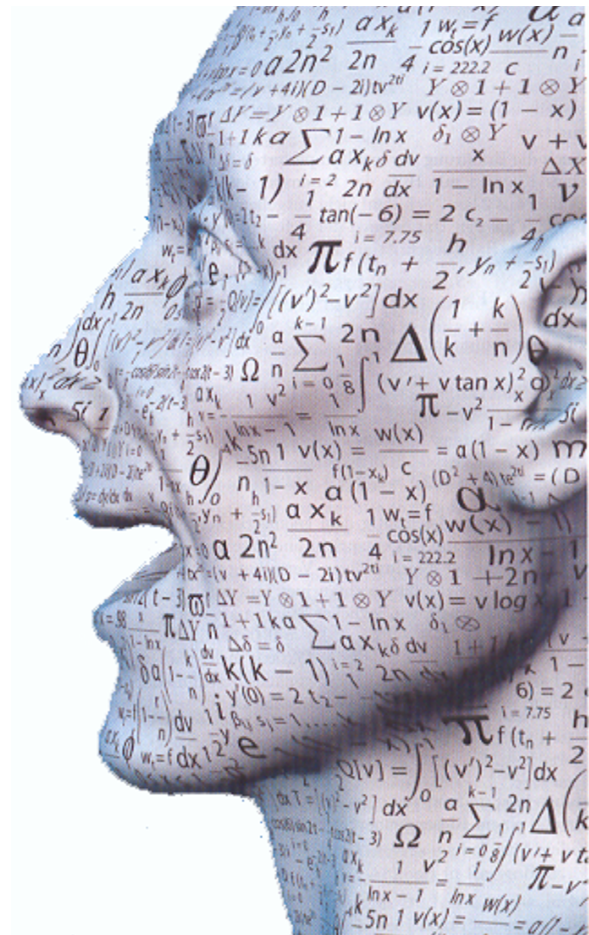


Stefan Funken
Mathematische Modelle in der Biologie



Vorwort

Das vorliegende Manuskript beinhaltet die Ausarbeitungen des Seminars „Mathematische Modelle in der Biologie“, welches im Wintersemester 2009/10 an der Fakultät für Mathematik und Wirtschaftswissenschaften der Universität Ulm als Blockseminar vom 18. und 19. Dezember 2009 stattgefunden hat.

Im Seminar befassten wir uns mit mathematischen Modellen für dynamische Prozesse aus den Biowissenschaften. Behandelt werden Dynamiken von Populationen, Epidemien, Viren, Prionen und Enzymen, sowie Selektion in der Genetik. Den Hauptmerk stellten dabei Modelle dar, deren Formulierung auf gewöhnliche Differentialgleichungen führen. Schwerpunkte waren sowohl die mathematische Modellierung als auch die Analyse der resultierenden Modelle, sowie die biologische beziehungsweise biochemische Interpretation der Ergebnisse.

Ziele des Seminars waren:

- Herleitung der mathematischen Modelle in der Biologie,
- Vorstellung numerische Ansätze zur Simulation o.g. Prozesse, z. B. Euler-, Runge-Kutta-Verfahren, Adaptivität
- das Kennenlernen interessanter praktischer Anwendungen der Mathematik,
- das Üben interdisziplinärer Ausdrucksweisen,
- das Präsentieren mathematischer Sachverhalte.

Textgrundlage des Seminars:

„Mathematische Modelle in der Biologie“ von J.W. Prüß, R. Schnaubelt, R. Zacher (Birkhäuser, 2008)

Bedanken möchte ich mich an dieser Stelle nochmals bei allen Teilnehmern für ihre tollen Beiträge und gelungenen Vorträge.

Ulm, im Dezember 2009

Stefan Funken

Inhaltsverzeichnis

Mathematische Modelle in der Biologie: Einführung

Daniel Ruf 1

Populationen

Hendrik Lang, Kerstin Schick 7

Infektionen

Manuela Lassu und Aljoscha Himmighofen 19

Viren und Prionen

Helmut Weidle 31

Prionen und weitere Endemiemodelle

Benjamin Wenger 39

Paarbildung I/II

Stephanie Seeburger 45

Paarbildung II/II

Maria Bruno 51

Genetik

Anja Bachmann, Karen Huep 59

Enzyme

Anna-Katharina Bayer und Birgit Kröner 73

Die Delaunay Triangulierung

Pascal Heiter 85

Die Bedingte Delaunay Triangulierung

Mladjan Radic 93

Numerische Lösungen von Volterra's Populationsmodell

Katrin Egl 111

Analytische Lösungen des Populationsmodells von Volterra

Sophie Päusch 123

Mathematische Modelle in der Biologie: Einführung

Daniel Ruf

danruf@web.de

1 Einführung

Die Biologie, die Lehre des Lebens, unterliegt wie sämtliche andere Naturwissenschaften den Gesetzen der Mathematik. Symbiose oder Konkurrenz verschiedener Populationen, Wachstumsraten von Viren und Bakterien und die Ausbreitung der Krankheiten, die durch sie verursacht werden, lassen sich präzise durch bekannte Theorien der Algebra, der Analysis oder der damit verwandten Differentialgleichungen beschreiben.

Da dieses Seminar für Mathematiker und angehende Mathematiker angelegt ist, stehen nicht die sichtbaren Ergebnisse im Mittelpunkt, sondern deren Ursachen. Diese Einführung soll dazu dienen, ausgewählte, nützliche Sätze für die nachfolgenden Ausarbeitungen vorzustellen.

2 Flüsse und Halbflüsse

Definition 1. Sei $M \subset \mathbb{R}^d$. Eine stetige Abbildung $\mathbb{R}^d \times M \rightarrow M$ heißt Fluss auf M , falls

$$x(t+s, x_0) = x(t, x(s, x_0)) = x(s, x(t, x_0)), \quad t, s \in \mathbb{R}, \quad x \in M, \quad x(0, x_0) = x_0 \quad (1)$$

gilt. Falls $u: \mathbb{R}_+^d \times M \rightarrow M$ für $t, s \geq 0$ erfüllt, so heißt u Halbfluss

Satz 2.1 Sei $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ global Lipschitzstetig. Dann erzeugt die autonome DGL

$$\dot{x} = f(x) \quad , x(0) = x_0 \quad (2)$$

ein Fluss auf $\mathbb{R}$

Beweis. Sei $x(t, x_0)$ eine Lösung. $y(t) := x(t+s, x_0)$ mit dem Anfangswert $y(0) = x(s, x_0)$ ist ebenfalls eine Lösung, weil autonome DGLs translationsinvariant sind. Dann folgt mit der Eindeutigkeit der Lösungen, der durch die Lipschitzstetigkeit gegeben ist, dass $y(t) = x(t, x(s, x_0))$ $\square$

Falls f nicht Lipschitzstetig ist, bleibt die Aussage erhalten, wenn f nur stetig ist, aber zusätzlich die Eindeutigkeit bekannt ist.

Ist f nur lokal Lipschitzstetig, erzeugt $x(t, x_0)$ auch nur auf dem maximalen Existenzintervall $(t_-(x_0), t_+(x_0)) =: J$ einen Fluss. Falls $J \neq \mathbb{R}^d$, so bezeichnet man x als lokalen Fluss auf J , wobei (2.1) nur für $t, s \in \mathbb{R}^d$ mit $t+s \in J$. Falls $t, s \geq 0$, so ist x ein lokaler Halbfluss

Definition 2. Sei $t \in J$. Dann beschreibt $x(t, x_0)$ eine Kurve $\gamma(x_0)$ durch x_0 , die man als Bahn oder Trajektorie bezeichnet. Die Gesamtheit aller Bahnen nennt man Phasendiagramm oder Phasenportrait

Satz 2.2 Bahnen können sich nicht schneiden

Beweis.

$$\left. \begin{aligned} y(t) &= x(t + t_1, x_1) \stackrel{\text{Fluss}}{=} x(t, x(t_1, x_1)) = x(t, x_0) \\ z(t) &= x(t + t_2, x_2) \stackrel{\text{Fluss}}{=} x(t, x(t_2, x_2)) = x(t, x_0) \end{aligned} \right\} y(t) = z(t) \quad (3)$$

□

Ist eine Bahn $\gamma(x_0)$ geschlossen, so folgt $J = \mathbb{R}$ und die Lösung ist periodisch, d.h. $\exists T > 0$ mit $x(t + T, x_0) = x(t, x_0)$ für alle $t \in \mathbb{R}$.

Ist x_* eine Nullstelle von f , also eine konstante Lösung des Problems, so nennt man x_* Equilibrium. Equilibria spielen eine wichtige Rolle bei der Analyse von Flüssen.

3 Ljapunov-Funktionen

Definition 3. Sei $M \subset \mathbb{R}$

1. Sei x ein lokaler Halbfluss auf M . $D \subset M$ heißt positiv invariant, falls $x(t, x_0) \in D$ für alle $0 < t < t_+$. Analog definiert man negativ invariant für lokale Flüsse. D heißt invariant für einen lokalen Fluss, falls D positiv und negativ invariant ist.
2. Sei x ein lokaler Halbfluss auf M , $x \in M$. Dann heißt $\omega^+(x) := \{y \in M : \exists t_n \rightarrow t_+ \text{ mit } x(t_n, x_0) \rightarrow y\}$ die positive Limesmenge von x . Analog kann man eine negative Limesmenge $\omega^-(x)$ definieren.
3. Sei M eine positiv invariante Menge für den von (2.1) erzeugten lokalen Halbfluss. Eine stetige Funktion $\Phi : M \rightarrow \mathbb{R}$ heißt Ljapunov-Funktion für (2.1), falls $\Phi(x(t))$ für jede Lösung von (2.1) auf $\mathbb{R}_+$ monoton fallend ist. Analog ist Φ eine strikte Ljapunov-Funktion, falls Φ für jede nichtkonstante Lösung streng monoton fallend ist.

Satz 3.1 Sei $M \subset \mathbb{R}$ eine abgeschlossene, positiv invariante Menge für den von $\dot{x} = f(x)$ erzeugten lokalen Halbfluss, Φ eine strikte Ljapunov-Funktion. Dann gelten

- Auf Limesmengen ω^+ mit $x_0 \in M$ ist Φ konstant
- $\omega^+(x_0) \subset E$, die Equilibriumsmenge von obigem Problem, für alle $x_0 \in M$
- Ist E diskret, so konvergiert jede beschränkte Lösung mit $x_0 \in M$ für $t \rightarrow \infty$ gegen ein Equilibrium
- Es gibt keine periodische Lösung für das gegebene Problem

Es kann durchaus vorkommen, dass $\Phi'(x) = 0$ für alle $x \in M$, das heißt dass Φ längs jeder Lösung konstant ist. Dann bezeichnet man Φ als eine Erhaltungsgröße oder erstes Integral. Ljapunov-Funktionen haben aber auch wichtige Anwendungen in der Stabilitätstheorie:

Definition 4. Sei $M \subset \mathbb{R}$ positiv invariant, x_* ein Equilibrium für f . Dann heißt x_*

1. stabil, wenn es zu jedem $\epsilon > 0$ ein $\delta > 0$ gibt, sodass $x(t, x_0) \in B_\epsilon(x_*)$ für alle $t \geq 0$ gilt, sofern der Anfangswert $x_0 \in B_\delta(x_*) \cap M$
2. instabil in M , wenn x_* nicht stabil in M ist
3. attraktiv in M , wenn es ein $\delta_0 > 0$ gibt, sodass $t^+ = \infty$ ist, und $x(t, x_0) \rightarrow x_*$ für $t \rightarrow \infty$, sofern $x_0 \in B_{\delta_0}(x_*) \cap M$
4. asymptotisch stabil in M , wenn x_* stabil und attraktiv in M ist

Satz 3.2 Sei $M \subset \mathbb{R}$ eine positiv invariante Menge für den von (2.1) erzeugten lokalen Halbfluss, Φ eine Ljapunovfunktion für die DGL, die auf einer offenen Menge $U \supset M$ differentierbar ist, $x_* \in M$ ein Equilibrium. Dann gelten:

1. Ist x_* ein striktes lokales Minimum von Φ , dann ist x_* stabil
2. Ist x_* ein isoliertes Equilibrium und ein striktes lokales Minimum von Φ , und Φ eine strikte Ljapunov-Funktion, dann ist x_* asymptotisch stabil

4 Linearisierung

Sei $f \in C^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$, $x_* \in \mathbb{R}^d$ ein Equilibrium von $\dot{x} = f(x)$. Sei $A := f'(x_*)$ die Linearisierung von f in x_* . Sei nun $u := x - x_*$; Dann lässt sich das Problem folgendermaßen umschreiben:

$$\underbrace{\dot{u}}_{\dot{x}} = \underbrace{Au}_{f'(x_*)} + \underbrace{g(u)}_{f(u+x_*) - f(x_*) - f'(x_*)} \quad (4)$$

Es ist klar, dass auch $g \in C^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$, weil Verknüpfungen und Summen von differenzierbaren Funktionen wieder differenzierbar sind.

Der Vorteil dieser Darstellung ist nun, dass man (2.1) mit dem linearen Problem

$$\dot{z} = Az, \quad z(0) = z_0 \quad (5)$$

insbesondere bezüglich Stabilität vergleichen kann. Das Stabilitätsverhalten von (2.1) lässt sich sehr leicht anhand der Eigenwerte von A ablesen. Aus der Vorlesung 'Differentialgleichungen' ist bekannt, dass Instabilität genau dann folgt, wenn es einen Eigenwert mit positivem Realteil gibt, und asymptotische Stabilität genau dann folgt, wenn die Realteile aller Eigenwerte negativ sind.

Satz 4.1 Sei f stetig differenzierbar auf $\mathbb{R}^d$, $f(x_*) = 0$, $A = f'(x_*)$. Dann gilt:

- Ist $\operatorname{Re} \lambda < 0$ für alle Eigenwerte λ von A , so ist x_* asymptotisch stabil
- Ist $\operatorname{Re} \lambda_0 > 0$ für einen Eigenwert λ_0 von A , so ist x_* instabil

Diese Erkenntnis wird als 'Prinzip der linearisierten Stabilität' bezeichnet.

Der Fall $d=1$ ist trivial: Die 'Matrix' ist nur die Ableitung von f an der Stelle x_* ; f ist also asymptotisch stabil bzw. instabil, wenn f an x_* streng monoton steigt bzw. streng monoton fällt.

In der Biologie ist besonders der Fall $d=2$ interessant, weil es beispielweise bei der Beschreibung des Zusammenlebens zweier Arten angewendet werden kann. In diesem Fall stellt die erste Ableitung von f die Jacobi-Matrix dar. Aus der Linearen Algebra ist bekannt, dass die Eigenwerte die Nullstellen des charakteristischen Polynoms sind, welches sich mit wenig Aufwand berechnen lässt:

$$p(\lambda) = \lambda^2 - (\operatorname{sp} A)\lambda + \det A \quad (6)$$

mit den Nullstellen

$$\lambda_{\pm} = \frac{\operatorname{sp} A \pm \sqrt{(\operatorname{sp} A)^2 - 4 \det A}}{2} \quad (7)$$

Hiermit kann man 5 Fälle unterscheiden:

1. **stabiler Knoten** $\lambda_{\pm} < 0$, d.h. $0 < \det A < (\operatorname{sp} A)^2/4$ und $\operatorname{sp} A < 0$
2. **instabiler Knoten** $\lambda_{\pm} > 0$, d.h. $0 < \det A < (\operatorname{sp} A)^2/4$ und $\operatorname{sp} A > 0$
3. **Sattelpunkt** $\lambda_- < 0 < \lambda_+$, also $\det A < 0$
4. **stabile Spirale** $\operatorname{Re} \lambda_{\pm} < 0$, $\operatorname{Im} \lambda_{\pm} \neq 0$, d.h. $\det A > (\operatorname{sp} A)^2/4 < 0$
5. **instabile Spirale** $\operatorname{Re} \lambda_{\pm} > 0$, $\operatorname{Im} \lambda_{\pm} \neq 0$, d.h. $\det A > (\operatorname{sp} A)^2/4 > 0$

Beispiel 1. stabiler Knoten:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} -x + y \\ x - 2y \end{pmatrix}, \quad x_* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

Sattelpunkt:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} x + 2y \\ x - 2y \end{pmatrix}, \quad x_* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (9)$$

stabile Spirale:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} -x + y \\ -x - y \end{pmatrix}, \quad x_* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

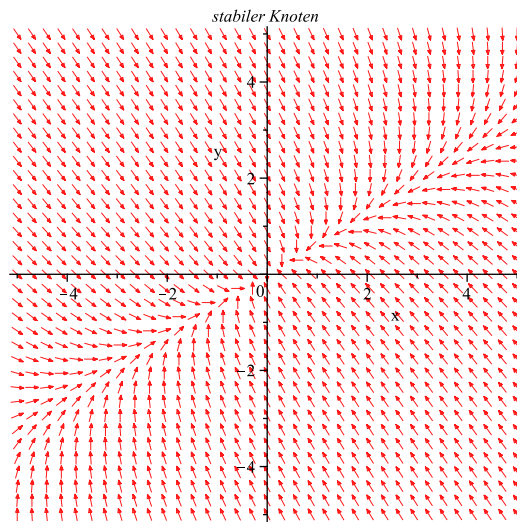


Abb. 1. Der von (11) erzeugte stabile Knoten

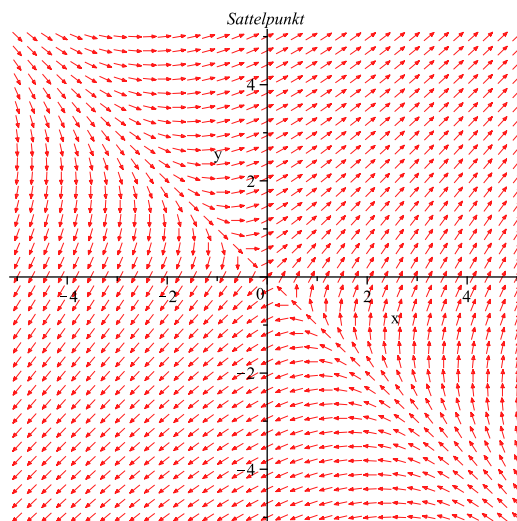


Abb. 2. Der von (9) erzeugte Sattelpunkt

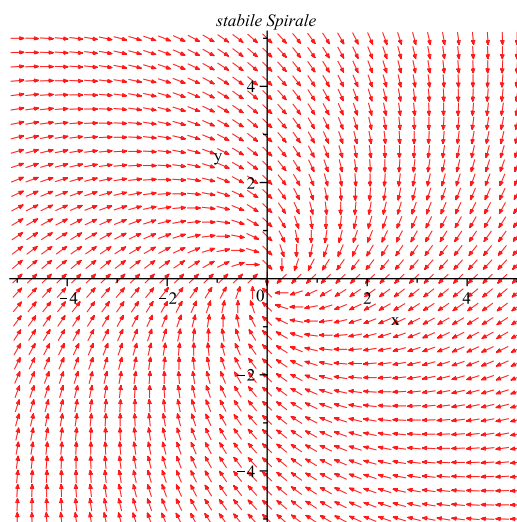


Abb. 3. Die von (10) erzeugte stabile Spirale

Die jeweiligen Beispiele lassen sich leicht in die instabilen Fälle transformieren:

(11) wird zu einem instabilen Knoten, wenn man anstatt $f(x)$ nun $-f(x)$ betrachtet. Tatsächlich ist

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} x - y \\ -x + 2y \end{pmatrix}, \quad x_* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

ein instabiler Knoten, weil $\det -f'(x_*) = \det f'(x_*)$ und $sp(-f'(x_*)) = -sp(f'(x_*))$. Analog erzeugt $\dot{x} = -f(x)$ genau dann eine instabile Spirale, wenn $\dot{x} = f(x)$ eine stabile Spirale erzeugt.

Für die Abbildungen gilt im instabilen Fall, dass die Pfeile in die entgegengesetzte Richtung zeigen, sich also alle Lösungen immer weiter von $f(x_*)$ entfernen. Weil $\det -f'(x_*) = \det f'(x_*)$ gilt, ist auch klar warum bei Sattelpunkten nicht in Stabilität und Instabilität unterschieden wird. Man kann es sich auch an Abb. 2 verdeutlichen: Würden alle Pfeile in die entgegengesetzte Richtung zeigen, wäre die Abbildung nur gespiegelt, sie würde aber weiterhin einen Sattelpunkt darstellen.

Allgemein gilt nun:

1. $\det A > 0$ und $spA < 0 \implies$ Stabilität
2. $\det A > 0$ und $spA > 0$, oder $\det A < 0 \implies$ Instabilität

Falls $d > 2$, sind die Nullstellen des charakteristischen Polynoms $p(\lambda) = \det(A - \lambda)$ teilweise schwer zugänglich. Deshalb wurden Kriterien entwickelt um sie dennoch ausfindig zu machen. Das Bekannteste davon ist das Kriterium von Routh-Hurwitz.

Sei dazu

$$p(\lambda) = a_1^0 \lambda^d + a_1^1 \lambda^{d-1} + a_2^0 \lambda^{d-2} + a_2^1 \lambda^{d-3} + \dots$$

Die Einträge der Routh-Matrix werden nun induktiv dargestellt als

$$a_j^{i+1} = a_{j+1}^{i-1} - r_i a_{j+1}^i, \quad r_i = \frac{a_1^{i-1}}{a_1^i}, \quad i, j \geq 1 \quad (12)$$

Falls $a_1^i = 0$, wird $a_j^{i+1} = 0$ gesetzt. Mithilfe dieser Definition lässt sich folgender Satz formulieren:

Satz 4.2 *Es sei die Routh-Matrix $[a_j^i]_{ij}$ wie angegeben definiert. Dann sind äquivalent:*

- Alle Nullstellen von $p(\lambda)$ haben negative Realteile.
- $a_1^i > 0$ für alle $i = 1, \dots, d$

Wichtig hierbei ist, dass die Polynome standardisiert sind, d.h. $a_1^0 = 1$.

Für $d=3$ ergibt sich durch $p(\lambda) = \lambda^3 + a\lambda^2 + b\lambda + c$ die Stabilitätsbedingungen $a > 0$, $c > 0$, $ab > c$. Für $d=4$ mit $p(\lambda) = \lambda^4 + a\lambda^3 + b\lambda^2 + c\lambda + d$ die Bedingungen $a > 0$, $d > 0$, $ab > c$, $abc > c^2 + a^2d$. Es ist offensichtlich, dass in höheren Dimensionen die Bedingungen immer komplexer werden, deshalb verzichtet der Autor auf deren explizite Darstellung.

5 Quasimonotone Systeme

Seien die Anfangswerte x_0, y_0 zu der Differentialgleichung $\dot{x} = f(x)$ gegeben, $x(t), y(t)$ die zugehörigen Lösungen. Da sich Lösungen nicht schneiden können, impliziert, für $d = 1$, $x_0 \leq y_0$ sofort $x(t) \leq y(t)$. Wie sieht dann aber der allgemeine Fall aus? Sei dazu $x, y \in \mathbb{R}^d$. Um eine Ordnung auf $\mathbb{R}^d$ zu definieren, sagt man $x \leq y \iff x_i \leq y_i \forall i = 1, \dots, d$. Hierbei ist zu beachten, dass für $d \geq 2$ nicht alle Elemente aus $\mathbb{R}^d$ zueinander im Verhältnis stehen; beispielsweise $(0, 1)$ und $(1, 0)$ für $d = 2$.

Definition 5. Sei $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ stetig differenzierbar. f heißt quasimonoton, falls

$$x \leq y, x_i = y_i \Rightarrow f_i(x) \leq f_i(y) \quad (13)$$

für alle $i = 1, \dots, d$ erfüllt.

Für $d = 1$ ist jede Funktion in $\mathbb{R}$ quasimonoton. Mit $d \geq 2$ ist f genau dann quasimonoton, wenn die Matrizen $A := f'(x)$ allesamt quasipositiv sind, d.h. $x \in \mathbb{R}_+^d, x_i = 0 \Rightarrow f_k(x) \geq 0 \forall i$.

Satz 5.1 Sei $f \in C^1(\mathbb{R}^d \rightarrow, \mathbb{R}^d)$ quasimonoton, x, y stetig differenzierbare Funktionen mit

$$\begin{aligned}\dot{x} - f(x(t)) &\leq \dot{y} - f(y(t)) \\ x(0) &=: x_0 \leq y_0 := y(0)\end{aligned}\tag{14}$$

Dann gilt: $x(t) \leq y(t)$.

Beweis. Setze $u(t) := y(t) - x(t)$, $g(t, u) := f(x(t) + u(t)) - f(x(t))$, $h(t) := \dot{y} - \dot{x} - f(y(t)) + f(x(t))$ und $u_0 = y_0 - x_0$. Dann löst u das Problem

$$\dot{u}(t) = \underbrace{g(t, u(t))}_{f(y(t)) - f(x(t))} + \underbrace{h(t)}_{\dot{y} - \dot{x} - f(y(t)) + f(x(t))}.$$

Es gilt $h(t) \leq 0$ nach Voraussetzung. Damit folgt $u(t) \leq 0$ dann wenn $g(t, u)$ quasipositiv ist, was nach der Konstruktion der Fall ist.

□

Der von $\dot{x} = f(x)$ erzeugte Halbfluss wird dann ordnungserhaltend genannt. In der Schreibweise der Flüsse folgt die Darstellung

$$x_0 \leq y_0 \Rightarrow x(t, x_0) \leq x(t, y_0)$$

Literaturverzeichnis

1. Jan W. Prüß, Roland Schnaubelt, Rico Zacher *Mathematische Modelle in der Biologie: Deterministische homogene Systeme* (2008)
2. Harro Heuser *Gewöhnliche Differentialrechnungen: Einführung in Lehre und Gebrauch* (2004)
3. Wolfgang Walter *Gewöhnliche Differentialgleichungen* (2000)

Populationen

Hendrik Lang, Kerstin Schick

Hendrik.Lang@uni-ulm.de, Kerstin.Schick@uni-ulm.de

1 Einleitung

Als **Population** wird in der Biologie eine Gruppe von Individuen einer Art bezeichnet, die zur gleichen Zeit am selben Ort leben und sich miteinander fortpflanzen können.

Gesucht werden nun mathematische Gesetzmäßigkeiten, die die Entwicklung solch einer Population modellhaft darstellen können. Im Folgenden soll nun zuerst das Wachstumsverhalten einer Population einer einzelnen Art betrachtet werden, was auch als logistisches Wachstum bezeichnet wird. Darauf aufbauend können dann Wachstumsprozesse im Bezug auf biologisch relevante Interaktionen innerhalb von Artengemeinschaften untersucht und modelliert werden. Dabei werden die Konkurrenz, die Kooperation und das Räuber-Beute-Modell im letzten Abschnitt detaillierter analysiert.

2 Logistisches Wachstum

In diesem Abschnitt soll zunächst die Grundlage für das Populationswachstum einer einzelnen Art gelegt werden. Diese Betrachtungsweise ist vorerst rein theoretischer Natur, da sich Organismen in den meisten Fällen in Interaktionen mit Individuen anderer Arten befinden.

Als erstes Ziel soll ein Modell für die Entwicklung einer Population ohne jeglichen Einfluss von Außen, d.h. bei optimal herrschenden Bedingungen, gefunden werden, wodurch Aussagen über das Langzeitverhalten der Populationsgröße getroffen werden können. Dabei bezeichnet die Funktion $N(t) \in \mathbb{N}$ die Anzahl der Individuen einer Population zum Zeitpunkt t .

Abhängig von der betrachteten Art kann es zu sehr unterschiedlichen Individuenzahlen kommen. Eine Bakterienkolonie bewegt sich in anderen Größenordnungen als beispielsweise eine Population von größeren Säugetieren. Dieses Problem lässt sich durch eine **Entdimensionalisierung** lösen, indem zunächst eine Bezugszahl $N_* \approx N(0)$ definiert wird, die die gemessene bzw. geschätzte Anfangsgröße der Population angibt. Damit lässt sich eine neue Funktion

$$u(t) = \frac{N(t)}{N_*} \geq 0$$

definieren, deren Werte sich in einem Größenbereich von 1 bewegen und die für biologisch sinnvolle Wachstumsmodelle positiv sein sollte. Außerdem kann $u(t)$ für genügend große N_* als stetige Funktion auf dem Intervall $[0, \infty)$ angenommen werden.

Im nächsten Schritt soll nun eine explizite Formel für das Verhalten von $u(t)$ gefunden werden. Dafür wird angenommen, dass die Populationsgröße zu einem bestimmten Zeitpunkt bekannt ist, beispielsweise sei für $t = 0$ der Anfangswert $u(0) = u_0$ bekannt. Zur Vereinfachung wird angenommen, dass es innerhalb der betrachteten Population keine Migration von Individuen gibt, d.h. dass Populationsänderungen nur durch Geburts- und Sterbeprozesse resultieren. Dabei ergeben sich für die weitere Modellberechnung die zwei Variablen

$$\beta := \frac{\text{Anzahl der Geburten}}{\text{Zeiteinheit und Kopf}} \quad \mu := \frac{\text{Anzahl der Sterbefälle}}{\text{Zeiteinheit und Kopf}}$$

Damit kann nun eine Formel für die Änderung des Populationsbestandes in Abhängigkeit von der Zeit aufgestellt werden:

$$\dot{u}(t) = \frac{du}{dt}(t) = (\beta - \mu) \cdot u(t), \quad t \geq 0, \quad u(0) = u_0 \quad (1)$$

Diese Differentialgleichung dient als Grundlage für die weitere Modellierung von Wachstumsprozessen in der Biologie.

Das eigentliche Problem dieses Modells ist jedoch die Erhebung von β und μ . Einen ersten Lösungsansatz entwickelte der britische Ökonom Thomas Robert Malthus im Jahre 1798 [a]. Dabei nahm er an, dass sich Geburts- und Sterbeprozesse im Wesentlichen nicht ändern, d.h. β und μ konstant seien. Damit ergeben sich als Lösungen von (1):

$$u(t) = e^{(\beta - \mu)t} \cdot u_0$$

Definiert man nun $r_0 := \frac{\beta}{\mu}$ als Reproduktionsrate, so können folgende Aussagen über die Entwicklung einer Population getroffen werden:

- $r_0 < 1$: Population stirbt exponentiell aus
- $r_0 = 1$: Population bleibt konstant
- $r_0 > 1$: Population wächst exponentiell

Eine realistischere Beschreibung des zeitabhängigen Wachstums einer Population lieferte 1845 der belgische Mathematiker Pierre-François Verhulst [b], wobei er das Wachstum $(\beta - \mu)$ als von u abhängige Funktion $g(u)$ definierte:

$$\beta - \mu =: g(u) = \lambda_0 \left(1 - \frac{u}{u_\infty}\right), \quad u \geq 0 \quad (2)$$

Dabei stehen die positiven Parameter λ_0 für die Wachstumsrate und u_∞ für die maximal zu erreichende Kapazität einer Population. Setzt man $g(u)$ in obige Grundgleichung (1) ein, so ergibt sich eine Differentialgleichung, die die Änderung des Populationswachstums mit variablen Geburten- und Sterberaten wie folgt beschreibt:

$$\dot{u} = \lambda_0 \cdot u \left(1 - \frac{u}{u_\infty}\right), \quad u(0) = u_0 \geq 0 \quad (3)$$

Dieses Wachstumsgesetz wird auch als **logistisches Wachstum** bezeichnet und ist in Abbildung 1 für zwei beispielhafte Funktionsverläufe dargestellt.

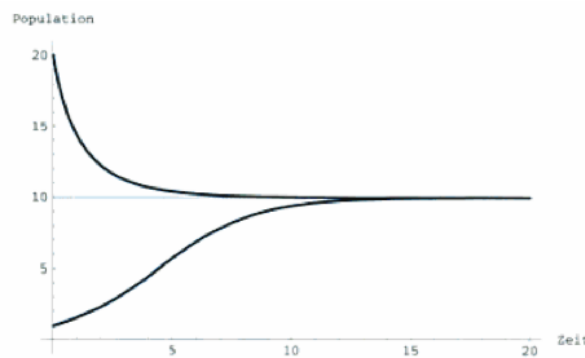


Abb. 1. Logistisches Wachstum

Abhängig von der betrachteten Populationsgröße u und der zu erreichenden Kapazität u_∞ lassen sich folgende Aussagen über das Wachstum der Population treffen:

- $u < u_\infty \rightarrow g(u) > 0 \leftrightarrow$ Population wächst
- $u = u_\infty \rightarrow g(u) = 0 \leftrightarrow$ Population ist im Gleichgewicht (**Equilibrium**)
- $u > u_\infty \rightarrow g(u) < 0 \leftrightarrow$ Population dezimiert sich

Wobei der Zustand des Equilibriums den Zeitpunkt beschreibt, bei dem das Wachstum sich abzüglich der Sterbe- und Geburtenrate nicht verändert. Für kleine Populationen u gilt außerdem, dass sich die Population exponentiell mit der Wachstumsrate λ_0 vermehrt, dass also $g(u) \approx \lambda_0$ gilt.

Durch den Satz von Picard-Lindelöf ist bekannt, dass sich Lösungen nicht schneiden können und somit jede nicht-triviale Lösung der Gleichung (3) gegen die Kapazität u_∞ konvergiert, also dass gilt:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u(t) = u_\infty \quad \forall \quad u_0 > 0$$

Die expliziten Lösungen von (3) können für $u_0 \neq u_\infty$, $u_0 \neq 0$ und $t \geq 0$ wie folgt angegeben werden:

$$u(t) = \frac{u_\infty \cdot u_0}{u_0 + (u_\infty - u_0)e^{-\lambda_0 t}}$$

Dies kann durch Einsetzen in Gleichung (3) gezeigt werden.

Im nächsten Schritt soll nun das logistische Wachstums verallgemeinert dargestellt werden. Dazu wird folgender Satz eingeführt:

Satz 1 (Satz über die Logistik) Sei $g \in C^1(\mathbb{R}_+)$ derart, dass $g(u) > 0$ in $(0, u_\infty)$ ist, sowie $g(u) < 0$ in (u_∞, ∞) . Dann existieren die Lösungen $u(t, u_0)$ von

$$\dot{u} = g(u)u, \quad \forall \quad t \geq 0, \quad u(0) = u_0 > 0,$$

und es gilt $\lim_{t \rightarrow \infty} u(t, u_0) = u_\infty$ für jedes $u_0 > 0$.

Beweis. • Satz von Picard-Lindelöf $\Rightarrow$ Lösungen auf einem maximalen Existenzintervall $J = [0, t^*)$

- Lösungen schneiden sich nicht, $u_1 = 0, u_2 = u_\infty$ Equilibria
- $0 < u_0 < u_\infty \Rightarrow 0 < u(t) < u_\infty \quad \forall t \in J$
- $u(t)$ beschränkt auf $J \Rightarrow J = \mathbb{R}_+$
- $u(t)$ streng wachsend, da $\dot{u}(t) = g(u(t))u(t) > 0 \Rightarrow u(\infty) := \lim_{t \rightarrow \infty} u(t)$
- analog für $u_0 > u_\infty$
- $u(\infty) = u_\infty$, da Funktion g nur eine pos. Nullstelle besitzt und $g(u(\infty)) = 0$

□

Ein Beispiel für solch eine verallgemeinert logistische Wachstumsfunktion ist in Abbildung 2 dargestellt. Für eine Populationsgröße u von $(0, u_\infty)$ wächst die Population, d.h. die Funktion $g(u) > 0$. Ebenso gilt, dass Populationen ab einer Größe von u_∞ abnehmen, d.h. $g(u) < 0$.

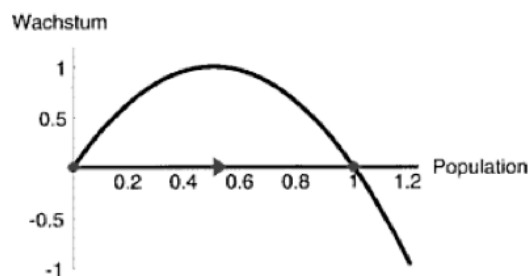


Abb. 2. Verallgemeinerte Logistik

Soll das Wachstumsmodell noch exakter den biologischen Gegebenheiten entsprechen, so muss es um eine Eigenschaft erweitert werden. Dies liegt daran, dass manche Populationen aussterben können, falls ihre Größe einen gewissen Wert unterschreitet. Startpunkte unterhalb dieses Grenzwerts führen dementsprechend zu negativen Funktionswerten von $g(u)$. Unter Berücksichtigung dieser Modellverfeinerung ergibt sich folgender Satz:

Satz 2 (Satz über die modifizierte Logistik) Seien $0 < u_1 < u_\infty$ und $g \in C^1(\mathbb{R}_+)$ derart, dass $g(u) < 0$ in $(0, u_1)$ ist, $g(u) > 0$ in (u_1, u_∞) , sowie $g(u) < 0$ in (u_∞, ∞) . Dann existieren die Lösungen $u(t, u_0)$ der Gleichung aus Satz 1 $\forall t \geq 0$, und es gilt

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} u(t, u_0) &= u_\infty \quad \text{für jedes } u_0 > u_1, \\ \lim_{t \rightarrow \infty} u(t, u_0) &= 0 \quad \text{für jedes } u_0 < u_1 \end{aligned}$$

In Abbildung 3 ist ein typischer Verlauf einer solchen modifiziert logistischen Wachstumsfunktion $f(u) = g(u)u$ aufgezeigt, wobei u_1 die untere Wachstumsgrenze und u_∞ die Populationskapazität darstellen.

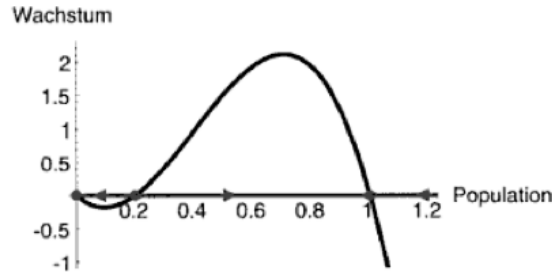


Abb. 3. Modifizierte Logistik

Bisher haben wir die Wachstumsfunktion g lediglich in Abhängigkeit von u betrachtet. Durch **sessionale Schwankungen** können die Parameter λ_0 und u_∞ jedoch variieren und somit hängt das Wachstum auch von der Zeit ab, es gilt also in diesem Fall $g = g(t, u)$.

3 Interaktionen innerhalb einer Artengemeinschaft

Lebewesen benötigen zum Überleben verschiedene Ressourcen, die im beschränkten Maße vorliegen, wie etwa Nahrung, Lebensraum und Fortpflanzungspartner [c]. Eine genaue Modellierung würde demnach die Berücksichtigung vieler verschiedener Parameter erfordern. Um das Modell möglichst übersichtlich zu halten, wird die Betrachtung im Folgenden auf die zur Verfügung stehenden **Nahrungsressourcen** beschränkt. Außerdem betrachten wir zunächst die kleinstmögliche Artengemeinschaft, also eine Gemeinschaft bestehend aus **zwei Arten**. Zu Beginn dieser Betrachtung wird die folgende Bezeichnung eingeführt:

$$x_i(t) = \text{Populationsgröße der Art } i \in \{1, 2\} \text{ zum Zeitpunkt } t$$

Das Wachstum g_i der Art $i \in \{1, 2\}$ hängt jetzt nicht mehr allein von der Kapazität u_∞ und der Wachstumsrate λ_0 ab, sondern auch von der Populationsgröße der interagierenden Art $j \in \{1, 2\}, j \neq i$. Somit gilt: $g_i = g_i(x_1, x_2), i \in \{1, 2\}$. Folgende drei Interaktionstypen werden nun detaillierter betrachtet:

1. Konkurrenz
2. Kooperation
3. Räuber-Beute-Beziehung

Anmerkung:

Die Konkurrenz als Interaktionsform (= interspezifische Konkurrenz) darf nicht mit der intraspezifischen Konkurrenz, welche zur Selbstbeschränkung innerhalb einer Population führt, verwechselt werden. Die intraspezifische Konkurrenz ist bereits in der logistischen Wachstumskurve einer einzelnen, isolierten Art berücksichtigt und liefert die Wachstumsrate λ_0 und die Kapazität u_∞ .

3.1 Konkurrenz

Im Falle der Konkurrenz kommt es zu einem Wettstreit zweier Arten um dieselbe Nahrungsquelle. Das bedeutet, dass sich die Überlebenschancen der einen Art durch das Vorkommen der anderen Art verschlechtern. Das Gleiche gilt auch im umgekehrten Fall. Es ergeben sich folgende Wachstumsfunktionen $g_i(x_1, x_2)$ für $i \in \{1, 2\}$:

$$\begin{aligned} g_1(x_1, x_2) &= a_1 - b_1x_1 - c_1x_2 \\ g_2(x_1, x_2) &= a_2 - b_2x_2 - c_2x_1 \end{aligned}$$

Dabei ist für $i, j \in \{1, 2\}$, mit $i \neq j$, a_i das Grundwachstum der Population der jeweiligen Art i . Im Konkurrenz-Modell geht man allgemein von einem positiven Grundwachstum für beide Arten aus. Der Subtrahend b_ix_i beruht auf der Selbstbeschränkung aufgrund der intraspezifischen Konkurrenz und führt zu einer logistischen Populationsentwicklung, wie sie bereits aus dem vorherigen Abschnitt bekannt ist.

Hier wird allerdings die Kapazität beider Arten noch zusätzlich durch das Vorhandensein der Konkurrenzart nach unten reguliert, was durch den Subtrahend c_ix_j für $i, j \in \{1, 2\}$, $i \neq j$ in den Gleichungen der Wachstumsfunktionen zum Ausdruck kommt. Durch Einsetzen der Wachstumsfunktionen $g_i(x_1, x_2) =: g(x)$ in die Vorgabe des logistischen Wachstums $\dot{x} = g(x)x$ für $i \in \{1, 2\}$ ergibt sich folgendes System aus Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= (a_1 - b_1x_1(t) - c_1x_2(t))x_1(t) \\ \dot{x}_2 &= (a_2 - b_2x_2(t) - c_2x_1(t))x_2(t) \end{aligned} \quad (4)$$

Dabei sind die Parameter a_i , b_i und c_i für $i \in \{1, 2\}$ stets positiv.

3.2 Kooperation

Bei der Kooperation profitieren die beiden Arten $i \in \{1, 2\}$ voneinander, so dass sich durch gemeinsames Auftreten die Überlebenschancen beider Arten erhöhen. In besonders engen Kooperationsverhältnissen, wenn etwa das Überleben nur durch das Vorkommen der interagierenden Art möglich ist, spricht man von einer Symbiose [d]. Als Konsequenz ergeben sich folgende Wachstumsfunktionen:

$$\begin{aligned} g_1(x_1, x_2) &= a_1 - b_1x_1 + c_1x_2 \\ g_2(x_1, x_2) &= a_2 - b_2x_2 + c_2x_1 \end{aligned}$$

Auch im Kooperations-Modell hängt die Populationsentwicklung von der Selbstbeschränkung beider Arten ab, welche das Wachstum negativ prägt. Hier erhöhen sich jedoch die Überlebenschancen durch das Vorkommen des Kooperationspartners. Das Grundwachstum a_i hängt in diesem Modell vom Grad der Kooperation ab. Es ist positiv, sofern die betrachtete Art auch ohne den Kooperationspartner überlebensfähig ist. Ist dies nicht der Fall, so ist das Grundwachstum a_i negativ. Es lässt sich folgendes System aus Differentialgleichungen aufstellen:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= (a_1 - b_1x_1(t) + c_1x_2(t))x_1(t) \\ \dot{x}_2 &= (a_2 - b_2x_2(t) + c_2x_1(t))x_2(t) \end{aligned} \quad (5)$$

Die Parameter b_i und c_i sind positive Werte. a_i kann, wie oben beschrieben, sowohl positiv, als auch negativ sein.

3.3 Räuber-Beute-Modell

Die Betrachtung eines Räuber-Beute-Verhältnisses gibt ein Modell vor, in dem das Vorkommen von Räubern die Größe der Beutepopulation negativ und das Vorkommen von Beuteorganismen die Größe der Räuberpopulation positiv beeinflussen. Sei im Folgenden x_1 die Größe der Beute- und x_2 die Größe

der Räuberpopulation. Die jeweils zugehörige Wachstumsfunktion lässt sich demnach folgendermaßen darstellen:

$$\begin{aligned}g_1(x_1, x_2) &= a_1 - b_1 x_1 - c_1 x_2 \\g_2(x_1, x_2) &= a_2 - b_2 x_2 + c_2 x_1\end{aligned}$$

Auch im Räuber-Beute-Modell verhält sich die Selbstbeschränkung wie in den beiden zuvor vorgestellten Modellen. Das Grundwachstum der Beutepopulation a_1 ist positiv. a_2 , also das Grundwachstum der Räuberpopulation, ist abhängig davon, ob die betrachtete Beuteart die essenzielle Hauptnahrung, oder gar die alleinige Nahrungsquelle der Räuberart ist. In diesem Fall ist a_2 negativ. Hat jedoch die Räuberart ausreichend Ausweichmöglichkeiten auf andere Beute, so nimmt a_2 positive Werte an. Zusammenfassend lässt sich folgendes Differentialgleichungssystem aufstellen:

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= (a_1 - b_1 x_1(t) - c_1 x_2(t))x_1(t) \\ \dot{x}_2 &= (a_2 - b_2 x_2(t) + c_2 x_1(t))x_2(t)\end{aligned}\tag{6}$$

Dieses System gilt $\forall a_1, b_i, c_i \in \mathbb{R}_+$ für $i \in \{1, 2\}$ und $a_2 \in \mathbb{R}$.

Ein Spezialfall der Betrachtung des Räuber-Beute-Verhältnisses ist ein Modell, welches in den Jahren 1925 und 1926 unabhängig von den Mathematikern Alfred James Lotka und Vito Volterra entwickelt wurde - das Lotka-Volterra-Modell [e]. Darin wird die Selbstbeschränkung durch intraspezifische Konkurrenz vernachlässigt, also gilt $b_i = 0$ für $i \in \{1, 2\}$. Außerdem geht man davon aus, dass die betrachtete Beuteart die einzige Nahrungsquelle für die Räuber darstellt. Daraus folgt unmittelbar $a_2 < 0$. Das System aus Differentialgleichungen lässt sich also auf folgende modifizierte Form bringen:

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= (a_1 - c_1 x_2(t))x_1(t) \\ \dot{x}_2 &= (a_2 + c_2 x_1(t))x_2(t)\end{aligned}\tag{7}$$

Dies gilt für $a_1, c_i \in \mathbb{R}_+$ für $i \in \{1, 2\}$ und für $a_2 < 0$.

3.4 Allgemeine Populationsmodelle für n Arten

Für die mathematische Betrachtung von Artengemeinschaften mit n Arten, können auf dieselbe Weise, wie in den aufgezeigten Spezialfällen für 2 Arten, **Systeme aus n Differentialgleichungen** erstellt werden. Dabei wird die spezifische Interaktion einer Art mit einer anderen sowie deren Grad stets durch das Anhängen eines weiteren Summanden bzw. eines weiteren Subtrahenden, welcher von der Populationsgröße der interagierenden Art abhängt, zum Ausdruck gebracht. Folglich erhält man ein derartiges System:

$$\dot{x}_k(t) = x_k(t)g_k(x(t)) \quad \text{mit} \quad t \geq 0, \quad x_k(0) = x_{k,0}, \quad k = 1, \dots, n$$

$g_k(x(t))$ kann dabei folgendermaßen aussehen:

$$g_k(x(t)) = a_k - b_k x_k + \sum_{l \neq k} c_{k,l} x_l \quad \text{mit} \quad l = 1, \dots, n \quad \text{und} \quad c_{k,l} \in \mathbb{R}$$

Die Gegebenheit, dass $c_{k,l}$ aus den reellen Zahlen ist, also insbesondere positive und negative Werte annehmen kann, zeigt, dass die Interaktionsform mit der l -ten Art für die Art k sowohl gewinnbringend, als auch existenzgefährdend sein kann.

4 Skalierung der Differentialgleichungssysteme

Die Systeme von Differentialgleichungen aus dem vorangegangenen Abschnitt enthalten allesamt eine große Anzahl an Parametern. Um den Einfluss einzelner Parameter auf das Gesamtsystem besser untersuchen zu können, ist es ratsam, die Anzahl der Parameter zu reduzieren. Dies ist beispielsweise durch die mathematische Methode der Skalierung möglich, welche in diesem Abschnitt am Beispiel des Räuber-Beute-Modells in ihrer Anwendung vorgestellt wird. Zuerst werden dabei neue Variablen eingeführt:

$$x_1(t) = \alpha_1 u(\sigma t), \quad x_2(t) = \alpha_2 v(\sigma t), \quad \tau = \sigma t$$

mit $\alpha_i = \text{const}$ für $i \in \{1, 2\}$ und $\sigma = \text{const}$. Diese Konstanten werden später geeignet gewählt. Setzt man diese nun in das Differentialgleichungssystem des Räuber-Beute-Modells ein, so erhält man folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{u}(t) &= u(t) \left[\frac{a_1}{\sigma} - \frac{b_1 \alpha_1}{\sigma} u(t) - \frac{c_1 \alpha_2}{\sigma} v(t) \right] \\ \dot{v}(t) &= v(t) \left[\frac{a_2}{\sigma} - \frac{b_2 \alpha_2}{\sigma} v(t) + \frac{c_2 \alpha_1}{\sigma} u(t) \right] \end{aligned}$$

Einige Koeffizienten der Differentialgleichungen können nun durch geschickte Wahl der (Skalierungs-) Parameter σ und α_i für $i \in \{1, 2\}$ auf einen gewünschten Wert, insbesondere auf 1 normiert werden.

Wir setzen nun o.B.d.A. $\frac{a_1}{\sigma} = 1$, $\frac{c_1 \alpha_2}{\sigma} = 1$ und $\frac{c_2 \alpha_1}{\sigma} = 1$ um die Kopplungsterme, welche die Populationsgrößen beider Arten miteinander in Abhängigkeit setzen, zu normieren. Durch Umstellen dieser Gleichungen, erhält man $\sigma = a_1$, $\alpha_1 = \frac{a_1}{c_2}$ und $\alpha_2 = \frac{a_1}{c_1}$. Anschließend setzen wir:

$$\mu := \frac{a_2}{\sigma} = \frac{a_2}{a_1}, \quad \lambda_1 := \frac{b_1 \alpha_1}{\sigma} = \frac{b_1}{c_2}, \quad \lambda_2 := \frac{b_2 \alpha_2}{\sigma} = \frac{b_2}{c_1}$$

Damit lässt sich das Räuber-Beute-Modell für $\lambda_1, \lambda_2 \geq 0$ und $\mu \in \mathbb{R}$ in folgender, standardisierter Form darstellen:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= (1 - \lambda_1 u - v)u, & t \geq 0, & \quad u(0) = u_0 \\ \dot{v} &= (\mu - \lambda_2 v + u)v, & t \geq 0, & \quad v(0) = v_0 \end{aligned} \quad (8)$$

Durch die Skalierung wurde die Anzahl an Parametern auf drei reduziert, wodurch sich das Gesamtsystem im Folgenden besser untersuchen lässt.

5 Detaillierte Entwicklungsanalyse

In den nächsten drei Abschnitten werden die einzelnen Interaktionsmöglichkeiten in Artengemeinschaften differenzierter betrachtet und analysiert. Beginnen möchten wir mit dem Konkurrenz-Modell.

5.1 Konkurrenz

Durch eine analog zu Kapitel 4 durchgeführte Skalierung ergibt sich folgendes System aus Differenzialgleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= (1 - \lambda_1 u - v) \cdot u, & \tau \geq 0, & \quad u(0) = u_0 \\ \dot{v} &= (\mu - \lambda_2 v - u) \cdot v, & \tau \geq 0, & \quad v(0) = v_0 \end{aligned} \quad (9)$$

wobei λ_1, λ_2 und $\mu \geq 0$ sind, da bei $\mu < 0$ die zweite Art sowieso ausstirbt.

Betrachtet man die rechte Seite dieser polynomialen Gleichungen ($= f(u, v)$), so wird klar, dass diese insbesondere stetig differenzierbar sind. Das System besitzt also zu jedem Anfangswert genau eine Lösung auf einem maximalen Existenzintervall und erzeugt einen lokalen Fluss auf $\mathbb{R}_+^2$, der die Menge $(0, \infty)^2$ invariant lässt.

Im nächsten Schritt soll die globale Existenz für $t \geq 0$ gezeigt werden. Dabei sei $J = [0, t_*)$ das maximale Existenzintervall mit dem folgende Ungleichungen gelten:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= (1 - \lambda_1 u - v) \cdot u \leq u \\ \dot{v} &= (\mu - \lambda_2 v - u) \cdot v \leq \mu v \end{aligned} \quad (10)$$

woraus folgt, dass $0 \leq u(t) \leq e^t u_0$ und $0 \leq v(t) \leq e^{\mu t} v_0$ gilt.

Damit ist $(u(t), v(t))$ auf jedem endlichen Intervall beschränkt und $t_* = \infty$, was wiederum bedeutet, dass für $t \geq 0$ Lösungen des Konkurrenz-Modells global existieren.

Um das qualitative Verhalten des von (9) erzeugten Halbflusses genauer zu betrachten, werden zunächst die Equilibria des Systems berechnet, d.h. die Stellen, an denen es zu keiner weiteren Änderung der Populationsgröße kommt. Dies sind die Lösungen der algebraischen Gleichungen

$$\begin{aligned} 0 &= \dot{u} = (1 - \lambda_1 u - v) \cdot u \\ 0 &= \dot{v} = (\mu - \lambda_2 v - u) \cdot v \end{aligned} \quad (11)$$

Die Lösungen können in drei verschiedene Equilibria-Typen unterteilt werden, die im Folgenden aufgelistet werden:

1. triviales Equilibrium $(0, 0)$, bei dem beide Arten ausgestorben sind
2. zwei marginale Equilibria $(0, \bar{v}) = (0, \frac{\mu}{\lambda_2})$ und $(\bar{u}, 0) = (\frac{1}{\lambda_1}, 0)$, bei denen genau eine der beiden Arten ausgestorben ist
3. Koexistenz-Equilibrium $(u_*, v_*) = \frac{1}{\lambda_1 \lambda_2 - 1}(\lambda_2 - \mu, \lambda_1 \mu - 1)$, bei dem die beiden Arten im Gleichgewicht leben

wobei der Fall $\lambda_1 \lambda_2 = 1$ ausgeschlossen wird.

Das Koexistenz-Equilibrium ist jedoch biologisch nur dann von Bedeutung, wenn $u_*, v_* > 0$ gilt. Dann können die folgenden zwei Fälle unterschieden werden:

$$\begin{aligned} (i) \quad \lambda_2 > \mu, \quad \lambda_1 \mu > 1 &\Rightarrow \lambda_1 \lambda_2 > 1 \\ (ii) \quad \lambda_2 < \mu, \quad \lambda_1 \mu < 1 &\Rightarrow \lambda_1 \lambda_2 < 1 \end{aligned}$$

Durch die **Methode der Linearisierung** kann das Verhalten der Lösungen nahe der Equilibria untersucht werden. Dazu wird die Funktion $f(u, v)$, also die rechte Seite der Gleichung (11), durch ihre Ableitung angenähert, wozu die Jacobi-Matrix von $f(u, v)$ berechnet werden muss:

$$f'(u, v) = \begin{pmatrix} (1 - \lambda_1 u - v) - \lambda_1 u & -u \\ -v & (\mu - \lambda_2 v - u) - \lambda_2 v \end{pmatrix}$$

Im nächsten Schritt werden die drei verschiedenen Equilibria in $f'(u, v)$ eingesetzt und eine Stabilitätsanalyse durchgeführt.

Für das triviale Equilibrium $(0, 0)$ erhält man folgende Matrix:

$$A_0 := f'(0, 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \mu \end{pmatrix}$$

Dabei besitzt A_0 die positiven Eigenwerte 1 und $\mu > 0$, woraus sich schließen lässt, dass das triviale Equilibrium einen instabilen Knoten darstellt.

Für das marginale Equilibrium $(\bar{u}, 0)$ ergibt sich nach Einsetzen folgende Matrix:

$$A_{\bar{u}} := f'(\bar{u}, 0) = \begin{pmatrix} (1 - \lambda_1 \bar{u}) - \lambda_1 \bar{u} & -\bar{u} \\ 0 & \mu - \bar{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & -\bar{u} \\ 0 & \mu - \bar{u} \end{pmatrix}$$

Die Matrix $A_{\bar{u}}$ besitzt dabei die Eigenwerte -1 und $\mu - \bar{u}$. Somit ist das Equilibrium $(\bar{u}, 0)$ für $\bar{u} > \mu$ ein stabiler Knoten, da beide Eigenwerte negativ sind. Im Fall $\bar{u} < \mu$ verhält sich das marginale Equilibrium instabil und stellt einen Sattelpunkt dar.

Analog kann für das marginale Equilibrium $(0, \bar{v})$ durch Einsetzen in $f'(u, v)$ folgende Matrix erhalten werden:

$$A_{\bar{v}} := f'(0, \bar{v}) = \begin{pmatrix} 1 - \bar{v} & 0 \\ -\bar{v} & (\mu - \lambda_2 \bar{v}) - \lambda_2 \bar{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \bar{v} & 0 \\ -\bar{v} & -\mu \end{pmatrix}$$

Hierbei hat die Matrix $A_{\bar{v}}$ die Eigenwerte $-\mu$ und $1 - \bar{v}$, woraus sich schließen lässt, dass das zweite marginale Equilibrium $(0, \bar{v})$ für $\bar{v} > 1$ ein stabiler Knoten und für $\bar{v} < 1$ instabil, also wiederum ein Sattelpunkt ist.

Zuletzt soll das Koexistenz-Equilibrium (u_*, v_*) untersucht werden. Durch Einsetzen in die Jacobi-Matrix erhält man folgendes:

$$A_* := f'(u_*, v_*) = \begin{pmatrix} -\lambda_1 u_* & -u_* \\ -v_* & -\lambda_2 v_* \end{pmatrix}$$

Für die biologische Relevanz der Betrachtung, muss zunächst $u_* > 0$ und $v_* > 0$ gelten. Dadurch erhält man, dass

$$spA_* = -(\lambda_1 u_* + \lambda_2 v_*) < 0$$

und es gilt außerdem

$$detA_* = u_* v_* (\lambda_1 \lambda_2 - 1)$$

Für den Fall $\lambda_1 \lambda_2 < 1$ ist daher $detA_* < 0$ und das Koexistenz-Equilibrium instabil, d.h. ein Sattelpunkt. Im Fall $\lambda_1 \lambda_2 > 1$ stellt (u_*, v_*) dagegen einen stabilen Knoten dar, da

$$(spA_*)^2 - 4detA_* = (\lambda_1 u_* - \lambda_2 v_*)^2 + 4u_* v_* > 0$$

Zusammenfassend lassen sich also vier Fälle auflisten:

	Ia	Ib	IIa	IIb
Equilibria	$\mu > \bar{u}, 1 > \bar{v}$	$\mu > \bar{u}, 1 < \bar{v}$	$\mu < \bar{u}, 1 > \bar{v}$	$\mu < \bar{u}, 1 < \bar{v}$
$(0, 0)$	instabil	instabil	instabil	instabil
$(\bar{u}, 0)$	instabil	instabil	stabil	stabil
$(0, \bar{v})$	instabil	stabil	instabil	stabil
(u_*, v_*)	stabil	exist. nicht	exist. nicht	instabil
	stab. Koexistenz	v gewinnt	u gewinnt	bistabiler Fall

Im nächsten Schritt soll das Langzeitverhalten der Lösungen analysiert werden. Dazu werden zunächst die Fälle Ib und IIa betrachtet, bei denen keine Koexistenz zustande kommt. Ihr Verhalten wird im folgenden Satz zusammengefasst:

Satz 3 (Satz über keine Koexistenz) *Es ergeben sich folgende 2 Fälle:*

- (i) **Fall Ib:** *Es gelte $\mu > \bar{u}, 1 < \bar{v}$. Dann ist das marginale Equilibrium $(0, \bar{v})$ in $(0, \infty)^2$ global asymptotisch stabil und jede Lösung mit Anfangswert $u_0 > 0, v_0 \geq 0$ konvergiert für $t \rightarrow \infty$ gegen $(0, \bar{v})$.*
- (ii) **Fall IIa:** *Es gelte $\mu < \bar{u}, 1 > \bar{v}$. Dann ist das marginale Equilibrium $(\bar{u}, 0)$ in $(0, \infty)^2$ global asymptotisch stabil und jede Lösung mit Anfangswert $u_0 \geq 0, v_0 > 0$ konvergiert für $t \rightarrow \infty$ gegen $(\bar{u}, 0)$.*

Das Langzeitverhalten der Populationsgrößen für die Fälle Ib und IIa ist in den nächsten beiden Abbildungen dargestellt:

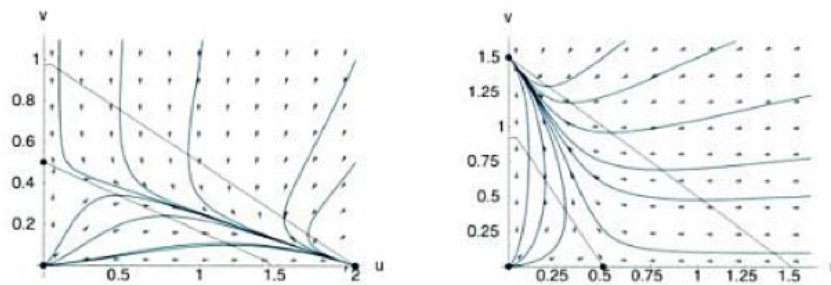


Abb. 4. Keine Koexistenz in Konkurrenz

Für die Koexistenz-Fälle Ia und IIb wird das Langzeitverhalten ebenfalls in einem Satz zusammengefasst:

Satz 4 (Satz über Koexistenz) *Es ergeben sich folgende 2 Fälle:*

- (i) **Fall Ia:** *Es gelte $\mu > \bar{u}, 1 > \bar{v}$. Dann ist das Koexistenz-Equilibrium (u_*, v_*) in $(0, \infty)^2$ global asymptotisch stabil und jede Lösung mit Anfangswert $u_0, v_0 > 0$ konvergiert gegen (u_*, v_*) .*
- (ii) **Fall IIb:** *Es gelte $\mu < \bar{u}, 1 < \bar{v}$. Dann ist das Koexistenz-Equilibrium (u_*, v_*) instabil und es gibt eine Separatrix S mit $(0, 0), (u_*, v_*) \in S$, sodass jede Lösung mit Anfangswert $(u_0, v_0) \notin S$ gegen $(\bar{u}, 0)$ oder $(0, \bar{v})$ konvergiert.*

In beiden Fällen gilt jedoch $u_* < \bar{u}$ und $v_* < \bar{v}$, woraus folgt, dass beide Arten durch die Koexistenz verlieren.

Biologisch interpretiert, verlieren also beide Arten in Koexistenz durch das Vorhandensein der anderen Art. Eine stabile Koexistenz kommt nur dann zustande, falls die relative Geburtenrate jeder Art jeweils größer ist als die Kapazität der anderen Art. Wird die Bedingung von der ersten Art erfüllt, von der zweiten aber nicht, so stirbt die erste Art aus. Erfüllt keine der beiden Arten die Bedingung, so stirbt in Abhängigkeit vom Anfangsbestand eine der beiden Arten aus.

In den folgenden Abbildungen soll das Verhalten dieser beiden Koexistenz-Fälle dargestellt werden:

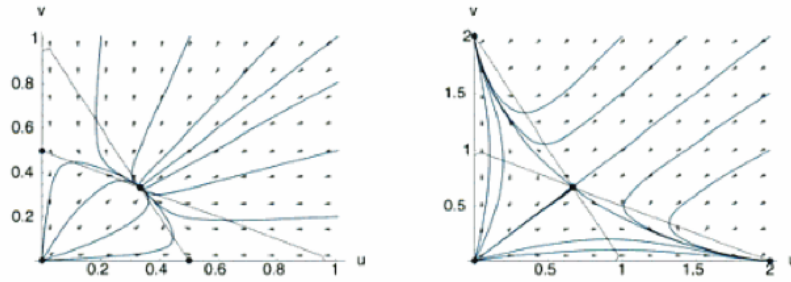


Abb. 5. Koexistenz in Konkurrenz

5.2 Kooperation

Betrachtet man nun analog die Equilibria des skalierten Kooperations-Modells in der selben Weise wie das Konkurrenzmodell im vorangegangenen Abschnitt, so erhält man folgenden Satz sowie die anschließend aufgeführten Diagramme in Abbildung 6 für die mathematische Modellierung der Populationsentwicklungen der Kooperationspartner:

Satz 5 (Satz über Kooperation) Es seien $\lambda_1, \lambda_2, \mu \geq 0$. Dann sind das triviale Equilibrium $(0,0)$ und die marginalen Equilibria $(\bar{u},0)$ und $(0,\bar{v})$ für das Kooperations-Modell instabil. Ferner gilt:

- (i) Im Fall $\lambda_1 \lambda_2 > 1$ gibt es genau ein Koexistenz-Equilibrium (u_*, v_*) . Dieses ist in $(0, \infty)^2$ global asymptotisch stabil und es gilt $u_* > \bar{u}$ und $v_* > \bar{v}$.
- (ii) Im Fall $\lambda_1 \lambda_2 < 1$ gibt es kein Koexistenz-Equilibrium und jede Lösung in $(0, \infty)^2$ explodiert in endlicher Zeit.

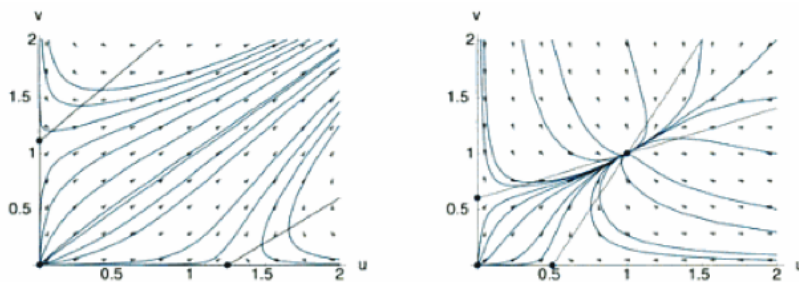


Abb. 6. Kooperation

5.3 Räuber-Beute-Modell (Volterra-Lotka-Modelle)

Im Falle eines Räuber-Beute-Verhältnisses lässt sich durch Betrachtung der Equilibria der folgende Satz formulieren:

Satz 6 (Satz zum Räuber-Beute-Verhältnis) *Es ergeben sich folgende drei Fälle:*

- (i) *Koexistenz: Für $\lambda_2 > \mu > \frac{-1}{\lambda_1}$ gibt es genau ein Koexistenz-Equilibrium (u_*, v_*) . Es ist in $(0, \infty)^2$ global asymptotisch stabil.*
- (ii) *Für $\lambda_2 < \mu$, also $\bar{v} > 1$, ist das marginale Equilibrium $(0, \bar{v})$ in $(0, \infty)^2$ global asymptotisch stabil.*
- (iii) *Für $\mu < \frac{-1}{\lambda_1}$, also $\mu < -\bar{u}$, ist das marginale Equilibrium $(\bar{u}, 0)$ in $(0, \infty)^2$ global asymptotisch stabil.*

Dieses Ergebnis lässt sich biologisch folgendermaßen interpretieren:

Zur Koexistenz kommt es nur, wenn die relative Geburtenrate der Beute die Kapazität der Räuberpopulation überwiegt sowie im Falle, dass die Kapazität der Beutepopulation größer ist als die negative relative Geburtenrate der Räuber. Diese Fälle sind in Abbildung 7 veranschaulicht. Zu keiner Koexistenz kommt es, falls die Räuber die Beutepopulation ausrotten bzw. sie sich nicht mehr von der Beute ernähren können und verhungern. In Abbildung 8 werden diese beiden Fälle dargestellt.

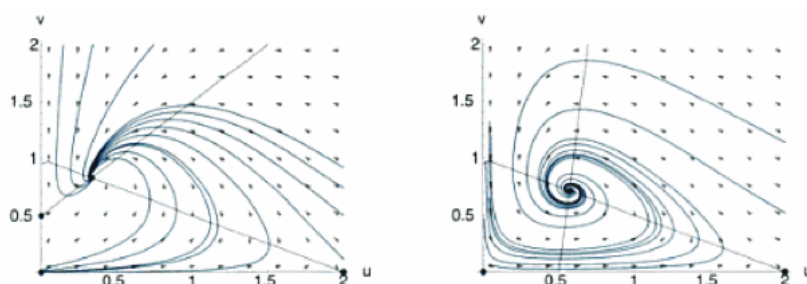


Abb. 7. Koexistenz für Räuber-Beute

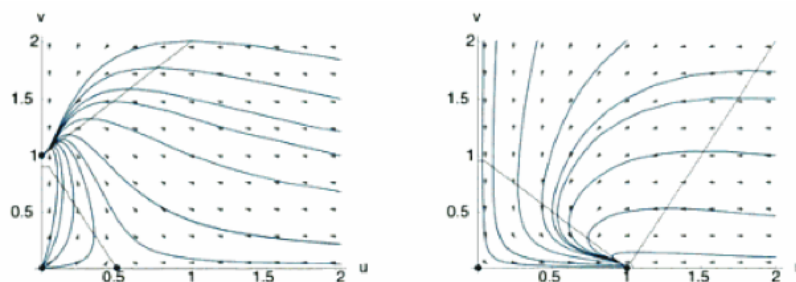


Abb. 8. Keine Koexistenz für Räuber-Beute

Literaturverzeichnis

- [a] <http://www.stauff.de/matgesch/dateien/malthus.htm>
- [b] <http://www.scienceofcomplexity.org/glossar.html>
- [c] Neil A. Campbell. *Biologie. Pearson Studium. 6.Auflage* (2006) 1383-1396.
- [d] Neil A. Campbell. *Biologie. Pearson Studium. 6.Auflage* (2006) 1410-1411.
- [e] H.J. Müller. *Ökologie. Gustav Fischer Verlag Jena. 2.Auflage* (1991) 224.

Infektionen

Manuela Lassu und Aljoscha Himmighofen

`manuela.lassu@uni.ulm.de`, `aljoscha.himmighofen@uni-ulm.de`

1 Einleitung

Zur mathematischen Modellierung einer Infektionskrankheit betrachtet man eine Population der Mächtigkeit N , die üblicherweise in mehrere Merkmalsgruppen aufgeteilt wird. Die einfachste Form sieht dabei eine Unterteilung in zwei Klassen vor:

- Die Klasse S der Infizierbaren (engl.: *susceptibles*),
- Die Klasse I der Infizierenden (engl.: *infectives*).

Zur genaueren bzw. realitätsnäheren Betrachtung können noch weitere Klassen in den Modellen eingeführt werden:

- Die Klasse R der Individuen, die nicht (mehr) infizierend oder infizierbar sind (engl.: *removed*),
- Die Klasse E der Infizierten, die noch nicht ansteckend sind (engl.: *exposed*).

Des Weiteren steht $X = X(t)$ für die Anzahl der Individuen in Klasse X (zum Zeitpunkt t). Ausserdem bilden diese Klassen in jedem Modell eine disjunkte Zerlegung der Gesamtpopulation, sodass folgender Zusammenhang besteht: $S + I + R + E = N$. Zu der Klasse R können zusätzlich noch die an der Krankheit Gestorbenen gezählt werden. Je nach Krankheitstyp kann es sinnvoll sein, eine genauere Differenzierung vorzunehmen und weitere Klassen einzuführen. Die folgenden Kapitel bauen auf dem klassischen Modell von Kermack und McKendrick auf und führen diese Ideen weiter.

2 Epidemien ohne Immunisierung: Das SIS - Modell

Das SIS-Modell ist eine Art Grundmodell bei dem vorausgesetzt wird, dass die Population räumlich gleichverteilt ist und aus den beiden Klassen S und I besteht. Insgesamt soll also der Wanderungsprozess zwischen diesen beiden Gruppen modelliert werden, welcher schematisch folgendermaßen beschrieben wird:

$$S \xrightarrow{rSI} I \xrightarrow{aI} S$$

Pro Zeitintervall wechselt also eine absolute Anzahl von rSI Individuen von Klasse S zu Klasse I (Erkrankung) und eine Anzahl von aI Individuen wieder zurück (Gesundung). Es wird dabei angenommen, dass die Ansteckung eines nicht infizierten Individuums beim Kontakt mit einem Infizierten mit einer festen relativen Häufigkeit, die krankheitsspezifisch ist, stattfindet. Dieser Zusammenhang spiegelt sich in der sogenannten *Infektionskontakttrate* $r > 0$ wieder. Ausserdem wird davon ausgegangen, dass die Zahl der Neuinfizierten proportional zu S und I ist und somit direkt von diesen abhängt. Die Heilung - also der Wechsel von I zu S - hingegen findet über eine feste Pro Kopf Rate $a > 0$ als Anteil von I statt. Offensichtlich bleibt die Summe $S + I$ konstant, sodass zusätzlich $\dot{S} = -\dot{I}$ gilt, was anschaulich bedeutet, dass S nur um die Anzahl zunehmen kann, um die I abnimmt und umgekehrt.

Durch diese Überlegungen kann man nun folgendes Anfangswertproblem aufstellen:

$$\begin{aligned}\dot{S} &= -rSI + aI, & t \geq 0 \\ \dot{I} &= rSI - aI, & t \geq 0 \\ S(0) &= S_0, \quad I(0) = I_0\end{aligned}\tag{1}$$

Nach dem Satz von Picard-Lindelöf und der Folgerung zur Quasipositivität besitzt (1) genau eine Lösung (S, I) . Bevor dieses Gleichungssystem nun gelöst wird, bedarf es noch einiger Umformungen.

Betrachten wir zunächst die Gleichung $\dot{I} = -aI$ - also den isolierten Gesundungsprozess - mit der Lösung $I(t) = e^{-at}I_0$. Der relative Anteil der (noch) infizierten Individuen von dem Startwert I_0 zum Zeitpunkt t ist also durch e^{-at} gegeben. Aus diesen Erkenntnissen kann man nun ableiten, dass die Infektionsdauer exponentialverteilt ist mit dem Erwartungswert

$$\frac{1}{a} = \int_0^\infty t a e^{-at} dt.$$

Weiterhin wird die *Reproduktionsrate* R der Infektion folgendermaßen definiert

$$R = \frac{rN}{a}.\tag{2}$$

Dabei ist rN die Infektionsrate, also der Anteil an N Infizierbaren, die ein einziger Infizierter pro Zeitintervall ansteckt. Durch die Multiplikation mit $\frac{1}{a}$, ist R also die Infektionsrate der mittleren Infektionsdauer.

Als nächstes werden die absoluten Häufigkeiten in (1) zu relativen Häufigkeiten und die Zeit zur charakteristischen Zeitspanne $\frac{1}{a}$ umskaliert ($\tau = at$). Wir setzen also

$$u(at) = \frac{S(t)}{N}, \quad v(at) = \frac{I(t)}{N}, \quad u_0 = \frac{S_0}{N}, \quad v_0 = \frac{I_0}{N}.\tag{3}$$

und erhalten folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}\dot{u} &= -(Ru - 1)v, & t \geq 0 \\ \dot{v} &= (Ru - 1)v, & t \geq 0 \\ u(0) &= u_0, \quad v(0) = v_0.\end{aligned}\tag{4}$$

Aus dem Satz von Picard-Lindelöf und der Folgerung zur Quasipositivität ergibt sich, dass (4) eine eindeutige Lösung besitzt. Ferner folgt, dass $\dot{u} + \dot{v} = 0$ also $u(t) + v(t) = u_0 + v_0 = 1$ für alle $t \geq 0$ gilt. Die Lösung (u, v) verläuft also in $D_1 = \{(u, v) \in \mathbb{R}^2 : u, v \geq 0, u + v = 1\}$ und existiert für alle Zeiten nach dem Fortsetzungssatz.

Setzt man $u = 1 - v$ in die zweite Gleichung von (4) ein, erhält man die Gleichung

$$\dot{v} = ((R - 1) - Rv)v,\tag{5}$$

die durch die folgende Funktion für $R > 0$ und $R \neq 1$ gelöst wird:

$$v(t) = \frac{v_0 v_*}{v_0 + (v_* - v_0) \exp(-(R - 1)t)} \quad \text{mit} \quad v_* = 1 - \frac{1}{R}.\tag{6}$$

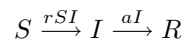
Für $t \rightarrow \infty$ ergibt sich ein Konvergenzverhalten von $(u, v) = (1 - v, v)$:

- Ist $R \leq 1$, so konvergiert (u, v) gegen das *krankheitsfreie Equilibrium* $(\bar{u}, \bar{v}) = (1, 0)$. Die Krankheit stirbt also aus.
- Für $R > 1$ konvergiert (u, v) gegen das *endemische Gleichgewicht* $(u_*, v_*) = (\frac{1}{R}, 1 - \frac{1}{R})$.

Zusammenfassend kann man sagen, dass die Reproduktionsrate R eine entscheidende Rolle bei der Ausbreitung der Infektion besitzt. Die Krankheit kann nur ausbrechen, wenn ein Infizierter im Mittel mehr als einen anderen ansteckt.

3 Epidemien mit Immunisierung: Das SIR - Modell

Im klassischen Modell von Kermack und McKendrick gibt es zusätzlich zu den beiden Klassen I und S noch eine weitere Klasse R, die der Immunisierten. Das SIR-Modell hat also Ähnlichkeiten zum vorigen Modell, wobei nun alle Gesunden immunisiert sind. Es ergibt sich folgendes Schema:



Dieses führt zu folgendem Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} \dot{S} &= -rSI, & t &\geq 0, \\ \dot{I} &= rSI - aI, & t &\geq 0, \\ \dot{R} &= aI, & t &\geq 0, \\ S(0) &= S_0, \quad I(0) = I_0, \quad R(0) = R_0, \end{aligned} \tag{7}$$

mit Konstanten $a, r > 0$ und Anfangswerten $S_0, I_0, R_0 \geq 0$. Es gilt $N = S_0 + I_0 + R_0$, und da $\dot{S} + \dot{I} + \dot{R}$ gleich 0 ist, gibt es genau eine positive Lösung mit $S(t) + I(t) + R(t) = N$ für alle $t \geq 0$. Nun wird das Anfangswertproblem noch wie zuvor der Einfachheit halber umgeformt. Man setzt

$$u(at) = \frac{S(t)}{N}, \quad v(at) = \frac{I(t)}{N}, \quad w(at) = \frac{R(t)}{N}, \quad u_0 = \frac{S_0}{N}, \quad v_0 = \frac{I_0}{N}, \quad w_0 = \frac{R_0}{N}$$

und erhält

$$\begin{aligned} \dot{u} &= -Ruv, & t &\geq 0, \\ \dot{v} &= Ruv - v, & t &\geq 0, \\ \dot{w} &= v, & t &\geq 0, \\ u(0) &= u_0, \quad v(0) = v_0, \quad w(0) = w_0. \end{aligned} \tag{8}$$

Es gilt $u(t) + v(t) + w(t) = u_0 + v_0 + w_0 = 1$ für alle $t \geq 0$. Da die Variable w nur in der letzten Gleichung vorkommt, kann man das System reduzieren und erhält

$$\begin{aligned} \dot{u} &= -Ruv, & t &\geq 0, \\ \dot{v} &= Ruv - v, & t &\geq 0, \\ u(0) &= u_0, \quad v(0) = v_0. \end{aligned} \tag{9}$$

Die Anfangswerte und Lösungen dieses Problems liegen im Dreieck $D_2 = \{(u, v) \in \mathbb{R}^2 : u, v \geq 0, u + v \leq 1\}$. Die Funktion w ergibt sich dann als Integral von v mit gegebenem Anfangswert w_0 :

$$w(t) = w_0 + \int_0^t v(s) ds, \quad t \geq 0.$$

Das System (9) hat offenbar die einzigen stationären Lösungen $(\bar{u}, 0)$ mit $\bar{u} \in [0, 1]$, wobei ein Startwert $(0, v_0) \in D_2$ zu der Lösung $(0, e^{-t}v_0)$ führt, die gegen $(0, 0)$ konvergiert. Seien nun u und v größer Null, dann kann man über die Trennung der Variablen ein Integral von (9) berechnen. Aus dem Gleichungssystem folgt:

$$\frac{\dot{v}(t)}{\dot{u}(t)} = -1 + \frac{1}{Ru(t)}.$$

Durch Multiplikation mit $\dot{u}$ und Integration nach t ergibt sich:

$$v(t) - v_0 = u_0 - u(t) + R^{-1}(\log u(t) - \log u_0).$$

Also ist die Funktion $H : (0, 1] \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}_+$, $H(u, v) = v + u - R^{-1} \log u$ ein Integral von (9). Es ergeben sich daraus folgende Trajektorien von H :

$$v = \phi_c(u) = c - u + R^{-1} \log u, \quad c = H(u_0, v_0), \quad u > 0,$$

Diese Funktionen sind in der folgenden Abbildung dargestellt:

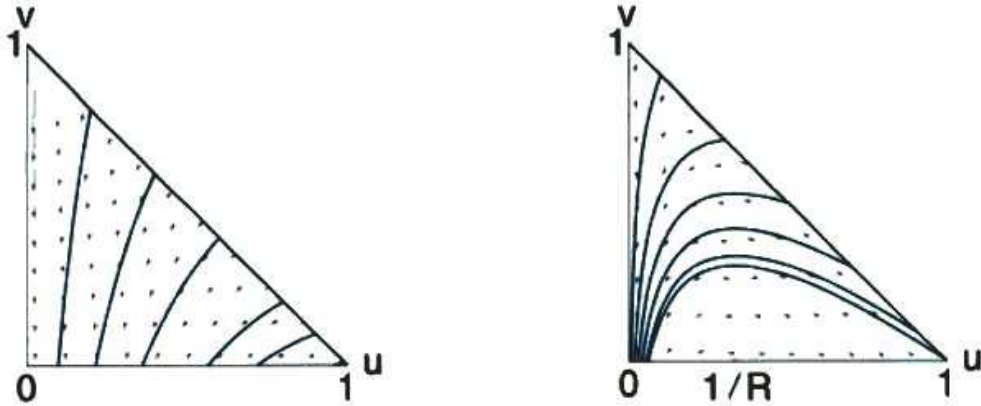


Abb. 1. Epidemisches SIR Modell mit $R = 0.8$ bzw. $R = 3$.

Typischerweise kann man voraussetzen, dass die Anfangswerte auf der Hypotenuse des Dreiecks liegen, da zum Startzeitpunkt der Anteil der Immunisierten gleich Null ist. Die Lösungen verlaufen dabei von rechts nach links, da $\dot{u} < 0$ nach (9).

Man kann nun zwei Fälle unterscheiden:

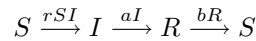
- Für $R \leq 1$ konvergiert die Lösung $(u(t), v(t))$ für $t \rightarrow \infty$ gegen eine stationäre Lösung $(u_\infty, 0)$.
- Für $R > 1$ steigt der Anteil der Infizierten bei gleichzeitiger Verringerung von u ggf. bis zu einer Maximalstelle $v_{max} = -R^{-1}(1 + \log R) + u_0 + v_0 - R^{-1} \log u_0$ an, bevor diese Lösung auch gegen das Equilibrium $(u_\infty, 0)$ konvergiert.

In beiden Fällen kann man u_∞ als Nullstelle der entsprechenden Trajektorie identifizieren. Die Krankheit stirbt also auf lange Sicht gesehen in jedem Fall aus. u_∞ ist damit gegeben durch:

$$u_\infty - R^{-1} \log u_\infty = u_0 + v_0 - R^{-1} \log u_0, \quad u_0 > 0. \quad (10)$$

4 Epidemien mit Immunverlust: Das SIRS - Modell

Das SIRS-Modell baut weiter auf dem epidemischen SIR-Modell auf und berücksichtigt zusätzlich, dass die Immunität mit der Zeit verloren gehen kann. Eine neue Rate bR mit Parameter $b > 0$ gibt dabei an, wieviele Individuen von Klasse R zurück zu Klasse S wechseln, also wieder infizierbar werden. Es ergibt sich ein neues Schema:



Wir betrachten das System

$$\begin{aligned} \dot{S} &= -rSI + bR, & t &\geq 0, \\ \dot{I} &= rSI - aI, & t &\geq 0, \\ \dot{R} &= aI - bR, & t &\geq 0, \\ S(0) &= S_0 \geq 0, \quad I(0) = I_0 \geq 0, \quad R(0) = R_0 \geq 0, \end{aligned} \tag{11}$$

mit gegebenen Konstanten $a, b, r > 0$. Vollkommen analog zu den beiden vorherigen Modellen kann man zeigen, dass die Lösung für alle Zeiten $t \geq 0$ nach dem Fortsetzungssatz existiert. Wir formen wieder um mit identischer mittleren Infektionsdauer und Reproduktionsrate, setzen $\alpha := b/a$ und erhalten das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \dot{u} &= -Ruv + \alpha w, & t &\geq 0, \\ \dot{v} &= Ruv - v, & t &\geq 0, \\ \dot{w} &= v - \alpha w, & t &\geq 0, \\ u(0) &= u_0, \quad v(0) = v_0, \quad w(0) = w_0. \end{aligned} \tag{12}$$

Die Lösung liegt dabei offensichtlich im räumlichen Dreieck $D_3 = \{(u, v, w) \in \mathbb{R}^3 : u, v, w \geq 0, u + v + w \leq 1\}$, ist eindeutig und existiert für alle Zeiten.

Man kann nun folgende Schlussfolgerungen ziehen:

Satz 4.1 (Das endemische Gleichgewicht p_*)

- Für $R < 1$ ist das krankheitsfreie Gleichgewicht $(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}) = (1, 0, 0)$ asymptotisch stabil in D_3 und die Lösung konvergiert gegen $(1, 0, 0)$ für $t \rightarrow \infty$.
- Für $R > 1$ ist $(1, 0, 0)$ instabil und das endemische Gleichgewicht $p_* = (u_*, v_*, w_*)$ asymptotisch stabil in D_3 . Die Lösung konvergiert für $t \rightarrow \infty$ gegen

$$p_* = (u_*, v_*, w_*) = \left(\frac{1}{R}, \frac{\alpha(1 - R^{-1})}{1 + \alpha}, \frac{1 - R^{-1}}{1 + \alpha} \right). \tag{13}$$

Beweis. Für einen ausführlichen Beweis dieses Satzes siehe [1]. □

Dieses Ergebnis zeigt, dass das SIRS-Modell Ähnlichkeiten zum SIS-Modell aufweist. Die Reproduktionsrate R hat bei beiden Modellen die entscheidende Rolle eines Schwellenparameters. Für $R > 1$ wird ein endemisches Gleichgewicht angenommen, wobei im Gegensatz zum SIR-Modell, bei dem die Krankheit in jedem Fall ausstirbt, $R < 1$ sein muss, damit der Anteil der infizierten Individuen gegen Null konvergiert.

Die folgende Abbildung zeigt drei Lösungen von (12) im Falle von $R > 1$ mit $w_0 = 0$:

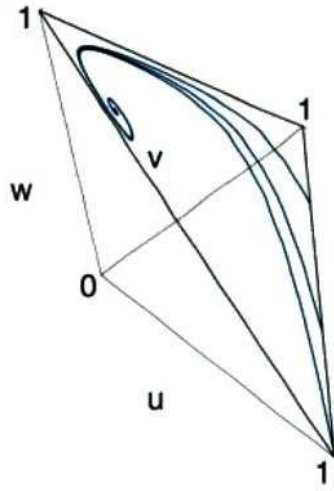


Abb. 2. Epidemisches SIRS Modell mit $R = 5$ und $\alpha = 0.05$.

5 Endemien

(zu grch. endemos = im Volke, einheimisch) Unter einer Endemie versteht man das andauernd gehäufte Auftreten einer Infektionskrankheit in einer begrenzten Region oder Population. Die Wahrscheinlichkeit an der Infektion zu erkranken ist mehr oder weniger gleich, aber im Verhältnis zu anderen Regionen/Populationen erhöht. Beispiele hierfür sind Kinderkrankheiten, FSME (z.B. in Süddeutschland oder der Schweiz) oder auch Malaria in den Tropen. Um nun eine aussagekräftige Modellierung zu erhalten, sollten auch die Geburts- und Sterberaten der Population, die unabhängig von der Infektionserkrankung sind, in die Modellierung miteinfließen.

Wir treffen folgende Annahmen für das endemische SIR Modell:

1. Die pro Kopf Geburts- und Sterberaten sind konstant und beide sind gleich $b > 0$
2. Die Neugeborenen sind weder infiziert noch immunisiert
3. Die Geburts- und Sterbeprozesse sind unabhängig von der Infektion

Die Gesamtpopulation ist also wieder konstant ihrer Anfangsgröße $N = S_0 + I_0 + R_0$. Wir erhalten das System

$$\begin{aligned} \dot{S} &= bN - rSI - bS, & t \geq 0 \\ \dot{I} &= rSI - aI - bI, & t \geq 0 \\ \dot{R} &= aI - bR, & t \geq 0 \\ S(0) &= S_0, \quad I(0) = I_0, \quad R(0) = R_0 \end{aligned} \tag{14}$$

mit den Konstanten $a, b, r > 0$ und den Anfangswerten $S_0, I_0, R_0 \geq 0$. Die relativen Anteile ergeben sich durch

$$u(\tau) = \frac{S(t)}{N}, \quad v(\tau) = \frac{I(t)}{N}, \quad w(\tau) = \frac{R(t)}{N}$$

wobei jetzt $\tau = (a + b)t$ ist, da die Abnahmerate der Infizierten nun $a + b$ entspricht.

Die durch einen Infizierten durchschnittlich ausgelösten Folgefälle während seiner Krankheit werden durch die Reproduktionsrate $\mathcal{R}$ ausgedrückt, die hier wie folgt definiert ist

$$\mathcal{R} = \frac{rN}{a+b} \quad \text{und} \quad \alpha = \frac{b}{a+b} \quad (15)$$

Wenn wir u, v, w nun differenzieren erhalten wir das System

$$\begin{aligned} \dot{u} &= \alpha(1-u) - \mathcal{R}uv, \quad t \geq 0 \\ \dot{v} &= \mathcal{R}uv - v, \quad t \geq 0 \\ \dot{w} &= (1-\alpha)v - \alpha w, \quad t \geq 0 \\ u(0) &= u_0, \quad v(0) = v_0, \quad w(0) = w_0 \end{aligned} \quad (16)$$

mit $\mathcal{R} > 0$, $\alpha \in (0, 1)$, $u_0, v_0, w_0 \geq 0$, $u_0 + v_0 + w_0 = 1$. Aus dem Satz von Picard-Lindelöf und der Quasipositivität folgt, dass (16) eine eindeutige positive Lösung besitzt. Da w in den ersten beiden Gleichungen nicht vorkommt, können wir das folgende Teilsystem betrachten

$$\begin{aligned} \dot{u} &= \alpha(1-u) - \mathcal{R}uv \quad t \geq 0 \\ \dot{v} &= \mathcal{R}uv - v \quad t \geq 0 \\ u(0) &= u_0, \quad v(0) = v_0, \end{aligned} \quad (17)$$

Aus $\dot{u} + \dot{v} = \alpha(1-u) - v \leq \alpha - \alpha(u+v)$ erhalten wir durch Integration die Ungleichung $u+v \leq 1$. Die Lösung verläuft im Dreieck $D_2 = \{(u, v) \in \mathbb{R}^2 : u, v \geq 0, u+v \leq 1\}$ und existiert $\forall t \geq 0$. (17) besitzt zum einen den Gleichgewichtspunkt $(\bar{u}, \bar{v}) = (1, 0)$, der immer biologisch relevant ist, und den Gleichgewichtspunkt $(u_*, v_*) = (\frac{1}{\mathcal{R}}, \alpha(1 - \frac{1}{\mathcal{R}}))$, der nur für $\mathcal{R} > 1$ und $v_0 > 0$ unseren Annahmen, N konstant und $u, v \geq 0$, entspricht. Für (14) erhalten wir den endemischen Gleichgewichtspunkt

$$(S_*, I_*, R_*) = \left(\frac{a+b}{r}, \frac{bN}{a+b} - \frac{b}{r}, \frac{aN}{a+b} - \frac{a}{r} \right) \quad (18)$$

Satz 5.1 ($\mathcal{R}$ als Schwellenwert)

Gegeben sei $\mathcal{R}$ durch (15) und $(u_0, v_0) \in D_2$. Dann besitzt das endemische SIR Modell (17) genau eine Lösung, die $\forall t \geq 0$ in D_2 liegt.

Für $\mathcal{R} < 1$ kommt es zum Aussterben der Krankheit. Der krankheitsfreie Gleichgewichtspunkt $(\bar{u}, \bar{v}) = (1, 0)$ ist asymptotisch stabil und die Lösung konvergiert für jeden Anfangswert (u_0, v_0) gegen $(1, 0)$.

Für $\mathcal{R} > 1$ kommt es zu einem endemischen Fortbestehen der Krankheit. $(1, 0)$ ist instabil und das endemische Gleichgewicht (u_*, v_*) asymptotisch stabil. Die Lösung konvergiert gegen (u_*, v_*) , falls $v_0 > 0$.

Beweis. Wir verwenden unter anderem das Prinzip der linearisierten Stabilität. Dazu berechnen wir die Jacobimatrizen von $f(u, v) = (\alpha(1-u) - \mathcal{R}uv, \mathcal{R}uv - v)$ für die beiden Gleichgewichtspunkte. Wir erhalten

$$f'(1, 0) = \begin{bmatrix} -\alpha & -\mathcal{R} \\ 0 & \mathcal{R} - 1 \end{bmatrix} =: A_1 \quad \text{und} \quad f'(u_*, v_*) = \begin{bmatrix} -\alpha\mathcal{R} & -1 \\ \alpha(\mathcal{R} - 1) & 0 \end{bmatrix} =: A_2$$

Wir wollen nun Auskunft über die Eigenwerte von A_1 und A_2 bekommen und berechnen dazu das jeweilige charakteristische Polynom

$$\begin{aligned} c_{A_1} &= (-\alpha - \lambda)(\mathcal{R} - 1 - \lambda) \\ \lambda_1 &= -\alpha < 0, \quad \text{da } \alpha > 0 \\ \lambda_2 &= \mathcal{R} - 1 \begin{cases} < 0 & \text{für } \mathcal{R} < 1 \\ > 0 & \text{für } \mathcal{R} > 1 \end{cases} \end{aligned}$$

$\implies (1, 0)$ ist für $\mathcal{R} < 1$ asymptotisch stabil und für $\mathcal{R} > 1$ instabil.

Beim Fall λ_1, λ_2 reell und kleiner 0, handelt es sich um einen stabilen Knoten.

$$\begin{aligned} c_{A_2} &= \lambda^2 + \alpha\mathcal{R}\lambda + \alpha(\mathcal{R} - 1) \\ \lambda_{1/2} &= -\frac{\alpha\mathcal{R}}{2} \pm \frac{\sqrt{\alpha^2\mathcal{R}^2 - 4\alpha(\mathcal{R} - 1)}}{2} \end{aligned}$$

für $\mathcal{R} \in \left(\frac{2-2\sqrt{1-\alpha}}{\alpha}; \frac{2+2\sqrt{1-\alpha}}{\alpha} \right)$ ist der $\text{Im } \lambda_{1/2} \neq 0$ und der $\text{Re } \lambda_{1/2} < 0$
 $\implies (u_*, v_*)$ ist asymptotisch stabil und es liegt eine stabile Spirale vor siehe Abb. (3).

für $\mathcal{R} \notin \left(\frac{2-2\sqrt{1-\alpha}}{\alpha}; \frac{2+2\sqrt{1-\alpha}}{\alpha} \right)$ und $\mathcal{R} > 1$ sind $\lambda_{1/2}$ nach dem Satz von Vieta kleiner 0, denn

$$\begin{aligned}\lambda_1 + \lambda_2 &= -\alpha\mathcal{R} < 0 \\ \lambda_1\lambda_2 &= \alpha(\mathcal{R} - 1) > 0 \text{ für } \mathcal{R} > 1\end{aligned}$$

Damit beide Bedingungen erfüllt sind, müssen λ_1 und $\lambda_2 < 0$ sein.

$\implies (u_*, v_*)$ ist asymptotisch stabil

Es liegt wieder ein stabiler Knoten vor, da $\lambda_{1/2} < 0$ und reell.

Wir zeigen jetzt, dass die Lösung für $\mathcal{R} < 1$ für alle Anfangswerte $(u_0, v_0) \in D_2$ gegen den Gleichgewichtspunkt $(1, 0)$ konvergiert.

Wir erhalten aus $u, v \geq 0$ und $u \leq 1$ die Ungleichung

$$\begin{aligned}\dot{v} &\leq (\mathcal{R} - 1)v \\ \xrightarrow{\text{Integration}} v(t) &\leq v_0 e^{-(1-\mathcal{R})t} \\ \text{aus } 0 \leq v(t) &\leq \underbrace{v_0 e^{-(1-\mathcal{R})t}}_{\rightarrow 0 \text{ (} t \rightarrow \infty)} \\ \text{folgt } \lim_{t \rightarrow \infty} v(t) &= 0 \quad \forall v_0 \in D_2\end{aligned}$$

daraus erhalten wir die Ungleichung

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(1-u) &= -\dot{u} \leq -\alpha(1-u) + \mathcal{R}v_0 e^{-(1-\mathcal{R})t} \\ \xrightarrow{\text{Integration}} 0 \leq 1-u(t) &\leq \underbrace{(1-u_0)e^{-\varepsilon t}}_{\rightarrow 0 \text{ (} t \rightarrow \infty)}, \varepsilon := \min\{\alpha, 1-\mathcal{R}\} > 0 \\ \implies \lim_{t \rightarrow \infty} u(t) &= 1 \quad \forall u_0 \in D_2\end{aligned}$$

Somit bleibt noch zu zeigen, dass für $\mathcal{R} > 1$ die Lösung gegen (u_*, v_*) konvergiert, falls v_0 strikt positiv ist. In diesem Fall ist also $v_0 > 0$ und die Funktion v ist strikt positiv. Wir bilden eine Ljapunov-Funktion Φ auf $D_2 \setminus ([0, 1] \times \{0\})$

$$\begin{aligned}\Phi(x, y) &= \frac{1}{2}(x - u_*)^2 + u_*(y - v_* \log y) \quad , x \in \mathbb{R}, y > 0 \\ \dot{\Phi}(u, v) &= \frac{d}{dt}\Phi(u, v) \leq -\alpha(u - u_*)^2 \leq 0 \\ \text{aus } \dot{\Phi}(u, v) \equiv 0 &\implies u \equiv u_* = \frac{1}{\mathcal{R}} \xrightarrow{(17)} v \text{ konstant}\end{aligned}$$

Die Funktion Φ ist also streng fallend für jede nichtkonstante Lösung und somit eine strikte Ljapunov-Funktion. Für ein genügend großes c liegt der Startwert (u_0, v_0) und der Gleichgewichtspunkt (u_*, v_*) in der Menge $N_c = \{x \geq 0, y > 0 : \Phi(x, y) \leq c\}$. Diese ist positiv invariant und abgeschlossen. Aus dem Satz über Ljapunov-Funktionen erhalten wir unser gewünschtes Ergebnis. $\square$

Wir wollen unser Modell (14) nun um die infektionsabhängige Todesrate $m > 0$ erweitern. Wir erhalten

$$\begin{aligned}\dot{S} &= bN - rSI - bS, \quad t \geq 0 \\ \dot{I} &= rSI - aI - bI - mI, \quad t \geq 0 \\ \dot{R} &= aI - bR, \quad t \geq 0 \\ S(0) &= S_0, \quad I(0) = I_0, \quad R(0) = R_0\end{aligned} \tag{19}$$

wobei $N = S_0 + I_0 + R_0$ $r, a > 0$ und $S_0, I_0, R_0 \geq 0$.

Zunächst entspricht der Zuwachs an Geburten dem Verlust durch Sterbefälle. Aber an $\dot{S} + \dot{I} + \dot{R} = -mI$ sehen wir, dass die Gesamtpopulation für $I_0 > 0$ strikt fällt und somit N keine Konstante mehr ist.

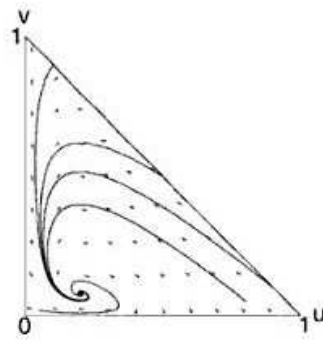
Endemisches SIR Modell mit $\alpha = 0.1$ und $\mathcal{R} = 5$.

Abb. 3.

Unsere neue Zeitskala ergibt sich aufgrund der steigenden pro Kopf Abnahmerate der Infizierten von $a + b + m$ zu $\tau = (a + b + m)t$. Somit verändern sich unsere Konstanten zu

$$\mathcal{R} = \frac{rN}{a + b + m} \quad \text{und} \quad \alpha = \frac{b}{a + b + m} \quad (20)$$

Die Reproduktionsrate $\mathcal{R}$ verkleinert sich, da die Zahl der Infizierten durch die Todesfälle reduziert wird und die Infektion sich dadurch langsamer ausbreitet.

Wenn wir das Ganze wieder in relativen Anteilen ausdrücken, erhalten wir das gleiche reduzierte System wie für $m = 0$, nämlich

$$\begin{aligned} \dot{u} &= \alpha(1 - u) - \mathcal{R}uv & t \geq 0 \\ \dot{v} &= \mathcal{R}uv - v & t \geq 0 \\ u(0) &= u_0, \quad v(0) = v_0 \end{aligned} \quad (21)$$

Somit gelten die Aussagen des Satzes (5.1) und für (19) ergibt sich im Fall $\mathcal{R} > 1$ der strikt positive und asymptotisch stabile Gleichgewichtspunkt

$$(S_*, I_*, R_*) = \left(\frac{a + b + m}{r}, \frac{bN}{a + b + m} - \frac{b}{r}, \frac{aN}{a + b + m} - \frac{a}{r} \right) \quad (22)$$

Der Unterschied zum SIR Modell mit $m = 0$:

S_* erhöht sich und I_*, R_* und $S_* + I_* + R_*$ verringern sich.

6 Impfungen für Endemien

Wir wollen nun schauen, wie sich das Modell (14) ändert, wenn wir einen Anteil $p \in [0, 1]$ der Neugeborenen impfen lassen. $q = 1 - p$ sei dabei der Anteil der Neugeborenen, die infizierbar bleiben.

Wir bekommen das System

$$\begin{aligned} \dot{S} &= bqN - rSI - bS & t \geq 0 \\ \dot{I} &= rSI - aI - bI & t \geq 0 \\ \dot{R} &= bpN + aI - bR & t \geq 0 \\ S(0) &= S_0, \quad I(0) = I_0, \quad R(0) = R_0 \end{aligned} \quad (23)$$

mit Konstanten $a, b, r > 0$, Anfangswerten $S_0, I_0, R_0 \geq 0$ und $N = S + I + R$, wobei die Gesamtpopulation aufgrund von $\dot{S} + \dot{I} + \dot{R} = 0$ konstant bleibt. Es existiert wieder genau eine positive Lösung. Wir gehen wie in den vorherigen Modellen vor und erhalten mit den Größen $\mathcal{R} > 0$ und $\alpha \in (0, 1)$ das reduzierte System

$$\begin{aligned} \dot{u} &= \alpha q - \alpha u - \mathcal{R}uv & t \geq 0 \\ \dot{v} &= \mathcal{R}uv - v & t \geq 0 \\ u(0) &= u_0, \quad v(0) = v_0 \end{aligned} \quad (24)$$

Das System hat die beiden Gleichgewichtspunkte

$$(q, 0) \quad \text{und} \quad \left(\frac{1}{\mathcal{R}}, \alpha \left(q - \frac{1}{\mathcal{R}} \right) \right)$$

Wir möchten nun herausfinden, wie wir die Krankheit trotz $\mathcal{R} > 1$ zum Aussterben bringen können. Deshalb schauen wir uns nur den Gleichgewichtspunkt $(q, 0)$ an und schließen den anderen durch die Bedingung $q < \frac{1}{\mathcal{R}}$ aus. Die Bedingung ist äquivalent zu

$$p > 1 - \frac{1}{\mathcal{R}} \quad (25)$$

Aus (25) und der Jacobimatrix von $f(u, v)$ im Punkt $(q, 0)$

$$f'(q, 0) = \begin{bmatrix} -\alpha & -\mathcal{R}q \\ 0 & \mathcal{R}q - 1 \end{bmatrix}$$

folgt dann die asymptotische Stabilität von $(q, 0)$.

Für $v_0 = 0$ bleibt $v = 0$ und $u(t) \rightarrow q$ für $t \rightarrow \infty$. Für $v_0 > 0$ bleibt v positiv und es gilt $\dot{u} \leq \alpha q - \alpha u$. Da $u(0) \leq q$ ist, folgt $u(t) \leq q$ für $t \geq 0$. Wir erhalten damit die Ungleichung $\mathcal{R}u \leq \mathcal{R}q < 1$ und sehen, dass v wegen $\dot{v} = v(\mathcal{R}u - 1) < 0$ exponentiell gegen 0 geht. Somit konvergiert u gegen q . Wir können die Infektion also zum Aussterben bringen, wenn wir einen Anteil $p > \hat{p} = 1 - \frac{1}{\mathcal{R}}$ der Neugeborenen impfen. Aus unseren Erkenntnissen können wir jetzt folgenden Satz formulieren.

Satz 6.1 *Im endemischen SIR Modell mit Impfung (24) ist der krankheitsfreie Gleichgewichtspunkt $(q, 0)$ für $\mathcal{R} > 1$ aus (15) und der Bedingung (25) asymptotisch stabil. Die Lösung konvergiert für $t \rightarrow \infty$ gegen $(q, 0) \forall (u_0, v_0) \in D_2$*

Für das Modell (19) mit der infektionsabhängigen Todesrate $m > 0$ erhält man ebenfalls das reduzierte System (24), mit dem Unterschied, dass $\mathcal{R}$ und α durch (20) gegeben sind. Auch hier kann man die Infektion zum Aussterben bringen, wenn man einen Anteil $p > \hat{p} = 1 - \frac{1}{\mathcal{R}}$ ($\mathcal{R}$ durch (20) gegeben) der Neugeborenen impft.

Eine weitere Möglichkeit die Krankheit im Modell (14) für $\mathcal{R} > 1$ auszurotten, besteht durch Quarantäne. Dabei werden δI Infektiöse von der Klasse S in die Klasse R verschoben. Die Reproduktionsrate ergibt sich jetzt durch $\mathcal{R} = \frac{rN}{a+\delta+b}$. Die Krankheit stirbt aus, wenn

$$\frac{rN}{a+\delta+b} < 1 \iff \delta > rN - a - b > 0$$

7 Ein SIS-Modell mit 2n Klassen

Es gibt Infektionskrankheiten, bei der man die Klassen, wie S und I , in Unterklassen aufteilen muss, um eine angemessene Modellierung zu erhalten. Man unterteilt zum Beispiel nach Geschlecht oder Bevölkerungsgruppen. Wir führen das ganze am SIS Modell für n Unterklassen durch. S_k sind die Infizierbaren und I_k die Infektiösen der Klasse k , $k = 1, \dots, n$. Wir treffen folgende Annahmen

1. Die Individuen können die Klasse nicht wechseln
2. Wir berücksichtigen keine Geburts- und Sterberaten
3. Die Inkubationszeit wird vernachlässigt

Aus der Annahme 1 folgt, dass die Anzahl $S_k + I_k =: N_k > 0$ der k -ten Unterklasse konstant bleibt. Wir bezeichnen die Gesundungsrate der k -ten Unterklasse mit $a_k > 0$ und die Infektionskontrakte eines Infizierbaren der Klasse k mit einem Infektiösen der Klasse l mit r_{kl} . Wir erhalten die folgenden Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{I}_k &= -a_k I_k + \sum_{l=1}^n r_{kl} S_k I_l \\ &= -a_k I_k + \sum_{l=1}^n r_{kl} N_k I_l - \sum_{l=1}^n r_{kl} I_k I_l \\ k &\in \{1, \dots, n\} \end{aligned}$$

Wenn wir das ganze wieder in relativen Anteilen ausdrücken möchten, erhalten wir für $v_k = \frac{I_k}{N_k}$ und $b_{kl} = r_{kl}N_l \geq 0$ folgendes System

$$\begin{aligned} \dot{v}_k &= -a_k v_k + \sum_{l=1}^n b_{kl} v_l - \sum_{l=1}^n b_{kl} v_k v_l, \quad t \geq 0, \quad k = 1, \dots, n, \\ v_k(0) &= v_{k0}, \quad k = 1, \dots, n \end{aligned} \quad (26)$$

Wir treffen außerdem die Annahme, dass die Population irreduzibel ist, das bedeutet, dass für jede echte Teilmenge $J \neq \emptyset$ von $\{1, \dots, n\}$, $l \in J$ und $k \in \{1, \dots, n\} \setminus J$ mit $b_{kl} > 0$ existieren.

In unserem Fall heißt das, dass eine Gruppe J von Unterklassen mindestens eine Unterklasse, die nicht aus J ist, infizieren kann.

Wir können das System (26) auch schreiben als

$$\dot{v} = Av - g(v), \quad t \geq 0, \quad v(0) = v_0 \quad (27)$$

dabei sei

$$\begin{aligned} v &= (v_1, \dots, v_n)^T, \quad v_0 = (v_1 0, \dots, v_n 0)^T \in W_n = [0, 1]^n \\ A &= [a_{kl}] = \begin{cases} b_{kl}, & \text{für } k \neq l \\ b_{kk} - a_k, & \text{sonst} \end{cases}, \quad n \times n \text{ Matrix} \\ g(v) &= \left(\sum_{l=1}^n b_{kl} v_k v_l \right)_{k=1, \dots, n} \end{aligned}$$

Wir definieren nun die Spektralschranke durch

$$s(A) = \max \{ \operatorname{Re} \lambda : \lambda \text{ ist ein Eigenwert von } A \}$$

Mit ihrer Hilfe können wir Aussagen über die asymptotische Stabilität des Systems (26) machen. Und genau das macht folgender Satz.

Satz 7.1 (*$s(A)$ als Schwellenwert*)

Sei v Lösung des irreduziblen Systems (26) mit $v(0) = v_0 \in W_n = [0, 1]^n$ dann gilt

für $s(A) \leq 0$: $\lim_{t \rightarrow \infty} v(t) = \bar{v} = 0$ dabei ist $\bar{v} \in W^n$ der einzige Gleichgewichtspunkt. $\bar{v}$ ist global asymptotisch stabil und die Infektion stirbt aus.

für $s(A) > 0$ und $v_0 \neq 0$: $\lim_{t \rightarrow \infty} v(t) = v^*$, v^* ist dabei der einzige Gleichgewichtspunkt und global asymptotisch stabil in $W^n \setminus \{0\}$. v^* liegt in $(0, 1)^n$ und somit bleibt die Infektion in allen Unterklassen bestehen.

Beweis. Für einen ausführlichen Beweis dieses Satzes siehe [1] □

Beispiel 1. Damit das Ganze etwas verständlicher wird, führen wir dieses Modell an der Geschlechtskrankheit Gonorrhö durch. Wir gehen von einer heterosexuellen Bevölkerung aus $\Rightarrow$ die Ansteckungsrate zwischen Gleichgeschlechtlichen ist $b_{11} = b_{22} = 0$. Wir bezeichnen die Klasse weiblich mit 1 und die Klasse männlich mit 2. Also ist

- v_1 der Anteil an Infizierten der Klasse weiblich
- v_2 der Anteil an Infizierten der Klasse männlich
- a_1 die Gesundungsrate der weiblichen Infizierten
- a_2 die Gesundungsrate der männlichen Infizierten
- b_{12} die Ansteckungsrate einer weiblichen Infizierbaren durch einen männlichen Infizierten
- b_{21} die Ansteckungsrate eines männlichen Infizierbaren durch eine weibliche Infizierte

Wir erhalten

$$\begin{pmatrix} \dot{v}_1 \\ \dot{v}_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -a_1 & b_{12} \\ b_{21} & -a_2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_{11}v_1^2 + b_{12}v_1v_2 \\ b_{21}v_2v_1 + b_{22}v_2^2 \end{pmatrix}$$

Daraus ergeben sich die stationären Lösungen

$$\bar{v} = 0 \quad \text{und} \quad v^* = \left[\frac{b_{12}b_{21} - a_1a_2}{b_{21}(a_1 + b_{12})}, \frac{b_{12}b_{21} - a_1a_2}{b_{12}(a_2 + b_{21})} \right]$$

aus der Matrix $A = \begin{bmatrix} -a_1 & b_{12} \\ b_{21} & -a_2 \end{bmatrix}$ bekommen wir die folgenden EW

$$\lambda_{1/2} = \frac{1}{2} \{-a_1 - a_2 \pm \sqrt{(-a_1 - a_2)^2 + 4(b_{12}b_{21} - a_1a_2)}\}$$

für $b_{12}b_{21} - a_1a_2 > 0$ ist der Realteil des größten Eigenwertes von A größer 0, also $s(A) > 0$

$$\xrightarrow{\text{Satz(7.1)}} \lim_{t \rightarrow \infty} v(t) = v^*$$

für $b_{12}b_{21} - a_1a_2 \leq 0$ ist der Realteil des größten Eigenwertes von $A \leq 0$, also $s(A) \leq 0$.

$$\xrightarrow{\text{Satz(7.1)}} \lim_{t \rightarrow \infty} v(t) = 0$$

8 Schlussbetrachtung

Zu guter Letzt möchten wir noch mit Hilfe der obigen Ergebnisse grundlegende Strategien diskutieren, die es erlauben, die Ausbreitung von Infektionskrankheiten einzudämmen bzw. ganz zu verhindern. In den meisten Fällen war dabei die Reproduktionsrate R für den Verlauf ausschlaggebend. Im Grunde kann man sagen, dass sich die Infektion umso langsamer ausbreitet je kleiner R ausfällt. Über die Parameter kann man dabei Einfluss auf die Größe von R nehmen, zum Beispiel, indem man die Infektionskontaktrate r durch Hygienemaßnahmen oder - bei Tieren - die Populationsgröße N durch Massentötungen verringert. Ferner kann man die Heilungsrate a erhöhen, indem man den Gesundungsprozess von Erkrankten durch geeignete Therapien beschleunigt, diese in Quarantäne verlegt oder noch nicht infizierte Individuen durch Impfung immunisiert.

Literaturverzeichnis

1. J.W. Prüss, R. Schnaubelt, R. Zacher: *Mathematische Modelle in der Biologie: Deterministische homogene Systeme*, Kapitel 2, Abschnitte 7-12, Birkhäuser Verlag (2008)
2. H.Heuser: *Gewöhnliche Differentialgleichungen*

Viren und Prionen

Helmut Weidle

Helmut.Weidle@uni-ulm.de

1 Viren

1.1 Das Modell von May und Nowak

Aktualität

Viren sind aus aktuellem Anlass ein sehr aktives Forschungsgebiet. Jedes Jahr wird vom Gesundheitsamt eine große Zahl von Grippeerkrankungen registriert. Immer häufiger berichten die Medien von neu auftretenden Krankheiten.

Beispielsweise wird die „Schweinegrippe“ durch H1N1 Viren verursacht. Nicht zuletzt sorgte die „Vogelgrippe“, welche durch H5N1 Viren ausgelöst wird, für Aufregung.

Definition 1 (Virenmodell). *Das Virenmodell wird durch folgendes Differentialgleichungssystem definiert. Es wird stets $t \geq 0$ vorausgesetzt.*

$$\begin{aligned}\dot{V} &= kI - \nu V \\ \dot{Z} &= \lambda - mZ + bV - rVZ \\ \dot{I} &= rVZ - \mu I\end{aligned}\tag{1}$$

$$V(0) = V_0, \quad Z(0) = Z_0, \quad I(0) = I_0$$

$$V := \# \text{ freie Viren} \quad Z := \# \text{ nicht infizierte Zellen} \quad I := \# \text{ infizierte Zellen}$$

Anfangswerte $V_0, Z_0, I_0 \geq 0$ sowie Konstanten $\lambda, m, k, r, \mu, \nu > 0$ und $b \geq 0$.

Anmerkung

- infizierte Zellen setzen neue Viren mit Rate $k > 0$ pro Zelle frei
- Sterberate der drei Klassen: νV , mZ , μI
- nicht infizierte Zellen werden mit fester Rate $\lambda > 0$ bereitgestellt
- freie Viren infizieren mit der Rate rVZ
- Infektionsrate $r > 0$ beschreibt die Effizienz des Infektionsvorgangs
- Anwesenheit freier Viren regt die Zellproduktion mit Rate bV an
- infizierte Zellen können nicht gesunden

Die mittlere Lebensdauer einer infizierten Zelle beträgt $\frac{1}{\lambda}$, währenddessen wird mit $\frac{k}{\lambda}$ freie Viren produziert. Wenn man den Virenfreien Fall $V_0 = I_0 = 0$ betrachtet und die Lösung von $\dot{Z} = \lambda - mZ + bV - rVZ$ berechnet, dann sieht man, dass die Lösung exponentiell gegen das Equilibrium $\frac{\lambda}{m}$ konvergiert.

Wird die Anzahl der nichtinfizierten Zellen fest auf diesem Wert gehalten, so kann man folgende Größe einführen:

Definition 2 (Reproduktionsrate des Virenmodells (1)). Die von der infizierten Zelle ausgeschütteten Viren, infizieren während ihrer mittleren Lebenszeit mit Rate R neue Zellen.

$$R = \frac{kr\lambda}{m\mu\nu} \quad (2)$$

Theorem 1 (Eindeutigkeit). Das Virenmodell (1) besitzt eine eindeutige Lösung.

Beweis. Der Beweis ist elementar und wird an dieser Stelle ausgespart. $\square$

Theorem 2 (Virenmodell). Es sei $(V_0, Z_0, I_0) \in \mathbb{R}_+^3$ und R wie in Definition (2) gegeben. Falls $kb < \mu\nu$, dann besitzt das Virenmodell (1) eine beschränkte, positive Lösung für alle $t > 0$.

Sei $R < 1$. Dann konvergiert die Lösung von (1) gegen $(\bar{V}, \bar{Z}, \bar{I}) := (0, \frac{\lambda}{m}, 0)$. $(\bar{V}, \bar{Z}, \bar{I})$ ist das einzige Equilibrium in $\mathbb{R}_+^3$. Es ist asymptotisch stabil.

Sei $R > 1$. Dann ist $(V_*, Z_*, I_*) := \left(\frac{kr\lambda - m\mu\nu}{r\mu\nu - rkb}, \frac{\mu\nu}{kr}, \frac{\nu}{k} \frac{kr\lambda - m\mu\nu}{r\mu\nu - rkb} \right)$ das einzige Equilibrium von (1). Es ist strikt positiv, asymptotisch stabil und $(\bar{V}, \bar{Z}, \bar{I})$ ist instabil in $\mathbb{R}_+^3$. Die Lösung strebt gegen (V_*, Z_*, I_*) , falls $V_0 + I_0 > 0$ ist.

Beweis. Es ist klar, dass eine einzige positive Lösung (V, Z, I) von (1) existiert.

Sei $u := bV + \alpha\nu Z + \alpha\nu I$ und $\kappa := \min\{\mu - \frac{bk}{\alpha\nu}, \nu - \alpha\nu, m\} > 0$ mit $\alpha \in (0, 1)$ mit $\mu > \frac{bk}{\alpha\nu}$, wobei die vorausgesetzte Relation $kb < \mu\nu$ verwendet wird.

Dann folgt aus (1) die Ungleichung:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= bkI - b\nu V + \alpha\lambda\nu - \alpha\nu mZ + \alpha b\nu V - \alpha\mu\nu I \\ &= -(\alpha\mu\nu - bk)I - (b\nu - b\alpha\nu)V - \alpha\nu mZ + \alpha\lambda\nu \\ &\leq \alpha\lambda\nu - \kappa u \end{aligned}$$

Integration liefert $u \leq u(0) + \frac{\alpha\lambda\nu}{\kappa}$

Auf Grund der Positivität von (V, Z, I) sind die Lösungen beschränkt und existieren für alle Zeiten nach dem Fortsetzungssatz.

$(\bar{V}, \bar{Z}, \bar{I})$ ist offensichtlich eine stationäre Lösung von (1). Sei (V_*, Z_*, I_*) ein weiteres Equilibrium. Dann muss $I_* = \frac{\nu}{k} V_* \neq 0$ gelten. Aus $\mu I_* = rV_* Z_*$ $\neq 0$ folgt dann $Z_* = \frac{\mu\nu}{kr}$ und wegen $0 = \lambda - mZ_* + bV_* - rV_* Z_*$ gilt schließlich $V_* = \frac{kr\lambda - m\mu\nu}{r\mu\nu - rkb}$.

Folglich ist (V_*, Z_*, I_*) das einzige weitere Gleichgewicht. Da $\mu\nu > kb$ vorausgesetzt wird, ist (V_*, Z_*, I_*) genau für $kr\lambda > m\mu\nu \Leftrightarrow R > 1$ positiv und ungleich $(\bar{V}, \bar{Z}, \bar{I})$.

An den Equilibria erhält man folgende Linearisierungen:

$$\begin{aligned} A &:= f'(\bar{V}, \bar{Z}, \bar{I}) = \begin{pmatrix} -\nu & 0 & k \\ b - r\frac{\lambda}{m} & -m & 0 \\ r\frac{\lambda}{m} & 0 & -\mu \end{pmatrix} \\ B &:= f'(V_*, Z_*, I_*) = \begin{pmatrix} -\nu & 0 & k \\ b - \frac{\mu\nu}{k} & -m - \frac{kr\lambda - m\mu\nu}{\mu\nu - kb} & 0 \\ \frac{\mu\nu}{k} & \frac{kr\lambda - m\mu\nu}{\mu\nu - kb} & -\mu \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Die Eigenwerte von A sind:

$$\begin{bmatrix} -m \\ -\frac{m\nu + \mu m - \sqrt{m^2\nu^2 - 2\mu m^2\nu + \mu^2 m^2 + 4r\lambda km}}{2m} \\ -\frac{m\nu + \mu m + \sqrt{m^2\nu^2 - 2\mu m^2\nu + \mu^2 m^2 + 4r\lambda km}}{2m} \end{bmatrix}$$

Sei $kr\lambda < m\mu\nu$, dann sind alle Eigenwerte von A kleiner 0. Nach dem Prinzip der linearisierten Stabilität folgt dann die asymptotische Stabilität. Sei $kr\lambda > m\mu\nu$, dann gibt es einen Eigenwert größer 0

und es folgt nach dem Prinzip der linearisierten Stabilität die Instabilität.

Das charakteristische Polynom von B ist durch $\lambda^3 + a_2\lambda^2 + a_1\lambda + a_0$ mit $a_2 := \frac{\mu^2\nu - \mu kb - mkb + kr\lambda + \mu\nu^2 - \nu kb}{\mu\nu - kb}$

$a_1 := \frac{-\mu kb + \mu kr\lambda - \nu mkb + \nu kr\lambda}{\mu\nu - kb}$ und $a_0 := \frac{-kr\lambda bk + kr\lambda\mu\nu + \mu\nu bk - \mu^2 m\nu^2}{\mu\nu - kb}$ gegeben.

Aus den Voraussetzungen $kb < \mu\nu$ und $R > 1$ ergeben sich unter anderem folgende Beziehungen: $kr\lambda > m\mu\nu > mkb$ und $\mu^2\nu > \mu kb$. Insgesamt lässt sich die strikte Positivität der a_i , $i = 0, 1, 2$ herleiten. Nach dem Routh¹-Hurwitz² Kriterium folgt dann, dass die Eigenwerte von B negative Realteile haben. Somit ist (V_*, Z_*, I_*) in diesem Fall asymptotisch stabil.

Die behauptete Konvergenzaussage wird mittels Ljapunov-Funktionen gezeigt. Zuerst betrachten wir den Fall $kr\lambda < m\mu\nu$ und das Equilibrium $(\bar{V}, \bar{Z}, \bar{I}) = (0, \frac{\lambda}{m}, 0)$.

Sei

$$\Phi(V, Z, I) := \frac{(Z - \bar{Z})^2}{2r} + \left(2\frac{\mu\nu k}{r} - \frac{b}{r} - \bar{Z}\right) \left(\frac{\mu}{kr}V + \frac{I}{r}\right) \quad V, Z, I \geq 0$$

Dann ergibt sich aus (1) und $\lambda = m\bar{Z}$, dass

$$\begin{aligned} \dot{\Phi}(V, Z, I) &= (Z - \bar{Z})\left(\frac{m}{r}\bar{Z} - \frac{m}{r}Z + \frac{b}{r}V - VZ\right) + \left(2\frac{\mu\nu}{kr} - \frac{b}{r} - \bar{Z}\right) \left(VZ - \frac{\mu\nu}{kr}V\right) \\ &= -\frac{m}{r}(Z - \bar{Z})^2 - V \left[Z^2 - 2\frac{\mu\nu}{kr}Z + \frac{b}{r}\bar{Z} + \frac{\mu\nu}{kr} \left(2\frac{\mu\nu}{kr} - \frac{b}{r} - \bar{Z}\right) \right] \\ &= -\frac{m}{r}(Z - \bar{Z})^2 - V \left[\left(Z - \frac{\mu\nu}{kr}\right)^2 \underbrace{\left(\frac{\mu\nu}{kr} - \bar{Z}\right)}_{>0} \underbrace{\left(\frac{\mu\nu}{kr} - \frac{b}{r}\right)}_{>0} \right] \end{aligned}$$

Wegen $kb < \mu\nu$ und $kr\lambda < m\mu\nu$ folgt, dass Φ eine Ljapunov³-Funktion auf $\mathbb{R}_+^3$ ist. Gilt $\dot{\Phi}(V, Z, I) \equiv 0$, dann erhalten wir $Z \equiv \frac{\lambda}{m}$ und $V \equiv 0$. Daraus ergibt sich aber $I \equiv 0$, sodass Φ eine strikte Ljapunov-Funktion ist. Daher folgt die Konvergenzaussage aus dem Satz über Ljapunov-Funktionen.

Auch für (V_*, Z_*, I_*) lässt sich eine geeignete strikte Ljapunov-Funktion finden und nach dem Satz über Ljapunov-Funktionen die Konvergenzaussage beweisen. Einen Beweis dazu findet man zum Beispiel in [MMB] auf Seite 48 und 49.

Abschließend wollen wir einen Anfangswert (V_0, Z_0, I_0) auf dem Rand von $\mathbb{R}_+^3$ mit $V_0 + I_0 > 0$ betrachten. Zunächst zeigt die zweite Gleichung in (1), dass für kleine $t > 0$ die Komponente $Z(t)$ positiv ist, auch wenn Z_0 gleich null sein sollte. Daher kann man annehmen, dass $Z_0 > 0$ gilt. Dann folgt aus (1), dass $f_1(0, Z_0, I_0)$, $f_2(V_0, 0, I_0)$ und $f_3(V_0, Z_0, 0)$ positiv sind. Somit tritt die Lösung für $t > 0$ in $(0, \infty)^3$ ein und konvergiert dann nach (V_*, Z_*, I_*) .

□

Lemma 1 (endemisches Gleichgewicht). *Für den Spezialfall $b = 0$ kann das endemische Gleichgewicht wie folgt ausgedrückt werden.*

$$(V_*, Z_*, I_*) = \left((R-1)\frac{m}{r}, \frac{\bar{Z}}{R}, (R-1)\frac{m\nu}{rk} \right) \quad (3)$$

Beweis.

$$\begin{aligned} (V_*, Z_*, I_*) &= \left(\frac{kr\lambda - m\mu\nu}{r\mu\nu - rkb}, \frac{\mu\nu}{kr}, \frac{\nu}{k} \frac{kr\lambda - m\mu\nu}{r\mu\nu - rkb} \right) \\ &\stackrel{b=0}{=} \left(\frac{k\lambda}{\mu\nu} - \frac{m}{r}, \frac{\mu\nu}{kr}, \frac{\lambda}{\mu} - \frac{\nu m}{kr} \right) \\ &= \left((R-1)\frac{m}{r}, \frac{\bar{Z}}{R}, (R-1)\frac{m\nu}{rk} \right) \end{aligned}$$

□

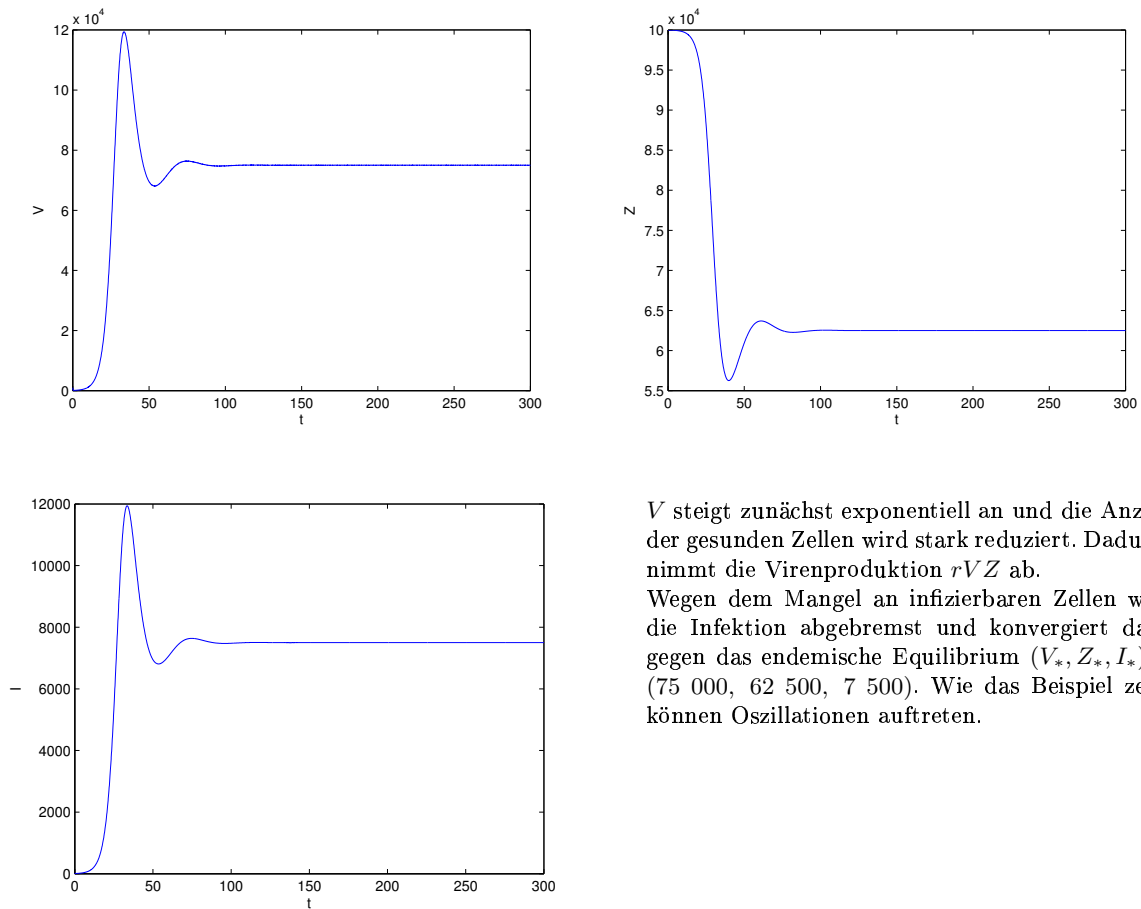
¹ Edward Routh, 1831-1907, englischer Mathematiker und Naturphilosoph

² Adolf Hurwitz, 1859-1919, deutscher Mathematiker

³ Alexander Michailowitsch Ljapunov, 1857-1918, russischer Mathematiker und Physiker

Beispiel

Folgendes Beispiel zeigt das Verhalten der Lösung von (1) im Falle $R > 1$.



V steigt zunächst exponentiell an und die Anzahl der gesunden Zellen wird stark reduziert. Dadurch nimmt die Virenproduktion rVZ ab.

Wegen dem Mangel an infizierbaren Zellen wird die Infektion abgebremst und konvergiert dann gegen das endemische Equilibrium $(V_*, Z_*, I_*) = (75\,000, 62\,500, 7\,500)$. Wie das Beispiel zeigt können Oszillationen auftreten.

Abb. 1. Virenmodell mit $\lambda = 10^4$, $k = 100$, $\nu = 10$, $m = 0.1$, $b = 0$, $r = 8 \cdot 10^{-7}$, $\mu = 0.5$, $R = 1.6$.

Matlab Skript

Mit folgendem Matlab Skript können die Schaubilder aus Abbildung (1) erzeugt werden. Matlab verfügt über eine ganze Reihe von numerischen Näherungsverfahren zur Berechnung von Differentialgleichungen.

In folgendem Skript wird der Befehl `ode45` verwendet. `ode45` basiert auf einem Paar expliziter Runge⁴-Kutta⁵-Verfahren. Dem sogenannten Dormand-Prince-Paar (Ordnung 4 und 5). Die voreingestellte Toleranz `RelTol` für die relativen Fehler liegt bei 10^{-3} .

⁴ Carl Runge, 1856-1927, deutscher Mathematiker

⁵ Wilhelm Kutta, 1867-1944, deutscher Mathematiker

```

                                Virenmodell.m

k = 100;
v = 10;
l = 10000;
m = 0.1;
b = 0;
r = 0.0000008;
n = 0.5;
Virenmodell = @(t,y)[k*y(3) - v*y(1);           %V'
                    l - m*y(2) + b*y(1) - r*y(1)*y(2); %Z'
                    r*y(1)*y(2) - n*y(3)];       %I'

% ODE = Ordinary Differential Equation %

[T,Y] = ode45(Virenmodell,[0 300],[1000 l/m 0]); %Reproduktionsrate = 1.6
plot(T,Y(:,1))
xlabel('t')
ylabel('V')
figure
plot(T,Y(:,2))
xlabel('t')
ylabel('Z')
figure
plot(T,Y(:,3))
xlabel('t')
ylabel('I')

```

Anmerkung

Bislang wurde das Immunsystem des Körpers nicht berücksichtigt. Im nächsten Abschnitt soll diskutiert werden, wie das Immunsystem die Viren bekämpft.

1.2 Immunantwort

Definition 3 (Immunantwort). Das Virenmodell mit Immunantwort wird durch folgendes Differentialgleichungssystem definiert. Es wird stets $t \geq 0$ vorausgesetzt.

$$\begin{aligned}
 \dot{V} &= kI - \nu V \\
 \dot{Z} &= \lambda - mZ - rVZ \\
 \dot{I} &= rVZ - \mu I - sIT \\
 \dot{T} &= aIT - nT
 \end{aligned} \tag{4}$$

$$V(0) = V_0, \quad Z(0) = Z_0, \quad I(0) = I_0, \quad T(0) = T_0$$

$$T := \# \text{ T-Zellen}$$

Anfangswerte und Konstanten wie in (1) sowie $T_0 \geq 0$ und $a, s, n > 0$

Anmerkung

- T-Zellen zerstören infizierte Zellen mit Rate sIT
- T-Zellen werden mit einer Rate aIT produziert und mit der Rate nT abgebaut

Theorem 3 (Eindeutigkeit). *Das Virenmodell mit Immunantwort (4) besitzt eine eindeutige Lösung.*

Beweis. Der Beweis ist elementar und wird an dieser Stelle ausgespart. □

Beispiel

Dieses Beispiel zeigt wie sich das Virenmodell (1) durch die Wirkung des Immunsystems verändert.

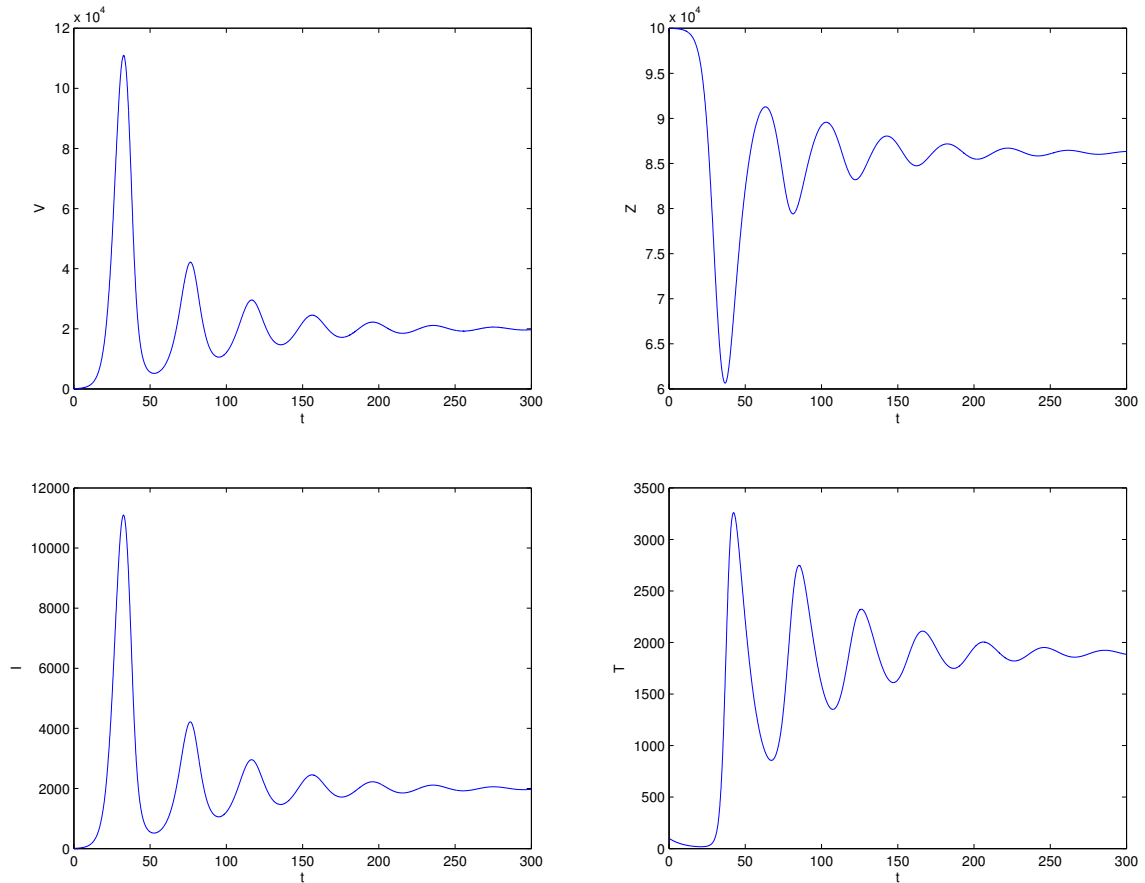


Abb. 2. Virenmodell mit Immunantwort, Konstanten wie in Abbildung (1), sowie $s = 0.0001$, $a = 0.00005$, $n = 0.1$, $R_i = 1.16$.

Die Anzahl der Viren nimmt durch das Befallen gesunder Zellen rasch zu. Dabei überschreitet I den Schwellenwert $\frac{n}{a}$, sodass es zu einer Zunahme der T-Zellen kommt. Diese sorgen für eine Verringerung der infizierten Zellen und damit der Viren. Schließlich erhöht sich die Anzahl gesunder Zellen.

Typisches Merkmal ist das Auftreten von Oszillationen. Die Lösung strebt gegen $\hat{P} = (20\,000, 86\,207, 2\,000, 1\,896, 6)$.

Theorem 4 (Immunantwort). *Es sei $(V_0, Z_0, I_0, T_0) \in \mathbb{R}_+^4$ und R wie in Definition (2) gegeben. Das System (4) hat eine positive, beschränkte Lösung für $t > 0$.*

Sei $R < 1$. Dann hat das System (4) genau ein positives Equilibrium $\bar{P} = (0, \frac{\lambda}{m}, 0, 0)$. Es ist asymptotisch stabil und die Lösung konvergiert gegen $\bar{P}$.

Sei $1 < R < R_i := 1 + \frac{knr}{amv}$. Dann ist $P_ := (V_*, Z_*, I_*, 0) = \left((R-1)\frac{m}{r}, \frac{\bar{Z}}{R}, (R-1)\frac{m\nu}{rk}, 0\right)$ das einzig weitere positive Equilibrium. P_* ist asymptotisch stabil und die Lösung konvergiert gegen P_* .*

Sei $R > R_i$. Dann gibt es genau ein weiteres positives Equilibrium $\hat{P} := \left(\frac{kn}{av}, \frac{av\lambda}{amv+rk n}, \frac{n}{a}, \frac{ark\lambda}{s(amv+rk n)} - \frac{\mu}{s}\right)$. Es ist asymptotisch stabil und die Lösung konvergiert gegen $\hat{P}$.

Beweis. Es ist klar, dass eine einzige positive Lösung (V, Z, I, T) von (4) existiert.

Sei $u := V + \frac{\alpha k}{\mu} Z + \frac{\alpha k}{\mu} I + \frac{\alpha k s}{a\mu} T$ mit $\alpha > 1$ fest vorgegeben und $\kappa := \min\{\mu - \frac{\mu}{\alpha}, \nu, m, n\}$. Dann folgt aus (4) die Ungleichung:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= kI - \nu V + \frac{\alpha k \lambda}{\mu} - \frac{\alpha m k}{\mu} Z - \alpha k I - \frac{n \alpha k s}{a\mu} T \\ &= -\nu V - \left(\frac{\alpha m k}{\mu}\right) Z - (\alpha k - k) I - \left(\frac{n \alpha k s}{a\mu}\right) T + \frac{\alpha k \lambda}{\mu} \\ &\leq \frac{\alpha k \lambda}{\mu} - \kappa u \end{aligned}$$

Integration liefert $u \leq u(0) + \frac{\alpha k \lambda}{\kappa \mu}$

Auf Grund der Positivität von (V, Z, I, T) sind die Lösungen beschränkt und existieren für alle Zeiten nach dem Fortsetzungssatz.

Aus $T=0$ folgt $\dot{T} = 0$ und man erhält die stationären Lösungen $\bar{P}$ und P_* .

Für den Fall $T > 0$ existiert genau ein weiteres Gleichgewicht $\hat{P} := \left(\frac{kn}{av}, \frac{av\lambda}{amv+rk n}, \frac{n}{a}, \frac{ark\lambda}{s(amv+rk n)} - \frac{\mu}{s}\right)$.

$\bar{P}$ ist offensichtlich positiv. Die Positivität der anderen Equilibria ergibt sich aus den Beziehungen $1 < R < R_i$ und $R > R_i$.

Wegen $\det(f'(\bar{P}) - \lambda I) = (-n - \lambda) \det(A - \lambda I)$ und $\det(f'(P_*) - \lambda I) = (aI_* - n - \lambda) \det(B - \lambda I)$ ergeben sich die Stabilitätsaussagen im Theorem aus dem Prinzip der linearisierten Stabilität und dem Beweis aus dem letzten Abschnitt.

Die Konvergenz der Lösungen im Falle $R < 1$ und $1 < R < R_i$ zeigt man mittels geeigneter Modifikation der Ljapunov-Funktionen aus dem letzten Abschnitt. Ein Beweis zum Fall $R > R_i$ findet man zum Beispiel im Buch [MMB] auf Seite 52. $\square$

Matlab Skript

Mit folgendem Matlab Skript können die Schaubilder aus Abbildung (2) erzeugt werden. Es wird wieder der Befehl `ode45` verwendet.

```

                                Immunantwort.m

k = 100;
v = 10;
l = 10000;
m = 0.1;
b = 0;
r = 0.0000008;
n = 0.5;
a = 0.00005;
s = 0.0001;
n_1 = 0.1;
Immunantwort = @(t,y) [k*y(3) - v*y(1);           %V'
                        l - m*y(2) - r*y(1)*y(2); %Z'
                        r*y(1)*y(2) - n*y(3) - s*y(3)*y(4); %I'
                        a*y(3)*y(4) - n_1*y(4)];    %T'

                                % ODE = Ordinary Differential Equation %

[T,Y] = ode45(Immunantwort,[0 300],[1000 l/m 0 100]);
plot(T,Y(:,1))
xlabel('t')
ylabel('V')
figure
plot(T,Y(:,2))
xlabel('t')
ylabel('Z')
figure
plot(T,Y(:,3))
xlabel('t')
ylabel('I')
figure
plot(T,Y(:,4))
xlabel('t')
ylabel('T')

```

Anmerkung

$\hat{I} = \frac{n}{a}$ hängt nicht vom Effizienzparameter s der Infektionsbekämpfung ab. Dies erscheint unrealistisch. Wenn das System jedoch durch $\dot{T} = aI - nT$ modifiziert wird, dann wird es diese Eigenschaft verlieren.

Literaturverzeichnis

1. Jan W. Prüss, Roland Schnaubelt, Rico Zacher *Mathematische Modelle in der Biologie* (43-53).

Prionen und weitere Endemiemodelle

Benjamin Wenger

benjamin.wenger@uni-ulm.de

1 Prionen

Prionen sind eines der Eiweiße, die im menschlichen und tierischen Körper vorkommen. Es gibt zwei Arten von Prionen, zelluläre Prionen Proteine (Prion Protein cellular, kurz: PrP^C) und Scrapie Prionen Proteine (Prion Protein Scrapie, kurz: PrP^{Sc}). PrP^C ist die natürlich im Körper vorhandene Form der Prionen, die vermutlich dem Zellschutz dient. Die anormale Form PrP^{Sc} wandelt PrP^C in Prionen der Form PrP^{Sc} um. Diese werden für BSE und die Creutzfeld-Jacob Krankheit verantwortlich gemacht. Hier soll nun ein Modell zur Untersuchung der Prionendynamik aufgestellt werden.

Monomere (griech.: „Einzelteil“) der Form PrP^C werden vom Körper mit einer festen Rate produziert. Die infektiöse Form PrP^{Sc} bildet lange Ketten mit über 1000 Monomeren. Diese Polymere (griech.: „Vielteil“) sind erst ab einer Mindestlänge stabil, wobei Monomere die Länge eins haben sollen. Die Kettenlänge kann eigentlich nur in diskreten Schritten zunehmen, aufgrund der großen Länge der Ketten nehmen wir aber eine kontinuierliche Längenzunahme an. Ketten, die Länger als die Mindestlänge sind, zerfallen mit einer von ihrer Länge abhängigen Rate. Zur Beschreibung der Prionendynamik führen wir nun folgende Bezeichnungen ein:

- λ = Produktionsrate der Prionen PrP^C ,
- x_m = die Mindestlänge, ab der Polymere stabil sind, wobei $x_m \geq 1$ gelten soll,
- $V(t)$ = die Anzahl der Monomere zur Zeit $t \geq 0$,
- $u(t, x)$ = Anzahl der Polymere der Länge x zur Zeit $t \geq 0$,
- r = Rate, mit der sich die Ketten durch Anlagerung umgewandelter Monomere verlängern,
- $b(x)u(t, x)$ = Rate, mit der Ketten der Länge $x > x_m$ zerfallen,
- $\kappa(z, x)$ = Wahrscheinlichkeit, dass beim Zerfallen Ketten der Länge $z \in (0, x)$ und $x - z$ entstehen.

Durch Wachstum verringert sich die Anzahl von Ketten der Länge x mit Rate $rV(t) \frac{\partial}{\partial x} u(t, x)$.

Für die Wahrscheinlichkeit $\kappa(z, x)$ soll gelten, dass $\int_0^x \kappa(z, x) dz = 1$ und $\kappa(z, x) = \kappa(x - z, x)$, für $x > x_m$ und $0 < z < x$.

Da Ketten, deren Länge kleiner als x_m ist, instabil sind, nehmen wir an, dass sie sofort in Monomere zerfallen.

Monomere und Ketten der Länge x werden mit Rate $\mu V(t)$ bzw. $\nu u(t, x)$ abgebaut.

Aus diesen Modellannahmen folgt so das System

$$\frac{d}{dt} V(t) = \lambda - \mu V(t) - rV(t) \int_{x_m}^{\infty} u(t, x) dx + 2 \int_0^{x_m} x \int_{x_m}^{\infty} \kappa(x, y) b(y) u(t, y) dy dx, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u(t, x) = -rV(t) \frac{\partial}{\partial x} u(t, x) - (\nu + b(x))u(t, x) + 2 \int_x^{\infty} \kappa(x, y) b(y) u(t, y) dy, \quad (2)$$

$$V(0) = V_0, \quad u(0, x) = u_0(x), \quad u(t, x_m) = 0, \quad t \geq 0, \quad x \geq x_m.$$

Die Anfangsbedingungen $V_0 \geq 0$ und $u_0 \geq 0$ sind gegeben, $x \geq x_m$ setzen wir voraus, da es keine Ketten gibt, deren Länge kleiner als x_m ist.

Für $u(t, x)$ setzen wir Differenzierbarkeit in (t, x) sowie Integrierbarkeit über x in $[0, \infty]$ voraus.

Für den Zerfall wollen wir nun zusätzlich annehmen, dass die Ketten mit einer Häufigkeit proportional zu ihrer Länge in Teilketten zerfallen, deren Länge gleichverteilt ist. Dies lässt sich in unserem Modell ausdrücken durch

$$\begin{aligned} b(y) &= \beta y, \text{ für } y > 0 \text{ und ein konstantes } \beta > 0 \\ \kappa(x, y) &= 1/y, \text{ für } y > x_m \text{ und } x \in (0, y), \kappa(x, y) = 0 \text{ sonst.} \end{aligned}$$

Weiter wollen wir die Gesamtzahl $U(t)$ der Polymere und die Gesamtzahl $W(t)$ von Monomeren in Polymeren zur Zeit $t \geq 0$ betrachten, wobei gilt:

$$\begin{aligned} U(t) &= \int_{x_m}^{\infty} u(t, x) dx, \\ W(t) &= \int_{x_m}^{\infty} x u(t, x) dx. \end{aligned}$$

Aus (1) und (2) wollen wir nun Differentialgleichungen für U und W herleiten.

Durch einsetzen von (2) in U und Verwendung der Randbedingung $u(t, x_m) = 0$ sowie der Annahme, dass $u(t, x) \rightarrow 0$ für $x \rightarrow \infty$, ergibt sich so zunächst:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} U(t) &= - \int_{x_m}^{\infty} \left[rV(t) \frac{\partial}{\partial x} u(t, x) + \nu u(t, x) + \beta x u(t, x) \right] dx + 2 \int_{x_m}^{\infty} \int_x^{\infty} \beta u(t, y) dy dx \\ &= -\nu U(t) - \beta W(t) + 2\beta \int_{x_m}^{\infty} \int_{x_m}^y u(t, y) dx dy \\ &= -\nu U(t) - \beta W(t) + 2\beta(W(t) - x_m U(t)). \end{aligned}$$

Für W multiplizieren wir (2) mit x und nehmen an, dass $xu(t, x) \rightarrow 0$ für $x \rightarrow \infty$. Dann folgt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} W(t) &= - \int_{x_m}^{\infty} \left[rV(t)x \frac{\partial}{\partial x} u(t, x) + \nu x u(t, x) + \beta x^2 u(t, x) \right] dx + 2 \int_{x_m}^{\infty} \int_x^{\infty} \beta x u(t, y) dy dx \\ &= rV(t)U(t) - \nu W(t) - \beta \int_{x_m}^{\infty} x^2 u(t, x) dx + \beta \int_{x_m}^{\infty} u(t, y)(y^2 - x_m^2) dy \\ &= rV(t)U(t) - \nu W(t) - \beta x_m^2 U(t). \end{aligned}$$

Zusammen mit (1) erhalten wir so das System

$$\begin{aligned} \dot{U} &= \beta W - \nu U - 2\beta x_m U, \quad t \geq 0, \\ \dot{V} &= \lambda - \mu V + \beta x_m^2 U - rUV, \quad t \geq 0, \\ \dot{W} &= rUV - \nu W - \beta x_m^2 U, \quad t \geq 0, \\ U(0) &= U_0, \quad V(0) = V_0, \quad W(0) = W_0, \end{aligned} \tag{3}$$

mit den gegebenen Anfangswerten $U_0, V_0 \geq 0$ und $W_0 > x_m U_0$, sowie den Konstanten $\beta, \lambda, \mu, \nu, r, x_m > 0$.

Die Lösungen des Systems liegen im Keil $K = \{(U, V, W) \in \mathbb{R}_+^3 : W \geq x_m U\}$, da die Anzahlen nicht negativ sein können und jedes Polymer mindestens x_m Monomere enthält.

Abhängig von einem Schwellenwert konvergieren die Anzahlen gegen das krankheitsfreie bzw. endemische Gleichgewicht, was im folgenden Satz beschrieben wird:

Theorem 1 (Satz zu Prionen). *Das Problem (3) besitzt eine eindeutige, beschränkte Lösung in K für alle $t \geq 0$. Es existieren nur die Gleichgewichte $(\bar{U}, \bar{V}, \bar{W}) = (0, \lambda/\mu, 0)$ und*

$$(U_*, V_*, W_*) = \left(\frac{r\beta\lambda - \mu(\nu + \beta x_m)^2}{r\nu(\nu + 2\beta x_m)}, \frac{(\nu + \beta x_m)^2}{r\beta}, \frac{r\beta\lambda - \mu(\nu + \beta x_m)^2}{r\nu\beta} \right).$$

Sei $r\beta\lambda < \mu(\nu + \beta x_m)^2$. Dann ist $(\bar{U}, \bar{V}, \bar{W})$ das einzige Gleichgewicht von (3) in K . Es ist asymptotisch stabil und die Lösung von (3) konvergiert gegen $(\bar{U}, \bar{V}, \bar{W})$ für $t \rightarrow \infty$ und für jeden Anfangswert in K .

Sei $r\beta\lambda > \mu(\nu + \beta x_m)^2$. Dann ist $(\bar{U}, \bar{V}, \bar{W})$ in K instabil und (U_*, V_*, W_*) liegt im inneren von K und ist asymptotisch stabil. Die Lösung konvergiert gegen (U_*, V_*, W_*) für $t \rightarrow \infty$ und für jedes $(U_0, V_0, W_0) \in K$ mit $U_0 > 0$ oder $W_0 > x_m U_0$.

Beweis. Wir definieren zunächst $Y = W - x_m U$, weiter setzen wir $Y_0 = W_0 - x_m U_0$ und erhalten so aus (3) das System

$$\begin{aligned} \dot{U} &= \beta Y - (\nu + \beta x_m)U, & t \geq 0, \\ \dot{V} &= \lambda - \mu V + \beta x_m^2 U - rUV, & t \geq 0, \\ \dot{Y} &= rUV - (\nu + \beta x_m)Y, & t \geq 0, \\ U(0) &= U_0, & V(0) = V_0, & Y(0) = Y_0. \end{aligned} \quad (4)$$

Hier können wir wieder eine Reproduktionsrate einführen. In ein System werde $Y_0 = 1$ mit $U_0 = 0$ und $V \equiv \lambda/\mu$ eingebracht. Dann werden in der mittleren Lebenszeit der Spezies Y und U

$$\mathcal{R} = \frac{r\beta\lambda}{\mu(\nu + \beta x_m)^2}$$

Monomere neu infiziert. Die Schwellenbedingung im Satz über Prionen entspricht so den Fällen $\mathcal{R} < 1$ bzw. $\mathcal{R} > 1$. Durch setzen von

$$\begin{aligned} \alpha &= (\nu + \beta x_m)^{-1} \\ x(t) &= \alpha r U(\alpha t), & y(t) &= \alpha^2 r \beta V(\alpha t), & z(t) &= \alpha^2 r \beta Y(\alpha t), \\ x_0 &= \alpha r U_0, & y_0 &= \alpha^2 r \beta V_0, & z_0 &= \alpha^2 r \beta Y_0, \\ \xi &= 1, & \sigma &= \alpha^3 r \beta \lambda, & \rho &= \alpha \mu, & \delta &= \alpha^2 \beta^2 x_m^2 \in (0, 1), \end{aligned}$$

transformieren wir das System (4) in ein normalisiertes System. Der Satz über Prionen folgt nun unmittelbar aus dem Satz über das normalisierte Modell. $\square$

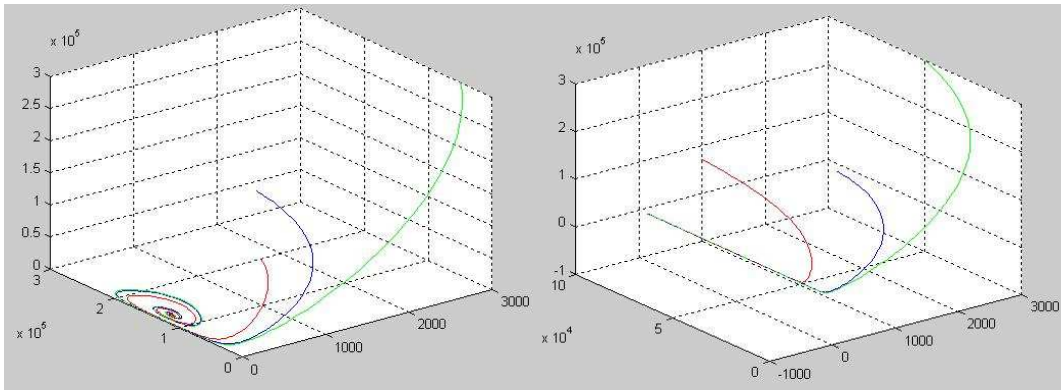


Abb. 1. Prionenmodell mit endemischem und krankheitsfreiem Gleichgewicht.

2 Weitere Endemienmodelle

Wir betrachten wieder die Infektionsmodelle aus dem zweiten Kapitel, wobei wir nun zusätzlich die Klasse E der infizierten, aber noch nicht infektiösen Individuen berücksichtigen. Wie zuvor bezeichnen wir die Anzahl der Inizierbaren mit S und die Anzahl der Infektiösen mit I . Die Infektionsrate soll wieder gleich rIS sein, wobei ein Infizierter zunächst in die Klasse E wechselt. Mit der festen pro Kopf Rate $a > 0$ wird er dann infizierend und schließlich mit einer pro Kopf Rate $b > 0$ wieder gesund,

wobei keine Immunisierung erworben wird. Die Individuen in den drei Klassen sterben mit den Raten $mS, \mu E$ bzw. νI , in die Klasse S werden mit einer festen Rate $\lambda > 0$ geboren. Dies ergibt das SEIS System

$$\begin{aligned}\dot{S} &= \lambda - mS + bI - rIS, t \geq 0, \\ \dot{E} &= rIS - \mu E - \alpha E, t \geq 0, \\ \dot{I} &= \alpha E - \nu I - bI, t \geq 0, \\ S(0) &= S_0, \quad E(0) = E_0, \quad I(0) = I_0,\end{aligned}\tag{5}$$

wobei die Anfangswerte $S_0, E_0, I_0 \geq 0$ und die Konstanten $\lambda, a, b, r, m, \mu, \nu > 0$ gegeben sind. Das Problem hat eine eindeutige positive Lösung, wobei $(\bar{S}, \bar{E}, \bar{I}) = (\lambda/m, 0, 0)$ das krankheitsfreie Gleichgewicht ist. Wird ein infektiöses Individuum einer Population in diesem Gleichgewicht eingeführt und die Anzahl der infizierbaren gleich $\bar{S}$ halten, so werden während der mittleren Infektionszeit $1/(b + \nu)$ des infektiösen Individuums $\frac{r\lambda}{m(b+\nu)}$ Individuen infiziert. Im Mittel ergeben sich so

$$\mathcal{R} = \frac{ar\lambda}{m(a + \mu)(b + \nu)}$$

neue Infektiöse. Wie schon zuvor ist die Zahl $\mathcal{R}$ die Reproduktionsrate des Systems (5) und stellt wieder den entscheidenden Schwellenwert dar. Da neu Infizierte nicht gleich infektiös sind, hat sich die Reproduktionsrate hier im Vergleich zum endemischen SIR-Modell um den Faktor $a(a + \mu)^{-1}$ verkleinert ($N \triangleq \lambda/m$ und $a + b \triangleq b + \nu$). Durch setzen von

$$\begin{aligned}x(t) &= \frac{r}{a + \mu} I \left(\frac{t}{a + \mu} \right), \quad y(t) = \frac{ar}{(a + \mu)^2} S \left(\frac{t}{a + \mu} \right), \quad z(t) = \frac{ar}{(a + \mu)^2} E \left(\frac{t}{a + \mu} \right), \\ x_0 &= \frac{rI_0}{a + \mu}, \quad y_0 = \frac{arS_0}{(a + \mu)^2}, \quad z_0 = \frac{arE_0}{(a + \mu)^2}, \\ \xi &= \frac{b + \nu}{a + \mu}, \quad \sigma = \frac{ar\lambda}{(a + \mu)^3}, \quad \rho = \frac{m}{a + \mu}, \quad \delta = \frac{ab}{(a + b)^2}.\end{aligned}\tag{6}$$

skalieren wir (5) in ein normalisiertes System. Dabei folgt automatisch, dass $\delta < \xi$ und $\mathcal{R} = \sigma/(\xi\rho)$. Die Ungleichung $\mathcal{R} > 1$ aus dem Satz über das normalisierte Modell entspricht somit der Bedingung $\sigma > \xi\rho$. Dieser Satz besagt, dass im Fall $\mathcal{R} > 1$ ein Infizierter mehr als ein Individuum infiziert, was das System zu einem endemischen Gleichgewicht führt, und im Fall $\mathcal{R} < 1$ zu einem krankheitsfreien Gleichgewicht.

Theorem 2. *Es sei $\mathcal{R} = \frac{ar\lambda}{m(a+\mu)(b+\nu)}$ gegeben. Das Problem (5) besitzt eine eindeutige, beschränkte, positive Lösung für alle $t > 0$ und alle Anfangswerte in $\mathbb{R}_+^3$. Es existieren nur die Gleichgewichte $(\bar{S}, \bar{E}, \bar{I}) = (\lambda/m, 0, 0)$ und*

$$(S_*, E_*, I_*) = \left(\frac{(a + \mu)(b + \nu)}{ar}, \frac{b + \nu}{a} I_*, \frac{ar\lambda - m(a + \mu)(b + \nu)}{r(av + b\mu + \mu\nu)} \right).$$

Sei $\mathcal{R} < 1$. Dann ist $(\bar{S}, \bar{E}, \bar{I})$ das einzige Gleichgewicht von 5 in $\mathbb{R}_+^3$. Es ist asymptotisch stabil, und die Lösung von 5 konvergiert gegen $(\bar{S}, \bar{E}, \bar{I})$ für $t \rightarrow \infty$ und für jeden Anfangswert in $\mathbb{R}_+^3$.

Sei $\mathcal{R} > 1$. Dann ist $(\bar{S}, \bar{E}, \bar{I})$ in $\mathbb{R}_+^3$ instabil und (S_, E_*, I_*) ist strikt positiv und asymptotisch stabil. Die Lösung konvergiert gegen (S_*, E_*, I_*) für $t \rightarrow \infty$ und für jedes positive (S_0, E_0, I_0) mit $S_0 + I_0 > 0$.*

Beweis. Folgt aus dem Satz über das normalisierte Modell. □

Abschließend wollen wir noch ein SEIR-Modell betrachten, bei dem wie beim SEIS-Modell die Übergangsklasse E der noch nicht infektiösen Infizierten modelliert wird. Allerdings erwerben Infizierte bei Gesundung mit Rate bI eine Immunität, die nicht mehr verloren wird. Immunisierte Individuen sterben mit einer Rate γR . Dies ergibt das System

$$\begin{aligned}
\dot{S} &= \lambda - mS - rIS, t \geq 0, \\
\dot{E} &= rIS - \mu E - aE, t \geq 0, \\
\dot{I} &= aE - \nu I - bI, t \geq 0, \\
\dot{R} &= bI - \gamma R, t \geq 0, \\
S(0) &= S_0, E(0) = E_0, I(0) = I_0, R(0) = R_0.
\end{aligned} \tag{7}$$

Da eine einmal erworbene Immunität nicht mehr verloren geht, tritt R in den Gleichungen für S , E und I nicht mehr auf, sodass die vierte Gleichung abgespalten werden kann. Wie in (5) skalieren wir nun wieder das System und erhalten ein normalisiertes System mit $\delta = 0$. Die Reproduktionsrate $\mathcal{R}$ ist wie beim System (5) gegeben, woraus sich der folgende Satz ergibt.

Theorem 3. *Es sei $\mathcal{R} = \frac{ar\lambda}{m(a+\mu)(b+\nu)}$ gegeben. Das Problem (7) besitzt eine eindeutige, beschränkte, positive Lösung für alle $t > 0$ und jeden Anfangswert in $\mathbb{R}_+^4$. Im Teilsystem der Lösungen (S, E, I) existieren nur die Gleichgewichte $(\bar{S}, \bar{E}, \bar{I}) = (\lambda/m, 0, 0)$ und*

$$(S_*, E_*, I_*) = \left(\frac{(a+\mu)(b+\nu)}{ar}, \frac{\lambda}{a+\mu} - \frac{m(b+\nu)}{ar}, \frac{\lambda a}{(a+\mu)(b+\nu)} - \frac{m}{r} \right). \tag{8}$$

Sei $\mathcal{R} < 1$. Dann ist $(\bar{S}, \bar{E}, \bar{I})$ das einzige positive Equilibrium des Teilsystems. Es ist asymptotisch stabil und die Lösung konvergiert gegen $(\bar{S}, \bar{E}, \bar{I})$ für $t \rightarrow \infty$ und für jeden Anfangswert in $\mathbb{R}_+^3$.

Sei $\mathcal{R} > 1$. Dann ist $(\bar{S}, \bar{E}, \bar{I})$ in $\mathbb{R}_+^3$ instabil und (S_, E_*, I_*) ist strikt positiv und asymptotisch stabil. Die Lösung konvergiert gegen (S_*, E_*, I_*) für $t \rightarrow \infty$ und für jedes positive (S_0, E_0, I_0) mit $S_0 + I_0 > 0$.*

Beweis. Folgt aus dem Satz über das normalisierte Modell. □

Literaturverzeichnis

1. J.W. Prüss, R. Schnaubelt, R. Zacher: *Mathematische Modelle in der Biologie*, Birkhäuser, 2008

Paarbildung I/II

Stephanie Seeburger

Stephanie.Seeburger@uni-ulm.de

1 Einleitung

Die mathematische Modellierung einer Paarbildungsfunktion hat es ermöglicht, Prognosen über die zukünftige Entwicklung von Populationen zu machen. Dabei kann unter anderem anschaulich gezeigt werden, wie bestimmte Faktoren zur Gesundheit bzw. Krankheit von Populationen und deren Individuen beitragen können und wie diese sich ausbreiten bzw. übertragen.

1.1 Beispiele für die Problematik bei der Bildung von Paaren in der Biologie

„Schwule Pinguine - Wahre Liebe nur unter Männern!“, titelte der Stern im Februar 2006. Der Bremerhavener Zoo war bereits Anfang 2005 in den Schlagzeilen, als sich dort wegen fehlenden Weibchen homosexuelle Paare unter den Pinguinen gebildet hatten. Daraufhin hatte der Tierpark im Jahr 2006 versucht mit weiblichen Tieren aus Schweden die Männerfreundschaften auseinanderzubringen. Doch der Versuch so für Nachkommen der vom Aussterben bedrohten Humboldt-Pinguine zu sorgen, blieb auch in diesem Jahr erfolglos.

Ein anderes Beispiel des Zusammenlebens zeigt sich bei einem Löwenrudel. Der Rudelführer lebt polygam und hat einen ganzen Harem an Frauen. Versucht ein junger Löwe dem Führer seinen Platz im Rudel streitig zu machen, kommt es zum Kampf. Gewinnt der junge Herausforderer, verjagt er den alten Rudelführer und tötet anschließend auch dessen Nachkommen.

Die Geschlechter mancher Tiere können sich auch ändern, was im nachfolgenden Beispiel deutlich wird. Viele Arten von Lippfischen zählen zu den so genannten Konsekutivzwittern. Sie sind dazu in der Lage ihr Geschlecht im Laufe des Lebenszyklus zu wechseln. Der Geschlechtswandel ist häufig abhängig von Alter und Größe der Fische. Bei der Geburt sind die meisten Tiere zunächst weiblich, werden dann aber im Laufe ihres Lebenszyklus, je nach Größe, zum Sekundärmännchen.

Die genannten Beispiele machen deutlich, dass es in der Biologie beim Zusammenleben viele Unterschiede zwischen den einzelnen Arten gibt. Unter bestimmten Bedingungen kann es zur Bildung von homosexuellen Paaren (hier: beim Fehlen von Weibchen) oder sogar zur Umwandlung des Geschlechts (hier: abh. von Alter und Geschlecht) kommen. Es gibt Arten, die ihr gesamtes Leben nur mit einem Partner verbringen (z.B. Schwäne), andere haben gleichzeitig mehrere Partner. Da man auf der Suche nach einem geeigneten Mathematischen Modell nicht alle Möglichkeiten des Zusammenlebens miteinbeziehen kann, wird im Folgenden zur Vereinfachung eine monogame Population ohne Altersstrukturen betrachtet. Diese setzt sich sowohl aus Single-Männchen, Single-Weibchen und zweigeschlechtlichen Paaren zusammen. Außerdem wird davon ausgegangen, dass keine Migration möglich ist und es neben der Entstehung von Paaren keine weiteren Interaktionen zwischen den einzelnen Singles gibt. Bei der Reproduktion eines Paares entstehen sowohl männliche als auch weibliche Singles. Singles, die durch Trennung bzw. Tod der Partnerin bzw. des Partners entstehen, können wieder eine Bindung eingehen.

2 Bedingungen für die Aufstellung einer Paarbildungsfunktion

Um eine Paarbildungsfunktion aufstellen zu können, ist es wichtig neben der Anzahl der Singles (s_f, s_m) und Paare (p) auch die Änderungsraten der drei Parameter (männliche Singles, weibliche Singles und

Paare) zu betrachten. Dabei seien σ , μ_j , $\tilde{\mu}_j$ und β_j ($j = f, m$) positive Konstanten. Durch weibliche/-männliche Nachkommen (β_f bzw. β_m), gestorbene PartnerInnen ($\tilde{\mu}_f$ bzw. $\tilde{\mu}_m$) und Trennungen (σ), wächst die Anzahl der weiblichen/männlichen Singles (s_f bzw. s_m). Sie wird kleiner, sobald die Singles eine Beziehung eingehen (p) oder sterben (μ_f bzw. μ_m). Die Anzahl der Paare (p) wird einerseits durch die Bildung von Paaren erhöht, andererseits durch Trennungen (σ) und gestorbene PartnerInnen gesenkt. Die Bildung von Paaren wird mit Hilfe der Paarbildungsfunktion ($\phi(s_f, s_m)$) dargestellt. Sie beschreibt die Anzahl der Paare, die pro Zeiteinheit aus weiblichen und männlichen Singles entstehen.

Dazu stellt man das folgende Gleichungssystem der jeweiligen Änderungsraten auf:

$$\begin{aligned}\dot{s}_f &= -\mu_f s_f + (\beta_f + \tilde{\mu}_m + \sigma)p - \phi(s_f, s_m) \\ \dot{s}_m &= -\mu_m s_m + (\beta_m + \tilde{\mu}_f + \sigma)p - \phi(s_f, s_m) \\ \dot{p} &= -(\tilde{\mu}_f + \tilde{\mu}_m + \sigma)p + \phi(s_f, s_m)\end{aligned}\tag{1}$$

Eigenschaften der Paarbildungsfunktion (durch demographische Beobachtungen herausgefunden):

- ($\phi 1$) $\phi : \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+; \phi(x, y) = 0 \Leftrightarrow xy = 0 \forall x, y \geq 0$
- ($\phi 2$) ϕ ist stetig; $\phi(\cdot, y)$ und $\phi(x, \cdot)$ sind monoton wachsend $\forall x, y \geq 0$
- ($\phi 3$) ϕ ist positiv homogen, d.h. $\phi(\alpha x, \alpha y) = \alpha \phi(x, y) \forall x, y \geq 0$

Die 1. Eigenschaft zeigt, dass keine Paare gebildet werden können, wenn weibliche oder männliche Singles fehlen. Die Zunahme der gebildeten Paare bei Erhöhung beider Singlearten, sowie die stetige Abhängigkeit der Paarbildung von den Populationen der Singles, wird in Eigenschaft 2 festgehalten. Die letzte Eigenschaft beschreibt die Proportionalität zwischen der Paarbildung und der Anzahl der weiblichen und männlichen Singles.

3 Analytische Eigenschaften der Funktion

Um festzustellen, ob das aufgestellte Anfangswertproblem (AWP) aus (1) lösbar in $\mathbb{R}_+^3$ ist, zeigt man zuerst die Existenz einer Lösung, anschließend die Eindeutigkeit, die Positivität und die globale Existenz dieser Lösung. Die Anfangsbedingungen seien dabei gegeben durch

$$s_f(0) \geq 0; s_m(0) \geq 0; p(0) \geq 0.\tag{2}$$

Mit Hilfe des Satzes von Peano kann die Existenz einer Lösung des zuvor aufgestellten Gleichungssystems (1) überprüft werden.

Satz von Peano: Sei $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ stetig. Dann existiert ein $\delta > 0$ und mindestens eine Lösung $u \in \mathbb{C}^k([t_0 - \delta, t_0 + \delta]; \mathbb{R})$ des AWP's $u' = f(u)$ mit der Anfangsbedingung $u(t_0) = x \in \mathbb{R}^d$.

Die Funktion ist auf ganz $\mathbb{R}^2$ stetig, da ϕ in 0 stetig fortsetzbar ist und die Eigenschaft $\phi(2)$ erfüllt. Somit hat das aufgestellte AWP (1) mindestens eine lokale Lösung.

Die Eindeutigkeit der Lösung wird durch einen Widerspruchsbeweis festgestellt. Es wird angenommen, dass zwei verschiedene Lösungen (s_f, s_m, p) und $(\bar{s}_f, \bar{s}_m, \bar{p})$ auf dem Intervall $[0, T]$ existieren. Außerdem definiert man für $n \in \mathbb{N}$ eine Funktion χ_n auf $\mathbb{R}$ mit

$$\chi_n(x) = \begin{cases} |x|, & \text{für } |x| \geq \frac{1}{n} \\ \frac{nx^2}{2} + \frac{1}{2n}, & \text{für } |x| < \frac{1}{n}. \end{cases}$$

Bei der Ableitung dieser Funktion werden demnach auch zwei Fälle unterschieden:

$$\chi'_n(x) = \begin{cases} \operatorname{sgn}(x), & \text{für } |x| \geq \frac{1}{n} \\ nx, & \text{für } |x| < \frac{1}{n}. \end{cases}$$

Daraus ergeben sich die Abschätzungen $|\chi'_n(x)| \leq 1$ und $x\chi'_n(x) \geq 0 \forall x \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}$.

Bildet man nun die Ableitungen von $\chi_n(s_f - \bar{s}_f)$ und $\chi_n(s_m - \bar{s}_m)$ erhält man allgemein für $j = f, m$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\chi_n(s_j - \bar{s}_j)) &= \chi'_n(s_j - \bar{s}_j) \cdot (-\mu_j(s_j - \bar{s}_j) + C_j(p - \bar{p}) - [\phi(s_f, s_m) - \phi(\bar{s}_f, \bar{s}_m)]) \\ &\leq C_j |p - \bar{p}| - \chi'_n(s_j - \bar{s}_j)(\phi(s_f, s_m) - \phi(\bar{s}_f, \bar{s}_m)), \end{aligned}$$

mit $C_f = \beta_f + \tilde{\mu}_m + \sigma$ und $C_m = \beta_m + \tilde{\mu}_f + \sigma$.

Weiter erhält man auf $[0, T]$ durch Addition der Ableitungen für $j = f, m$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\chi_n(s_f - \bar{s}_f)) + \frac{d}{dt}(\chi_n(s_m - \bar{s}_m)) &\leq (C_f + C_m) |p - \bar{p}| - (\chi'_n(s_f - \bar{s}_f) + \chi'_n(s_m - \bar{s}_m)) \\ &\quad \cdot (\phi(s_f, s_m) - \phi(\bar{s}_f, \bar{s}_m)). \end{aligned}$$

Durch Abschätzung, Integration und Limesbildung ($n \rightarrow \infty$) kommt man schließlich auf die folgende Ungleichung:

$$|s_f(t) - \bar{s}_f(t)| + |s_m(t) - \bar{s}_m(t)| \leq (C_f + C_m) \int_0^t |p(\tau) - \bar{p}(\tau)| d\tau, \quad t \in [0, T]. \quad (3)$$

Addiert man die 1. und 3. Zeile aus (1), setzt das Ergebnis in χ_n ein und bildet die Ableitung, so gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\chi_n(s_f - \bar{s}_f + p - \bar{p})) &= \chi'_n(s_f - \bar{s}_f + p - \bar{p}) \cdot (-\mu_f(s_f - \bar{s}_f) + (\beta_f + \tilde{\mu}_m + \sigma)(p - \bar{p}) - (\phi(s_f, s_m) \\ &\quad - \phi(\bar{s}_f, \bar{s}_m)) - (\tilde{\mu}_f + \tilde{\mu}_m + \sigma)(p - \bar{p}) + \phi(s_f, s_m) - \phi(\bar{s}_f, \bar{s}_m)) \\ &= \chi'_n(s_f - \bar{s}_f + p - \bar{p}) \cdot (-\mu_f(s_f - \bar{s}_f) + (\beta_f - \tilde{\mu}_f)(p - \bar{p})) \\ &\leq \mu_f |s_f - \bar{s}_f| + |\beta_f - \tilde{\mu}_f| |p - \bar{p}| \quad (\text{da } |\chi'_n(x)| \leq 1). \end{aligned} \quad (4)$$

Wiederholte Integration und Limesbildung ($n \rightarrow \infty$) $\forall t \in [0, T]$ führt zu

$$|s_f(t) + p(t) - \bar{s}_f(t) - \bar{p}(t)| \leq \int_0^t (\mu_f |s_f(\tau) - \bar{s}_f(\tau)| + |\beta_f - \tilde{\mu}_f| |p(\tau) - \bar{p}(\tau)|) d\tau.$$

Es genügt diese Ungleichung mit s_f durchzuführen, um p und $\bar{p}$ abzudecken. So sind alle drei Parameter berücksichtigt. Zur Vereinfachung setzt man nun für $t \in [0, T]$ den Term

$$|s_f(t) - \bar{s}_f(t)| + |s_m(t) - \bar{s}_m(t)| + |s_f(t) + p(t) - \bar{s}_f(t) - \bar{p}(t)| := w(t). \quad (5)$$

Nach (3), (4) und der Dreiecksungleichung, sowie einer Konstanten $C \geq 0$, erhält man für $t \in [0, T]$ die Abschätzung

$$0 \leq w(t) \leq C \int_0^t w(\tau) d\tau. \quad (6)$$

Bemerkung (Differentialgleichung): Gegeben sei das AWP $\dot{u} = \lambda f(u)$ mit der Anfangsbedingung $u(t_0)$. Dann ist die Lösung von der Form $u(t) = e^{\lambda t} u(t_0)$.

Also gilt mit $W(t) := \int_0^t w(\tau) d\tau$ auf $[0, T]$ alternativ auch das AWP $\dot{W} \leq CW$. Mit der Anfangsbedingung $W(0)$ ist die Lösung gegeben durch $W(t) \leq W(0)e^{Ct} = 0$, da $W(0) = \int_0^0 w(\tau) d\tau = 0$. Einsetzen in (6) ergibt

$$0 \leq w(t) \leq C \int_0^t w(\tau) d\tau = CW(t) \leq 0 \rightarrow w = 0 \text{ auf } [0, T].$$

Mit $w = 0$ ist die Gleichung in (5) nur erfüllt, wenn $s_f = \bar{s}_f, s_m = \bar{s}_m$ und $p = \bar{p}$ gilt. Dadurch ist die Eindeutigkeit der Lösung bewiesen.

Ob die Lösung des Gleichungssystems aus (1) unter den Anfangsbedingungen aus (2) tatsächlich positiv ist und nur Werte in $\mathbb{R}_+^3$ annimmt, sieht man durch prüfen der rechten Seite von (1) auf Quasipositivität. Dazu seien $u = (s_f, s_m, p)^T$ und $\nu = (-1, -1, 1)^T$ Vektoren, $\Phi(u) = \phi(s_f, s_m)$ eine Funktion abhängig von u , und A eine Matrix mit

$$A = \begin{pmatrix} -\mu_f & 0 & \beta_f + \tilde{\mu}_m + \sigma \\ 0 & -\mu_m & \beta_m + \tilde{\mu}_f + \sigma \\ 0 & 0 & -(\tilde{\mu}_f + \tilde{\mu}_m + \sigma) \end{pmatrix}.$$

Dies führt auf die vereinfachte Gleichung

$$\dot{u} = Au + \nu\Phi(u) \quad (7)$$

anstelle des Gleichungssystems (1) und man kann die Quasipositivität nun leichter beweisen.

Definition: Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^d$ ist genau dann quasipositiv, wenn gilt: $a_{ij} \geq 0 \forall i \neq j$.

Da A nach Definition eine quasipositive Matrix ist, gilt für die Gleichung (7) mit ϕ_1 für $i \in \{1, 2, 3\}$

$$u \in \mathbb{R}_+^3, u_i = 0 \Rightarrow (Au)_i + \nu_i\Phi(u) \geq 0.$$

Die Lösung von (1) mit den Anfangsbedingungen (2) nimmt also nur Werte in $\mathbb{R}_+^3$ an.

Um zu zeigen, dass die Lösung auch global auf dem Intervall $[0, t^*]$ existiert, betrachtet man die Gleichung $N(t) = s_f(t) + s_m(t) + 2p(t)$. Diese beschreibt die Anzahl der Individuen einer Population zum Zeitpunkt t . Durch Einsetzen und elementare Zeilenoperationen erhält man aus (1) die Ableitung

$$\begin{aligned} \dot{N} &= -\mu_f s_f - \mu_m s_m + (\beta_f - \tilde{\mu}_f)p + (\beta_m - \tilde{\mu}_m)p \leq (\beta_f - \tilde{\mu}_f)p + (\beta_m - \tilde{\mu}_m)p \\ &\leq (\beta_f + \beta_m)p \leq \frac{1}{2}(\beta_f + \beta_m)N. \end{aligned} \quad (8)$$

Mit $C = \frac{1}{2}(\beta_f + \beta_m)$ und der Anfangsbedingung $N(0) = s_f(0) + s_m(0) + 2p(0)$ ist die Lösung des AWP aus (8) für $t \in [0, t^*]$ gegeben durch

$$N(t) \leq e^{Ct}N(0).$$

Schließlich folgt aus

$$0 \leq s_f(t) \leq e^{Ct}N(0), \quad 0 \leq s_m(t) \leq e^{Ct}N(0) \quad \text{und} \quad 0 \leq p(t) \leq \frac{1}{2}e^{Ct}N(0),$$

dass $u(t)$ beschränkt ist und für kein t (sogar für $t = \infty$) Werte im Unendlichen annimmt. Damit ist auch die globale Existenz der Lösung nachgewiesen und $t^* = \infty$.

Die mathematischen Untersuchungen des Gleichungssystems aus (1), die im 3. Kapitel durchgeführt wurden, werden im nachfolgenden Satz festgehalten:

Satz: Mit den Anfangsbedingungen $s_f(0), s_m(0)$ und $p(0) \in \mathbb{R}_+^3$ hat das Gleichungssystem aus (1) $\forall t \geq 0$ genau eine Lösung in $\mathbb{R}_+^3$.

4 Suche nach Equilibria

Bemerkung: An der Stelle eines Equilibriums befinden sich die Paare und Singles im Gleichgewicht, d.h. es gibt keine zeitliche Änderung mehr und die Ableitung der Funktion an der Stelle ist 0. Mit den zuvor genannten Eigenschaften der Paarbildungsfunktion, ist $0 \in \mathbb{R}^3$ ein triviales Equilibrium, da mit $\phi(1)$ gilt:

$$\phi(s_f, s_m) = 0 \Leftrightarrow s_f s_m = 0 \quad \forall s_f, s_m \geq 0.$$

Allgemein ist davon auszugehen, dass dieser Punkt das einzige Equilibrium ist. Durch geschickte Konstruktion der Parameter kann man jedoch noch weitere Equilibria erzeugen, worauf jedoch an dieser Stelle verzichtet wird. Interessanter ist hier die Frage, ob es neben dem Equilibrium noch weitere Punkte (persistente Lösungen) gibt, an denen das Verhältnis von s_f und s_m gleichbleibt.

5 Exponentiallösungen

Annahmen: Die Eigenschaften $\phi(1), \phi(2)$ und $\phi(3)$ der Paarbildungsfunktion sind erfüllt und es gilt: $\beta_j > \tilde{\mu}_j$ für $i = f, m$. Auf der Suche nach persistenten Lösungen für $t \geq 0$, betrachtet man Lösungen der Form

$$u(t) = \rho(t)u^*, \text{ mit } \rho : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+, u^* \in \mathbb{R}_+^3 \text{ (}\rho \text{ ist Skalierungsfaktor).} \quad (9)$$

Dabei ist jede Lösung mit konstantem ρ ein Equilibrium und für $u^* = 0$ oder $\rho = 0$ ist das gesuchte, triviale Equilibrium gerade 0. Bei der weiteren Untersuchung gilt daher $u^* \neq 0$ und $\rho > 0 \forall t \geq 0$. Einsetzen von (9) in (7) und die Eigenschaft $\phi(3)$ liefert die Gleichung

$$\dot{\rho}(t)u^* = \rho(t)Au^* + \nu\Phi(\rho(t)u^*) = \rho(t)Au^* + \nu\rho(t)\Phi(u^*).$$

Durch Umstellen der Gleichung erhält man den Quotienten

$$\frac{\dot{\rho}(t)}{\rho(t)}u^* = Au^* + \nu\Phi(u^*).$$

Da die rechte Seite hier konstant ist (unabh. von t), existiert $\forall t \geq 0$ ein $\lambda \in \mathbb{R}$ und $\frac{\dot{\rho}(t)}{\rho(t)} = \lambda$. Eine Lösung des AWP $\dot{\rho}(t) = \rho(t)\lambda$ mit der Anfangsbedingung $\rho(0) = C$ (mit $C > 0$ konstant) ist

$$\rho(t) = Ce^{\lambda t}, \quad t \geq 0.$$

Aus der Gleichung in (9) folgt $C = 1$. Somit sind die nichttrivialen persistenten Lösungen des Gleichungssystems in (1) für $t \geq 0$ gegeben durch die Exponentiallösungen

$$u(t) = e^{\lambda t}u^*, \quad t \geq 0 \text{ mit } \lambda \in \mathbb{R}, u^* \in \mathbb{R}_+^3 \setminus \{0\}.$$

Um die Lösungen zu berechnen, löst man das nichtlineare Eigenwertproblem

$$\lambda u^* = Au^* + \nu\Phi(u^*), \text{ mit } \lambda \in \mathbb{R}_+^3 \setminus \{0\} \quad (10)$$

und bekommt als Lösungen den Eigenwert λ mit den Eigenvektoren γu^* , wobei $\gamma > 0$ Vielfache des Eigenvektors sind. Der Einfachheit halber, betrachtet man den normierten Vektor $u^* = (s_f^*, s_m^*, p^*) \in \mathbb{R}_+^3 \setminus \{0\}$ und kann mit Hilfe der Gleichung aus (10) das folgende Gleichungssystem aufstellen:

$$\lambda s_f^* = -\mu_f s_f^* + (\beta_f + \tilde{\mu}_m + \sigma)p^* - \phi(s_f^*, s_m^*) \quad (11)$$

$$\lambda s_m^* = -\mu_m s_m^* + (\beta_m + \tilde{\mu}_f + \sigma)p^* - \phi(s_f^*, s_m^*) \quad (12)$$

$$\lambda p^* = -(\tilde{\mu}_f + \tilde{\mu}_m + \sigma)p^* + \phi(s_f^*, s_m^*) \quad (13)$$

Durch elementare Zeilenoperationen bekommt man für $j = f, m$ die Gleichung

$$(\lambda + \mu_j)s_j^* = (\beta_j - \tilde{\mu} - \lambda)p^*. \quad (14)$$

Im Folgenden unterscheidet man zwei Fälle. Einerseits wird $\lambda = -\mu_j$ angenommen, andererseits sei $\lambda \neq -\mu_j$ für $j \in \{f, m\}$. Im 1. Fall erhält man aus (14) die Gleichung $0 = (\beta_j - \tilde{\mu} - \lambda)p^*$. Diese ist für $p^* = 0$ erfüllt, da $\beta_j > \tilde{\mu}_j$ (Annahme). Somit gilt $\beta_j > 0$ und $\beta_j - \tilde{\mu}_j - \lambda > 0$. Eingesetzt in (13) folgt mit der Eigenschaft $\phi(1)$: $0 = \phi(s_f, s_m) \Leftrightarrow s_j^* = 0$ für $j = f, m$. Die Lösungen des Eigenwertproblems sind also gegeben durch

$$(\lambda, u^*) = (-\mu_f, (1, 0, 0)^T), \quad (\lambda, u^*) = (-\mu_m, (0, 1, 0)^T).$$

Für den 2. Fall definiere $\underline{\lambda} := \max\{-\mu_f, -\mu_m\}$ und $\bar{\lambda} := \min\{\beta_f - \tilde{\mu}_m, \beta_m - \tilde{\mu}_f\}$ die obere bzw. untere Schranke von λ . Dabei gilt $\underline{\lambda} < \bar{\lambda}$, da $\beta_j > \tilde{\mu}_j$. Allerdings ist (λ, u^*) nur Lösung des Eigenwertproblems (10), wenn die Bedingung $\underline{\lambda} < \lambda < \bar{\lambda}$ erfüllt ist und $u^* \in \text{int}\mathbb{R}_+^3$. Stellt man die Gleichung aus (14) nach s_j^* um, so erhält man für $j = f, m$

$$s_j^* = \frac{\beta_j - \tilde{\mu}_j - \lambda}{\mu_j + \lambda} p^*. \quad (15)$$

Mit der Eigenschaft $\phi(3)$ und (13) kann man zwei Funktionen, $l(\lambda)$, $r(\lambda)$ definieren mit

$$l(\lambda) := \lambda + \tilde{\mu}_f + \tilde{\mu}_m + \sigma = \phi\left(\frac{\beta_f - \tilde{\mu}_f - \lambda}{\mu_f + \lambda}, \frac{\beta_m - \tilde{\mu}_m - \lambda}{\mu_m + \lambda}\right) =: r(\lambda).$$

Die Funktionen sind stetig und durch Einsetzen von $\underline{\lambda}$ bzw. $\bar{\lambda}$ sieht man, dass $l(\lambda)$ auf $\mathbb{R}$ streng monoton wächst und $r(\lambda)$ auf $(\underline{\lambda}, \bar{\lambda}]$ monoton fällt. In $\bar{\lambda}$ ist r sogar 0. Man erhält genau dann einen Schnittpunkt $\lambda \in (\underline{\lambda}, \bar{\lambda})$ der beiden Funktionen, wenn $l < r$ am linken Rand des Intervalls, d.h.

$$\underline{\lambda} + \tilde{\mu}_f + \tilde{\mu}_m + \sigma < \lim_{\lambda \downarrow \underline{\lambda}} \phi\left(\frac{\beta_f - \tilde{\mu}_f - \lambda}{\mu_f + \lambda}, \frac{\beta_m - \tilde{\mu}_m - \lambda}{\mu_m + \lambda}\right) =: \phi_\infty \in (0, \infty]. \quad (16)$$

Ist zudem $l(0) \leq r(0)$, kann man schließen, dass $\lambda \geq 0$. Besitzen die Funktionen einen gemeinsamen Schnittpunkt λ und setzt man diesen in die Gleichung aus (15) ein, so bekommt man genau eine Lösung (λ, u^*) des Eigenwertproblems (10) mit normiertem $u^* \in \mathbb{R}_+^3$.

Um den Grenzwert $\phi_\infty \in (0, \infty]$ aus (16) zu bestimmen, definiert man $\phi(\infty, y) := \lim_{x \rightarrow \infty} \phi(x, y)$ mit $y \geq 0$, sowie $\phi(x, \infty) := \lim_{y \rightarrow \infty} \phi(x, y)$ mit $x \geq 0$ und erhält

$$\phi_\infty = \begin{cases} \phi\left(\infty, \frac{\beta_m - \tilde{\mu}_m + \mu_f}{\mu_m - \mu_f}\right) : \mu_f < \mu_m \\ \infty : \mu_f = \mu_m \\ \phi\left(\frac{\beta_f - \tilde{\mu}_f + \mu_m}{\mu_f - \mu_m}, \infty\right) : \mu_f > \mu_m. \end{cases}$$

Ist ϕ zusätzlich stetig differenzierbar auf $\mathbb{R}_+^2$, existieren $\forall x, y > 0$ die Differenzenquotienten

$$\begin{aligned} \phi(x, y) &= x \phi\left(1, \frac{y}{x}\right) = y \frac{\phi\left(1, \frac{y}{x}\right) - \phi(1, 0)}{\frac{y}{x}} \\ \phi(x, y) &= y \phi\left(\frac{x}{y}, 1\right) = x \frac{\phi\left(\frac{x}{y}, 1\right) - \phi(0, 1)}{\frac{x}{y}} \end{aligned}$$

und $\phi(\infty, y) = y \phi_y(1, 0)$ für $y > 0$ bzw. $\phi(x, \infty) = x \phi_x(0, 1)$ für $x > 0$. Dadurch kann man ϕ_∞ alternativ formulieren als

$$\phi_\infty = \begin{cases} \left(\frac{\beta_m - \tilde{\mu}_m + \mu_f}{\mu_m - \mu_f}\right) \phi_y(1, 0) : \mu_f < \mu_m \\ \infty : \mu_f = \mu_m \\ \left(\frac{\beta_f - \tilde{\mu}_f + \mu_m}{\mu_f - \mu_m}\right), \phi_x(0, 1) : \mu_f > \mu_m. \end{cases}$$

Am Ende des 5. Kapitels ergibt sich zusammenfassend folgender Satz:

Satz: ϕ besitzt die Eigenschaften $\phi(1) - \phi(3)$, $\sigma \geq 0$, $\mu_j, \tilde{\mu}_j$ und $\beta_j > 0$ seien Konstanten und es gilt $\beta_j > \tilde{\mu}_j$ für $j = f, m$.

(i) Die beiden trivialen Exponentiallösungen des Gleichungssystems aus (1) haben die Form

$$(s_f(t), s_m(t), p(t)) = e^{-\mu_f t}(1, 0, 0) \text{ und } (s_f(t), s_m(t), p(t)) = e^{-\mu_m t}(1, 0, 0) \quad (17)$$

(ii) Wenn (16) mit $\underline{\lambda} := \max\{-\mu_f, -\mu_m\}$ gilt, gibt es noch eine weitere Exponentiallösung von (1) in $\text{int}\mathbb{R}_+^3$. Für $\phi_\infty \in (0, \infty]$ gelten die beiden obigen Definitionen wenn ϕ zusätzlich stetig differenzierbar ist.

(iii) Die nichttriviale Exponentiallösung in (ii) wächst für

$$\tilde{\mu}_f + \tilde{\mu}_m + \sigma \leq \phi\left(\frac{\beta_f - \tilde{\mu}_f}{\mu_f}, \frac{\beta_m - \tilde{\mu}_m}{\mu_m}\right), \text{ d.h. } \lambda \geq 0. \quad (18)$$

Der letzte Punkt hält fest, dass nur durch die Bildung von genügend neuen Paaren ein Wachstum der Population stattfinden kann.

Literaturverzeichnis

1. Jan W. Prüft/ Roland Schnaubelt/ Rico Zacher, Mathematische Modelle in der Biologie, Birkhäuser Verlag, 2008
2. Neil A. Campbell/ Jane B. Reece, Biologie, Spektrum Verlag, 6. Auflage 2003
3. <http://www.stern.de/wissen/natur/schwule-pinguine-wahre-liebe-nur-unter-maennern-555195.html>
4. <http://www.abendblatt.de/ratgeber/wissen/forschung/article844528/Valentinstag-bei-Loewe-amp-Co.html>

Paarbildung II/II

Maria Bruno

maria.bruno@uni-ulm.de

1 Transformation auf den planaren Simplex

1.1 Existenz und Eindeutigkeit der Lösungen des transformierten Systems

Wir fahren nun mit der Untersuchung von

$$\begin{aligned}\dot{s}_f &= -\mu_f s_f + (\beta_f + \tilde{\mu}_m + \sigma)p - \phi(s_f, s_m) \\ \dot{s}_m &= -\mu_m s_m + (\beta_m + \tilde{\mu}_f + \sigma)p - \phi(s_f, s_m) \\ \dot{p} &= -(\tilde{\mu}_f + \tilde{\mu}_m + \sigma)p + \phi(s_f, s_m)\end{aligned}\tag{1}$$

fort. Dazu ist es besser eine geeignete Formatierung dieses Systems zu wählen. Sei also:

$$\phi \in C^1(\mathbf{R}_+^2 \setminus \{0\}), \quad \text{Kegel} : \mathbf{R}_+^3 \setminus \{0\} \text{ positiv invariant für (1).}$$

Wir nehmen an:

$$u_0 := (s_f^0, s_m^0, p^0) \in \mathbf{R}_+^3 \setminus \{0\}.$$

Definieren: Vektor $e = (1, 1, 1)^T$ zum Zweck der Normalisierung, sowie den Vektor $v = (v_f, v_m, v_p)^T$ mit

$$v_f := \frac{s_f}{s_f + s_m + p}, \quad v_m := \frac{s_m}{s_f + s_m + p}, \quad v_p := \frac{p}{s_f + s_m + p},$$

d.h. v_i mit $i \in \{f, m, p\}$ drückt den Anteil der jeweiligen Gruppe von der Gesamtzahl aus.

Wegen $\langle e, u \rangle = s_f + s_m + s_p$ gilt:

$$v = \frac{u}{\langle e, u \rangle} \text{ mit } u \in \mathbf{R}_+^3 \setminus \{0\}\tag{2}$$

v ist Element des planaren Simplex S , das definiert wird als: $S := \{y \in \mathbf{R}_+^3 : \langle e, y \rangle = 1\}$

Sei nun $u = (s_f, s_m, p)^T$ eine Lösung von :

$$\dot{u} = Au + v\Phi(u).\tag{3}$$

Auf diese Weise löst v folgende Differentialgleichung (mit Hilfe der Produktregel abgeleitet nach u):

$$\dot{v} = \left(\frac{u}{\langle e, u \rangle}\right)' = \frac{\dot{u}\langle e, u \rangle - \langle e, \dot{u} \rangle u}{\langle e, u \rangle^2} = \frac{\dot{u}}{\langle e, u \rangle} - \frac{\langle e, \dot{u} \rangle u}{\langle e, u \rangle^2}$$

unter Verwendung von (3) erhalten wir:

$$= \frac{Au + v\Phi(u)}{\langle e, u \rangle} - \frac{u\langle e, Au + v\Phi(u) \rangle}{\langle e, u \rangle^2}$$

ersetzen u gemäß (2) durch $v\langle e, u \rangle$ und erhalten gemäß Homogenität von Φ :

$$\begin{aligned}
&= Av + v\Phi(v) - v\langle e, A + v\Phi(v) \rangle \\
&= F(v) - \langle e, F(v) \rangle v.
\end{aligned}$$

Wobei $F(v) := Av + v\Phi(v)$.

v löst damit insbesondere:

$$\dot{v} = F(v) - \langle e, F(v) \rangle v \quad (4)$$

Nach Voraussetzung ist $\phi \in C^1(\mathbf{R}_+^2 \setminus \{0\})$ und damit ist auch $F(v)$ als Verknüpfung stetiger Funktionen Element $C^1(\mathbf{R}_+^3 \setminus \{0\})$ außerdem besitzt (4) damit zu jedem Anfangswert $v_0 \in S$ genau eine Lösung v

Diese Ergebnisse lassen sich in folgendem Satz festhalten.

Lemma 1. *Zu jedem Anfangswert $v_0 \in S$ besitzt (4) genau eine Lösung. Diese existiert $\forall t \geq 0$ und nimmt nur Werte in S an.*

1.2 Menge der Equilibria des transformierten Systems

Zur Untersuchung der Menge der Equilibria des transformierten Systems betrachten wir zunächst die Ableitung von $\langle e, v \rangle$.

$$\frac{d}{dt} \langle e, v \rangle = \langle e, \dot{v} \rangle$$

Ersetzen dann $\dot{v}$ durch (4).

$$\begin{aligned}
\langle e, \dot{v} \rangle &= \langle e, F(v) - \langle e, F(v) \rangle v \rangle \\
&= \langle e, F(v) \rangle - \langle e, \langle e, F(v) \rangle v \rangle \\
&= \langle e, F(v) \rangle - \langle e, F(v) \rangle \langle e, v \rangle \\
&= \langle e, F(v) \rangle (1 - \langle e, v \rangle)
\end{aligned}$$

Daraus folgt wegen der Eindeutigkeit: $\langle e, v \rangle \equiv 1$. Daraus folgt v liegt in S und S ist positiv invariant für (4) und Lösungen von (4) mit $v(0) = v_0 \in S$ existieren global nach rechts.

Sei nun v eine Lösung von (4). Ann: Wenn wir $u(t)$ wie folgt über v definieren, ist $u(t)$ dadurch Lösung von (3).

$$u(t) := v(t) \exp\left(\int_0^t \langle e, F(\tau) \rangle d\tau\right) \langle e, u_0 \rangle \quad (5)$$

Also gilt nun zu zeigen: $\dot{u}(t) = Au(t) + v\Phi(u(t))$.

Beweis. Es gilt:

$$\begin{aligned}
\dot{u}(t) &= \left[v(t) \exp\left(\int_0^t \langle e, F(\tau) \rangle d\tau\right) \langle e, u_0 \rangle \right]' \\
&= \left(\dot{v}(t) + v(t) \langle e, F(v(t)) \rangle \right) \exp\left(\int_0^t \langle e, F(\tau) \rangle d\tau\right) \langle e, u_0 \rangle
\end{aligned}$$

setzen nun für $\dot{v}$ Gleichung (4) ein:

$$\begin{aligned}
&= \left(F(v(t)) - \langle e, F(v(t)) \rangle v(t) + v(t) \langle e, F(v(t)) \rangle \right) \exp\left(\int_0^t \langle e, F(\tau) \rangle d\tau\right) \langle e, u_0 \rangle \\
&= F(v(t)) \exp\left(\int_0^t \langle e, F(\tau) \rangle d\tau\right) \langle e, u_0 \rangle
\end{aligned}$$

um v zu ersetzen (5) nach v auflösen:

$$\begin{aligned} &= F(u(t)) \\ &= A(u(t)) + v\Phi(u(t)). \end{aligned}$$

□

Eine wichtige Eigenschaft liegt in dem Zusammenhang der Exponentiallösungen von (3) und den stationären Lösungen von (4).

So gilt einerseits: ist $u(t) = e^{\lambda t} u^*$ mit $\lambda \in \mathbf{R}$, $u^* \in S$ eine Exponentiallösung von (3), dann ist die Transformierte $v = u^*$ Equilibrium von (4), denn gemäß (2) ist $v = \frac{u^*}{\langle e, u^* \rangle}$ und da $u^* \in S$ ist $\langle e, u^* \rangle = 1$ ist also $v = u^*$.

Und umgekehrt gilt: ist $v^* \in S$ ein Equilibria von (4), so gilt mit $\lambda := \langle e, F(u^*) \rangle$: $F(v^*) = \dot{v}^* + \langle e, F(v^*) \rangle v^* = \lambda v^*$, da v Equilibrium von (4) ist $\dot{v}^* = 0$.

Somit sind die entsprechenden Lösungen von (3) gegeben durch:

$$u(t) = v^* e^{\lambda t} \langle e, u_0 \rangle.$$

Insgesamt lässt sich daraus folgern, dass die Menge der Equilibria von (4)

- (a) den beiden trivialen Exponentiallösungen $(1, 0, 0)^T$ und $(0, 1, 0)^T$ entspricht, was im Simplex S je die beiden Ecken verbildlichen,
- (b) falls es bei den Exponentiallösungen einen nichttrivialen Fall gibt, dann gibt es auch einen nichttrivialen Punkt im Inneren von S .

Daraus können wir nun folgern, dass die Exponentiallösungen den Equilibria im Simplex entsprechen. Dies wollen wir in einem weiteren Satz festhalten.

Lemma 2. Die Menge der Equilibria von (4) $\in S$ besteht aus: den beiden Ecken $(1, 0, 0)^T$ und $(0, 1, 0)^T$, sowie einem nichttrivialen Punkt v^* im Inneren von S falls

$$\underline{\lambda} + \tilde{\mu}_f + \tilde{\mu}_m + \sigma < \lim_{\lambda \downarrow \underline{\lambda}} \phi\left(\frac{\beta_f - \tilde{\mu}_f - \lambda}{\mu_f + \lambda}, \frac{\beta_m - \tilde{\mu}_m - \lambda}{\mu_m + \lambda}\right) =: \phi_\infty \in (0, \infty] \quad (6)$$

gilt. Wobei $\underline{\lambda} = \max\{-\mu_f, -\mu_m\}$.

1.3 Stabilität der Equilibria des transformierten Systems

Im Folgenden wollen wir Aussagen über die Stabilität der Equilibria von (4) treffen. Dazu klären wir zunächst die Begrifflichkeiten der Stabilität, Attraktivität und asymptotischen Stabilität. Dazu sei nun x^* ein Equilibria.

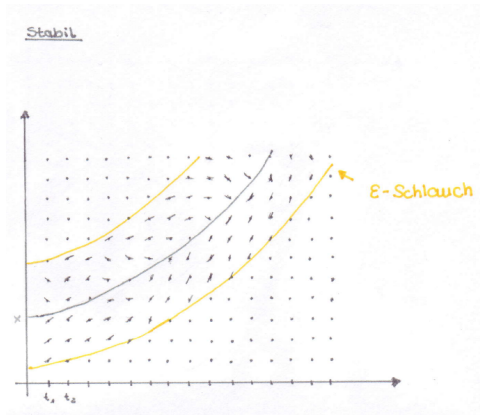


Abb. 1. Stabilität

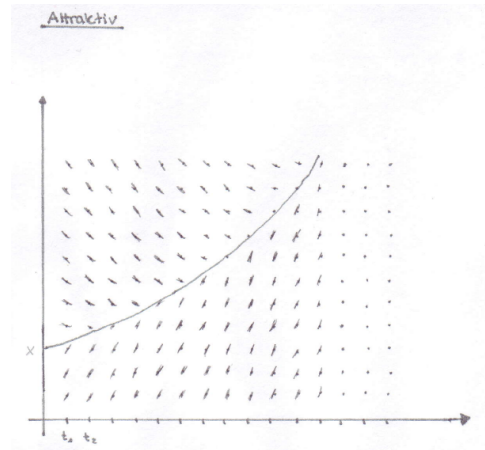


Abb. 2. Attraktivität

Stabilität

Hat man zu Beginn eine kleine Störung x_0 an x^* , die noch innerhalb einer δ -Umgebung von x^* liegt, so bleibt man mit der Störung x , abhängig von der Zeit und dem Startwert x_0 , trotzdem innerhalb eines ε -Schlauches um x^* .

Definition 1. x^* heißt **stabil**, falls gilt: $\forall \varepsilon > 0 \exists \delta > 0$, sodass $x(t, x_0) \in U_\varepsilon(x^*) \forall t \geq 0$, falls der Anfangswert x_0 in $U_\delta(x^*)$ liegt.
 x^* heißt „instabil“, falls x^* nicht stabil ist.

Attraktivität

Hat man zu Beginn eine kleine Störung x_0 an x^* , die noch innerhalb einer δ -Umgebung von x^* liegt, so strebt x , abhängig von der Störung x_0 , für $t \rightarrow \infty$ gegen x^* . Wird also auf Dauer von x^* angezogen.

Definition 2. x^* heißt **attraktiv**, falls gilt: $\exists \delta_0$, sodass $t^+(x_0) = \infty$ und $x(t, x_0) \rightarrow x^*$ für $t \rightarrow \infty$, falls der Anfangswert $x_0 \in U_{\delta_0}(x^*)$ ist.

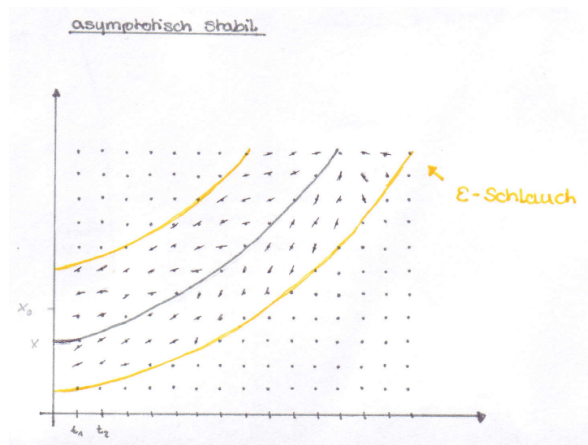


Abb. 3. asymptotische Stabilität

symptotischen Stabilität

Hat man zu Beginn eine Störung x_0 , so bleibt $x(t, x_0)$ nicht nur im ε -Schlauch um x^* , sondern nähert sich auf Dauer auch immer mehr an x^* an.

Definition 3. x^* heißt **asymptotisch stabil**, falls: x^* stabil und attraktiv ist.

Um nun Aussagen über die Stabilität der zuvor bestimmten Menge der Equilibria von (4) machen zu können unterscheiden wir folgende 3 Fälle, die sich durch sehr technische Vorüberlegungen zeigen lassen.

Lemma 3. Seien die Voraussetzungen des Abschnittes über Exponentiallösungen erfüllt, das heißt: Konstanten: $\mu_j, \tilde{\mu}_j, \beta_j > 0$ ($j = f, m$), sowie $\sigma \geq 0$
 $\beta_j > \tilde{\mu}_j$ für $j = f, m$ und ϕ erfüllt $(\phi_1) - (\phi_3)$

Fall 1:

$$\mu_f < \mu_p \text{ und } \mu_m > \mu_f + \frac{\beta_m - \tilde{\mu}_m + \mu_f}{\mu_p - \mu_f} \phi_y(1, 0)$$

Daraus ergibt sich: $(1, 0, 0)$ ist asymptotisch stabil in S , $(0, 1, 0)$ ist instabil in S (Quelle), und v^* existiert nicht.

Fall 2:

$$\mu_m < \mu_p \text{ und } \mu_f > \mu_m + \frac{\beta_f - \tilde{\mu}_f + \mu_m}{\mu_p - \mu_m} \phi_x(0, 1)$$

Daraus ergibt sich: $(1, 0, 0)$ ist instabil in S (Quelle), $(0, 1, 0)$ ist asymptotisch in S , und v^* existiert nicht.

Fall 3: gelten gleichzeitig die Implikationen:

$$\mu_f < \mu_p \Rightarrow \mu_m > \mu_f + \frac{\beta_m - \tilde{\mu}_m + \mu_f}{\mu_p - \mu_f} \phi_y(1, 0)$$

$$\mu_m < \mu_p \Rightarrow \mu_f > \mu_m + \frac{\beta_f - \tilde{\mu}_f + \mu_m}{\mu_p - \mu_m} \phi_x(0, 1) \quad .$$

Daraus folgt: die beiden Ecken $(1, 0, 0)$ und $(0, 1, 0)$ sind instabil in S (Quelle), und v^* existiert und ist in S asymptotisch stabil.

Diese Stabilität der Lösungen sieht in einem Schaubild verdeutlicht wie folgt aus.

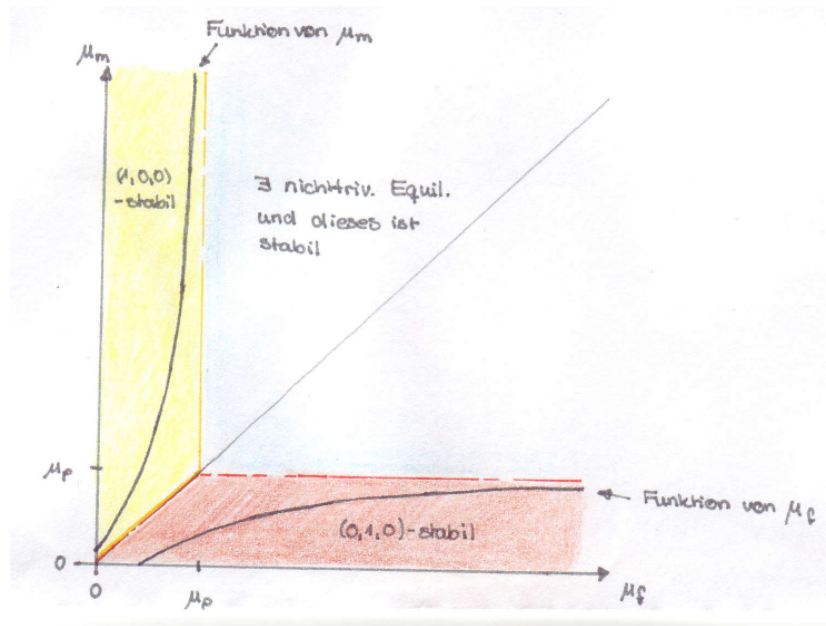


Abb. 4. Stabilitätsbereiche der Lösungsmenge

1.4 Verbirdlichung der 3 Fälle an Beispielen

Das Simplex aus dem Raum lässt sich als planares Dreieck, mit Seitenlängen 1 und Flächeninhalt A , abbilden. Wählen wir nun einen Punkt μ aus dem Dreieck aus, brauchen wir aber wieder seine dreidimensionalen Koordinaten μ_f , μ_m und μ_p . Diese erhalten wir durch grundlegende geometrische Verhältnisse:

Der Punkt μ unterteilt das Dreieck in 3 kleinere Dreiecke mit den Flächeninhalten A_1 , A_2 , A_3 (Die sich über die Formel $\frac{1}{2} \cdot \text{Grundfläche} \cdot \text{Höhe}$ berechnen lassen). Dabei gilt:

$$\frac{A_1}{A} = \mu_f; \quad \frac{A_2}{A} = \mu_m; \quad \frac{A_3}{A} = \mu_p.$$

Die Abbildung unten gibt Beispiele für die Fälle aus vorigem Lemma über die Stabilität der Lösungsmengen an:

- (1) ist dabei ein Bsp für Stabilität der Ecke $(1,0,0)$. Etwas salopp gesagt: „Die Frauen gewinnen“,
- (2) ist ein Beispiel für Stabilität in $(0,1,0)$. Wir können eine „Tendenz zu den Männern“ erkennen,
- (3) ist ein Beispiel für Stabilität in einem nichttrivialen Fall. Dabei herrscht eine gewisse Ausgewogenheit bzgl. der Tendenz.

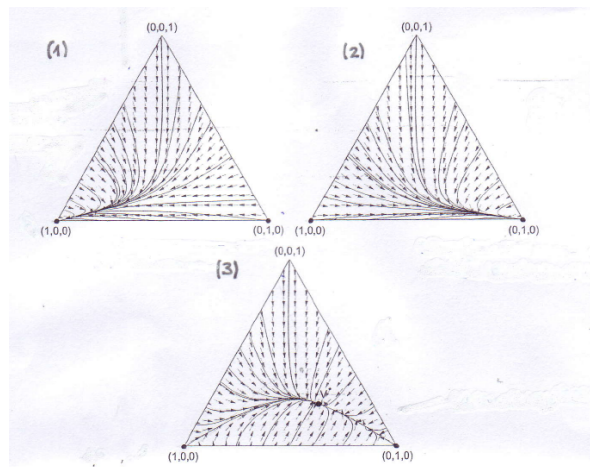


Abb. 5. Beispiele aus den drei Stabilitätsbereichen

2 Spezialfall - der symmetrische Fall

Im symmetrischen Fall nehmen wir nun an, dass die Paarbildungsfunktion symmetrisch ist und die Geburts- und Sterberaten geschlechtsunabhängig sind.

D.h. es gelte:

$$(i) \quad \phi(x, y) = \phi(y, x), \quad x, y \geq 0$$

Folglich bilden sich bei beispielsweise 10 Männern und 7 Frauen gleich viele Paare, wie bei 10 Frauen und 7 Männern.

$$(ii) \quad \tilde{\mu} := \tilde{\mu}_f = \tilde{\mu}_m$$

$$(iii) \quad \mu := \mu_f = \mu_m$$

Es sterben demnach immer je gleich viele verheiratete Frauen wie verheiratete Männern, als auch gleich viele Singlefrauen wie Singlemänner.

$$(iv) \quad \beta := \beta_f = \beta_m$$

Es kommen also immer gleichviele weibliche wie männliche Babys zu Welt.

Zweierlei Verhältnisse von Sterbe und Geburtenraten gilt es jetzt zu unterscheiden.

1.Fall: $\beta \leq \tilde{\mu}$ Dann ist $\beta - \tilde{\mu} \leq 0$ Daraus ergibt sich, nach einem Satz aus dem Abschnitt über grundlegende analytische Eigenschaften, dass das triviale Equilibria $= (0, 0, 0)^T$ ist. d.h. $s_f = 0, s_m = 0, p = 0$

Folgerung: Die Population stirbt aus.

2.Fall: $\beta > \tilde{\mu}$ Zur Untersuchung dieses Falls werden einige Feststellungen aus dem Abschnitt über Exponentiallösungen angewandt.

Nach einem Satz aus dem Abschnitt über Exponentiallösungen gilt nun: $\exists!$ nichttriviale Exponentiallösung $u(t) = e^{\lambda t} u^*$ mit $\langle e, u^* \rangle = 1$ (anwendbar da die Bedingung aus (6) trivialerweise erfüllt ist, denn $\phi_\infty = \infty$ und ∞ ist immer $> -\mu - 2\tilde{\mu} + \sigma$).

Eine weitere Feststellung aus selbigem Kapitel war:

$$(\lambda + \mu_j) s_j^* = (\beta_j - \tilde{\mu}_j - \lambda) p^* \text{ für } j = f, m.$$

Wendet man darauf unsere Voraussetzungen (i) - (iv) der Symmetrie an, erhält man:

$$(\lambda + \mu) s_f^* = (\beta - \tilde{\mu} - \lambda) p^* = (\lambda + \mu) s_m^*.$$

Daraus ergibt sich: $s_f^* = s_m^* =: s^*$, aufgelöst nach p^* haben wir:

$$p^* = \frac{\mu + \lambda}{\beta - \tilde{\mu} - \lambda} s^*.$$

Daraus folgt zusammen mit (6) und unsereren Voraussetzung (i)-(iv), dass:

$$\lambda + 2\tilde{\mu} + \sigma = \phi\left(\frac{\beta - \tilde{\mu} - \lambda}{\mu + \lambda}, \frac{\beta - \tilde{\mu} - \lambda}{\mu + \lambda}\right).$$

Da nach Voraussetzung $\beta > \tilde{\mu}$ lässt sich (ϕ_3) anwenden:

$$\phi\left(\frac{\beta - \tilde{\mu} - \lambda}{\mu + \lambda}, \frac{\beta - \tilde{\mu} - \lambda}{\mu + \lambda}\right) = \frac{\beta - \tilde{\mu} - \lambda}{\mu + \lambda} \phi(1, 1).$$

Definiere nun $\kappa := \phi(1, 1)$

$$\Rightarrow \lambda + 2\tilde{\mu} + \sigma = \kappa \frac{\beta - \tilde{\mu} - \lambda}{\mu + \lambda}.$$

Was sich wiederum zu folgender quadratischen Gleichung umformen lässt:

$$\lambda^2 + (\mu + 2\tilde{\mu} + \sigma + \kappa)\lambda - \kappa(\beta - \tilde{\mu}) + \mu(2\tilde{\mu} + \sigma) = 0 \quad . \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \lambda_{1,2} &= \frac{-(\mu + 2\tilde{\mu} + \sigma + \kappa) \pm \sqrt{(\mu + 2\tilde{\mu} + \sigma + \kappa)^2 - 4(\kappa(\beta - \tilde{\mu}) + \mu(2\tilde{\mu} + \sigma))}}{2} \\ &= -\frac{1}{2}(\mu + 2\tilde{\mu} + \sigma + \kappa) \pm \frac{1}{2}[(-\mu + 2\tilde{\mu} + \sigma + \kappa)^2 + 4\kappa(\mu + \beta - \tilde{\mu})]^{1/2} \end{aligned}$$

Jedoch gilt: die zweite Lösung λ_2 von (7) fällt weg, da diese kleiner als $-\mu$ ist.

Also ist

$$\lambda = -\frac{1}{2}(\mu + 2\tilde{\mu} + \sigma + \kappa) + \frac{1}{2}[(-\mu + 2\tilde{\mu} + \sigma + \kappa)^2 + 4\kappa(\mu + \beta - \tilde{\mu})]^{1/2}.$$

λ ist genau dann positiv (aufgrund eines vorangehenden Ergebnisses), wenn gilt:

$$2\tilde{\mu} + \sigma \leq \kappa \frac{\beta - \tilde{\mu}}{\mu}.$$

D.h. nach β aufgelöst gilt:

$$\beta \geq \tilde{\mu} + \mu \frac{2\tilde{\mu} + \sigma}{\kappa}. \quad (8)$$

Dies kann man nun auf folgende Weise interpretieren, die auch der Intuition entspricht: Die Population wächst wenn, Paarbildungsrate (κ) und Geburtenrate (β) groß, Scheidungsrate (σ) und Mortalität (μ bzw. $\tilde{\mu}$) gering sind. Für großes κ reduziert sich (8) im Wesentlichen zu $\beta > \tilde{\mu}$, da der rechte Summand aus (8) dann gegen 0 geht.

Literaturverzeichnis

1. Jan W. Prükt/ Roland Schnaubelt/ Rico Zacher, Mathematische Modelle in der Biologie, Birkhäuser Verlag, 2008

Genetik

Anja Bachmann, Karen Huep

Anja.Bachmann@uni-ulm.de, Karen.Huep@uni-ulm.de

1 Grundbegriffe und das Hardy-Weinberg-Gesetz

Die Populationsgenetik untersucht die Auswirkungen von Evolutionsfaktoren auf die genetische Zusammensetzung.

Gene, auch als Erbanlage oder Erbfaktor bezeichnet, sind Träger der Erbinformation, welche durch Reproduktion an die Nachkommen weitergegeben werden. Sie sind im Zellkern auf Chromosomen gespeichert. Der Ort auf einem Chromosom, an welchem sich das Gen befindet ist der Genort oder auch Genlokus genannt und die Gesamtheit aller Gene ist das Genom. Sind in einer Zelle zwei vollständige Chromosomensätze vorhanden, so spricht man von Diploidie.

Verschiedene Ausprägungen oder Varianten eines Gens, die sich alle an einem Genort befinden, werden als Allele bezeichnet. Tritt ein Allel an einem Genort doppelt auf, der Genotyp hat die Form (A_i, A_i) , so ist der Genotyp homozygot und im Falle (A_i, A_j) mit $i \neq j$ ist er heterozygot.

In diesem Kapitel geht man von einer (sehr großen) Population diploider Individuen aus, die sich gemäß den Mendelschen Gesetzen fortpflanzen, und man beschränkt sich auf einen Genort.

Im Folgenden wird die relative Häufigkeit eines Allels und deren Veränderung in der Tochtergeneration untersucht.

Die relative Häufigkeit des geordneten Paares (A_i, A_j) in der Population wird mit P_{ij} , $i, j \in \{1, \dots, n\}$ bezeichnet. Dabei wird angenommen, dass $[P_{ij}]$ symmetrisch ist, denn (A_i, A_j) und (A_j, A_i) sind im Allgemeinen nicht unterscheidbar. Dies bedeutet, dass die relative Häufigkeit von $A_i A_j$ gleich $P_{ij} + P_{ji} = 2P_{ij}$ ist. Die relative Häufigkeit p_i des Allels A_i in der Population ist dann

$$p_i = \frac{1}{2} \left(2P_{ii} + \sum_{j \neq i} P_{ij} + \sum_{j \neq i} P_{ji} \right) = \sum_{j=1}^n P_{ij}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Es werden diskrete, nicht überlappende Generationen betrachtet. Migration und Mutation werden ausgeschlossen. Der Paarbildungsvorgang, Fruchtbarkeit und Überlebensfähigkeit der Nachkommen seien unabhängig vom Genotyp.

Alle Paarungsvarianten und die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten eines homozygoten Genotyps $A_i A_i$, $i \in \{1, \dots, n\}$ sind in der folgenden Tabelle dargestellt. Da von einer sehr großen Population ausgegangen wird entspricht die relative Häufigkeit der Wahrscheinlichkeit.

Paarungskombination ($k, l \neq i, k \neq l$)	Wahrscheinlichkeit	bedingte Wahrscheinlichkeit für die Bildung von $A_i A_i$
$A_i A_i \times A_i A_i$	P_{ii}^2	1
$A_i A_k \times A_i A_i$	$4P_{ik}P_{ii}$	1/2
$A_i A_k \times A_i A_k$	$4P_{ik}^2$	1/4
$A_i A_k \times A_i A_l$	$8P_{ik}P_{il}$	1/4

Mit der Formel von Bayes berechnet man die relative Häufigkeit von $A_i A_i$ in der Tochtergeneration

$$\begin{aligned}
P'_{ii} &= P_{ii}^2 + 2 \sum_{k \neq i} P_{ik} P_{ii} + \sum_{k \neq i} P_{ik}^2 + 2 \sum_{k \neq i} \sum_{l < k, l \neq i} P_{ik} P_{il} \\
&= P_{ii}^2 + 2 \sum_{k \neq i} P_{ik} P_{ii} + \left(\sum_{k \neq i} P_{ik} \right) (P_{ik} + \sum_{l \neq i, k} P_{il}) \\
&= (P_{ii} + \sum_{k \neq i} P_{ik}) (P_{ii} + \sum_{l \neq i} P_{il}) = p_i^2
\end{aligned} \tag{1}$$

Für einen heterozygoten Genotyp $A_i A_j$, $i, j \in \{1, \dots, n\}$, $i \neq j$, wird P'_{ij} mit der folgenden Tabelle analog zum homozygoten Genotyp berechnet.

Paarungskombination ($k \neq i, l \neq j, (k, l) \neq (j, i)$)	Wahrscheinlichkeit	bedingte Wahrscheinlichkeit für die Bildung von $A_i A_j$ ($i \neq j$)
$A_i A_i \times A_j A_j$	$2P_{ii}P_{jj}$	1
$A_i A_k \times A_j A_j$	$4P_{ik}P_{jj}$	1/2
$A_i A_i \times A_j A_l$	$4P_{ii}P_{jl}$	1/2
$A_i A_j \times A_i A_j$	$4P_{ij}^2$	1/2
$A_i A_k \times A_j A_l$	$8P_{ik}P_{jl}$	1/4

Mit der Formel von Bayes folgt

$$\begin{aligned}
2P'_{ij} &= 2P_{ii}P_{jj} + 2 \sum_{k \neq i} P_{ik}P_{jj} + 2 \sum_{l \neq j} P_{ii}P_{jl} + 2P_{ij}^2 + 2 \sum_{k \neq i} P_{ik} \left(\sum_{l \neq i, (k, l) \neq (j, i)} P_{jl} \right) \\
&= 2(P_{ii} + \sum_{k \neq i} P_{ik}) (P_{jj} + \sum_{l \neq j} P_{jl}) = 2p_i p_j
\end{aligned} \tag{2}$$

Die Ergebnisse aus 1 und 2 lassen sich zu

$$P'_{ij} = p_i p_j \quad \forall \quad i, j \in \{1, \dots, n\}.$$

zusammenfassen. Damit ergibt sich

$$p'_i = \sum_{j=1}^n P'_{ij} = \sum_{j=1}^n p_i p_j = p_i \sum_{j=1}^n p_j = p_i$$

für alle $i=1, \dots, n$. Das heißt, die Allelhäufigkeit bleibt in der Tochtergeneration gleich. Dies führt zum

Hardy-Weinberg-Gesetz

- (i) Die Allelhäufigkeiten p_i , $i=1, \dots, n$, bleiben von Generation zu Generation unverändert.
- (ii) Die Genotyphäufigkeiten P_{ij} , $i, j=1, \dots, n$, bleiben von der ersten Tochtergeneration an unverändert. Sie sind ab der ersten Tochtergeneration gegeben durch

$$P_{ij} = p_i p_j, \quad \text{für alle } i, j \in \{1, \dots, n\}. \quad (\text{Hardy} - \text{Weinberg} - \text{Gleichgewicht}) \tag{3}$$

2 Selektion an einem Genort

Dieser Abschnitt bezieht sich weiterhin nur auf einen Genort. Paarungserfolg, Fruchtbarkeit und Überlebensfähigkeit sind jetzt vom Genotyp abhängig, Mutation bleibt aber weiterhin ausgeschlossen. Es wird wieder eine große Population diploider Individuen betrachtet. $N(t)$ ist die Gesamtzahl aller Individuen und $2N_i(t)$ die Anzahl der Allele vom Typ A_i , $i=1, \dots, n$, zur Zeit t . Die Sterberate des Genotyps $A_i A_j$ wird mit d_{ij} und die Geburtenrate mit b_{ij} bezeichnet. Der Fitnessparameter von $A_i A_j$

ist definiert als $f_{ij} := b_{ij} - d_{ij}$ ($F = [f_{ij}]$). Man geht davon aus, dass F symmetrisch ist. Die Gleichung

$$N_i(t + \Delta t) - N_i(t) = \sum_j N(t) f_{ij} P_{ij}(t) \Delta t + O(|\Delta t|^2).$$

beschreibt die Veränderung von N_i innerhalb eines kleinen Zeitintervalls Δt durch den Beitrag von $A_i A_j$. Mit Division durch Δt folgt für $\Delta t \rightarrow 0$

$$\dot{N}_i = \sum_j N f_{ij} P_{ij}. \quad (4)$$

Setzt man $p_i = N_i/N$ und $N = \sum_j N_j$, so bekommt man für die relative Häufigkeit der Tochtergeneration

$$\dot{p}_i = \frac{\dot{N}_i N - N_i \dot{N}}{N^2} = \frac{1}{N} \sum_j N f_{ij} P_{ij} - \frac{N_i}{N^2} \sum_{k,l} N f_{kl} P_{kl} = \sum_j f_{ij} P_{ij} - p_i \sum_{k,l} f_{kl} P_{kl}. \quad (5)$$

Man nimmt an, dass sich die Population zu jedem Zeitpunkt im Hardy-Weinberg-Gleichgewicht befindet. Ersetzt man die Genotyphäufigkeiten P_{ij} in 5 durch die Hardy-Weinberg-Annahme, bekommt man die **Fisher-Haldane-Wright-Gleichungen**

$$\dot{p}_i = \sum_j f_{ij} p_i p_j - p_i \sum_{k,l} f_{kl} p_k p_l, \quad i = 1, \dots, n \quad (6)$$

für die Allelfrequenzen p_i .

Definiere

$$\phi_i(p) = \sum_{j=1}^n f_{ij} p_j, \quad i = 1, \dots, n \quad (7)$$

$$\phi(p) = \sum_{i=1}^n p_i \phi_i(p) = \sum_{i,j=1}^n f_{ij} p_i p_j, \quad (8)$$

dann erhält man mit 4 und der Hardy-Weinberg-Annahme

$$\dot{N}_i = \phi_i(p) N_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (9)$$

Dabei ist $\phi_i(p)$ die Fitness des Allels A_i . Für die Gesamtpopulation gilt nach Summation der Gleichungen 9

$$\dot{N} = \sum_{i=1}^n \dot{N}_i = \sum_{i=1}^n \phi_i(p) N_i = \phi(p) N.$$

$\phi(p)$ ist der Fitnesszustand der gesamten Population und wird als mittlere Fitness der Population bezeichnet.

Die Fisher-Haldane-Wright-Gleichungen 6 können nun mit 7 und 8 in der Form

$$\dot{p}_i = p_i (\phi_i(p) - \phi(p)), \quad i = 1, \dots, n \quad (10)$$

geschrieben werden. Dabei ist $\phi_i(p) - \phi(p)$ die Wachstumsrate von p_i . Die relative Häufigkeit des Allels A_i nimmt also genau dann zu, wenn die Fitness des Allels größer ist als die mittlere Fitness der Population.

Die relativen Häufigkeiten können als Vektor $p = (p_1, \dots, p_n)^T$ geschrieben werden. Dieser sollte zu jedem Zeitpunkt im $(n-1)$ -dimensionalen Simplex

$$S_n = \{x \in \mathbb{R}_+^n : \langle e, x \rangle = 1\}$$

liegen, wobei $e := (1, 1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}$.

Lemma 1. Für jeden Vektor $p_0 \in S_n$ besitzt das System $\dot{p}_i = p_i (\phi_i(p) - \phi(p))$ ($i = 1, \dots, n$) genau eine Lösung $p(t)$ mit $p(0) = p_0$. Diese Lösung existiert auf $\mathbb{R}_+$, und es gilt $p(t) \in S_n$ für alle $t \geq 0$.

Beweis. Mit dem Satz von Picard-Lindelöf folgt die lokale Existenz und die Eindeutigkeit. Wegen der positiven Invarianz von S_n folgt die globale Existenz nach rechts und der Standardkegel $\mathbb{R}_+^n$ ist positiv invariant, da die rechte Seite von $\dot{p}_i = p_i(\phi_i(p) - \phi(p))$ ($i = 1, \dots, n$) quasipositiv ist. Für jede Lösung $p(t)$ von $\dot{p}_i = p_i(\phi_i(p) - \phi(p))$ ($i = 1, \dots, n$) gilt:

$$\frac{d}{dt}\langle e, p \rangle = \langle e, \dot{p} \rangle = \sum_{i=1}^n p_i(\phi_i(p) - \phi(p)) = \phi(p)(1 - \langle e, p \rangle).$$

Es gilt $\langle e, p \rangle \equiv 1$, falls $\langle e, p(0) \rangle = 1$ ist. Denn die skalare Differentialgleichung $\dot{w} = \phi(p)(1 - w)$ mit Anfangsbedingung $w(0) = 1$ besitzt die eindeutige Lösung $w \equiv 1$. Desweiteren ist der Durchschnitt zweier positiv invarianter Mengen wieder positiv invariant. $\square$

3 Das Fundamentaltheorem von Fisher

Satz 7 Für jede Lösung $p(t)$ von $\dot{p}_i = p_i(\phi_i(p) - \phi(p))$ ($i = 1, \dots, n$) mit $p(0) \in S_n$ ist die mittlere Fitness $\phi(p(t))$ für $t \geq 0$ monoton wachsend. Es gilt

$$\dot{\phi}(p) = 2 \sum_{i=1}^n p_i(\phi_i(p) - \phi(p))^2, \quad p \in S_n \quad (11)$$

Insbesondere gilt $\dot{\phi}(p) = 0$ genau dann, wenn p ein Equilibrium ist.

Beweis. $p(t)$ sei eine Lösung von $\dot{p}_i = p_i(\phi_i(p) - \phi(p))$ ($i = 1, \dots, n$) mit $p(0) \in S_n$. Da F symmetrisch ist folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\phi(p) &= \frac{d}{dt} \left(\sum_{i,j=1}^n f_{ij} p_i p_j \right) = 2 \sum_{i,j=1}^n f_{ij} \dot{p}_i p_j = 2 \sum_{i=1}^n \phi_i(p) \dot{p}_i \\ &= 2 \sum_{i=1}^n p_i \phi_i(p) (\phi_i(p) - \phi(p)) = 2 \sum_{i=1}^n p_i (\phi_i(p) - \phi(p))^2. \end{aligned}$$

Die mittlere Fitness $\phi(p)$ wächst somit für alle $t \geq 0$ und $\dot{\phi}(p)$ ist genau dann gleich 0, wenn für alle $i=1, \dots, n$ $p_i = 0$ oder $\phi_i(p) - \phi(p) = 0$ gilt (p ist ein Equilibrium). $\square$

Aus Satz 1, Lemma 2 und dem Satz von La Salle folgt, dass für jeden Anfangswert $p_0 \in S_n$ die zugehörige Lösung $p(t)$ von $\dot{p}_i = p_i(\phi_i(p) - \phi(p))$ ($i = 1, \dots, n$) für $t \rightarrow \infty$ gegen die Menge der Equilibria konvergiert. Im nächsten Kapitel wird gezeigt, dass dies auch für unendlich viele Equilibria gilt.

4 Konvergenz gegen Equilibria

Satz 8 Konvergenzsatz. Für jeden Anfangswert $p_0 \in S_n$ konvergiert die zugehörige Lösung $p(t)$ von $\dot{p}_i = p_i(\phi_i(p) - \phi(p))$ ($i = 1, \dots, n$) für $t \rightarrow \infty$ gegen ein Equilibrium.

Zunächst einige Hilfsmittel für den Beweis:

$T(p) = \{i : p_i > 0\} \subset \{1, \dots, n\}$ ist der Träger von $p \in S_n$. Es sei $q \in S_n$. Dann ist die Entropie $d_q : S_n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ definiert durch:

$$d_q(p) = \begin{cases} -\sum_{i \in T(q)} q_i \log(p_i/q_i), & \text{falls } T(q) \subseteq T(p) \\ \infty, & \text{falls } T(q) \not\subseteq T(p) \end{cases}$$

Außerdem sei $T(q) \subseteq T(p)$. Setze $\bar{p} := \sum_{i \in T(q)} p_i \in (0, 1]$. Dann folgt mit dem Satz von Taylor, angewandt auf die Funktion $\{x \mapsto -\log(x)\}$ in $(0, \infty)$:

$$-\log x = -\log(\bar{p}) - \frac{1}{\bar{p}}(x - \bar{p}) + \frac{1}{2\xi(x)^2}(x - \bar{p})^2. \quad (x > 0, \xi(x) \in [\min\{x, \bar{p}\}, \max\{x, \bar{p}\}]).$$

Setze $x = x_i := p_i/q_i$, $i \in T(q)$ dann gilt

$$\xi(x_i) \leq \max\{x_i, \bar{p}\} \leq \max\left\{\frac{p_i}{q_i}, 1\right\} \leq \max\left\{\frac{1}{q_i}, 1\right\} \leq \max_{i \in T(q)} \frac{1}{q_i} =: \eta(q),$$

und man erhält folgende Ungleichungen:

$$\begin{aligned} -\log\left(\frac{p_i}{q_i}\right) &\geq -\log(\bar{p}) - \frac{1}{\bar{p}}\left(\frac{p_i}{q_i} - \bar{p}\right) + \frac{1}{2\eta(q)^2}\left(\frac{p_i}{q_i} - \bar{p}\right)^2, \quad i \in T(q) \\ \iff -\sum_{i \in T(q)} q_i \log\left(\frac{p_i}{q_i}\right) &\geq -\log(\bar{p}) - \sum_{i \in T(q)} \frac{q_i}{\bar{p}}\left(\frac{p_i}{q_i} - \bar{p}\right) + \frac{1}{2\eta(q)^2} \sum_{i \in T(q)} q_i \left(\frac{p_i}{q_i} - \bar{p}\right)^2 \end{aligned}$$

da $\sum_{i \in T(q)} q_i = 1$ und $\sum_{i \in T(q)} q_i(p_i/q_i - \bar{p}) = 0$ gilt

$$d_q(p) \geq -\log(\bar{p}) + \frac{1}{2\eta(q)^2} \sum_{i \in T(q)} q_i \left(\frac{p_i}{q_i} - \bar{p}\right)^2 \quad (12)$$

Wegen $-\log(\bar{p}) \geq 0$ folgt $d_q(p) \geq 0$ und $d_q(p) = 0 \Leftrightarrow p = q$. $d_q(p) = \infty$ gilt genau dann, wenn der Population im Zustand p im Vergleich zu q mindestens ein Allel fehlt.

Als nächstes soll der euklidische Abstand $|p - q|_2$ mit Hilfe von 12 nach oben abgeschätzt werden. Es gelte $T(q) \subseteq T(p)$. Wegen 12 gilt $d_q(p) \geq -\log(\bar{p}) \Leftrightarrow -d_q(p) \leq \log(\bar{p}) \Leftrightarrow -\bar{p} \leq -e^{-d_q(p)}$. Da $x \mapsto e^{-x}$ konvex ist gilt $1 - x \leq e^{-x} \quad \forall x \in \mathbb{R}$ und damit

$$\sum_{i \notin T(q)} p_i = 1 - \bar{p} \leq 1 - e^{-d_q(p)} \leq d_q(p). \quad (13)$$

Mit 12,13, Dreiecksungleichung und Höldersche Ungleichung erhält man

$$\begin{aligned} |p - q|_1 &= \sum_{i \in T(q)} |p_i - q_i| + \sum_{i \notin T(q)} |p_i - q_i| = \sum_{i \in T(q)} |p_i - q_i| + \sum_{i \notin T(q)} p_i \\ &\leq \sum_{i \in T(q)} |p_i - \bar{p}q_i| + \sum_{i \in T(q)} |\bar{p}q_i - q_i| + 1 - \bar{p} \\ &= \sum_{i \in T(q)} \left| \frac{p_i}{q_i} - \bar{p} \right| q_i + 2(1 - \bar{p}) \leq \left[\sum_{i \in T(q)} \left(\frac{p_i}{q_i} - \bar{p} \right)^2 q_i \right]^{1/2} + 2(1 - \bar{p}) \\ &\leq \sqrt{2\eta(q)} \sqrt{d_q(p)} + 2d_q(p). \end{aligned}$$

Da $|x|_2 \leq |x|_1 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$, gilt

$$|p - q|_2 \leq 2\sqrt{d_q(p)}(\eta(q) + \sqrt{d_q(p)}), \quad p \in S_n. \quad (14)$$

Es sei $q \in S_n$ ein Equilibrium von $\dot{p}_i = p_i(\phi_i(p) - \phi(p))$ ($i = 1, \dots, n$). Diese Indexmenge $\{1, \dots, n\}$ wird zerlegt in

$$J_0 = \{i : \phi_i(q) = \phi(q)\}, J_- = \{i : \phi_i(q) < \phi(q)\}, J_+ = \{i : \phi_i(q) > \phi(q)\}.$$

Es gilt $T(q) \subseteq J_0$ und $T(q) = J_0 = \{1, \dots, n\}$ für $q \in \text{int}S_n$. Setze $l_q(p) = \sum_{i \in J_-} p_i$ und $V_q(p) = d_q(p) + 2l_q(p)$, $p \in S_n$. Da $l_q(p) \geq 0$ für alle $p \in S_n$ und $l_q(q) = 0$ (leere Indexmenge), ist auch $V_q(p) \geq 0$ für alle $p \in S_n$ und $V_q(p) = 0 \iff p = q$. Die Funktion V_q ist stetig differenzierbar auf der relativ offenen Menge $S_n(q) := \{p \in S_n : T(q) \subseteq T(p)\} = \{p \in S_n : d_q(p) < \infty\}$.

Lemma 2. *Es sei $q \in S_n$ ein Equilibrium von $\dot{p}_i = p_i(\phi_i(p) - \phi(p))$ ($i = 1, \dots, n$). Dann gibt es ein $\delta(q) > 0$, sodass*

$$\dot{V}_q(p) \leq \phi(p) - \phi(q)$$

für alle $p \in S_n$ mit $|p - q|_2 < \delta(q)$.

Beweis. Sei $p \in S_n(q)$. Da F symmetrisch ist gilt: $\sum_{i \in T(q)} q_i \phi_i(p) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n q_i f_{ij} p_j = \sum_{j=1}^n (\sum_{i=1}^n f_{ji} q_i) p_j = \sum_{j=1}^n p_j \phi_j(q)$. Damit kommt man auf folgende Ungleichung:

$$\begin{aligned} \dot{d}_q(p) &= - \sum_{i \in T(q)} \frac{q_i}{p_i} p_i [\phi_i(p) - \phi(p)] = - \sum_{i \in T(q)} q_i [\phi_i(p) - \phi(p)] = \phi(p) - \sum_{j=1}^n p_j \phi_j(q) \\ &= \phi(p) - \phi(q) + \sum_{j=1}^n p_j [\phi(q) - \phi_j(q)] \leq \phi(p) - \phi(q) + \sum_{j \in J_-} p_j [\phi(q) - \phi_j(q)] \end{aligned}$$

denn nach der Definition von J_0 und J_+ ist $\sum_{j \in J_0 \cup J_+} p_j [\phi(q) - \phi_j(q)] \leq 0$. Da $q \in S_n(q)$ und $S_n(q)$ in S_n relativ offen ist, gibt es ein $\delta_0 > 0$ mit $p \in S_n(q)$, falls $p \in S_n$ und $|p - q|_2 \leq \delta_0$. Außerdem gibt es wegen der Stetigkeit von $\phi - \phi_j, j = 1, \dots, n$ in q ein $\delta \in (0, \delta_0)$, sodass für alle $p \in S_n$ gilt:

$$|p - q|_2 < \delta \Rightarrow \phi(p) - \phi_j(p) \geq \frac{3}{4} [\phi(q) - \phi_j(q)], j = 1, \dots, n.$$

Mit $p \in S_n$ und $|p - q|_2 < \delta$ folgt dann

$$\dot{l}_q(p) = \sum_{j \in J_-} p_j [\phi_j(p) - \phi(p)] \leq -\frac{3}{4} \sum_{j \in J_-} p_j [\phi(q) - \phi_j(q)].$$

$$\dot{V}_q(p) = \dot{d}_q(p) + 2\dot{l}_q(p) = \phi(p) - \phi(q) - \frac{1}{2} \sum_{j \in J_-} p_j [\phi(q) - \phi_j(q)] \leq \phi(p) - \phi(q).$$

□

Damit kann nun der Konvergenzsatz bewiesen werden:

Beweis. Konvergenzsatz. $p_0 \in S_n$ sei ein beliebiger Anfangswert von 10 und $p(t)$ die entsprechende Lösung. $p(t)$ existiert global nach rechts (Lemma 1) und $\forall t \geq 0$ gilt $p(t) \in S_n$. Die Limesmenge $\omega^+(p_0)$ enthält also mindestens einen Punkt $q \in S_n$, ein Equilibrium (Fisher, Salle). Es muss nun gezeigt werden, dass $\omega^+(p_0) = \{q\}$ gilt.

Es gelte $0 < \delta < \delta_0$. Aus $|p - q|_2 \leq \delta_0$ folgt $p \in S_n(q) \forall p \in S_n$. Nach 14 und der Definition von $V_q(p)$ gibt es ein $\epsilon > 0$ mit $G_\epsilon := \{p \in S_n : V_q(p) < \epsilon\} \subseteq \{p \in S_n : |p - q|_2 < \delta\}$.

Sei $p(t) \neq q \forall t \geq 0$. $\phi(p(t))$ ist streng monoton wachsend (11), und es gilt $\phi(p(t)) < \phi(q)$ für alle $t \geq 0$. Da $q \in \omega^+(p_0)$, $V_q(q) = 0$ und V_q in q stetig gibt es ein $t_* > 0$, sodass $p(t_*) \in G_\epsilon$. Mit einem Widerspruchsbeweis lässt sich dann zeigen, dass daraus $p(t) \in G_\epsilon \forall t \geq t_*$ folgt. Für $p(t) \equiv q$ ist nichts zu zeigen.

Mit Lemma 2 folgt aus $p(t) \in G_\epsilon \subseteq \{p \in S_n : |p - q|_2 < \delta\} \forall t \geq t_*$, dass $V_q(p(t))$ in $[t_*, \infty)$ streng fallend ist. Da $V_q \geq 0$ gilt, existiert der Grenzwert $V_\infty := \lim_{t \rightarrow \infty} V_q(p(t))$ und wegen $q \in \omega^+(p_0)$ gibt es eine Folge $(t_k) \subset [0, \infty)$ mit $t_k \rightarrow \infty$ und $p(t_k) \rightarrow q$ für $k \rightarrow \infty$. Es gilt also $V_\infty = V_q(q) = 0$. Die Konvergenz von $p(t)$ gegen q für $t \rightarrow \infty$ folgt nun wegen $V_\infty = 0$, denn V_q ist in $S_n(q)$ stetig und $V_q(p) = 0 \Leftrightarrow p = q$. □

5 Equilibria

$p \in S_n$ ist genau dann Equilibrium von $\dot{p}_i = p_i (\phi_i(p) - \phi(p))$ ($i = 1, \dots, n$), wenn

$$p_i = 0 \text{ oder } \phi_i(p) = \phi(p) \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} \quad \text{gilt.} \quad (15)$$

E sei die Menge aller Gleichgewichtspunkte von $\dot{p}_i = p_i (\phi_i(p) - \phi(p))$ ($i = 1, \dots, n$). Sie enthält alle Ecken des Simplex S_n und besitzt höchstens $2^n - 1$ Elemente (falls E endlich ist).

Es sei $f_{ii} > 0$, $p \in \text{int} S_n$ ($T(p) = \{1, \dots, n\}$) und $e = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^n$. Dann gilt

$$(15) \iff Fp = \phi(p)e. \quad (16)$$

Diese Gleichung sei erfüllt, dann gilt für $y := p/\phi(p) \in (0, \infty)^n$ $Fy=e$. Gilt umgekehrt $Fy=e$ für ein $y \in (0, \infty)^n$, dann ist $\langle y, Fy \rangle = \langle e, y \rangle > 0$ und für $p := y/\langle e, y \rangle \in S_n \cap (0, \infty)^n$ ist 16 erfüllt, denn

$$Fp = \frac{Fy}{\langle e, y \rangle} = \frac{Fy}{\langle y, Fy \rangle} = \frac{\langle y, Fy \rangle e}{\langle y, Fy \rangle^2} = \langle p, Fp \rangle e = \phi(p)e.$$

Für alle $i \in T(p)$ gilt im Allgemeinen (15), falls $\phi_i(p) = \phi(p)$. Das System lässt sich also auf ein System der Dimension $k=\dim T(p)$ reduzieren: $\tilde{p}$ entstehe durch Streichen der Nulleinträge aus p , $\tilde{F}$ aus F durch Streichen der den Nulleinträgen von p entsprechenden Zeilen und Spalten und $\tilde{e}$ aus e durch Streichen der den Nulleinträgen von p entsprechenden Zeilen. Dann folgt:

Satz 9 Satz über die Equilibria. *Es sei $f_{ii} > 0$ für alle $i \in \{1, \dots, n\}$, $p \in S_n$ und $k = \dim T(p)$. Dann gilt die Äquivalenz*

$$p \in E \iff \exists y \in (0, \infty)^k : \tilde{F}y = \tilde{e} \text{ und } p_i = \frac{y_i}{\langle \tilde{e}, y \rangle} \quad \forall i \in T(p)$$

Insbesondere ist für jede Trägermenge $\emptyset \neq T \subseteq \{1, \dots, n\}$ die Menge $\{p \in E : T(p) = T\}$ konvex; E ist also eine endliche Vereinigung von konvexen Mengen.

Beispiel: $\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix}$ Lösen des Systems $Fy = e$ in $(0, \infty)^3$ führt auf $y = (\alpha, \frac{1}{3} - \alpha, \frac{1}{3})$, $\alpha \in (0, \frac{1}{3})$.

Mit $\langle e, y \rangle = \frac{2}{3}$ und $\beta = 3\alpha$ folgt

$$E \cap \text{int}S_3 = \left\{ \frac{1}{2}(\beta, 1 - \beta, 1) : \beta \in (0, 1) \right\}. \quad (17)$$

Für $T(p) = \{1, 3\}$ und $T(p) = \{2, 3\}$ ist $\tilde{F} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$. Lösen des Systems $\tilde{F}y = (1, 1)^T$ in $(0, \infty)^2$ führt zu den Endpunkten der Strecke 17.

Für $T(p) = \{1, 2\}$ ist $\tilde{F} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$ und man erhält als Lösung des Systems $\tilde{F}y = (1, 1)^T$ in $(0, \infty)^2$ $\{p \in S_3 : p_3 = 0\}$.

Daraus folgt $E = \{(0, 0, 1)\} \cup \{\frac{1}{2}(\beta, 1 - \beta, 1) : \beta \in [0, 1]\} \cup \{(\beta, 1 - \beta, 0) : \beta \in [0, 1]\} =: E_1 \cup E_2 \cup E_3$.

Dabei ist $\phi((0, 0, 1)) = 1$, $\phi(p) = \frac{3}{2} \quad \forall p \in E_2$ und $\phi(p) = 1 \quad \forall p \in E_3$, die mittlere Fitness ist also auf den Zusammenhangskomponenten von E konstant.

Lemma 3. *Die mittlere Fitness ist auf jeder Zusammenhangskomponente von E konstant.*

Beweis. O.B.d.A. gilt $T = \{1, \dots, n\}$. Mit dem Satz von Taylor gilt

$$\phi(x) = \phi(y) + 2\langle Fy, x - y \rangle + \langle x - y, F(x - y) \rangle, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n. \quad (18)$$

Es gelte $Fp = \phi(p)e$ und $Fq = \phi(q)e$ also $p, q \in E \cap \text{int}S_n$. Mit $x = p$ und $y = q$ eingesetzt in 18 ergibt sich

$$\begin{aligned} \phi(p) &= \phi(q) + 2\langle Fq, p - q \rangle + \langle p - q, F(p - q) \rangle \\ &= \phi(q) + 2\phi(q) \underbrace{\langle e, p - q \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle p - q, e \rangle}_{=0} [\phi(p) - \phi(q)] = \phi(q). \end{aligned}$$

Diese Aussage stimmt auch, wenn der Abschluss von $[p \in E; T(p) = T]$ betrachtet wird, da ϕ stetig ist. $\square$

6 Stabilität der Equilibria

In diesem Kapitel sollen die Gleichgewichtspunkte von (10) auf Stabilität hin untersucht werden. Doch was genau ist mit Stabilität eigentlich gemeint?

In seinen Gleichgewichtspunkten kommt ein System praktisch zu einem Halt, Änderungen laufen zwar immer noch ab, doch gleichen sie sich gegenseitig aus. Die Frage ist nun, ob ein System diese Gleichgewichtspunkte erreicht und wenn ja, was passiert, wenn es dann gestört wird? Stabilität bedeutet in etwa, dass sich das System nach einer Störung wieder auf diese Equilibria zu bewegt, also wieder in den Ausgangszustand zurückkehrt.

Man kann mehrere Arten von Stabilität unterscheiden:

- *lokale Stabilität:*
Wird die Ruhelage des Systems leicht gestört, so kehrt das System wieder zum Gleichgewichtspunkt zurück.
- *globale Stabilität:*
Das System kehrt auch nach großen Abweichungen immer wieder in den Ausgangszustand zurück. Ein Equilibrium ist also global stabil, falls das System immer in ihm mündet.
- *asymptotische Stabilität:*
Das System erreicht den Gleichgewichtspunkt oder umkreist ihn sozusagen, ohne ihn zu erreichen.

Im Folgenden werden wir nun die Stabilität der Equilibria in drei Sätzen auf verschiedene Weise charakterisieren:

Satz 10 Erster Stabilitätssatz: (*Charakterisierung mit Hilfe der mittleren Fitness ϕ*)

Es sei $q \in S_n$ ein Equilibrium von (10). Dann gelten:

- (i) *q ist genau dann in S_n stabil, wenn ϕ bei q ein lokales Maximum besitzt.*
- (ii) *q ist genau dann in S_n asymptotisch stabil, wenn ϕ bei q ein striktes lokales Maximum besitzt.*

Beweis. (i) $\Leftarrow$

Für diesen Teil des Beweises wurde ausgenutzt, dass ein Equilibrium q stabil ist, wenn es zu jedem $\epsilon > 0$ ein $\delta > 0$ gibt, so dass $q(t, q_0) \in B_\epsilon(q)$ für alle $t \geq 0$ gilt, sofern der Anfangswert $q_0 \in B_\delta(q)$ erfüllt. Mit den Resultaten aus Abschnitt 26, geeigneter Wahl der Mengen und aufgrund der Definition von V_q folgt die Behauptung.

$\Rightarrow$

Mit geeignet gewähltem ϵ erhalten wir die Menge $E \cap B_\epsilon(q)$, die q enthält. Aufgrund der Stabilität von q gilt für jedes beliebige $p_0 \in B_{\delta_1}(q) \cap S_n$ mit $\delta_1 > 0$ dann $p(t; p_0) \in B_{\epsilon/2}(q) \cap S_n$ für alle $t \geq 0$. Mit dem Fundamentalsatz von Fisher und dem Lemma aus Kapitel 27 erhalten wir dann $\phi(p_0) = \phi(p(0; p_0)) \leq \phi(p_\infty) = \phi(q)$ mit $p_\infty := \lim_{t \rightarrow \infty} p(t; p_0) \in E \cap B_\epsilon(q)$. p_0 war beliebig, also hat ϕ bei q ein lokales Maximum.

(ii) $\Leftarrow$

Für diesen Teil des Beweises wird *Ljapunovs direkte Methode* verwendet, die hier kurz vorgestellt werden soll:

Gilt

1. q ist ein Equilibrium
 2. V_q ist eine Ljapunov-Funktion
 3. V_q besitzt an q ein striktes Minimum
 4. auf einer Umgebung von q gilt: $\dot{V}_q < 0$
- Dann ist q asymptotisch stabil.

In unserem Fall gilt 1. nach Voraussetzung. 2.: Eine Funktion ist eine Ljapunov-Funktion, wenn gilt: $\dot{V}_q \leq 0$. Ist gegeben, denn auf Grund der Annahme, dass ϕ bei q ein striktes lokales Maximum besitzt und mit Hilfe des Lemmas aus Kapitel 26, gilt: $\dot{V}_q(p) \leq \phi(p) - \phi(q) < 0$ für alle $p \in B_\delta(q) \cap S_n \setminus \{q\}$. 3. gilt wegen $V_q \geq 0$ und $V_q(p) = 0 \Leftrightarrow p = q$. 4. gilt wieder wegen $\dot{V}_q(p) \leq \phi(p) - \phi(q) < 0$ für alle $p \in B_\delta(q) \cap S_n \setminus \{q\}$. Damit ist also die $\Leftarrow$ Richtung bewiesen.

$\Rightarrow$

Ist q in S_n asymptotisch stabil, dann muss q ein isoliertes Equilibrium sein. Die Behauptung folgt dann mit dessen Eigenschaften und dem Fundamentaltheorem von Fisher. $\square$

Folgerung:

Es sei $q \in S_n$ ein stabiles Equilibrium von (10). Dann gibt es ein $\epsilon > 0$, sodass alle Equilibria in $B_\epsilon(q) \cap S_n$ stabil sind.

Der Beweis erfolgt mit dem ersten Stabilitätssatz und dem Lemma aus Kapitel 27.

Satz 11 Zweiter Stabilitätssatz: (globale Stabilität)

Es sei $q \in \text{int}S_n$ ein Equilibrium von (10). Ist q asymptotisch stabil, so ist q bereits global asymptotisch stabil in $\text{int}S_n$. Insbesondere gilt in diesem Fall $E \cap \text{int}S_n = \{q\}$.

Beweis. Aus dem ersten Stabilitätssatz folgt, dass ϕ bei q ein striktes lokales Maximum besitzt. Mit Hilfe von Ergebnissen aus den vorherigen Kapiteln folgt, dass $\phi(q) > \phi(p)$ für alle $p \in S_n \setminus \{q\}$ gilt, also ϕ in q das globale Maximum auf S_n annimmt. Außerdem folgt aus Abschnitt 26 weiter, dass $\dot{d}_q(p) = \phi(p) - \phi(q) \leq 0$ für alle $p \in \text{int}S_n$ mit strikter Ungleichung im Fall $p \neq q$. Das bedeutet, dass d_q eine strikte Ljapunov - Funktion im Innern von S_n ist, also ist S_n positiv invariant, da $d_q(p) \rightarrow \infty$ für $p \rightarrow \text{Rand von } S_n$. Mit dem Satz von La Salle folgt die Behauptung. $\square$

Jetzt wollen wir die Stabilität der Equilibria mit Hilfe der Matrix F charakterisieren. Dies führt uns dann später zum dritten Stabilitätssatz.

Bevor wir auf den allgemeineren Fall übergehen, betrachten wir zunächst nur den Fall eines vollständig polymorphen Equilibriums $q \in \text{int}S_n$. Unter der Annahme $f_{ij} > 0$ gilt nach dem ersten Stabilitätssatz: q stabil $\Leftrightarrow \phi$ besitzt bei q ein lokales Maximum $\Leftrightarrow \langle z, Fz \rangle \leq 0$ für alle $z \in e^\perp$ mit der Nebenbedingung $\langle z, Fq \rangle = 0$. Mit aus der linearen Algebra bekannten Ergebnissen folgt, dass obige Gleichung äquivalent ist zu:

$$y_1^2 + \dots + y_k^2 - y_{k+1}^2 - \dots - y_{k+m}^2 \leq 0 \quad (19)$$

für alle $y \in \mathbb{R}^n$ mit

$$a_1 y_1 + \dots + a_k y_k - a_{k+1} y_{k+1} - \dots - a_{k+m} y_{k+m} = 0 \quad (20)$$

Dabei ist k die Anzahl der positiven, m die Anzahl der negativen Eigenwerte (sind alle reell und die Vielfachheiten mitgezählt), Q das Produkt einer orthogonalen Matrix Q_1 und einer Diagonalmatrix

mit positiven Elementen auf der Hauptdiagonalen, $y = Q^{-1}z$ und $a = Q^{-1}q$.

Wegen des Satzes von Perron-Frobenius gilt $k \geq 1$. Durch die Bildung eines einfachen Gegenbeispiels kann man außerdem leicht erkennen, dass $k \geq 2$ nicht gelten kann. Also gilt hier $k = 1$.

Sei nun $k = 1$ und $m = 0$. Die Gleichung (20) reduziert sich dann auf $a_1 y_1 = 0$, d.h. $y_1 = 0$, da $a_1 > 0$. Damit gilt (19). Wir nehmen also im Folgenden $m \geq 1$ an.

Damit ist (20) in unserem Fall

$$a_1 y_1 = a_2 y_2 + \dots + a_{k+1} y_{m+1}$$

Und durch Anwendung der Cauchy-Schwarzen-Ungleichung erhalten wir $\langle z, Fz \rangle \leq 0$, falls $\langle q, Fq \rangle \geq 0$, was ja der Fall ist.

Wir haben also gezeigt, dass q genau dann stabil ist, wenn F genau einen positiven Eigenwert besitzt ($k=1$ und $m \geq 0$).

Ist q asymptotisch stabil, dann ist es ein isoliertes Equilibrium und F nach dem Satz über die Equilibria invertierbar. Diskutiert man $\langle z, Fz \rangle < 0$ für alle $z \in e^\perp \setminus \{0\}$ in analoger Weise wie oben, so erhält man: q ist genau dann asymptotisch stabil, wenn F einen positiven und $n - 1$ negative Eigenwerte besitzt.

Nun betrachten wir nicht mehr ein vollständig polymorphes Equilibrium, sondern ein Equilibrium q mit $T(q) \neq \{1, \dots, n\}$. Sei $p \in S_n$, $z := p - q$ und κ die Dimension von $T(q)$, außerdem $\tilde{F}$ und $\tilde{e}$ wie in Kapitel 27 definiert und $\tilde{z}$ durch Streichen der den Nulleinträgen von q entsprechenden Komponenten aus z entstanden. Wir erhalten folgendes:

Hat ϕ bei q ein lokales Maximum, so gilt:

$$\alpha_j := \phi_i(q) - \phi(q) \leq 0 \text{ für alle } i \notin T(q) \text{ und } \langle \tilde{z}, \tilde{F}\tilde{z} \rangle \leq 0 \text{ für alle } \tilde{z} \in \mathbb{R}^\kappa \text{ mit } \langle \tilde{e}, \tilde{z} \rangle = 0.$$

Wir wissen bereits aus dem Fall des vollständig polymorphen Equilibriums, dass dies äquivalent dazu ist, dass $\tilde{F}$ genau einen positiven Eigenwert besitzt. Das alles reicht aber noch nicht für die Stabilität von q .

Wir beschränken uns auf den Fall $\alpha_j := \phi_i(q) - \phi(q) \neq 0$ für alle $i \notin T(q)$, q ist also nicht ausgeartet.

Dann folgt aus der Stabilität von q : $\alpha_i < 0$ für alle $i \notin T(q)$ und $\tilde{F}$ hat genau einen positiven Eigenwert.

Jetzt soll noch die Umkehrung gezeigt werden: Gelte also Obiges, dann folgt wegen der Identität aus Kapitel 27 mit hinreichend klein gewählten positiven Konstanten β und δ_1 und $T(q) = \{1, \dots, \kappa\}$,

$\tilde{z} = (z_1, \dots, z_\kappa)^T$ und $\hat{z} = \sum z_i, i \notin T(q)$:

$$\phi(p) - \phi(q) \leq -\beta \hat{z} + \langle \tilde{z}, \tilde{F}\tilde{z} \rangle$$

für alle $(\tilde{z}, \hat{z}) \in \mathbb{R}^{\kappa+1}$ mit $|(\tilde{z}, \hat{z})|_l \leq \delta_1, l \in \{1, \dots, n\}$

$\tilde{F}$ wird nun analog zu F diagonalisiert und mit denselben Bezeichnungen erhalten wir:

$$-\beta \hat{z} + \langle \tilde{z}, \tilde{F}\tilde{z} \rangle = -\beta \hat{z} + y_1^2 - y_2^2 - \dots - y_{m+1}^2 \text{ mit } a_1 y_1 - a_2 y_2 - \dots - a_{m+1} y_{m+1} = -\phi(q) \hat{z} \leq 0$$

Im Fall $m=0$ haben wir $a_1 y_1 = -\phi(q) \hat{z} \leq 0$ und damit $-\beta \hat{z} + \langle \tilde{z}, \tilde{F}\tilde{z} \rangle \leq 0$, falls $\hat{z}$ hinreichend klein ist.

Im Fall $m \geq 1$ gilt mit der Cauchy-Schwarzen-Ungleichung $-\beta \hat{z} + \langle \tilde{z}, \tilde{F}\tilde{z} \rangle \leq 0$, falls $|y|$ und $\hat{z}$ hinreichend klein sind. Da wir uns auf den generischen Fall beschränkt haben, folgt dass ϕ bei q ein lokales Maximum besitzt und damit nach dem ersten Stabilitätssatz stabil ist. Wir haben also die Umkehrung gezeigt.

Analog zeigt man, dass q genau dann asymptotisch stabil ist, wenn $\tilde{F}$ einen positiven und $\kappa - 1$ negative Eigenwerte besitzt.

Zusammengefasst erhalten wir den dritten Stabilitätssatz:

Satz 12 Dritter Stabilitätssatz: (Charakterisierung mit Hilfe der Matrix F)

Es sei $q \in S_n$ ein nicht ausgeartetes Equilibrium von (10). Weiter sei $\kappa = \dim T(q)$ und $\tilde{F} \in \mathbb{R}^{\kappa \times \kappa}$ wie im Satz über die Equilibria. Dann gelten:

(i) q ist genau dann in S_n stabil, wenn $\phi_i(q) < \phi(q)$ für alle $i \notin T(q)$ gilt, und $\tilde{F}$ genau einen positiven Eigenwert besitzt.

(ii) q ist genau dann in S_n asymptotisch stabil, wenn $\phi_i(q) < \phi(q)$ für alle $i \notin T(q)$ gilt, und $\tilde{F}$ genau einen positiven und $\kappa - 1$ negative Eigenwerte besitzt.

Man beachte, dass Ausartung im obigen Sinne nur am Rand von S_n auftreten kann. Zum Abschluss des Kapitels wollen wir noch folgenden Satz einführen:

Satz 13 Satz über das Aussterben von Allelen:

Besitzt die Fitnessmatrix F l positive Eigenwerte und sind alle führenden Hauptminoren von 0 verschieden, dann fehlen bei jedem stabilen Equilibrium von (10) mindestens $l - 1$ Allele.

Beweis. Ist q stabil, so besitzt $\tilde{F}$ genau einen positiven Eigenwert. Hat F l positive Eigenwerte und sind alle führenden Hauptminoren von 0 verschieden, so hat die Hauptuntermatrix mindestens $l - (n - \kappa)$ positive Eigenwerte. Damit gilt aber $l - (n - \kappa) \leq 1$, d. $n - \kappa \geq l - 1$. $\square$

7 Der Fall zweier Allele

Im Folgenden soll (10) für den Fall zweier Allele auf Stabilität untersucht werden. Das bedeutet also, dass ein Gen mit Wahrscheinlichkeit x in Ausprägungsform 1 und mit Wahrscheinlichkeit $1 - x$ in Ausprägungsform 2 vorkommt. Deswegen kann für $n = 2$ nun $p = (x, 1 - x)$ gesetzt werden. Desweiteren gilt aufgrund der Symmetrie der Fitnessmatrix F $f_{12} = f_{21}$, somit ist:

$$\phi_1 = f_{11}x + f_{12}(1 - x) \quad \text{und} \quad \phi_2 = f_{12}x + f_{22}(1 - x)$$

und damit:

$$\dot{x} = x(1 - x)(\phi_1(x) - \phi_2(x)) \tag{21}$$

Aus dieser Gleichung kann man direkt ablesen, dass die Häufigkeit des Allels A_1 genau dann zunimmt, wenn $\phi_1(x) > \phi_2(x)$ gilt, also - biologisch interpretiert - die Fitness von A_1 größer als die von A_2 ist.

Die Menge der für uns interessanten Equilibria sind gerade die Nullstellen der Gleichung (21), also

$$x = 0, x = 1 \text{ und } x_* = \frac{f_{22}-f_{12}}{(f_{11}-f_{12})+(f_{22}-f_{12})} \quad (\text{ mit } f_{11} - f_{12} \neq f_{12} - f_{22})$$

Außerdem gilt: $\phi(x) = x\phi_1(x) + (1-x)\phi_2(x)$ und damit $\dot{\phi}(x) = 2(f_{12} - f_{22} + x(f_{11} - f_{12} + f_{22} - f_{12}))$

Mit diesem Vorwissen wollen wir nun die Stabilität der Equilibria untersuchen. Dazu betrachten wir 4 verschiedene Fälle, wobei Grenzfälle außer Acht gelassen werden:

- Fall I: $f_{11} < f_{12} < f_{22}$
Aufgrund des Fundamentaltheorems von Fisher gilt $\dot{\phi}(x) < 0$ in ganz $[0, 1]$. ϕ ist also in dem Intervall streng monoton fallend und nimmt damit sein Maximum in $x = 0$ an. Mit dem ersten Stabilitätssatz folgt, dass $x = 0$ asymptotisch stabil und $x = 1$ instabil ist. x_* existiert in diesem Fall in $(0, 1)$ nicht. Alle Lösungen, die in $(0, 1)$ starten, konvergieren gegen das stabile Equilibrium $x = 0$. Es gilt in diesem Fall $\phi_1 < \phi_2$, das bedeutet eine Dominanz des Allels A_2 , da es die größere Fitness besitzt.
- Fall II: $f_{22} < f_{12} < f_{11}$
Hier gilt $\dot{\phi}(x) > 0$ in ganz $[0, 1]$. Analog zu Fall I ergibt sich damit asymptotische Stabilität von $x = 1$, Instabilität von $x = 0$ und Dominanz des Allels A_1 . x_* existiert auch hier in $(0, 1)$ nicht.
- Fall III: $f_{11}, f_{22} < f_{12}$
In Fall III ist $\phi(x)$ eine nach unten geöffnete Parabel mit Scheitelpunkt x_* , das heißt Maximum in x_* in $(0, 1)$. Mit dem ersten und zweiten Stabilitätssatz folgt global asymptotische Stabilität von x_* . Alle anderen Equilibria sind damit instabil. Wegen $f_{12} > f_{11}, f_{22}$ hat der heterozygote Genotyp die größte Fitness (Überdominanz oder Heterosis).
- Fall IV: $f_{11}, f_{22} > f_{12}$
 $\phi(x)$ ist eine nach oben geöffnete Parabel mit Scheitelpunkt x_* , das heißt Minimum in x_* in $(0, 1)$, damit ist x_* instabil. Unterhalb von x_* konvergieren die Lösungen gegen $x = 0$ und oberhalb gegen $x = 1$. Daraus folgt die asymptotische Stabilität von $x = 0$ und $x = 1$. Wegen $f_{11}, f_{22} > f_{12}$ ist hier der homozygote Genotyp am fittesten (Unterdominanz).

8 Beispiele im Fall dreier Allele

In diesem Kapitel wollen wir anhand einiger konkreter Beispiele Stabilität der Equilibria im Fall $n = 3$ betrachten.

(A) Ein stabiler Polymorphismus im Innern

Gegeben sei die Fitnessmatrix

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 3 & 1 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

Als Equilibria von 10 im Simplex S_3 erhalten wir nach Kapitel 27:

die Eckpunkte $(0, 0, 1)$, $(0, 1, 0)$ und $(1, 0, 0)$, außerdem $E_1 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $E_2 = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ und $E_3 = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ auf den Kanten und den vollständigen Polymorphismus $E_4 = (\frac{2}{7}, \frac{3}{7}, \frac{2}{7})$ im Innern.

Um auf Stabilität zu untersuchen, wollen wir den dritten Stabilitätssatz verwenden. Wir beginnen mit der Ecke $q = (1, 0, 0)$:

Hier ist $T(q) = \{1\}$. Für die $\phi_i(x)$ erhalten wir $\phi_1(x) = 1$, $\phi_2(x) = 3$ und $\phi_3(x) = 2$.

Damit ist $\phi(x) = 1$. Was bedeutet, dass $\phi_2(x), \phi_3(x) > \phi(x)$. Nach dem dritten Stabilitätssatz ist $(1, 0, 0)$ somit instabil. Analog sind auch die übrigen Ecken und die Kantenpunkte E_1, E_2, E_3 instabil.

Betrachten wir nun also E_4 : $T(E_4) = \{1, 2, 3\}$. Es existiert somit kein $i \notin T(E_4)$, wir betrachten daher gleich die Eigenwerte von F . Diese sind $2 + \sqrt{19}$, $2 - \sqrt{19}$ und -1 . Das heißt wir haben einen positiven und zwei negative Eigenwerte. Damit ist E_4 nach Teil (ii) des dritten Stabilitätssatzes asymptotisch stabil und nach dem zweiten Stabilitätssatz folgt daraus auch die globale Stabilität im Innern von S_3 .

(B) Ein global stabiler Polymorphismus auf dem Rand

Gegeben sei die Fitnessmatrix

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 3 \\ 2 & 3 & 1.5 \end{pmatrix}$$

Neben den drei Eckpunkten haben wir dieses Mal nur noch die drei Kantenpunkte $E_1 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $E_2 = (0, \frac{3}{7}, \frac{4}{7})$ und $E_3 = (\frac{1}{3}, 0, \frac{2}{3})$ als Equilibria. Die Eckpunkte und E_1 und E_3 sind aus dem gleichen Grund wie in (A) nach dem dritten Stabilitätssatz instabil. Untersuchen wir daher E_2 :

Es gilt:

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= 1 \cdot 0 + 2 \cdot \frac{3}{7} + 2 \cdot \frac{4}{7} = 2 \\ \phi_2(x) &= \frac{3}{7} + \frac{12}{7} = \frac{15}{7} \\ \phi_3(x) &= \frac{9}{7} + \frac{6}{7} = \frac{15}{7} \\ \text{und damit } \phi(x) &= 0 \cdot 2 + \frac{3}{7} \cdot \frac{15}{7} + \frac{4}{7} \cdot \frac{15}{7} = \frac{105}{7} \end{aligned}$$

Wegen $T(E_2) = \{2, 3\}$ muss nur $\phi_1 < \phi$ gelten. Das ist erfüllt, betrachten wir also die Eigenwerte der zu E_2 gehörigen Matrix $\tilde{F} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 3 & 1.5 \end{pmatrix}$: Diese sind mit 4.5 und -2 ein positiver und ein negativer Eigenwert. Also ist E_2 nach Teil (ii) des dritten Stabilitätssatzes asymptotisch stabil.

(C) Bistabilität

Gegeben sei die Fitnessmatrix

$$F = \begin{pmatrix} 1.5 & 1 & 3 \\ 1 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Neben den drei Ecken erhalten wir folgende Equilibria: $E_1 = (\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0)$, $E_2 = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $E_3 = (\frac{2}{5}, 0, \frac{3}{5})$ und auf dem Inneren von S_3 : $E_4 = (\frac{2}{12}, \frac{7}{12}, \frac{3}{12})$

Mit den gleichen Berechnungen wie oben erhalten wir aufgrund des dritten Stabilitätssatzes asymptotische Stabilität für $(0, 1, 0)$ und E_3 . Wir haben also genau zwei stabile Equilibria, gegen die die Anfangswerte konvergieren.

(D) Tristabilität

Gegeben sei die Fitnessmatrix

$$F = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1.2 & 1 \\ 1 & 1 & 1.5 \end{pmatrix}$$

Equilibria sind die Eckpunkte und $E_1 = (\frac{1}{6}, \frac{5}{6}, 0)$, $E_2 = (0, \frac{5}{7}, \frac{2}{7})$, $E_3 = (\frac{1}{3}, 0, \frac{2}{3})$ und $E_4 = (\frac{1}{8}, \frac{5}{8}, \frac{2}{8})$.

Alle Eigenwerte der Matrix F sind positiv und außerdem alle führenden Hauptminoren $\neq 0$, damit sind nach dem Satz über das Aussterben von Allelen alle E_i , $i=1, \dots, 4$ instabil. Die Eckpunkte hingegen sind mit Berechnungen analog zu den ersten Beispielen alle drei stabil in S_3 . Damit konvergieren die Anfangswerte gegen einen der drei Eckpunkte.

Anmerkung:

In den Fällen (C) und (D) gibt es jeweils mindestens eine sogenannte Separatrix, eine Lösungskurve, die die Lösungen mit verschiedenem Konvergenzverhalten (jeweils gegen eines der stabilen Equilibria) von einander abgrenzt. Die Aussagen über die Konvergenz der Anfangswerte beziehen sich daher nur auf diejenigen, die nicht auf eine dieser Separatrizen liegen.

Literaturverzeichnis

1. W. Prüss, Roland Schnaubelt, Rico Zacker - Mathematische Modelle in der Biologie - Birkhäuser (2008)
2. <http://www.zaik.uni-koeln.de/AFS/Projects/MultiMedia/TEMPI/modell/dg!Text.html>
3. <http://www.math.uni-hamburg.de/home/ortlieb/vw1/skript2.pdf>
4. www.wikipedia.de
5. <http://de.wikipedia.org/wiki/Stabilitätstheorie>
6. Abitur Training Biologie - Werner Bils

Enzyme

Anna-Katharina Bayer und Birgit Kröner

`anna-katharina.bayer@uni-ulm.de` und `birgit.kroener@uni-ulm.de`

1 Einleitung

Enzyme sind Protein-Moleküle, die in allen lebenden Organismen vorkommen. Sie katalysieren häufig biochemische Reaktionen, die sonst beispielsweise aufgrund zu niedriger Temperaturen im Organismus nicht ablaufen würden. Somit gehören Enzyme zu den wichtigsten biochemisch wirksamen Substanzen. In diesem Kapitel soll zunächst die Kinetik chemischer Reaktionen anhand zweier einfacher Reaktionstypen erläutert und modelliert werden, bevor im darauffolgenden Abschnitt die Modellierung und Diskussion einer allgemeinen Enzymreaktion erfolgt.

Der nachfolgende Abschnitt beschäftigt sich mit der Inhibierung enzymatischer Reaktionen. Hier soll die Hemmung der Reaktion durch einen kompetitiven Hemmstoff diskutiert und modelliert werden. Der letzte Abschnitt behandelt schließlich die Aktivierung von Enzymreaktionen.

Sowohl Inhibierung, als auch Aktivierung dienen der Kontrolle enzymatischer Reaktionen. Ohne diese beiden Mechanismen wäre es unmöglich, Enzymreaktionen innerhalb eines Organismus ablaufen zu lassen.

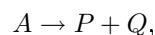
2 Chemische Kinetik

In diesem Abschnitt soll die Kinetik chemischer Reaktionen allgemein, also der Ablauf dieser Reaktionen analysiert und modelliert werden. Dazu werden im Folgenden zwei einfache Reaktionstypen, Zerfallsreaktionen und Gleichgewichtsreaktionen, näher betrachtet.

2.1 Zerfallsreaktionen

Zerfallsreaktionen beschreiben Vorgänge, bei denen eine chemische Substanz, das Edukt, in zwei oder mehr andere chemische Substanzen, die Produkte, zerfällt. Beispiele hierfür sind zum einen der radioaktive Zerfall und zum anderen der Zerfall von Wasserstoffperoxid, der zum Blondfärben von Haaren benutzt wird.

Allgemein kann man eine Zerfallsreaktion in folgender Reaktionsgleichung darstellen:



wobei A das zerfallende Edukt und P und Q die beiden entstehenden Produkte sind. Diese Zerfallsreaktion lässt sich mit folgendem System von Differenzialgleichungen modellieren:

$$\begin{aligned} \dot{c}_A &= -kc_A, & c_A(0) &= c_A^0 \\ \dot{c}_P &= kc_A, & c_P(0) &= c_P^0 \\ \dot{c}_Q &= kc_A, & c_Q(0) &= c_Q^0. \end{aligned}$$

Dabei ist c_j mit $j \in \{A, P, Q\}$ die Konzentration der jeweiligen Substanz beispielsweise in $\frac{\text{mol}}{\text{l}}$. Bei Zerfallsreaktionen ist die Reaktionsgeschwindigkeit, die durch die positive Reaktionskonstante k dargestellt wird, proportional zur Konzentration des Edukts c_A , da hierbei pro Zeitschritt immer ein fester Prozentsatz des noch vorhandenen Edukts zerfällt.

Da die letzten beiden Gleichungen bei bekanntem k nur noch von $c_A(t)$ abhängen, können diese nach Lösung der ersten Differenzialgleichung leicht mittels Integration gelöst werden. Die Lösung der ersten Gleichung lautet:

$$c_A = e^{-kt} c_A^0$$

mit einem $t \geq 0$. Für die Berechnung der Reaktionskonstanten k benötigt man die so genannte Halbwertszeit τ_H der Zerfallsreaktion. Diese beschreibt die Zeit, in der die Hälfte des Edukts A zerfallen ist. Daher gilt hier:

$$e^{-k\tau_H} = \frac{1}{2}$$

und damit:

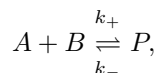
$$\tau_H = \frac{\log 2}{k}.$$

Damit lässt sich nun die Reaktionskonstante k , sowie die Lösungen $c_P(t)$ und $c_Q(t)$ der anderen beiden Differenzialgleichungen berechnen.

2.2 Gleichgewichtsreaktionen

Ein anderer einfacher und dabei sehr häufiger Reaktionstyp ist die Gleichgewichtsreaktion. Hierbei laufen zwei gegensätzliche Reaktionen, die Hin- und die Rückreaktion, gleichzeitig ab, wobei sich mit der Zeit ein Gleichgewicht, also ein stabiler Zustand einstellt. Gleichgewichtsreaktionen liegen beispielsweise bei Dissoziationen, also dem Zerfall von Salzen in wässrigen Lösungen, vor.

Allgemein lassen sich Gleichgewichtsreaktionen mit folgender Reaktionsgleichung darstellen:



wobei A und B die beiden Edukte der Hin- beziehungsweise die Produkte der Rückreaktion und P das Produkt der Hin- und das Edukt der Rückreaktion sind. Die Rückreaktion ist also wieder eine Zerfallsreaktion, während die Hinreaktion eine Synthese darstellt.

Daraus ergibt sich folgendes System von Differenzialgleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{c}_A &= -k_+ c_A c_B + k_- c_P, & c_A(0) &= c_A^0, \\ \dot{c}_B &= -k_+ c_A c_B + k_- c_P, & c_B(0) &= c_B^0, \\ \dot{c}_P &= k_+ c_A c_B - k_- c_P, & c_P(0) &= c_P^0, \end{aligned}$$

wobei die c_j mit $j \in \{A, B, P\}$ wieder die Konzentrationen der jeweiligen Substanzen sind. Die zweiten Summanden obiger Differenzialgleichungen stellen die Zerfallsreaktion, also die Rückreaktion von rechts nach links, dar. Da dies ein linearer Term ist, spricht man hier von einer Reaktion erster Ordnung. Dagegen ist die Synthesereaktion, also die Hinreaktion von links nach rechts, eine Reaktion zweiter Ordnung, da sie durch einen quadratischen Term modelliert wird. Dieser kommt zustande, da die Wahrscheinlichkeit, dass ein Molekül A mit einem Molekül B zusammentrifft und mit diesem reagiert, proportional zum Produkt der Konzentrationen beider beteiligter Spezies ist.

Zur Lösung dieses Differenzialgleichungssystems wird zunächst die erste beziehungsweise zweite Gleichung zur dritten addiert:

$$\dot{c}_A + \dot{c}_P = \dot{c}_B + \dot{c}_P = 0.$$

Daraus folgt, dass gilt:

$$c_A(t) + c_P(t) = \text{const.} = c_A^0 + c_P^0 \text{ und } c_B(t) + c_P(t) = \text{const.} = c_B^0 + c_P^0,$$

also:

$$c_A = c_A^0 + c_P^0 - c_P \text{ und } c_B = c_B^0 + c_P^0 - c_P.$$

Setzt man dies nun in die dritte Differenzialgleichung ein, so erhält man:

$$\dot{c}_P = k_+(c_A^0 + c_P^0 - c_P)(c_B^0 + c_P^0 - c_P) - k_-c_P =: r(c_P).$$

Um den stabilen Zustand im Gleichgewicht dieser Reaktion zu berechnen, muss die folgende algebraische Gleichung gelten:

$$r(c_P) = k_+(c_A^0 + c_P^0 - c_P)(c_B^0 + c_P^0 - c_P) - k_-c_P = 0.$$

Da es sich bei der Konzentration c_P um eine chemische Größe handelt, werden bei der Lösung obiger quadratischer Gleichung nur reelle Lösungen betrachtet. Eine der beiden reellen Lösungen der Gleichung ist kleiner als $a := \min \{c_A^0 + c_P^0, c_B^0 + c_P^0\}$, da dadurch das erste Produkt der Terms positiv wird und die beiden Produktterme so mit den beiden positiven Reaktionskonstanten k_+ und k_- in der Summe Null ergeben. Die zweite reelle Lösung der Gleichung ist größer als $b := \max \{c_A^0 + c_P^0, c_B^0 + c_P^0\}$, da hierdurch die beiden Klammern des ersten Produkts jeweils negativ werden und sich die beiden Produkte der Gleichung wiederum mit den positiven Reaktionskonstanten zu Null summieren.

Da jedoch nur positive Konzentrationen chemisch sinnvoll sind, muss die zweite Lösung ausgeschlossen werden. Durch diese Lösung werden wie oben beschrieben die beiden Klammern des ersten Summanden jeweils negativ. Da diese jedoch die nichtnegativen Konzentrationen c_A und c_B darstellen, ist dieser berechnete Gleichgewichtszustand zu vernachlässigen.

Die einzige relevante reelle Lösung c_P der obigen Gleichung ist also im Intervall $[0, \min \{c_A^0 + c_P^0, c_B^0 + c_P^0\}]$ zu suchen. Innerhalb dieses Intervalls gilt, dass diese Lösung $c_P(t)$ gegen den stabilen Zustand c_P^∞ für $t \rightarrow \infty$ konvergiert. Damit folgt für die Konvergenz der beiden anderen Konzentrationen $c_A(t)$ und $c_B(t)$:

$$c_A(t) \rightarrow c_A^\infty := c_A^0 + c_P^0 - c_P^\infty \text{ und } c_B(t) \rightarrow c_B^\infty := c_B^0 + c_P^0 - c_P^\infty$$

für $t \rightarrow \infty$. Die Lösung der obigen Gleichung lässt sich graphisch wie in der folgenden Abbildung 1 darstellen.

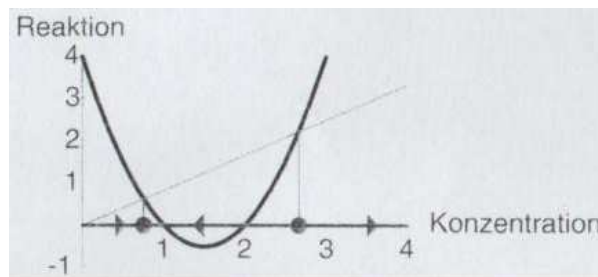


Abb. 1. Graphische Lösung der algebraischen Gleichung

Die Pfeile auf der x-Achse verdeutlichen die Stabilität der jeweiligen Gleichgewichtszustände. Es wird deutlich, dass der zuvor ausgeschlossene Zustand instabil ist, während das Gleichgewicht bei der kleineren Konzentration eine hohe Stabilität aufweist.

Im Gleichgewicht gilt nun mit den oben berechneten Konzentrationen c_P^∞ , c_A^∞ und c_B^∞ :

$$r(c_P) = k_+c_A^\infty c_B^\infty - k_-c_P^\infty = 0$$

und damit:

$$\frac{c_A^\infty c_B^\infty}{c_P^\infty} = \frac{k_-}{k_+} =: K.$$

Diese Gleichung ist das aus der Chemie bekannte Massenwirkungsgesetz. Die hier eingeführte Konstante K heißt Gleichgewichtskonstante.

3 Enzymreaktionen

Enzymreaktionen laufen typischerweise folgendermaßen ab. Ein Molekül der Substanz, die reagieren soll, im Folgenden Substrat S genannt, und ein Enzym-Molekül E koppeln sich und bilden einen so genannten Enzym-Substrat-Komplex ES . Dies ist eine Gleichgewichtsreaktion, da sich der Komplex auch wieder lösen kann. Das Substrat S im Enzym-Substrat-Komplex ES reagiert in der anschließenden Zerfallsreaktion zum Produkt P und das Enzym E wird wieder freigesetzt. Da das Enzym unverändert aus der Reaktion hervorgeht, wirkt es bei dieser als Katalysator. Eine solche Enzymreaktion ist in Abbildung 2 am Beispiel der Hydrolyse von Saccharose in Glucose und Fructose mit Hilfe des Enzyms Saccharase dargestellt.

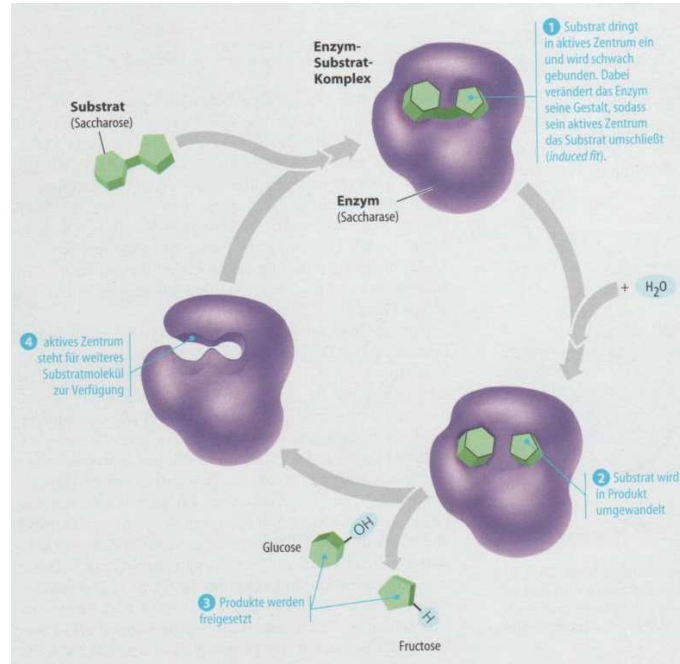
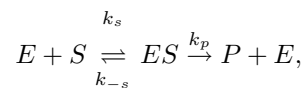


Abb. 2. Katalysezyklus eines Enzyms

Als Reaktionsgleichung der eben beschriebenen Enzymreaktion ergibt sich demnach:



Für die mathematische Formulierung dieser Reaktionsgleichung werden Variablen für die Substratkonzentration $s := [S]$, die Enzymkonzentration $e := [E]$, die Konzentration des Enzym-Substrat-Komplexes $z := [ES]$ und die Konzentration des Produkts $p := [P]$ eingeführt. Somit ergibt sich wie im vorherigen Abschnitt beschrieben folgendes System von Differenzialgleichung:

$$\begin{aligned} \dot{s} &= -k_s e s + k_{-s} z, & s(0) &= s_0, \\ \dot{e} &= -k_s e s + k_{-s} z + k_p z, & e(0) &= e_0, \\ \dot{z} &= k_s e s - k_{-s} z - k_p z, & z(0) &= z_0, \\ \dot{p} &= k_p z, & p(0) &= p_0. \end{aligned}$$

Unter der vereinfachenden Annahme, dass die oben beschriebene Enzymreaktion in einem so genannten Batch-Prozess, das heißt einem geschlossenen System abläuft, dass also weder Stoffe zugeführt noch abgezogen werden, gilt $z(0) = p(0) = 0$. Außerdem erkennt man, dass p durch Integration von z berechnet werden kann, weshalb die letzte Gleichung des Differenzialgleichungssystems ignoriert werden kann.

Addiert man nun die zweite und dritte Gleichung des obigen Systems, so erhält man:

$$\frac{d}{dt}(e + z) = 0,$$

also:

$$e(t) + z(t) \equiv e_0 + z_0 =: a_e \Leftrightarrow e(t) = a_e - z(t).$$

Die Enzymkonzentration e kann also aus dem System eliminiert werden. Dies ist auch chemisch verständlich, da die Konzentration des Enzyms aufgrund dessen katalytischer Funktion durch die Reaktion nicht verändert wird. Setzt man dies in die erste und die dritte Differenzialgleichung des Systems ein, ergibt sich das folgende zweidimensionale System:

$$\begin{aligned}\dot{s} &= -k_s(a_e - z)s + k_{-s}z, & s(0) &= s_0 \geq 0, \\ \dot{z} &= k_s(a_e - z)s - k_{-s}z - k_pz, & z(0) &= z_0 \geq 0.\end{aligned}$$

Aus Gründen der einfacheren Handhabung werden diese Differenzialgleichungen mittels $u = \frac{s}{a_s}$, $a_s := s_0 + z_0 + p_0$, $v = \frac{z}{a_e}$ und $\tau = k_s a_e t$ auf das Intervall $[0, 1]$ skaliert und man erhält:

$$\begin{aligned}\dot{u} &= -u(1-v) + \gamma_s v, & u(0) &= u_0 \in [0, 1], \\ \dot{v} &= u(1-v) - (\gamma_s + \gamma_p)v, & v(0) &= v_0 \in [0, 1].\end{aligned}$$

Hierbei sind $\gamma_s = \frac{k_{-s}}{k_s a_s}$, $\gamma_p = \frac{k_p}{k_s a_s}$ und $\epsilon = \frac{a_e}{a_s}$. Um die für Biochemiker relevante, weil messbare, Größe $V := \dot{p} = k_p z = k_p a_e v$, die Produktbildungsrate, zu berechnen, werden zunächst die Schaltkurven der beiden Differenzialgleichungen berechnet. Dazu wird der rechte Gleichungsterm im Folgenden jeweils Null gesetzt und es ergeben sich die beiden Schaltkurven:

$$\begin{aligned}\dot{u} &= 0 \\ \Leftrightarrow -u + u \cdot v + \gamma_s \cdot v &= 0 \\ \Leftrightarrow -u + (u + \gamma_s) \cdot v &= 0 \\ \Leftrightarrow v &= \frac{u}{u + \gamma_s}\end{aligned}$$

für u und:

$$\begin{aligned}\epsilon \dot{v} &= 0 \\ \Leftrightarrow u - u \cdot v - \gamma_s \cdot v - \gamma_p \cdot v &= 0 \\ \Leftrightarrow u - (u + \gamma_s + \gamma_p) \cdot v &= 0 \\ \Leftrightarrow u &= (u + \gamma_s + \gamma_p) \cdot v \\ \Leftrightarrow v &= \frac{u}{u + \gamma_s + \gamma_p}\end{aligned}$$

für v . Diese schneiden sich nur im Punkt $(0, 0)$ und, da die beiden Variablen γ_s und γ_p positiv sind, liegt die Schaltkurve für u oberhalb derer für v . Der Bereich zwischen diesen beiden Schaltkurven wird mit D bezeichnet. Sowohl $u(t)$, als auch $v(t)$ sind in D fallend und konvergieren also gegen den stabilen Zustand $(0, 0)$. Jede Lösung, die nicht in D startet, tritt nach endlicher Zeit in den Bereich D ein. Dies wird in Abbildung 3 für zwei unterschiedliche ϵ dargestellt.

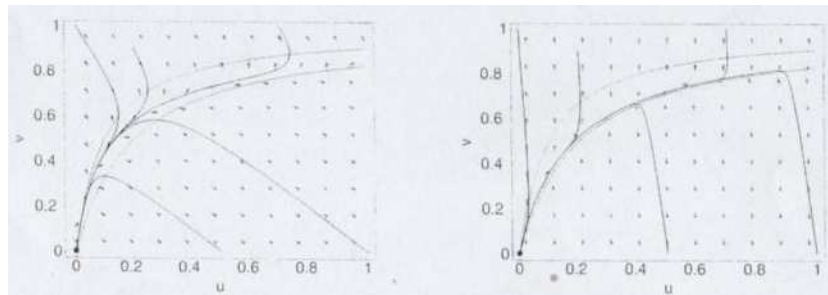


Abb. 3. Enzymdynamik für $\epsilon = 1$ und $\epsilon = 0.1$

Da $\epsilon > 0$ sehr klein ist, wird $\dot{v}$ sehr groß, wodurch die Eintrittszeit in den Bereich D klein wird. Die Lösung $v(t)$ nähert sich also sehr schnell der Schaltkurve von v an, weshalb man $v = \frac{u}{u + \gamma_s + \gamma_p}$ setzen

kann. Es gilt dann also $\epsilon \dot{v} = 0$. In der Chemie und Biochemie nennt man dies eine quasistationäre Approximation, kurz QSSA (= quasi-steady state approximation). Da für v das Gleichgewicht schnell und stabil eingestellt ist, wird v als schnelle Variable bezeichnet. Da wie oben beschrieben $v = \frac{u}{u + \gamma_s + \gamma_p}$ angenommen werden kann, ergibt sich die Produktbildungsrate V durch Einsetzen:

$$\begin{aligned}
 V = \dot{p} &= k_p \cdot a_e \cdot v \\
 &= k_p \cdot (e_0 + z_0) \cdot \frac{u}{u + \gamma_s + \gamma_p} \\
 &= k_p \cdot (e_0 + z_0) \cdot \frac{s}{a_s} \cdot \frac{1}{\frac{s}{a_s} + \frac{k_{-s}}{k_s \cdot a_s} + \frac{k_p}{k_s \cdot a_s}} \\
 &= k_p \cdot (e_0 + z_0) \cdot \frac{s}{a_s} \cdot \frac{1}{\frac{s \cdot k_s + k_{-s} + k_p}{k_s \cdot a_s}} \\
 &= k_p \cdot (e_0 + z_0) \cdot \frac{s}{a_s} \cdot \frac{k_s \cdot a_s}{k_s + k_{-s} + k_p} \\
 \Leftrightarrow V = \dot{p} &= k_p \cdot (e_0 + z_0) \cdot s \cdot \frac{1}{\frac{k_{-s} + k_p}{k_s} + 1} \\
 \Leftrightarrow V = \dot{p} &= \frac{V_{max} \cdot s}{s + K},
 \end{aligned}$$

wobei $K = \frac{k_{-s} + k_p}{k_s}$ und $V_{max} = k_p(e_0 + z_0)$, die maximale Produktbildungsrate, ist. Dadurch ergibt sich für das obige Differenzialgleichungssystem:

$$\dot{u} = -\frac{\gamma_p u}{u + \gamma_s + \gamma_p}, \quad u(0) = u_0.$$

Diese Differentialgleichung beschreibt den Substratverbrauch.

Die hier erläuterte Reaktionskinetik wird nach ihren Erfindern Leonor Michaelis und Maud Menten (1913) Michaelis-Menten-Kinetik genannt.

4 Inhibierung

Inhibitoren sind Hemmstoffe, das heißt Substrate, die eine Enzymreaktion so beeinflussen können, dass diese verlangsamt, gehemmt oder ganz verhindert wird. Sie dienen demnach der Kontrolle einer Enzymreaktion. Dies kann gewünscht sein, wenn es sich um körpereigene Hemmstoffe handelt, es kann jedoch auch fatale Folgen haben, wenn körperfremde Giftstoffe die hemmenden Substanzen sind. Solche Giftstoffe sind beispielsweise Cyanide, das sind Verbindungen der Blausäure. Diese hemmen das Enzym Cytochrom-c-Oxidase, welches in der Atmungskette der Zelle eine überlebenswichtige Position einnimmt. Durch diese Hemmung wird die Sauerstoffverwertung in der Zelle verhindert und es tritt ein Erstickungstod ein. Cyanide und andere Hemmstoffe können Enzyme hemmen, da sie einen sehr ähnlichen Aufbau wie das eigentliche Substrat der Enzymreaktion haben. Das heißt, sie binden an dieselbe Stelle wie dieses und blockieren sie somit. Bei körpereigenen Stoffen ist dies reversibel, was bedeutet, dass sich der Hemmstoff wieder von dem aktiven Zentrum des Enzyms löst und das Substrat umgesetzt werden kann. Bei Giftstoffen handelt es sich meist um eine irreversible Bindung, demnach bleibt das Enzym gehemmt. Für das Modell ist wichtig, dass Hemmstoff und Substrat in Konkurrenz um das aktive Zentrum des Enzyms stehen. Die nachfolgende Abbildung 4 zeigt eine solche kompetitive Inhibierung.

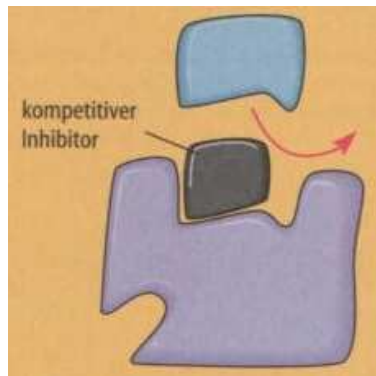
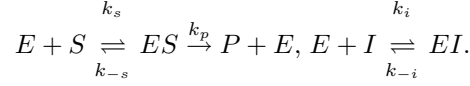


Abb. 4. Schematische Darstellung einer kompetitiven Inhibierung

Im Modell bezeichnen wir wie in den Abschnitten zuvor Enzyme mit E , die Konzentration von E mit e , das Substrat mit S , seine Konzentration mit s , das Produkt mit P , die Konzentration von P mit p und den Enzymkomplex mit ES beziehungsweise dessen Konzentration mit z_s . Der Inhibitor wird nun mit I gekennzeichnet, für die Konzentration von I wird i verwendet, der Enzymkomplex mit dem Inhibitor wird mit EI abgekürzt und dessen Konzentration mit z_i . Somit kommt man auf das Reaktionsschema:



Schreibt man nun dieses Schema unter Annahme der Massenwirkungskinetik um, erhält man folgendes System von Differenzialgleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{s} &= -k_s es + k_{-s} z_s, & s(0) &= s_0, \\ \dot{e} &= [-k_s es + k_{-s} z_s] + [-k_i ei + k_{-i} z_i] + k_p z_s, & e(0) &= e_0, \\ \dot{i} &= -k_i ei + k_{-i} z_i, & i(0) &= i_0, \\ \dot{z}_s &= [k_s es - k_{-s} z_s] - k_p z_s, & z_s(0) &= z_{s0}, \\ \dot{z}_i &= k_i ei - k_{-i} z_i, & z_i(0) &= z_{i0}, \\ \dot{p} &= k_p z_s, & p(0) &= p_0. \end{aligned}$$

Man trifft nun die Annahme, dass alle Konstanten $k_j > 0$ sind. Liegt jedoch eine irreversible Bindung zwischen Enzym und Inhibitor vor, gilt $k_{-i} = 0$. Betrachtet man nun die Erhaltungssätze:

$$\begin{aligned} \dot{s} + \dot{z}_s + \dot{p} &= -k_s es + k_{-s} z_s + [k_s es - k_{-s} z_s] - k_p z_s + k_p z_s = 0 \\ &\Rightarrow s + z_s + p = \text{const.} = s_0 + z_{s0} + p_0 =: a_s, \\ \dot{i} + \dot{z}_i &= -k_i ei + k_{-i} z_i + k_i ei - k_{-i} z_i = 0 \\ &\Rightarrow i + z_i = \text{const.} = i_0 + z_{i0} =: a_i, \\ \dot{e} + \dot{z}_s + \dot{z}_i &= [-k_s es + k_{-s} z_s] + [-k_i ei + k_{-i} z_i] + k_p z_s \\ &\quad + [k_s es - k_{-s} z_s] - k_p z_s + k_i ei - k_{-i} z_i = 0 \\ &\Rightarrow e + z_s + z_i = \text{const.} = e_0 + z_{s0} + z_{i0} =: a_e, \end{aligned}$$

so kann sowohl die Enzymkonzentration e , als auch die Konzentration des Inhibitors i aus dem System eliminiert werden. Außerdem basiert das obige Modell auf der Annahme, dass es sich um einen Batch-Prozess in einem abgeschlossenen System handelt. Somit gilt $z_s(0) = p(0) = 0$. Die Konzentration des Produkts p kann also durch Integration von z_s berechnet werden, weshalb auch die letzte Differenzialgleichung aus dem System eliminiert werden kann. Somit wird aus dem obigen System ein dreidimensionales System mit den Variablen s , z_s und z_i :

$$\begin{aligned} \dot{s} &= -k_s s (a_e - (z_s + z_i)) + k_{-s} z_s, & s(0) &= s_0, \\ \dot{z}_s &= [k_s s (a_e - (z_s + z_i)) - k_{-s} z_s] - k_p z_s, & z_s(0) &= z_{s0}, \\ \dot{z}_i &= k_i (a_e - (z_s + z_i)) (a_i - z_i) - k_{-i} z_i, & z_i(0) &= z_{i0}. \end{aligned}$$

Trifft man nun die Skalierungen wie zuvor mit $u = \frac{s}{a_s}$, $v = \frac{z_s}{a_e}$, $w = \frac{z_i}{a_i}$ und $\tau = k_s a_e t$, erhält man das System:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= -u(1 - v - \beta w) + \gamma_s v, & u(0) &= u_0 \in [0, 1], \\ \epsilon \dot{v} &= u(1 - v - \beta w) + (\gamma_s + \gamma_p) v, & v(0) &= v_0 \in [0, 1], \\ \eta \dot{w} &= (1 - w)(1 - v - \beta w) - \gamma_i w, & w(0) &= w_0 \in [0, 1], \end{aligned}$$

wobei $\gamma_s = \frac{k_{-s}}{k_s a_s}$, $\gamma_i = \frac{k_{-i}}{k_i a_e}$, $\gamma_p = \frac{k_p}{k_s a_s}$ und $\eta = \frac{k_s}{k_i}$ sind.

Der Gleichgewichtszustand der angenommenen Modell-Reaktion lässt sich wie folgt darstellen:

$$(u, v, w) \in D := \{(u, v, w) \in \mathbb{R}_+^3 : u + \epsilon v \leq 1, v + \beta w \leq 1, w \leq 1\}.$$

Die in D vorkommenden Ungleichungen sind mathematisch plausibel, denn es gilt mit den obigen Erhaltungssätzen:

$$\begin{array}{lll}
u + \epsilon v \leq 1 & v + \beta w \leq 1 & w \leq 1 \\
\Leftrightarrow \frac{s}{a_s} + \frac{a_e z_s}{a_s a_e} \leq 1 & \Leftrightarrow \frac{z_s}{a_e} + \frac{a_i z_i}{a_e a_i} \leq 1 & \Leftrightarrow \frac{z_i}{a_i} \leq 1 \\
\Leftrightarrow \frac{s+z_s}{a_s} \leq 1 & \Leftrightarrow \frac{z_s+z_i}{a_e} \leq 1 & \Leftrightarrow z_i \leq a_i. \\
\Leftrightarrow s + z_s \leq a_s, & \Leftrightarrow z_s + z_i \leq a_e, &
\end{array}$$

D ist aufgrund der chemischen Voraussetzung, dass Konzentrationen stets positiv sind, ein positiv invarianter Bereich, da die in D existierenden Differenzialgleichungen als Verknüpfungen stetiger Funktionen stetig sind. Daraus folgt, dass das obige Differenzialgleichungssystem in D einen globalen Halbfluss erzeugt. Das bedeutet, dass die Lösungen des Systems in D gegen ein Equilibrium (u_*, v_*, w_*) konvergieren, das die Gleichgewichtszustände der Reaktion darstellt. Diese sind durch $(0, 0, w_*)$ gegeben, wobei w_* die Lösungen folgender Gleichung sind:

$$(1 - w)(1 - \beta w) = \gamma_i w,$$

die sich aus der dritten Schaltkurve des Systems:

$$\begin{array}{ll}
\eta \dot{w} = (1 - w)(1 - v - \beta w) - \gamma_i w = 0 \\
\Leftrightarrow (1 - w)(1 - \beta w) - \gamma_i w = 0 \\
\Leftrightarrow (1 - w)(1 - \beta w) = \gamma_i w
\end{array}$$

ergibt, wobei $v = 0$ gilt. Dabei liegt wiederum nur die kleinere der beiden Lösungen für w_* in D . Diese ist auch die chemisch relevante Lösung.

Dieser Sachverhalt lässt sich nun in einem Satz über die Inhibierung von Enzymen zusammenfassen.

Satz 1 (Satz über die Inhibierung von Enzymen) *Es seien $\beta, \gamma_s, \gamma_p, \gamma_i, \epsilon, \eta > 0$ Konstanten. Das System:*

$$\begin{array}{ll}
\dot{u} = -u(1 - v - \beta w) + \gamma_s v, & u(0) = u_0 \in [0, 1], \\
\epsilon \dot{v} = u(1 - v - \beta w) + (\gamma_s + \gamma_p)v, & v(0) = v_0 \in [0, 1], \\
\eta \dot{w} = (1 - w)(1 - v - \beta w) - \gamma_i w, & w(0) = w_0 \in [0, 1]
\end{array}$$

mit den Bezeichnungen wie oben erzeugt einen globalen Halbfluss in der biochemisch relevanten Menge

$$D := \{(u, v, w) \in \mathbb{R}_+^3 : u + \epsilon v \leq 1, v + \beta w \leq 1, w \leq 1\}.$$

Es existiert genau ein Equilibrium $(0, 0, w_*)$ in D und dieses ist in D global asymptotisch stabil.

Für die quasistationäre Approximation wird nun $\epsilon = \eta = 0$ gesetzt. Somit ergibt sich das folgende algebraische System aus den beiden letzten Differenzialgleichungen des obigen Systems:

$$\begin{array}{l}
\epsilon \dot{v} = u(1 - v - \beta w) - (\gamma_s + \gamma_p)v = 0, \\
\eta \dot{w} = (1 - w)(1 - v - \beta w) - \gamma_i w = 0.
\end{array}$$

Löst man die erste Gleichung nach v auf, so ergibt sich:

$$\begin{array}{ll}
u(1 - v - \beta w) - (\gamma_s + \gamma_p)v = 0 \\
\Leftrightarrow u(1 - \beta w) - (\gamma_s + \gamma_p + u)v = 0 \\
\Leftrightarrow u(1 - \beta w) = (\gamma_s + \gamma_p + u)v \\
\Leftrightarrow \frac{(1 - \beta w)u}{(\gamma_s + \gamma_p + u)} = v.
\end{array}$$

Dies wird nun in die zweite Gleichung eingesetzt und man erhält folgende quadratische Gleichung für w :

$$\begin{array}{ll}
(1 - w)(1 - v - \beta w) - \gamma_i w = 0 \\
\Leftrightarrow (1 - w) \left(1 - \frac{(1 - \beta w)u}{(\gamma_s + \gamma_p + u)} - \beta w \right) - \gamma_i w = 0 \\
\Leftrightarrow \beta w^2 - (1 + \beta + \delta \gamma_i)w + 1 = 0,
\end{array}$$

wobei $\delta = \frac{u + \gamma_s + \gamma_p}{\gamma_s + \gamma_p}$. Die Lösungen dieser Gleichung ergeben sich aus der Lösungsformel für quadratische Gleichungen:

$$w_{\pm} = -\frac{1}{2\beta} (1 + \beta + \delta\gamma_i) \pm \sqrt{(1 + \beta + \delta\gamma_i)^2 - 4\beta},$$

wobei $\delta = \frac{u+\gamma_s+\gamma_p}{\gamma_s+\gamma_p}$ gilt. Ausschließlich die kleinere der beiden Lösungen für w ist relevant, da $w_+ > \frac{1}{\beta}$. Hieraus berechnet man die Substratabbaureate:

$$\dot{u} = \frac{\gamma_p u}{u + (\gamma_s + \gamma_p) \left(1 + (1 - w_-(u)) \frac{\beta}{\gamma_i} \right)}$$

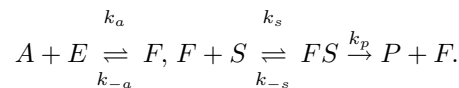
und die daraus resultierende Produktbildungsrate:

$$V = \dot{p} = k_p z_s = k_p a_e v = \frac{V_{max} u}{u + (\gamma_s + \gamma_p) \left(1 + (1 - w_-(u)) \frac{\beta}{\gamma_i} \right)}.$$

5 Aktivierung

Wenn man beispielsweise die Enzyme in einem Körper betrachtet, kann man sich bei der Anzahl an Enzymen vorstellen, dass nicht alle gleichzeitig aktiv sind. Zum einen wird das durch die Hemmung mit Hilfe von Inhibitoren geregelt, zum anderen gibt es so genannte schlafende Enzyme, die geweckt werden müssen. Dieses Wecken nennt man Aktivierung. Ein Enzym besitzt eine komplexe Oberflächenstruktur, die nicht nur eine Bindungsstelle für Substrat und Inhibitor besitzt. Manche Enzyme weisen auch weitere Bindungsstellen auf. Ein Substratmolekül kann nicht an ein inaktiviertes Enzym binden, da die Bindungsstelle modifiziert ist. Bindet nun der Aktivator an das Enzym, ändert sich die Bindungsstelle für das Substrat und dieses kann binden, um umgesetzt zu werden. Meist dient eine Vorform des Substrats als Aktivator, da, sofern die Substratvorform reichlich vorhanden ist, auch in Kürze viel Substrat zum Umsetzen da sein wird. Diese Bindung des Aktivators an das Enzym ist reversibel. Sind nicht genügend Aktivatormoleküle vorhanden, trennt sich dieses wieder vom Enzym.

Für das Model trifft man die Annahme, dass es nur eine Bindungsstelle für einen Aktivator pro Enzym gibt und dass das Enzym nur mit dem Aktivator reagiert und nicht direkt mit dem Substrat. Die Abkürzungen bleiben dieselben wie im vorangegangenen Abschnitt, nur dass der Aktivator mit A , dessen Konzentration mit a , der Enzym-Aktivator-Komplex mit $AE = F$, dessen Konzentration mit f , der Enzym-Aktivator-Substrat-Komplex mit FS und dessen Konzentration mit z bezeichnet werden. Man erhält dann das Reaktionsschema:



Mit Hilfe der Massenwirkungskinetik erhält man das System:

$$\begin{aligned} \dot{a} &= -k_a a e + k_{-a} f, & a(0) &= a_0 \geq 0, \\ \dot{e} &= -k_a a e + k_{-a} f, & e(0) &= e_0 \geq 0, \\ \dot{f} &= [k_a a e - k_{-a} f] + [-k_s f s + k_{-s} z] + k_p z, & f(0) &= f_0 \geq 0, \\ \dot{s} &= -k_s f s + k_{-s} z, & s(0) &= s_0 \geq 0, \\ \dot{z} &= k_s f s - k_{-s} z - k_p z, & z(0) &= z_0 \geq 0, \\ \dot{p} &= k_p z, & p(0) &= p_0 \geq 0. \end{aligned}$$

In diesem System kommen drei Erhaltungsgrößen vor, das sind Größen, die sich nicht verändern, diese sind:

$$\begin{aligned} \dot{e} + \dot{f} + \dot{z} &= -k_a a e + k_{-a} f + [k_a a e - k_{-a} f] + [-k_s f s + k_{-s} z] \\ &\quad + k_p z + k_s f s - k_{-s} z - k_p z = 0 \\ &\Rightarrow e + f + z = \text{const.} = e_0 + f_0 + z_0 =: a_e, \\ \dot{s} + \dot{z} + \dot{p} &= -k_s f s + k_{-s} z + k_s f s - k_{-s} z - k_p z + k_p z = 0 \\ &\Rightarrow s + z + p = \text{const.} = s_0 + z_0 + p_0 =: a_s, \\ \dot{a} - \dot{e} &= -k_a a e + k_{-a} f - [-k_a a e + k_{-a} f] = 0 \\ &\Rightarrow a - e = \text{const.} = a_0 - e_0 \Rightarrow a = e + a_0 - e_0. \end{aligned}$$

Durch diese Größen können die Konzentration des Aktivators a , die Enzymkonzentration e und die Konzentration des Produkts p eliminiert werden:

$$e = a_e - (f + z), \quad p = a_s - (s + z), \quad a = a_a - (f + z)$$

und man erhält das reduzierte System:

$$\begin{aligned} \dot{s} &= -k_s f s + k_{-s} z, & s(0) &= s_0, \\ \dot{z} &= k_s f s - (k_{-s} + k_p) z, & z(0) &= z_0, \\ \dot{f} &= k_a (a_e - (f + z)) (a_a - (f + z)) - k_{-a} f - k_s f s + (k_{-s} + k_p) z, & f(0) &= f_0. \end{aligned}$$

Durch die Skalierung mit $u = \frac{s}{a_s}$, $v = \frac{z}{a_e}$, $w = \frac{f}{a_e}$ und $\tau = k_s a_e t$ erhält man das System:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= -uw + \gamma_s v, & u(0) &= u_0, \\ \epsilon \dot{v} &= uw - (\gamma_s + \gamma_p) v, & v(0) &= v_0, \\ \epsilon \dot{w} &= \alpha [(1 - (v + w)) (\beta - (v + w)) - \gamma_a w] - uw + (\gamma_s + \gamma_p) v, & w(0) &= w_0, \end{aligned}$$

wobei $\epsilon = \frac{a_e}{a_s}$, $\gamma_s = \frac{k_{-s}}{k_s a_s}$, $\gamma_p = \frac{k_p}{k_s a_s}$, $\alpha = \frac{k_a a_e}{k_s a_s}$, $\beta = \frac{a_a}{a_e}$ und $\gamma_a = \frac{k_{-a}}{k_a a_e}$ sind.

Aus den obigen Erhaltungssätzen und der Positivität der Konzentrationen ergibt sich der Bereich:

$$D := \{(u, v, w) \in \mathbb{R}_+^3 : u + \epsilon v \leq 1, v + w \leq 1, v + w \leq \beta\}.$$

Die Ungleichungen in D sind plausibel, denn es gilt:

$$\begin{aligned} u + \epsilon v &\leq 1 & v + w &\leq 1 & v + w &\leq \beta \\ \Leftrightarrow \frac{s}{a_s} + \frac{a_e}{a_s} \frac{z}{a_e} &\leq 1 & \Leftrightarrow \frac{z}{a_e} + \frac{f}{a_e} &\leq 1 & \Leftrightarrow \frac{z}{a_e} + \frac{f}{a_e} &\leq \frac{a_a}{a_e} \\ \Leftrightarrow \frac{s+z}{a_s} &\leq 1 & \Leftrightarrow \frac{z+f}{a_e} &\leq 1 & \Leftrightarrow z+f &\leq a_a. \\ \Leftrightarrow s+z &\leq a_s, & \Leftrightarrow z+f &\leq a_e, \end{aligned}$$

Der Bereich D ist positiv invariant und die Equilibria des Systems sind wie im vorherigen Abschnitt gegeben durch $(0, 0, w^*)$, wobei w^* die Lösung folgender Gleichung ist:

$$w^2 - (1 + \beta + \gamma_a) w + \beta = 0,$$

die sich aus der dritten Schaltkurve des Systems:

$$\begin{aligned} \eta \dot{w} &= (1 - (v + w)) (\beta - (v + w)) - \gamma_a w - uw + (\gamma_s + \gamma_p) v = 0 \\ \Leftrightarrow & (1 - w) (\beta - w) - \gamma_a w = 0 \\ \Leftrightarrow & w^2 - w - w\beta - \gamma_a w + \beta = 0 \end{aligned}$$

ergibt, wobei $u = 0$ und $v = 0$ gilt. Somit ergeben sich die Lösungen dieser quadratischen Gleichung:

$$w_{\pm}^* = \frac{1}{2} \left(1 + \beta + \gamma_a \pm \sqrt{(1 + \beta + \gamma_a)^2 - 4\beta} \right),$$

wobei nur w_-^* in D liegt, da $w_+^* > \min\{1, \beta\}$. Chemisch entspricht dieses Equilibrium dem Zeitpunkt der Reaktion, an dem das Substrat verbraucht und ein Gleichgewicht bei der Enzym-Aktivator-Reaktion eingestellt ist.

Dies lässt sich wiederum in folgendem Satz über die Aktivierung von Enzymen formulieren.

Satz 2 (Satz über die Aktivierung von Enzymen) *Es seien $\alpha, \beta, \gamma_a, \gamma_s, \gamma_p, \epsilon > 0$ Konstanten. Das System:*

$$\begin{aligned} \dot{u} &= -uw + \gamma_s v, & u(0) &= u_0, \\ \epsilon \dot{v} &= uw - (\gamma_s + \gamma_p) v, & v(0) &= v_0, \\ \epsilon \dot{w} &= \alpha [(1 - (v + w)) (\beta - (v + w)) - \gamma_a w] - uw + (\gamma_s + \gamma_p) v, & w(0) &= w_0 \end{aligned}$$

mit den Bezeichnungen wie oben erzeugt einen globalen Halbfluss in der biochemisch relevanten Menge

$$D := \{(u, v, w) \in \mathbb{R}_+^3 : u + \epsilon v \leq 1, v + w \leq \min\{1, \beta\}\}.$$

Es existiert genau ein Equilibrium $(0, 0, w_-^*)$ in D und dieses ist in D global asymptotisch stabil.

Für die Durchführung einer quasistationären Approximation wird nun $\epsilon = 0$ gesetzt. Somit ergibt sich das algebraische System:

$$\begin{aligned} \epsilon \dot{v} &= uw - (\gamma_s + \gamma_p) v & \epsilon \dot{w} &= (1 - (v + w)) (\beta - (v + w)) - \gamma_a w \\ \Leftrightarrow uw &= (\gamma_s + \gamma_p) v, & \Leftrightarrow \gamma_a w &= (1 - v - w) (\beta - v - w). \end{aligned}$$

aus den letzten beiden Differenzialgleichungen des obigen Systems. Löst man die erste der beiden Gleichungen nach v auf, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} uw &= (\gamma_s + \gamma_p) v \\ \Leftrightarrow v &= \frac{uw}{\gamma_s + \gamma_p}. \end{aligned}$$

Setzt man diese Lösung für v in die zweite Gleichung ein, so erhält man folgende quadratische Gleichung für w :

$$\begin{aligned} \gamma_a w &= (1 - v - w) (\beta - v - w) \\ \Leftrightarrow \gamma_a w &= \left(1 - \frac{uw}{\gamma_s + \gamma_p} - w\right) \left(\beta - \frac{uw}{\gamma_s + \gamma_p} - w\right) \\ \Leftrightarrow 0 &= w^2 - (\delta(1 + \beta) + \delta^2 \gamma_a) w + \beta \delta^2, \end{aligned}$$

wobei $\delta = \frac{\gamma_s + \gamma_p}{u + \gamma_s + \gamma_p}$ gilt. Löst man diese Gleichung mit Hilfe der Lösungsformel für quadratische Gleichungen, so ergibt sich:

$$w_{\pm} = \frac{\delta}{2} \left(1 + \beta + \gamma_a \delta \pm \sqrt{(1 - \beta + \gamma_a \delta)^2 + 4\beta \gamma_a \delta} \right),$$

wobei wiederum nur die kleinere der beiden Lösungen w_- in D liegt und damit chemisch relevant ist. Für die Abbaurate erhält man nun die Gleichung:

$$\dot{u} = -\frac{\gamma_p \min\{1, \beta\} u}{u + \gamma_s + \gamma_p}.$$

Dies ist eine Michaelis-Menten-Kinetik. In diesem Fall ist $\beta < 1$, demnach $a_0 < e_0$, wodurch man die maximale Produktbildungsrate:

$$V_{max} = k_p a_e \beta = k_p a_a$$

erhält. Die Produktbildungsrate selbst ist dieselbe wie bei der Inhibierung, ausschließlich V_{max} unterscheidet sich, da bei der Inhibierung $V_{max} = k_p a_e$ gilt. Daraus erkennt man, dass durch eine Aktivierung von Enzymen V_{max} verkleinert wird, wohingegen bei der Hemmung die Michaelis-Menten-Konstante vergrößert wird.

Literaturverzeichnis

1. Neil A. Campbell, Jane B. Reece: *Biologie*, 6. Auflage, S. 113-122, *Spektrum* (2003)
2. Jan W. Prüss, Roland Schnaubelt, Rico Zacher: *Mathematische Modelle in der Biologie: Deterministische homogene Systeme*, *Birkhäuser*

Die Delaunay Triangulierung

Pascal Heiter

pascal.heiter@uni.ulm.de

1 Motivation

In der modernen Wissenschaft spielt die Netzgenerierung von Punktmengen eine tragende Rolle. Ein Anwendungsbeispiel findet sich in neusten Animationsfilmen, dabei werden Strukturen als Netze interpoliert. Auch die Gesichtserkennung von Computern kann mit Netzgenerierung geschehen. Das Gesicht wird gescannt, die Umrisse ermittelt und das Bild des Kopfes trianguliert. Eine mögliche Erkennungsoption wäre die Farbe, d.h. pro Dreieck gibt es einen Farbton, der mit einer Datenbank verglichen wird. Numerisch interessant wird die Netzgenerierung zum Beispiel bei Strömungsberechnungen (vgl. Abb. (1), Quelle: http://www2.hydrotec.de/vertrieb/hydro_as_2d/image013.png). Im Maschinenbau werden viele CAD-Programme benutzt, die auf dem Prinzip der Netzgenerierung basieren, damit werden Einzelteile entworfen. Allgemein gilt die Netzgenerierung in den Ingenieurwissenschaften als essentiell,

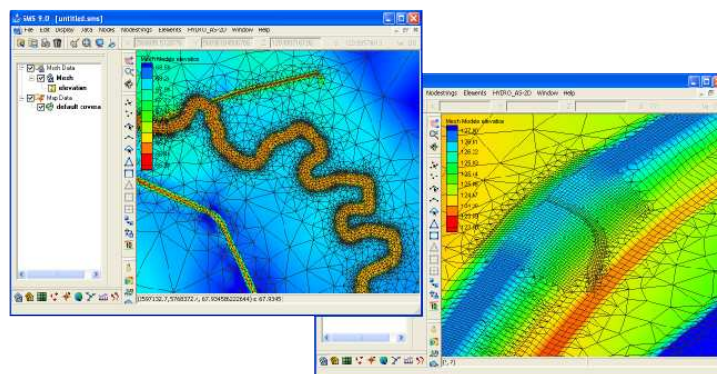


Abb. 1. Strömungsberechnung mit Hilfe eines Netzes.

da reale Modelle mit geometrischen Sachverhalten nicht ohne weiteres simuliert werden können. Um einen Bogen in die Biologie zu schlagen, betrachtet man bei der Immunantwort auf ein Antigen die humorale Abwehr. Speziell auch die Erkennung eines Antigens. In der Biologie spielt das Schlüssel-Schloss-Prinzip eine zentrale Rolle und deshalb könnte man daran interessiert sein, die Epitope eines Antigens mittels eines 3D-Netzes zu visualisieren, um gegebenenfalls durch die Visualisierung ein passendes Antikörper zu finden und es dem Patienten zu spritzen.

2 Delaunay Triangulierung

Es sei eine endliche Menge $P = \{p_1, p_2, \dots, p_n\} \subset \mathbb{R}^d$ gegeben. Gesucht ist die konvexe Hülle dieses Polyeders. Mittels Delaunay Triangulierung lässt sich diese ermitteln.

Zunächst wird das Voronoi-Diagramm studiert, da es sich dual zur Delaunay Triangulierung verhält. Um es zu motivieren, betrachtet man den direkten Einflussbereich jedes Punktes, den *Voronoibereich*.

Definition 1 (Voronobereich). Sei $p \in P$, so heißt

$$V_p := \{x \in \mathbb{R}^d \mid \|x - p\| \leq \|x - q\| \quad \forall q \in P\}$$

der zu p zugehörige Voronobereich.

Geometrisch interpretiert, bedeutet diese Definition, dass $\mathbb{R}^d$ in lauter konvexe, möglicherweise unbeschränkte Teilmengen zerlegt wird. Ferner ist jeder Voronobereich V_p der Schnitt von $n-1$ Halbräumen. Im Folgenden sei $d = 2$ gewählt. Alle Voronobereiche zusammen bilden das *Voronoidiagramm*.

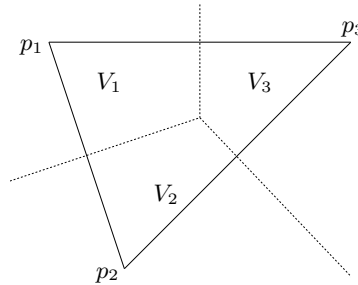


Abb. 2. Voronoidiagramm von 3 Punkten

Beispiel 1. Sei $P := \{p_1, p_2, p_3\} \subset \mathbb{R}^2$. Das zugehörige Voronoidiagramm wird in Abb. (2) dargestellt. Es gilt offensichtlich, dass $\mathbb{R}^2 = V_1 \cup V_2 \cup V_3$.

Die Dualität zwischen dem Voronoidiagramm und der Delaunay Triangulierung lässt folgende Charakterisierung dieser speziellen Triangulierung zu.

Definition 2 (Delaunay Triangulierung). Seien $p, q \in P$. Dann heißt die Verbindungsstrecke zwischen p und q genau dann *Delaunaykante*, wenn $V_p \cap V_q \neq \emptyset$. p und q werden als *Delaunayecken* bezeichnet. Alle Delaunaykanten zerlegen die konvexe Hülle von P in Dreiecke, welche auch *Delaunay Triangulierung* genannt wird.

Die Delaunay Triangulierung ist nicht eindeutig, wie folgender Spezialfall, auch *Entartung* genannt, zeigt.

Beispiel 2. Sei $p_1, p_2, p_3, p_4 \in P$ und $u \in \mathbb{R}^2$ so, dass $r = \|u - p_i\|$ für $i = 1 \dots 4$ und $V_{p_1} \cap V_{p_2} \cap V_{p_3} \cap V_{p_4} = \{u\}$. Also liegen p_1, p_2, p_3, p_4 auf dem Kreis mit Mittelpunkt u und Radius r . Hier hat man zwei legitime Auswahlmöglichkeiten für Delaunaykanten.

Die Wahrscheinlichkeit, dass 4 Punkte auf einem Kreis liegen, ist so gering, weswegen man annehmen darf, dass die Menge P keine Entartungen hat.

Um ein *Delaunay-Dreieck* zu beschreiben, benötigt man folgende Definition.

Definition 3 (Leerer Kreis). Sei $U(a, b, c)$ der Umkreis eines Dreiecks abc .

$$U(a, b, c) \text{ heißt leer} \Leftrightarrow a, b, c \in U.$$

Sei $K_{U(a,b,c)}$ die zu $U(a, b, c)$ gehörige Kreisschreibe. Also sind a, b, c keine inneren Punkte von U .

Mit Hilfe dieser Definition lässt sich nun die *Umkreisforderung* formulieren.

Satz 2.1 (Umkreisforderung) Sei P ohne Entartungen, $a, b, c \in P$.

$$abc \text{ heißt Delaunay-Dreieck} \Leftrightarrow U(a, b, c) \text{ leer.}$$

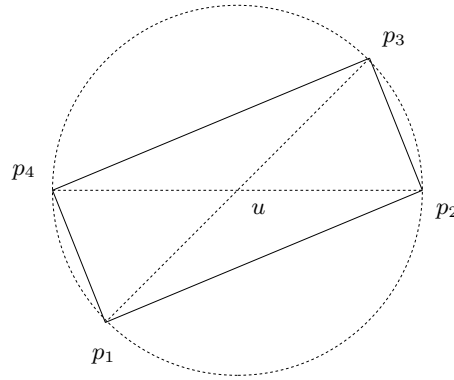


Abb. 3. zu Beispiel (2)

Ferner benötigt man ein Hilfsmittel, um zu entscheiden, ob ein Punkt $x \in \mathbb{R}^d$ innerhalb eines Kreises liegt.

Definition 4 (Bezug). Der Bezug $\pi_U(x)$ eines Punktes $x \in \mathbb{R}^d$ zu einem Kreis U mit Mittelpunkt $u \in \mathbb{R}^d$ und Radius $\rho > 0$ sei definiert durch

$$\pi_U(x) = \|x - u\|^2 - \rho^2.$$

Es gilt:

- $\pi_U(x) > 0$, falls $x \notin U$
- $\pi_U(x) = 0$, falls $x \in \bar{U}$
- $\pi_U(x) < 0$, falls $x \in \overset{\circ}{U}$

In Satz (2.1) wird ein Hilfsmittel bereit gestellt, um zu entscheiden, ob ein Dreieck ein *Delaunay-Dreieck* ist. Gleiches wird folgender Satz für *Delaunay-Kante* darstellen.

Satz 2.2 (stützende Kreisforderung) Sei P ohne Entartungen, $a, b \in P$.

$$ab \text{ heißt Delaunay-Kante} \Leftrightarrow \exists \text{ leerer Kreis } U : a, b \in U.$$

Nun fehlt noch ein letztes Hilfsmittel, um danach endgültig Aussagen über eine beliebige Triangulierung machen zu können, nämlich ob sie eine *Delaunay Triangulierung* ist. Sei nun eine beliebige Triangulierung K gegeben, welche die konvexe Hülle von P in Dreiecke teilt. Dann lässt sich die Eigenschaft *lokal Delaunay* einer Kante wie folgt charakterisieren.

Satz 2.3 (Lokal Delaunay) Sei ab eine Kante von K . ab heißt lokal Delaunay genau dann, wenn gilt, dass ab zu nur einem Dreieck abc gehört oder ab gehört zu zwei Dreiecken abc und abd und $d \notin K_{U(a,b,c)}$.

Satz 2.4 (Delaunay) Sei K eine beliebige Triangulierung von P .

$$\forall \text{ Kanten } ab \in K : ab \text{ ist lokal Delaunay} \Rightarrow K \text{ ist eine Delaunay Triangulierung.}$$

3 Edge-Flip-Algorithmus

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit dem *Edge-Flip-Algorithmus*. Dieser erzeugt aus einer beliebigen, gegebenen Triangulierung K eine *Delaunay Triangulierung*. Also sei im folgenden eine beliebige Triangulierung K gegeben, welche keine Entartungen enthält.

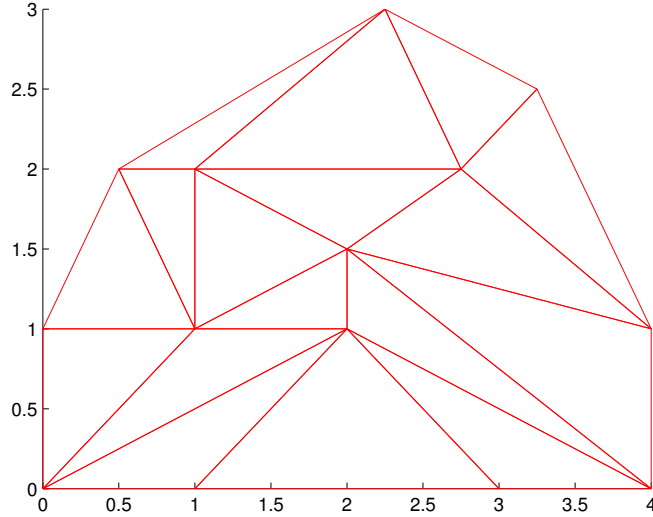


Abb. 4. Eine beliebige Triangulierung

Beispiel 3. Abb. (4) zeigt eine beliebige Triangulierung eine Menge von Punkten $P \subset \mathbb{R}^2$.

Zunächst wird eine Datenstruktur benötigt, die eine beliebige Triangulierung K einer Menge von Punkten $P \subset \mathbb{R}^2$ beschreibt, wie zum Beispiel:

$$T := \begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & m_{1,1} & m_{1,2} & m_{1,3} \\ y_{1,1} & y_{1,2} & y_{1,3} & b_{1,1} & b_{1,2} & b_{1,3} \\ \hline x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & m_{2,1} & m_{2,2} & m_{2,3} \\ y_{2,1} & y_{2,2} & y_{2,3} & b_{2,1} & b_{2,2} & b_{2,3} \\ \hline x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & m_{3,1} & m_{3,2} & m_{3,3} \\ y_{3,1} & y_{3,2} & y_{3,3} & b_{3,1} & b_{3,2} & b_{3,3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n-1,1} & x_{n-1,2} & x_{n-1,3} & m_{n-1,1} & m_{n-1,2} & m_{n-1,3} \\ y_{n-1,1} & y_{n-1,2} & y_{n-1,3} & b_{n-1,1} & b_{n-1,2} & b_{n-1,3} \\ \hline x_{n,1} & x_{n,2} & x_{n,3} & m_{n,1} & m_{n,2} & m_{n,3} \\ y_{n,1} & y_{n,2} & y_{n,3} & b_{n,1} & b_{n,2} & b_{n,3} \end{pmatrix}.$$

Die Dreiecke der Triangulierung K sollen eindeutig, fortlaufend durchnummeriert sein. Die $2i - 1$. und $2i$. Zeile mit $i = 1 \dots n$ von T beschreibt ein Dreieck abc , mit folgenden Bezeichnungen:

- $\begin{pmatrix} x_{i,j} \\ y_{i,j} \end{pmatrix} = \begin{cases} a & , j = 1 \\ b & , j = 2, \text{ wobei } a, b, c \in \mathbb{R}^2. \\ c & , j = 3 \end{cases}$
- $m_{i,j} = \begin{cases} 1 & , \text{ falls die } j. \text{ Kante, des } i. \text{ Dreiecks markiert ist} \\ 0 & , \text{ sonst} \end{cases}$
- Die 1. Kante entspricht gerade ab , die 2. Kante bc und die 3. Kante ca .
- $b_{i,j}$ gibt die Nummer des Nachbarn an, der an Kante $j = 1 \dots 3$ grenzt. Falls es keinen Nachbarn gibt, so ist der Wert 0.

Aus dieser Datenstruktur wird ein *Stack* erstellt, der die markierten Kanten beinhaltet. Sobald diese Vorarbeit geleistet wurde, kann der *Edge-Flip-Algorithmus* diese Daten verarbeiten.

Edge-Flip-Algorithmus (vgl [Ed] S. 9):

```

while stack != leer do
  pop  $ab$  vom Stack und setze Markierung der Kante auf 0;
  if  $ab$  ist nicht lokal Delaunay then
    drehe  $ab$  zu  $cd$ ;
    for  $xy \in \{ca, bc, db, ad\}$  do
      if  $xy$  ist nicht markiert then
        markiere  $xy$  und push  $xy$  auf den Stack;
      endif
    endfor
  endif
endif
endwhile

```

Der Rechenaufwand des *Edge-Flip-Algorithmus* beträgt $O(n^2)$. Eine elementare Operation im *Edge-Flip-Algorithmus* ist die Drehung einer Kante. Seien nun zwei Dreiecke abc und abd aus K gegeben. Formal betrachtet werden die Kante ab , sowie die Dreiecke abc und abd aus der Triangulierung entfernt und die Kante cd , sowie die modifizierten Dreiecke adc und cdb zu K hinzugefügt. Abb. (5) verdeutlicht, was bei der Drehung passiert. Diese elementare Operation erscheint zunächst sehr klar,

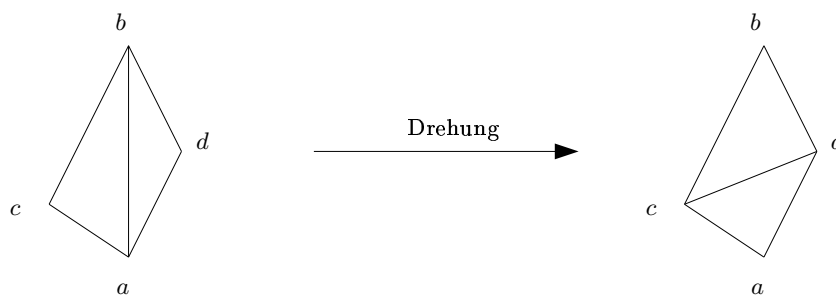


Abb. 5. Drehung einer Kante, weil ab nicht lokal Delaunay ist.

die Implementierung erfordert allerdings die Anpassung einiger Teile der Triangulierung. Die Nachbarn verändern sich bei jeder Drehung, sodass diese aktualisiert werden müssen.

Zuletzt kommt die wohl wichtigste Konsequenz der *Delaunay Triangulierung*, die Eigenschaft, dass der kleinste Winkel in einem Dreieck maximiert wird.

Satz 3.1 *Die Delaunay Triangulierung maximiert die kleinsten Winkel innerhalb jedes Dreiecks.*

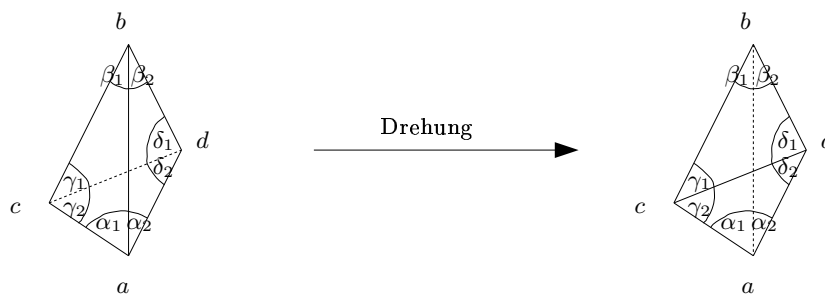


Abb. 6. Aktualisierung der Winkel

Beweis. Nach einer Drehung werden alle sechs Innenwinkel aktualisiert. Ausgehend von den Winkeln $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1 + \gamma_2; \alpha_2, \beta_2, \delta_1 + \delta_2$, sind die neuen Winkel $\gamma_1, \delta_1, \beta_1 + \beta_2; \gamma_2, \delta_2, \alpha_1 + \alpha_2$. Trivialerweise ist $\beta_1 + \beta_2 \geq \beta_1$ und $\alpha_1 + \alpha_2 \geq \alpha_1$. Es bleibt noch zu zeigen, dass $\delta_2 \geq \beta_1$, $\delta_1 \geq \alpha_1$, $\gamma_2 \geq \beta_2$ und $\gamma_1 \geq \alpha_2$. Diese Ungleichungen folgen direkt aus dem Kreiswinkelsatz und der Eigenschaft, dass diese Winkel gegenüber einer Kante liegen. Abb. (6) zeigt die Aktualisierung der Winkel. $\square$

Beispiel 4. Abb. (7) zeigt die Delaunay Triangulierung der Menge P aus Beispiel (3).

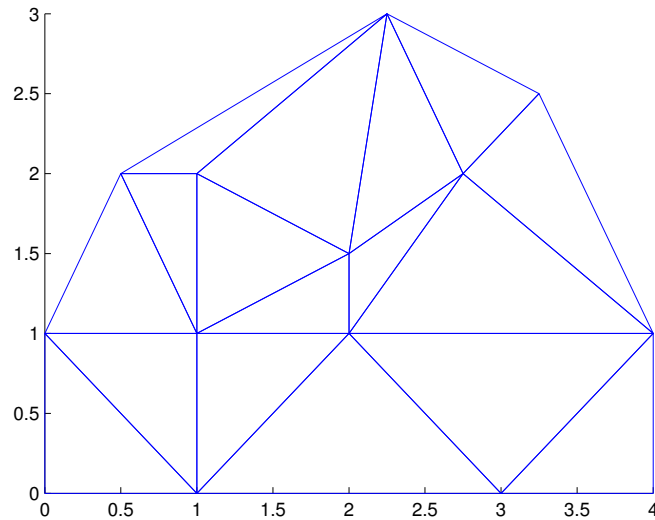


Abb. 7. Delaunay Triangulierung der Menge P aus Bsp. (3)

Zum Schluss noch die Implementierung des *Edge-Flip-Algorithmus* in Matlab:

*%— Funktion edge_flip(T) ermittelt aus einer vorgegebenen Triangulierung T
%— mittels Edge-Flip-Algorithmus eine Delaunaytriangulierung.*

function T = edge_flip(T)

%Generiere Stack von Kanten

edges = generate_stack(T);

while(size(edges,1) ~= 0)

%pop ab

ab = edges(1,:);

edges(1,:) = [];

%Entferne Markierung

T(2*ab(1)-1,3+ab(2)) = 0;

%Wenn ab NICHT lokal Delaunay

if (T(2*ab(1),3+ab(2)) ~= 0)

if ((isOutside(ab,T) == 0)) *%isOutside benutzt outside_circumcircle*

i = ab(1);

%i. Dreieck

k = T(2*ab(1),3+ab(2)); *%k. Dreieck*

%flip ab to cd

T1o = T(2*i-1:2*i,1:6); *%unverändertes abc*

T2o = T(2*k-1:2*k,1:6); *%unverändertes adb*

```

e1 = ab(2); %e1 = # der Kante
e2 = find_edge(ab, T1o(:,1:3), T2o(:,1:3)); %e2 = # der Kante
%Setze jeweilige Vorgänger p# und Nachfolger n# der Kante
if (e1 == 1)
    p1 = 3; n1 = 2;
elseif (e1 == 2)
    p1 = 1; n1 = 3;
elseif (e1 == 3)
    p1 = 2; n1 = 1;
end
if (e2 == 1)
    p2 = 3; n2 = 2;
elseif (e2 == 2)
    p2 = 1; n2 = 3;
elseif (e2 == 3)
    p2 = 2; n2 = 1;
end

%Ermittle c
c = T(2*i-1:2*i, p1);
%Ermittle d
d = T(2*k-1:2*k, p2);

%Konstruiere Kanten der neue Dreiecke
T1 = [T1o(:, e1) d c];
T2 = [T1o(:, n1) c d];

%push neue Kanten auf den Stack
t = search_other(i, k, edges);
for l=1:size(t, 2)
    edges(t(l), :) = [];
end
edges = [k 3; edges];
edges = [k 1; edges];
edges = [i 3; edges];
edges = [i 1; edges];

%Ermittle Nachbarn
a = T(2*i-1:2*i, e1);
b = T(2*i-1:2*i, n1);
nb1 = T1o(2, 3+n1);
nb2 = T1o(2, 3+p1);
nb3 = T2o(2, 3+n2);
nb4 = T2o(2, 3+p2);
T1 = [T1, [1 0 1; nb3 k nb2]];
T2 = [T2, [1 0 1; nb1 i nb4]];

%Update alten Nachbar1 und alten Nachbar3
if (nb1 ~= 0)
    bc = [b c];
e3 = find_edgenb(bc, T(2*nb1-1:2*nb1, 1:6));
T(2*nb1-1:2*nb1, 3+e3) = k;
end
if (nb3 ~= 0)
    ad = [a d];
e4 = find_edgenb(ad, T(2*nb3-1:2*nb3, 1:6));
T(2*nb3-1:2*nb3, 3+e4) = i;

```

```

        end

        %Füge neue Dreiecke in die Triangulierung T ein
        T(2*i-1:2*i,1:6) = T1;
        T(2*k-1:2*k,1:6) = T2;
    end
end
end

%— Funktion isOut liefert 1, falls d außerhalb des Umkreises(abc)
%—                                0, sonst
function isOut = outside_circumcircle(abc, d)

%Bestimme Umkreis per Gleichungssystem
A = [ abc(1,1) abc(2,1) 1;
      abc(1,2) abc(2,2) 1;
      abc(1,3) abc(2,3) 1];
b = [ abc(1,1)^2+abc(2,1)^2;
      abc(1,2)^2+abc(2,2)^2;
      abc(1,3)^2+abc(2,3)^2];
x = A\b;
u(1) = x(1)/2;
u(2) = x(2)/2;
r = sqrt(x(3)+u(1)^2+u(2)^2);

%vgl. Definition 4 (Bezug)
power = norm(d-u')^2 - r^2;
if ( power > 0 )
    isOut = 1;
else
    isOut = 0;
end

```

Literaturverzeichnis

[Ed] H. Edelsbrunner, *Geometry and topology for mesh generation* (2001) 1-25.

Die Bedingte Delaunay Triangulierung

Mladjan Radic

Mladjan.Radic@uni-ulm.de

1 Einleitung

Die folgenden Kapitel bauen auf den Vortrag „Die Delaunay Triangulierung“ von Herrn Pascal Heiter auf. Es werden aber andere Annahmen getroffen. Bisher haben wir nur eine Menge von Punkten in einem zweidimensionalen Raum betrachtet. Diese Menge wird im Weiteren mit $S \subset \mathbb{R}^2$ bezeichnet. Wir wollen unser Modell erweitern und fügen eine Menge L von Liniensegmenten hinzu. Diese Liniensegmente verbinden jeweils zwei Punkte aus S und sind vorgegebene Kanten. Diese werden insbesondere bei einer Triangulierung berücksichtigt. Sie werden also beispielsweise nicht durch einen Edge-Flip zerstört. Desweiteren wird das sogenannte „Meshing Problem“ betrachtet und genauer analysiert. Hier werden die zu triangulierenden Punkte durch weitere ergänzt. Der Algorithmus fügt also weitere Punkte hinzu, um somit eine Triangulierung zu erhalten, die gewisse Eigenschaften an die jeweiligen Dreiecke fordert: zum Beispiel Winkelgröße oder Seitenverhältnisse.

2 Plane-Sweep Algorithmus

Wie in der Einleitung erwähnt, betrachten wir eine endliche Menge an Punkten $S \subset \mathbb{R}^2$ und eine endliche Menge L , bestehend aus Liniensegmenten. Jede von Ihnen verbindet zwei Punkte aus S . Wir werden ab sofort fordern, dass zwei Linien entweder disjunkt sind oder nur einen Endpunkt gemeinsam haben.

Definition 1 (Bedingte Triangulierung). *Eine bedingte Triangulierung von S und L ist eine Triangulierung, die alle vorgegebenen Liniensegmente aus L enthält.*

Abb. 1 verdeutlicht die Definition der bedingten Triangulierung.

Der Plane-Sweep Algorithmus ist eine effiziente Methode zur Konstruktion einer bedingten Triangulierung. Die Idee ist, eine vertikale Linie L_0 von links nach rechts über das zu triangulierende Gebiet gleiten zu lassen. Jeder Punkt, der von L_0 geschnitten wird, wird zur schon vorhandenen Triangulierung hinzugefügt. Wir erhalten also eine partielle Triangulierung links von L_0 . Falls ein Liniensegment von L_0 geschnitten wird, so triangulieren wir alles oberhalb und unterhalb des Liniensegments. Eine eigene Implementierung und genauere Beschreibung des Algorithmus befindet sich im Anhang. Abb. 2 veranschaulicht den Plane-Sweep Algorithmus.

3 Bedingte Delaunay Triangulierung

Die Triangulierung, die durch den Plane-Sweep Algorithmus generiert wird erzeugt meistens Dreiecke mit spitzen Winkeln (siehe Abb. 2). Um dies zu verhindern, benötigen wir zuerst die Definition der „Sichtbarkeit“:

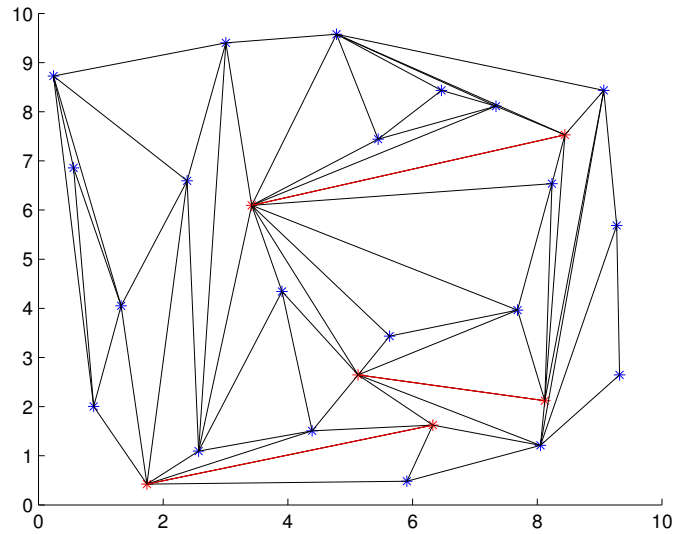


Abb. 1. Bedingte Triangulierung von S und L . Liniensegmente sind rot gekennzeichnet.

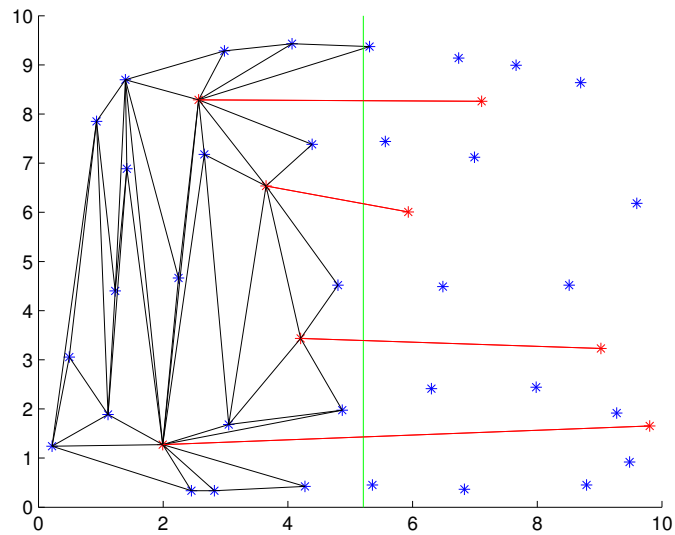


Abb. 2. Triangulierung durch den Plane-Sweep Algorithmus.

Definition 2 (Sichtbarkeit). Zwei Punkte $v, w \in \mathbb{R}^2$ heißen *sichtbar* zueinander, falls die offene Verbindungslinie vw keine Punkte aus S enthält und keine Schnittpunkte mit den Liniensegmenten aus L besitzt. Wenn also gilt:

$$vw \cap S = \emptyset \quad \text{und} \quad vw \cap l = \emptyset \quad \forall l \in L$$

wobei: $vw = \{v + t \cdot (w - v) : t \in (0, 1)\}$

Mit dieser Definition lässt sich nun die bedingte Delaunay Triangulierung definieren:

Definition 3. Seien $a, b \in S$. Die Gerade ab ist eine Kante der bedingten Delaunay Triangulierung, falls eine der folgenden Bedingungen erfüllt ist:

1. $ab \in L$ oder
2. a, b sind sichtbar zueinander und es existiert ein Kreis, der durch a und b verläuft, mit der Eigenschaft, dass jeder Punkt innerhalb des Kreises nicht sichtbar ist zu jedem Punkt v aus dem Inneren der Geraden ab .

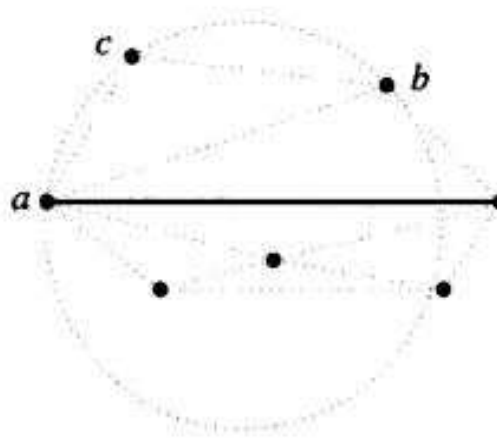


Abb. 3. Bedingte Delaunay Triangulierung von sieben Punkten und einem Liniensegment. Der Umkreis des Dreiecks abc enthält nur Punkte, die nicht sichtbar sind zu allen Punkten aus dem Inneren der Gerade ab .

Anmerkung 1. Falls $L = \emptyset$, dann ist die bedingte Delaunay Triangulierung von S und L gerade gleich der Delaunay Triangulierung.

Um zu zeigen, dass die Definition der bedingten Delaunay Triangulierung Sinn macht, stellen wir eine allgemeine Form der Eigenschaft „lokal Delaunay“ vor.

Definition 4 (lokal Delaunay). Sei T eine beliebige bedingte Triangulierung von S und L . Eine Kante $ab \in T$ heißt lokal Delaunay, falls eine der beiden Eigenschaften erfüllt ist:

1. $ab \in L$.
2. ab ist eine Kante der konvexen Hülle der Triangulierung.
3. Seien die Dreiecke $abc, abd \in T$ gegeben, dann liegt d außerhalb des Umkreises des Dreiecks abc .

Lemma 1. Sei T eine bedingte Triangulierung von S und L . Falls jede Kante von T lokal Delaunay ist, so ist T die bedingte Delaunay Triangulierung von S und L .

Beweis. Wir zeigen, dass jede Kante $ab \in T$ eine der beiden Bedingungen aus Definition 3 erfüllt. Sei dazu ab eine Kante und $v \in T$ ein beliebiger Punkt. Wir nehmen an, dass $ab \notin L$. Also gehört diese Kante zu der bedingten Delaunay Triangulierung. (Siehe Vortrag „Die Delaunay Triangulierung“, Pascal Heiter). Wir nehmen zudem auch an, dass ab keine Kante der konvexen Hülle von T ist. In diesem Fall können wir einen Kreis finden, der durch a und b verläuft mit der Eigenschaft, dass v außerhalb des Kreises liegt. Das bedeutet aber, dass die Kante ab zu zwei Dreiecken gehört. Sei abc dasjenige Dreieck, welches v durch die Kante ab trennt. Was zu zeigen bleibt ist, dass v zu einem Punkt w aus dem Inneren der Geraden ab sichtbar ist. Daraus würde dann folgen, dass der Punkt v außerhalb des Umkreises von abc liegt. Wir betrachten die Folge K_n derjenigen Kanten aus T , die die Gerade vw schneiden. Wenn w und v sichtbar zueinander sind, dann folgt daraus, dass $K_n \notin T$ und die Behauptung mit dem Delaunay Lemma (siehe „Die Delaunay Triangulierung“, Pascal Heiter). $\square$

Mit dieser Definition der lokalen Delaunay Eigenschaft können wir uns den Edge-Flip zu Nutze machen, um eine bedingte Delaunay Triangulierung zu erhalten. Der einzige Unterschied zu einer unbedingten Delaunay Triangulierung liegt darin, dass die vorgegebenen Liniensegmente nicht geflippt werden. Mit dieser Überlegung können wir nun auch das „MaxMin-Angle“ Lemma auf die bedingte Delaunay Triangulierung übertragen:

Lemma 2. Unter allen bedingten Triangulierungen von S und L , maximiert die bedingte Delaunay Triangulierung den kleinsten Winkel.

4 Delaunay Verfeinerung

4.1 Idee und Motivation

Dieses Kapitel behandelt eine spezielle Form der Delaunay Triangulierung. Die Idee ist, neue Punkte, und damit auch neue Dreiecke, zu der schon vorhandenen Triangulierung hinzuzufügen. Die Delaunay Verfeinerung ist zudem ein Algorithmus, welcher folgende Eigenschaften an die Dreiecke sicher stellt:

- Alle Dreiecke haben beschränkte Seitenverhältnisse.
- Der kleinste Winkel unter allen Dreiecken ist größer als eine vorgegebene Konstante.

Wir wollen diesen Algorithmus und seine Eigenschaften im Folgenden genauer analysieren. Dazu sei eine polygonale Fläche gegeben. Eventuell enthält diese Fläche Punkte und bedingte Liniensegmente. Als Endergebnis wollen wir eine Triangulierung dieser polygonalen Fläche erhalten. Diese Triangulierung soll alle vorgegebenen Ecken, sowie Liniensegmente enthalten. Ein Beispiel dieser Triangulierung ist in Abb. 4 gegeben.

Wir werden ab sofort die vorgegebenen Punkte und Liniensegmente mit G , die zugehörige Triangulierung mit T bezeichnen.

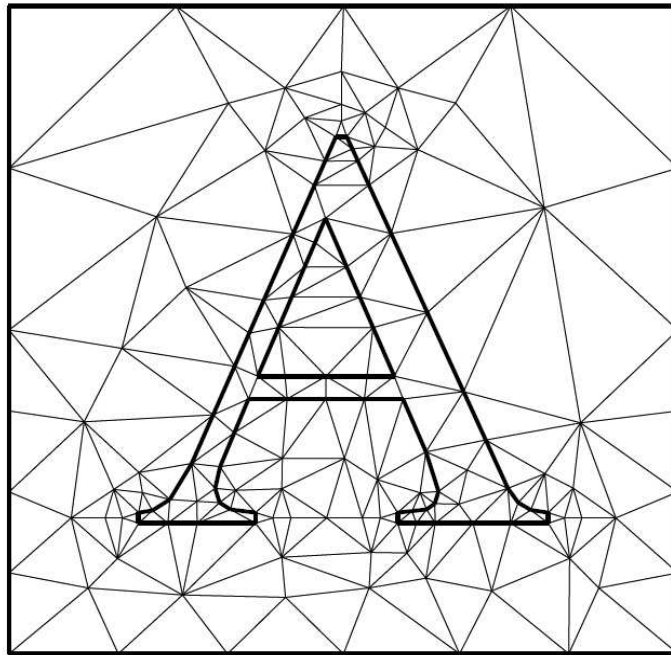


Abb. 4. Triangulierung einer polygonalen Fläche.

4.2 Vorüberlegungen - Kriterien an das Dreieck

Die Qualität eines Dreiecks abc werden wir an seinem kleinsten Winkel messen. Diesen werden wir mit θ bezeichnen. Alternativen um die Güte von abc zu bestimmen, sind gegeben durch:

- den größten Winkel von abc oder
- dem „aspect ratio“, wobei der „aspect ratio“ das Verhältnis zwischen der größten Kante des Dreiecks und der kleinsten Höhe angibt.

Wir können aber sagen, dass wenn wir eine untere Schranke für θ fordern, der größte Winkel des Dreiecks abc maximal $\pi - 2 \cdot \theta$ ist. Somit ist der größte Winkel auch beschränkt. Zur zweiten Alternative können wir analog vorgehen. Falls wir eine untere Schranke an den kleinsten Winkel θ fordern, so ist auch der „aspect ratio“ beschränkt. Dies wird anhand Abb. 5 verdeutlicht. In Abb. 5 haben wir ein Dreieck abc gegeben mit kleinstem Winkel θ . ac ist die größte Kante des Dreiecks. x ist in diesem Fall die orthogonale Projektion von b auf ac , insbesondere die kleinste Höhe. Mit diesen Voraussetzungen können wir uns nun folgende Gleichungen herleiten:

- $\|b - x\| = \|b - a\| \cdot \sin(\theta)$
- $\|b - a\| \geq \frac{\|c - a\|}{2}$

Aus diesen zwei Gleichungen erhalten wir sofort:

$$\frac{1}{\sin(\theta)} \leq \underbrace{\frac{\|c - a\|}{\|b - x\|}}_{\text{aspect ratio}} \leq \frac{2}{\sin(\theta)}$$

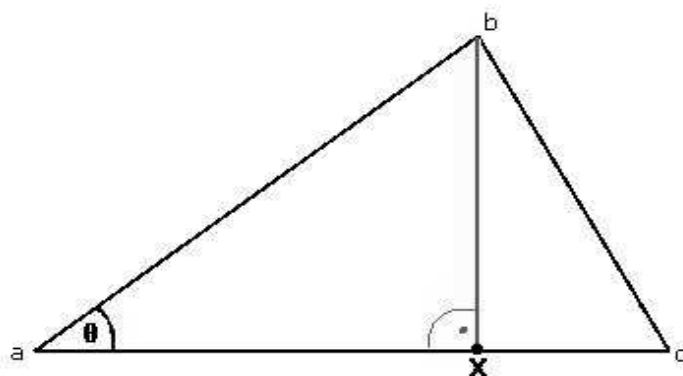


Abb. 5.

Nun ist offensichtlich, dass falls θ beschränkt ist, so auch der „aspect ratio“. Wir werden ab sofort annehmen, dass $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ gilt. Mit diesen Vorüberlegungen verfolgen wir also nun das Ziel, die Triangulierung T so zu konstruieren, dass der kleinste Winkel aller Dreiecke nicht kleiner ist als eine gewisse Konstante.

4.3 Delaunay Verfeinerung

Wir werden nun T so konstruieren, dass T die Delaunay Triangulierung von G ist. Dazu werden wir weitere Punkte zu der vorhandenen Triangulierung hinzufügen, um diese zu verfeinern. Die Punkte werden nach den folgenden Kriterien eingefügt:

1. Sei ab ein Liniensegment aus G . Liegt ein Punkt aus G innerhalb des Kreises, welcher um ab verläuft, so fügen wir den Mittelpunkt von ab als neuen Punkt ein. Diesen Vorgang werden wir als g_1 bezeichnen.
2. Sei das Dreieck $abc \in T$ gegeben. Falls abc einen Winkel besitzt, der kleiner ist als eine vorgegebene Konstante, so fügen wir den Mittelpunkt des Umkreises von abc als neuen Punkt ein. Diesen Vorgang werden wir mit g_2 bezeichnen.

Durch das Hinzufügen von neuen Punkten mit den Funktionen g_1, g_2 erhalten wir durch einige Anwendung des Edge-Flips eine neue Triangulierung. Dieser Vorgang wird mit den Abbildungen 6-9 noch genauer erläutert:

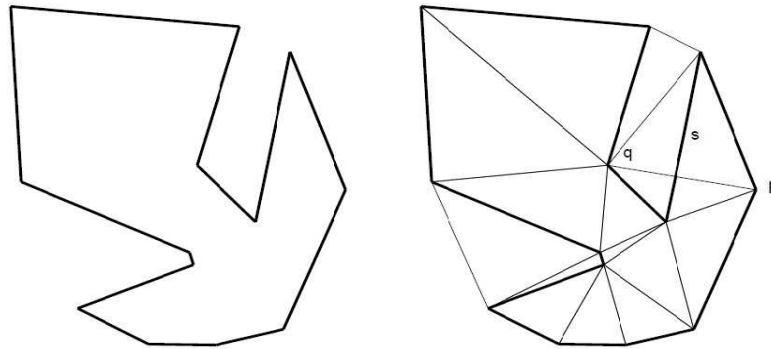


Abb. 6. Links: Das zu triangulierende Gebiet (Input). Rechts: s ist keine Delaunay-Kante $\Rightarrow$ Anwendung von g_1 .

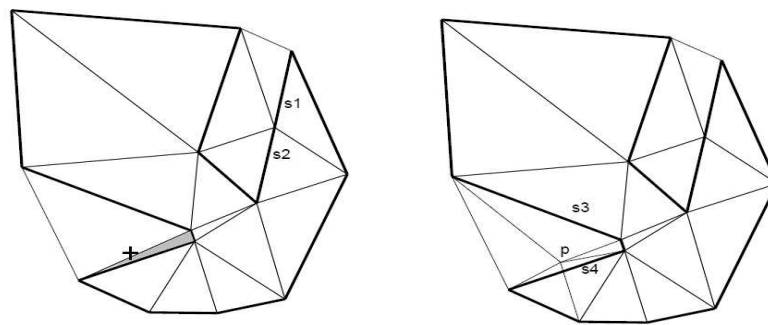


Abb. 7. Links: Kreuz kennzeichnet den Umkreismittelpunkt des Dreiecks, welches einen kleineren Winkel besitzt als eine vorgegebene Konstante. Rechts: Umkreismittelpunkt zur Triangulierung hinzugefügt g_2 wird angewendet.

4.4 Problemstellungen

Einfügen neuer Punkte verursacht womöglich ein ungewolltes Anwachsen von G . Eine Lösung wäre, G durch ein geeignetes Polygon zu umschließen. Wir wählen dazu ein Rechteck, welches wir mit R bezeichnen wollen. Wir wählen R dreimal so groß wie das kleinste Rechteck welches G beinhaltet. Jede Seite von R wird in drei Liniensegmente unterteilt. Es entstehen also 12 neue Punkte. Die Wahl von R impliziert, dass die Dreiecke welche bezüglich der 12 Punkte am Rand entstehen, keine spitzen Winkel beinhalten. Somit garantieren wir, dass die Mittelpunkte aller Dreiecke innerhalb von R liegen.

Eine wichtigere Frage, mit der wir uns beschäftigen wollen ist, ob der Algorithmus terminiert. Abb. 6 - Abb. 9 lassen vielleicht vermuten, dass wir unendlich viele Punkte hinzufügen. Um diese Frage beantworten zu können, überlegen wir uns, was passiert, wenn zwei Punkte keinen kleineren Abstand besitzen als 2ϵ . Nun betrachten wir die Fläche A von R , wenn wir die Höhe h von R und die Breite b

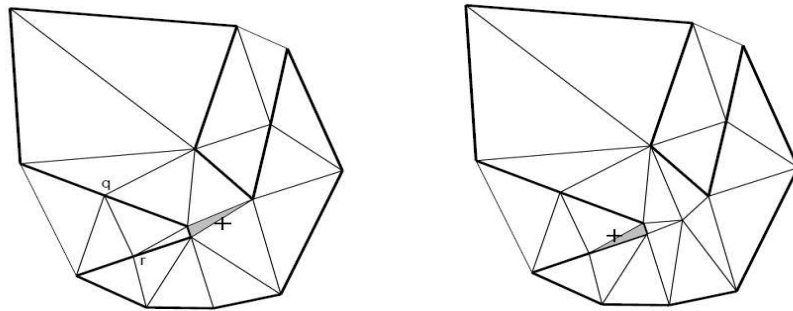


Abb. 8. Analog zu voriger Abbildung. Funktion g_2 wird angewendet.

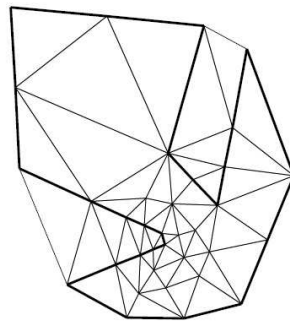


Abb. 9. Trianguliertes Gebiet (Output).

von R um 2ϵ erweitern: $A = (h + 2\epsilon) \cdot (b + 2\epsilon)$. Die Anzahl n der Punkte in A wäre dann:

$$n \leq \frac{A}{\epsilon^2 \cdot \pi}$$

Da nach Voraussetzung die Punkte einen Abstand von 2ϵ besitzen, enthält also die ϵ -Umgebung um einen beliebigen Punkt keinen weiteren Punkt. Falls zwei Punkte einen kleineren Abstand als 2ϵ besitzen, so terminiert der Algorithmus nach Hinzufügen endlich vieler Punkte. Wir müssen also die Existenz von ϵ nachweisen, welches wir im nächsten Kapitel angehen wollen.

4.5 Delaunay Verfeinerung im Detail

Die Abbildung, die wir im Folgenden definieren wollen, wird in der Literatur meist mit „local feature size“ bezeichnet. Diese Abbildung ist in der Tat eine lokale Kenngröße und legt eine gewisse Umgebung um einen Punkt fest.

Definition 5 („local feature size“). Die Abbildung $lfs : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ mit $lfs(x)$ für einen beliebigen Punkt $x \in \mathbb{R}^2$ verstehen wir als den kleinsten Radius um x , sodass die geschlossene Kreisscheibe K mit Mittelpunkt x , eine der folgenden Eigenschaften besitzt:

1. K enthält zwei Punkte aus G .
2. K schneidet ein Liniensegment $L_0 \in G$ und enthält einen Punkt $v \in G$, wobei v nicht der Anfangs- oder Endpunkt von L_0 ist.
3. K schneidet zwei Liniensegmente aus G , wobei diese Liniensegmente keinen Anfangs- oder Endpunkt gemeinsam haben.

Abb. 10 und Abb. 11 verdeutlichen die Definition der Abbildung lfs . Zudem lassen sich einige Eigenschaften der Abbildung lfs festhalten:

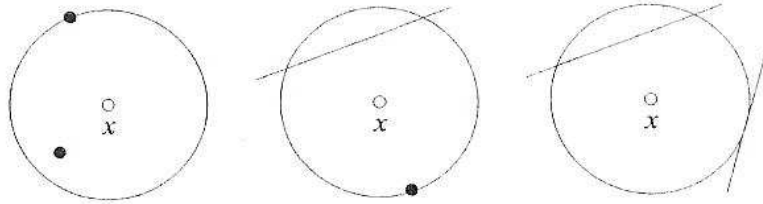


Abb. 10. Veranschaulichung der Definition der Abbildung lfs . Der Radius des Kreises um x ist gerade $lfs(x)$.

Theorem 1 (Lipschitz Bedingung). Die Abbildung lfs erfüllt eine Art der Lipschitz Bedingung, es gilt nämlich $\forall p, q \in G$:

$$|lfs(p) - lfs(q)| \leq \|p - q\|$$

Beweis. Sei o.B.d.A $lfs(q) \geq lfs(p)$. Die geschlossene Kreisscheibe K mit Mittelpunkt Punkt p mit Radius $r = lfs(p)$. Nach der Definition der Abbildung lfs beinhaltet K zwei disjunkte Elemente aus G . Die geschlossene Kreisscheibe K' mit Radius $r' = r + \|p - q\|$ mit Mittelpunkt q hat die Eigenschaft: $K \subset K'$. Das bedeutet aber, dass K' dieselben Elemente aus G enthält wie K . Daraus folgt, dass $lfs(q) \leq r'$. Also erhalten wir:

$$lfs(q) \leq r' = r + \|p - q\| = lfs(p) + \|p - q\|$$

Daraus folgt die Behauptung. □

Das nächste Lemma verifiziert, dass falls ein neuer Punkt zu der Triangulierung hinzugefügt wird, so ist der Abstand zu schon vorhandenen Punkten nicht kleiner als der „local feature size“.

Lemma 3. Für Konstanten C_1, C_2 mit: $1 + \sqrt{2}C_2 \leq C_1 \leq \frac{C_2 - 1}{2 \sin \alpha}$, wobei α die kleinste untere Schranke für die Winkel der Delaunay Verfeinerung beschreibt, gilt: Seien $v, w \in \mathbb{R}$ zwei Punkte, sodass v nach w durch die Delaunay Verfeinerung hinzugefügt wurde. Falls v mit der Funktion:

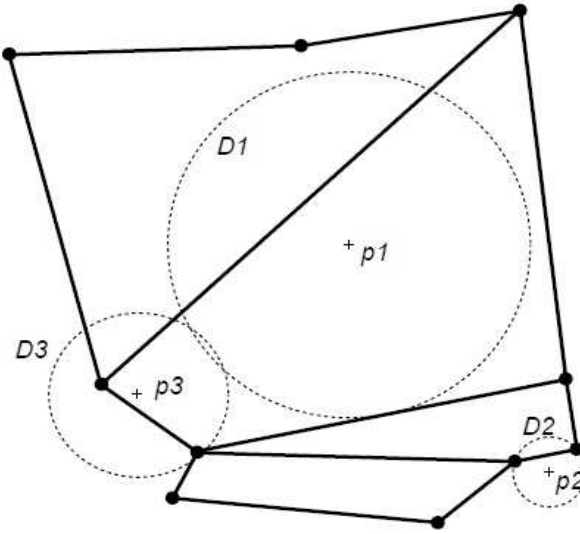


Abb. 11. Veranschaulichung der Definition der Abbildung lfs an einem konkreten Beispiel.

- g_1 hinzugefügt wurde, so gilt: $\|v - w\| \geq \frac{lfs(v)}{C_1}$.
- g_2 hinzugefügt wurde, so gilt: $\|v - w\| \geq \frac{lfs(v)}{C_2}$.

Beweis. Siehe [1]. □

Aus diesem Lemma können wir sofort folgern:

Lemma 4 (Vom kleinsten Abstand). Für alle $v, w \in T$ gilt:

$$\|v - w\| \geq \frac{lfs(v)}{1 + C_1}$$

wobei die Konstante C_1 wie im Lemma 3 gewählt wird und T die endgültige Triangulierung von G ist.

Beweis. Wurde v nach w eingefügt so gilt nach Lemma 3: $\|v - w\| \geq \frac{lfs(v)}{C_1} \geq \frac{lfs(v)}{1 + C_1}$. Andernfalls gilt: $\|v - w\| \geq \frac{lfs(w)}{C_1}$. Also folgt:

$$lfs(v) \leq lfs(w) + \|v - w\| \leq \|v - w\| \cdot (1 + C_1) \Leftrightarrow \|v - w\| \geq \frac{lfs(v)}{1 + C_1}$$

und damit die Behauptung. □

Mit diesem Lemma haben wir nun gezeigt, dass zwei Punkte in der Triangulierung T einen gewissen Abstand zueinander besitzen. Das nächste Theorem nutzt diese Eigenschaft aus, um eine obere Schranke der Ecken für die Triangulierung T zu zeigen.

Theorem 2 (Obere Schranke). Die Anzahl der Ecken in T ist nicht größer als

$$C \int_R \frac{1}{lfs^2(x)} dx$$

wobei R das Rechteck beschreibt, welches G umschließt und C eine noch nicht näher spezifizierte Konstante.

Beweis. Für jede Ecke p sei D_p die Kreisscheibe um p , mit Radius $r_p = \frac{lf s(p)}{2(1+C_1)}$. Nach Lemma 4 sind diese Kreisscheiben disjunkt. Weiterhin können wir sagen, dass mindestens ein Viertel dieser Kreisscheibe in R enthalten ist. Mit dieser Überlegung folgt:

$$\int_R \frac{1}{lf s^2(x)} dx \geq \frac{1}{4} \sum_{p \in G} \int_{D_p} \frac{1}{lf s^2(x)} dx$$

Mit:

$$\int_{D_p} \frac{1}{lf s^2(x)} dx \geq \frac{1}{\max_{x \in D_p} lf s^2(x)} \int_{D_p} dx \geq \frac{1}{(lf s(p) + r_p)^2} \int_{D_p} dx \geq \frac{\pi}{(2C_2 + 3)^2}$$

da $\int_{D_p} = \pi r_p^2$, folgt letztendlich:

$$\int_R \frac{1}{lf s^2(x)} dx \geq \frac{1}{4} \sum_{p \in G} \frac{\pi}{(2C_2 + 3)^2} = \frac{\pi}{4(2C_2 + 3)^2} \sum_{p \in G} 1$$

und damit die Behauptung für $C := \frac{4(2C_2+3)^2}{\pi}$. □

Analog zum obigen Theorem lässt sich eine Aussage über eine untere Schranke für die Anzahl der Ecken in T herleiten. Diese Aussage ist im nachfolgenden Theorem formuliert, welches wir aber nicht beweisen wollen.

Theorem 3 (Untere Schranke). *Die Anzahl der Ecken in T ist mindestens*

$$\hat{C} \int_R \frac{1}{lf s^2(x)} dx$$

wobei R das Rechteck beschreibt, welches G umschließt und $\hat{C}$ eine noch nicht näher spezifizierte Konstante.

5 Zusammenfassung

Die bedingte Delaunay Triangulierung hat viele praktische Anwendungen. Einige Anwendungsbeispiele sind:

- Oberflächenberechnung im $\mathbb{R}^3$
- Gebäudemodellierung
- Meshing von Oberflächen
- Siehe Abb. 12

Auch der Algorithmus zur Delaunay Verfeinerung kann leicht implementiert werden. Zudem haben wir gezeigt, dass der Algorithmus terminiert und die Kriterien aus Kapitel 5 für die Dreiecke erfüllt sind. Dabei soll insbesondere erwähnt werden, dass der „aspect ratio“ beschränkt ist. Leider gilt dies nicht im $\mathbb{R}^3$. Man ist also immer auf der Suche nach einer verallgemeinerten Delaunay Verfeinerung im Dreidimensionalen und nach neuen, schnelleren Algorithmen zur Triangulierung einer polygonalen Fläche, bzw. man versucht, die alten zu verbessern.

6 Anhang

6.1 Eigene Implementierung des Plane-Sweep Algorithmus

Einleitung

Im Folgenden Abschnitt betrachten wir eine Möglichkeit den Plane-Sweep Algorithmus zu implementieren. Das Programm wurde in Matlab realisiert. Das Hauptprogramm und die jeweiligen Unterprogramme werden hier im folgenden angegeben. Die prinzipiellen Ideen werden später genauer erläutert. Zu beachten ist, dass dieser Algorithmus keinen Edge-Flip durchführt. Das Programm generiert also eine Triangulierung, die nicht zwingend die Delaunay Triangulierung sein muss.

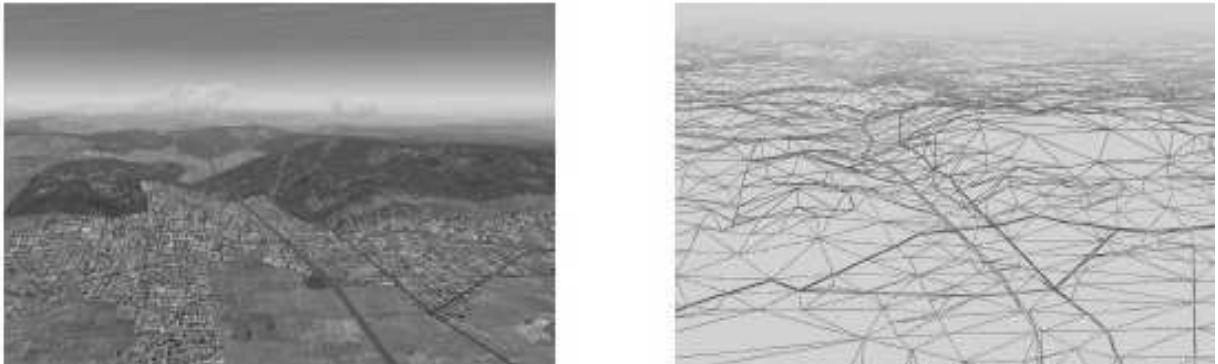


Abb. 12. Die Kanten von strukturellen Besonderheiten wie Straßen und Flüsse sollen eingepreßt werden, d.h. in der Triangulierung auf jeden Fall enthalten sein.

Hauptprogramm (seminar.m)

Beim Starten des Hauptprogramms öffnet sich automatisch ein Koordinatensystem. Hier kann der Benutzer mit der linken Maustaste zuerst seine Punkte beliebig setzen. Damit wird die Menge S generiert. Mit der rechten Maustaste setzt man den letzten Punkt. Weiter kann man wieder mit der linken Maustaste Anfangs- und Endpunkte der Liniensegmente setzen. Mit der rechten Maustaste fügt man den letzten Punkt ein. Damit ist auch die Menge L generiert. Zudem wird die Menge S nach der x -Koordinate sortiert. Die Punkte werden also von „links nach rechts“ in die Triangulierung eingefügt. Die ersten beiden Punkte werden verbunden. Es entsteht also eine erste (konvexe) Linie. Nun wird das erste Unterprogramm „constr_trian“ aufgerufen, dem die Menge S , die konvexe Hülle (in diesem Fall ist es die Verbindungslinie der ersten beiden Punkte) und ein Index übergeben wird. Dieser Index ist ein Verweis auf denjenigen Punkt v aus S , der als Letzter zur Triangulierung hinzugefügt wurde. Mit dieser Information kann der nächste Punkt eingefügt werden, denn er wird zuerst mit v verbunden. Wie wir danach weiter vorgehen wird später genauer erläutert.

```
clf
clear all, clc;
axis([0 10 0 10])
hold on;

S = [];
n = 0;

%%Mit der linken Maustaste werden die Punkte gesetzt:
%%Mit der rechten Maustaste letzten Punkt setzen.
but = 1;
while but == 1
    [xi,yi,but] = ginput(1);
    plot(xi,yi,'b*')
    n = n+1;
    S(:,n) = [xi;yi;0];
end

but = 1;
```

```

i=0;

%%Mit linken Maustaste Anfangs-und Endpunkt bzw.
%%Mit der rechten Maustaste letzten Punkt setzen.
while but == 1
    [xi,yi,but] = ginput(1);
    i=i+1;
    S(:,end+1) = [xi;yi;i];          %Anfangs-und Endpunkt markieren

    if mod(i,2) == 0
        if S(1,end-1) > S(1,end)
            temp = S(3,end-1);
            S(3,end-1) = S(3,end);
            S(3,end) = temp;
        end
        plot([S(1,end-1),S(1,end)], [S(2,end-1),S(2,end)], 'r')
        plot(S(1,end-1),S(2,end-1), '*r')
        plot(S(1,end),S(2,end), '*r')
    end

end

L=S(1:2,n+1:end);

if mod(i,2) == 1
    S(:,end)=[];
end

%%Sortieren der Punkte nach der X-Koordinate:
S = sortrows(S',1)';
S(4,:) = S(3,:);

%Triangulierung aufrufen:
if size(S,2)>0
    plot(S(1,1:2),S(2,1:2), 'k')
    constr_trian(S,[1 2 ; S(3:end,1:2)],2);
end

%%Erneutes Zeichnen der Liniensegmente
for j=1:2:size(L,2)
    plot([L(1,j) L(1,j+1)], [L(2,j) L(2,j+1)], 'r')
end

```

Unterprogramm 1 (constr_trian.m)

Dieses Unterprogramm fügt nun einen Punkt aus S nach dem Anderen ein. Da S nach der x -Achse sortiert ist, werden die Punkte also von links nach rechts trianguliert. Hier wird der Effekt der „Sweep-Line“ (SL) am deutlichsten sichtbar. Wenn die SL einen Punkt v aus S schneidet, wird dieser zur Triangulierung hinzugefügt. Dieser Vorgang wird im Unterprogramm 3 genauer beschrieben. Ist v Anfangspunkt eines Liniensegments l , so speichern wir Anfangs- und Endpunkt von l in eine Matrix M (die im Programm mit L bezeichnet wird). Wird ein Endpunkt eines Liniensegments l von der SL geschnitten, so wird l aus der Matrix M entfernt. Wir merken uns also zu jedem Zeitpunkt, welche Liniensegmente von der SL geschnitten werden. Desweiteren müssen wir überprüfen, ob M leer ist, bevor wir den nächsten Punkt v zur Triangulierung hinzufügen. Denn falls M nicht leer ist, benötigen wir die Position von v . Das bedeutet, dass wir die Liniensegmente, die über v bzw. unter v liegen, berechnen müssen. Dies wird im Unterprogramm 2 genauer erläutert. Weiter merken wir uns immer den letzten Punkt, der zur Triangulierung hinzugefügt wurde.

```

function [] = constr_trian(S,konv_chain,index)

L=[];
i=3;

while i<=size(S,2)

    el = 0;

    %Spezialfall: Endpunkt einer Linie erreicht:
    if S(3,i)>0 && mod(S(3,i),2)==0
        position = find(L(3,:) == S(3,i));
        L(:,position-1:position) = [];
        el=1;
    end

    %Falls die Sweep-Line Liniensegmente schneidet:
    if size(L,2) > 0
        %Bestimme wo der zu triangulierende Punkt sitzt:
        [o,u] = pos(L,S(:,i));
        temp=o;

        if el==1
            index = find(konv_chain(2,:) == S(3,i)-1);
            konv_chain(3,konv_chain(3,:)==o)=0;
        else
            index = find(konv_chain(3,:) == o);
        end

        if u<0
            u = size(konv_chain,2)+1;
        else
            u = find(konv_chain(2,:) == u);
        end

        if isempty(index)
            index = find( konv_chain(2,:) == abs(o) );
        else
            konv_chain(3,index) = 0;
        end

        S(4,i) = temp;

        if o<0
            o = 1;
        else
            o = find( konv_chain(2,:) == abs(o) );
        end

    else
        o = 1;
        u = size(konv_chain,2)+1;
    end

    %Verbindungslinien setzen und zeichnen:
    [konv_chain index] = trian(S,konv_chain,i,index,o,u);

```

```

    %Spezialfall: Anfangspunkt einer Linie erreicht:
    if mod(S(3,i),2) == 1
        L = [L S(:,i) S(:,S(3,:)) == S(3,i)+1)];
    end

    %Nächsten Punkt triangulieren:
    i=i+1;

end
end

```

Unterprogramm 2 (pos.m)

Dieses Unterprogramm berechnet die Liniensegmente, welche oberhalb bzw. unterhalb des zu triangulierenden Punktes v liegen. Dazu betrachten wir die SL, die durch v verläuft und berechnen die Schnittpunkte mit den Liniensegmenten, die von der SL geschnitten werden. (siehe Abb. 14). Die Menge dieser Liniensegmente werden wir mit M bezeichnen. Der Schnittpunkt mit einem Liniensegment wird auf folgende Weise berechnet: sei $l \in M$ beliebig. Sei a der Anfangs- und b der Endpunkt von l . Dann gilt für die Gerade ab : $ab = a + \lambda(b - a)$, wobei $\lambda \in [0, 1]$. Um den Schnittpunkt der SL mit l zu bestimmen, betrachten wir also die Gleichung:

$$ab = v + \mu \cdot e_2 \quad , \text{ wobei } e_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \lambda \in [0, 1], \mu \in \mathbb{R}$$

$$a + \lambda(b - a) = v + \mu \cdot e_2$$

Da $a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$, $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$ und $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$, kann man obige Gleichung auch als folgendes Gleichungssystem schreiben:

$$\begin{pmatrix} 0 & a_1 - b_1 \\ 1 & a_2 - b_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mu \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 - v_1 \\ a_2 - v_2 \end{pmatrix}$$

Mit der Cramerschen Regel erhalten wir als Lösung für λ gerade:

$$\lambda = \frac{\det \begin{bmatrix} 0 & a_1 - v_1 \\ 1 & a_2 - v_2 \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} 0 & a_1 - b_1 \\ 1 & a_2 - b_2 \end{bmatrix}} = \frac{a_1 - v_1}{a_1 - b_1}$$

Da a und b Anfangs- bzw. Endpunkt von l sind, gilt insbesondere $a \neq b$ und somit auch $\det \begin{bmatrix} 0 & a_1 - b_1 \\ 1 & a_2 - b_2 \end{bmatrix} \neq 0$. Mit dieser Lösung können wir nun den Schnittpunkt zwischen l und der SL berechnen für alle $l \in M$. Mit den berechneten Schnittpunkten lässt sich leicht herausfinden, welche Liniensegmente überhalb bzw. oberhalb von v liegen. Somit kann man die Position von v genau bestimmen.

```

function [o,u] = pos(L,v)

%Berechnet die Schnittpunkte der Sweep-Line mit den Liniensegmenten:
lamda = (L(1,1:2:end) - v(1) ) ./ ( L(1,1:2:end)-L(1,2:2:end) );
is=L(1:2,1:2:end)+([lamda;lamda] .* (L(1:2,2:2:end)-L(1:2,1:2:end)));
abstand = [is(2,:) - v(2) ; L(3,1:2:end)];

o = abstand(:,abstand(1,:) > 0);
u = abstand(:,abstand(1,:) < 0);

```

```

    %Rückgabe: Liniensegment welches oberhalb des Punktes liegt
    %bzw: Liniensegment welches unterhalb des Punktes liegt
    o = o( 2,o(1,:) == min(o(1,:)) );
    u = u( 2,u(1,:) == max(u(1,:)) );

    %Spezialfall:
    if isempty(o)
        o = -u;
    end
    if isempty(u)
        u = -1;
    end

end

```

Unterprogramm 3 (trian.m)

Das letzte Unterprogramm ist das Herzstück dieser Implementierung. Es bekommt die aktuelle konvexe Hülle übergeben, den Index zu demjenigen Punkt w , welcher als Letzter zur Triangulierung hinzugefügt wurde und die Position, wo der zu triangulierende Punkt v sich befindet. Damit ist gemeint, dass wir dasjenige Liniensegment, welches oberhalb bzw. unterhalb des Punktes liegt, kennen. Nun verbinden wir den Punkt v mit w und laufen entlang der konvexen Hülle, um weitere Verbindungslinien zu setzen und damit neue Dreiecke zu generieren. Abb. 13 und Abb. 14 verdeutlichen dies. Um zu garantieren, dass wir nicht zu weit laufen, nutzen wir die Eigenschaften der Determinante. Sei $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ ein Punkt aus der konvexen Hülle, welcher oberhalb von $w = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}$ liegt. Dann gilt für $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$:

$$\det \begin{bmatrix} x_1 - v_1 & w_1 - v_1 \\ x_2 - v_2 & w_2 - v_2 \end{bmatrix} < 0.$$

Einen Beweis zu dieser Behauptung werden wir nicht geben. Dies ist aber klar, da dies sofort aus der geometrischen Anschauung folgt: die Determinante $\det(v, w)$ ist die Fläche des Parallelogramms, der von den Vektoren $(x-v)$ und $(w-v)$ aufgespannt wird. Diese kann positiv bzw. negativ sein. Analog können wir mit diesem Determinantenkriterium auch einen Punkt, welcher oberhalb von x liegt, mit v verbinden. Dies führen wir solange fort, bis $\det(x - v, w - v) > 0$ gilt, oder bis wir auf einen Anfangspunkt eines Liniensegments treffen. Völlig analog gilt für einen Punkt $\tilde{x} = \begin{pmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \end{pmatrix}$ aus der konvexen Hülle, welcher sich unterhalb von w befindet:

$$\det \begin{bmatrix} \tilde{x}_1 - v_1 & w_1 - v_1 \\ \tilde{x}_2 - v_2 & w_2 - v_2 \end{bmatrix} > 0.$$

Dies führen wir solange für jeden Punkt unterhalb von w aus, bis $\det(\tilde{x} - v, w - v) < 0$ gilt, oder bis wir auf einen Anfangspunkt eines Liniensegments treffen. Als letzten Schritt müssen wir uns die konvexe Hülle neu generieren und v , der neu zu der Triangulierung hinzugekommen ist, merken.

```

function [konvex_chain ind] = trian(S,kc,i,index,obere_grenze, untere_grenze)

    kc(:,end+1:end+2) = kc(:,1:2);
    o=index;
    u=index;

    %Mit dem Determinantenkriterium Verbindungslinien setzen:
    V = [ S(1:2,kc(1,u)) - S(1:2,i) S(1:2,kc(1,u+1))-S(1:2,i) ];

```

```

while det(V) > 0 && u < untere_grenze
    pause(0.2)
    plot([S(1,kc(1,u)),S(1,i)], [S(2,kc(1,u)),S(2,i)], 'k')
    u=u+1;
    V= [V(:,2) S(1:2,kc(1,u+1))-S(1:2,i)];
end
pause(0.2)
plot([S(1,kc(1,u)),S(1,i)], [S(2,kc(1,u)),S(2,i)], 'k')

%Mit dem Determinantenkriterium Verbindungslinien setzen:
V = [ S(1:2,kc(1,o))-S(1:2,i) S(1:2,kc(1,o-1)) - S(1:2,i) ];
while det(V) < 0 && o > obere_grenze
    pause(0.2)
    o=o-1;
    plot([S(1,kc(1,o)),S(1,i)], [S(2,kc(1,o)),S(2,i)], 'k')
    if o==1
        break
    end
    V=[V(:,2) S(1:2,kc(1,o-1))-S(1:2,i)];
end

%Punkt zur konvexen Hülle hinzufügen:
konvex_chain = [kc(:,1:o),[i ; S(3:4,i)] , kc(:,u:end-2)];
ind=o+1;
end

```

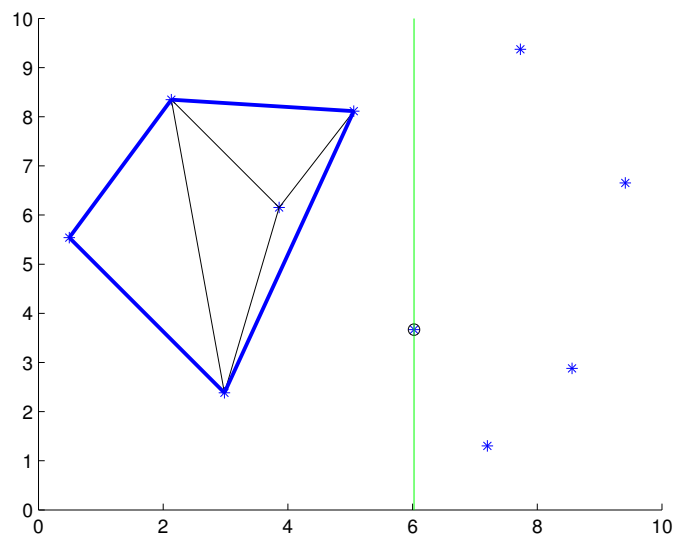


Abb. 13. Konvexe Hülle ist fett markiert. SL ist eingezeichnet und der zu triangulierende Punkt ist eingekreist.

Literaturverzeichnis

1. Herbert Edelsbrunner . *Geometry and Topology for Mesh Generation. (Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics)*. Cambridge University Press; 1 edition (May 28, 2001).

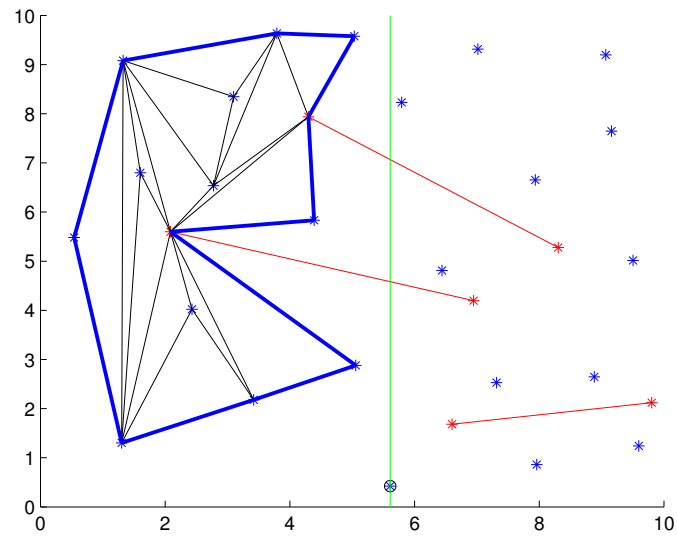


Abb. 14. Wie in Abb. 13. Hier zusätzlich noch mit Liniensegmenten.

2. <http://www.wikipedia.de>
3. <http://www.eecs.berkeley.edu/~jrs/meshpapers/Ruppert.pdf>
4. <http://www.sciencedirect.com>
5. http://math-www.uni-paderborn.de/personelles/AG/Koeckler/gitter/gitter_2005.pdf
6. http://www.math.cmu.edu/~arand/papers/Delaunay_Refinement_Estimate_FS-09.pdf
7. http://opus.kobv.de/tuberlin/volltexte/2008/1966/pdf/si_hang.pdf
8. <http://www.cs.cmu.edu>

Numerische Lösungen von Volterra's Populationsmodell

Katrin Egl

katrin.egl@uni-ulm.de

1 Populations-Modell von Volterra

Das Modell von Volterra ist eine integrale gewöhnliche Differentialgleichung 1. Ordnung; um das Problem zu betrachten, können alle numerischen und auch analytischen Methoden unabhängig voneinander verwendet werden.

Für diese integrale gewöhnliche Differentialgleichung 1. Ordnung werden in der folgenden Ausführung zwei numerische Lösungsansätze vorgestellt (dabei gilt: $\kappa = \mathcal{O}(1)$). Zunächst wird das Modell als Anfangswertproblem 1. Ordnung mit Hilfe von numerischer Integration gelöst, indem die explizite Euler-Methode eingesetzt wird und als numerische Integrationsmethoden die Newton-Cotes-Formeln angewandt werden. Eine weitere numerische Lösung ist es, das Problem in ein System von zwei Anfangswertproblemen erster Ordnung umzuformen und dieses zu lösen.

Für das Bevölkerungswachstum einer Art gilt in einem geschlossenem System folgendes Modell:

$$\frac{dp}{d\tilde{t}} = ap - bp^2 - cp \int_0^{\tilde{t}} p(x) dx \quad p(0) = p_0$$

Der Koeffizient $a > 0$ steht für die Geburtsrate, $b > 0$ für die intraspezifische Konkurrenz und $c > 0$ für die Toxizität. Die Variable p_0 beschreibt die Anfangspopulation, während $p = p(\tilde{t})$ die Population zum Zeitpunkt $\tilde{t}$ darstellt.

Es werden nun zwei dimensionslose Variablen u und t eingeführt, um die Zeit und die Bevölkerung zu skalieren:

$$t = \frac{\tilde{t}}{\frac{1}{b}} \quad u = \frac{p}{\frac{a}{b}}$$

Mit diesen Variablen erhält man somit ein dimensionsloses Problem des Modells, wobei $\kappa \equiv \frac{c}{ab}$:

$$\kappa \frac{du}{dt} = u - u^2 - u \int_0^t u(x) dx \quad u(0) = u_0 \quad (\diamond)$$

2 Numerische Lösung mit zwei verschiedenen Methoden

Nun soll erläutert werden, wie man vorgeht, um gewöhnliche Differentialgleichungen auf einem Rechner zu lösen.

Dazu ist in einem Intervall $\mathbb{I} = [t_0, t_0 + T] \subset \mathbb{R}$ eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung

$$y' = \frac{dy}{dt} = f(t, y(t)) \quad \text{mit einer Anfangsbedingung } y(t_0) = y_0 \in \mathbb{R}^n$$

gegeben. Die Lösung y ist eine vektorwertige Funktion $y : \mathbb{I} \rightarrow \mathbb{R}^n$ und die rechte Seite ist eine vektorwertige Funktion $f : \mathbb{I} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Man bezeichnet die Lösungskurve $y(t)$ auch als Trajektorie; wenn kein Anfangswert vorgegeben ist, ist die Lösungskurve somit nicht auf eine bestimmte Trajektorie festgelegt, sondern man erhält eine Schar von Trajektorien, welche auch Richtungsfeld genannt werden.

Um eine gewöhnliche Differentialgleichung numerisch zu lösen, wird die Differentialgleichung als erstes diskretisiert; das bedeutet, dass die Lösung in einzelnen Schritten berechnet wird. Dafür kann man für das Intervall I ein Gitter einführen, wobei man eine äquidistante Unterteilung wählt:

$$\mathbb{I}_h = \{t_0, t_1, \dots, t_n = t_0 + T\}, \quad \text{mit } t_i = t_0 + ih, i=1, \dots, n$$

Nun werden die Werte $u_i = u_h(t_i)$, $i = 1, \dots, n$ benötigt, wobei $u_h : \mathbb{I}_h \rightarrow \mathbb{R}^n$ die dazugehörige Gitterfunktion ist. Die Gitterfunktion wird so gewählt, dass der Wert der exakten Lösung der Differentialgleichung $y_i = y(t_i)$ durch u_i möglichst gut approximiert wird.

Folglich werden auf dem Gitter $\mathbb{I}_h$ mit der Schrittweite $h \neq 0$ Näherungswerte u_i für y_i an den äquidistanten Punkten $t_i = t_0 + ih$ berechnet. Es gibt einige numerische Verfahren, die auf dieser Diskretisierung basieren. Ein solches Verfahren ist das explizite Euler-Verfahren und auch das Runge-Kutta Verfahren.

Zunächst wird das dimensionlose Problem $(\diamond)$ mit einem beliebigen Wert für κ betrachtet. Es werden in der Ausführung die zwei Methoden vorgestellt, um $(\diamond)$ als folgendes Anfangswertproblem numerisch zu lösen:

$$u' = f(t, u), \quad u(t_0) = u_0$$

Für das Problem $(\diamond)$ gilt hier:

$$\kappa \frac{du}{dt} = u - u^2 - u \int_0^t u(x) dx, \quad (\diamond)$$

$$f(t, u) = \frac{u}{\kappa} [1 - u - \int_0^t u(x) dx]$$

Die beiden Methoden nähern die Lösung zu diskreten Zeiten $t_n = t_0 + nh$, $n = 0, 1, \dots$ an, wobei $h = t_{n+1} - t_n$ den gleichmäßigen Knotenabstand charakterisiert.

2.1 explizite Euler-Methode und Newton-Cotes-Formeln

Mit dem expliziten Euler-Verfahren gilt für die Ableitung y' näherungsweise:

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

und somit $y(t+h) \approx y(t) + hf(t, y(t))$. Für y_i bekommt man an den Stellen t_i die Näherungswerte u_i

durch

$$u_0 = y_0, \\ \frac{u_{i+1} - u_i}{h} = f(t_i, u_i), i=0, \dots, n-1$$

Formt man diese Gleichung um, ergibt sich:

$$u_{i+1} = u_i + hf(t_i, u_i), \quad i=0,1,2,\dots,n-1, \text{ wobei } u_0 = y_0$$

Durch die Differentialgleichung wird ein Richtungsfeld definiert; in den einzelnen Näherungspunkten (t_i, u_i) benutzt das explizite Euler-Verfahren die Steigung dieses Richtungsfeldes, um damit den nächstfolgenden Näherungswert zu bestimmen. Um gute Näherungswerte zu erhalten, wird eine kleine Schrittweite h benötigt.

Diese geometrische Konstruktion der Näherung bezeichnet man als Polygonzugmethode.

Die Lösung von $(\diamond)$ wird mit Hilfe der expliziten Euler-Methode am Knoten t_{n+1} folgendermaßen angenähert:

$$u_{n+1} = u_n + h \frac{u_n}{\kappa} \left[1 - u_n - \int_0^{t_n} u(x) dx \right]$$

In der Lösung durch die explizite Euler-Methode kann das Integral nicht explizit bestimmt werden, aber durch die Anwendung von numerischen Integrationsmethoden, auch bekannt als Quadraturmethoden, kann das Integral angenähert werden.

Dabei soll das Anfangswertproblem

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

durch Integration in diese Integralgleichung

$$y(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(s, y(s)) ds$$

umgeformt werden; anschließend kann das Integral über den unbekannten Integranden durch numerische Integrationsmethoden approximiert werden. Die numerische Integration hat nun zur Aufgabe, dieses Integral zu berechnen.

Am einfachsten ist es, die Funktion $f(x)$ durch ein Polynom zu interpolieren und dieses dann zu integrieren. Diese Idee führt zu den Newton-Cotes-Integralformeln. Das Integral der approximierten Funktion dient jetzt als Annäherung an das gesuchte Integral.

Es geht also darum, ein Integral der Form $\int_a^b f(x) dx$ zu berechnen. Nun führt man durch $\hat{x}_i = a + iH, i=0,\dots,N$ mit $H = \frac{b-a}{N}, N \in \mathbb{N}$ ein äquidistantes Gitter in dem Intervall $[a, b]$ ein und entwickelt das Interpolationspolynom $P_{0,\dots,N} \in \Pi_N$, welches $P_{0,\dots,N}(x) = f(\hat{x}_i), i=0,\dots,N$ erfüllen muss. Aus dem Satz über die Lagrange-Interpolation folgt:

$$P_{0,\dots,N}(x) = \sum_{i=0}^N f_i L_i(x)$$

Dabei sind L_i die Lagrange-Interpolationspolynome. Folglich ergibt sich:

$$\begin{aligned} \int_a^b P_{0,\dots,N}(x) dx &= \sum_{i=0}^N f_i \int_a^b L_i(x) dx = \dots = \\ &= H \sum_{i=0}^N f_i \omega_i = \frac{b-a}{n_s} \sum_{i=0}^N \sigma_i f_i \text{ mit } n_s, \omega_i \in \mathbb{Z} \end{aligned}$$

Die entstandenen Gewichte ω_i sind von f_i, a und b unabhängig, von N jedoch abhängig; die Gewichte liegen in Form von Brüchen $\frac{\sigma_i}{n_s}$ vor. Für konstante Funktionen wird erwartet, dass die Integration exakt ist, und deshalb wird nun gefordert, dass $n_s = \sum_i \sigma_i$. Diese Formeln heißen Newton-Cotes-Formeln.

Für die Annäherung des Integrals ergibt sich mit w_k als Koeffizienten der Integrations-Schemata:

$$\int_0^{t_n} u(x) dx \approx \sum_{k=0}^n w_k u_k \equiv S_n(h)$$

Kombiniert man diese beiden Integrationsmethoden miteinander, spricht man vom expliziten Euler-Newton-Cotes-Schema und erhält folgende Annäherung:

$$u_{n+1} = u_n + h \frac{u_n}{\kappa} [1 - u_n - S_n(h)]$$

Für die Newton-Cotes Formeln ergeben sich folgende Werte:

N	σ_i	n_s	Name
1	1 1	2	Trapez-Regel
2	1 4 1	6	Simpson-Regel

Für die Annäherung an das Integral eignen sich die Newton-Cotes-Integral-Formeln, welche eben die Trapez-Regel und die Simpson-Regel enthalten. Diese genannten Integralformeln bieten sich vor allem deshalb an, da alle Knoten, die zuvor berechnet wurden, verwendet werden.

Diese beiden Regeln gehören zu den summierten Regeln, welchen gemeinsam ist, dass zuerst das Integrations-Intervall $[a, b]$ in n gleich große Teilintervalle $[x_i, x_{i+1}]$, $i=0, \dots, n-1$ zerlegt wird, wobei $x_i = a + ih$ und $h = \frac{b-a}{n}$.

Verwendet man die Trapez-Regel, so interpoliert man die Funktion f auf $[x_i, x_{i+1}]$ linear durch die Werte auf den Intervallrändern. Dies entspricht geometrisch einem Trapez. Für die Abbildung 1 lautet die dazugehörige Formel:

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \cdot \frac{f(a) + f(b)}{2}$$

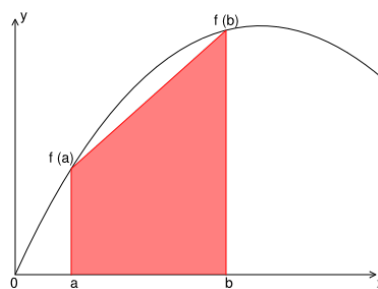


Abb. 1. Trapez-Regel

Es ergibt sich allgemein:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx h \cdot \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2}$$

Die summierte Trapez-Regel lautet also:

$$T(h) := \sum_{x_i}^{n-1} \frac{h}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})]$$

Verwendet man bei jedem Schritt die trapezförmige Integration als Verfahren, wird die Summe, die das Integral berechnet, folgendermaßen dargestellt:

$$\begin{aligned} S_0(h) &= 0 \\ S_1(h) &= \frac{h}{2}(u_0 + u_1) \\ S_n(h) &= S_{n-1}(h) + \frac{h}{2}(u_{n-1} + u_n) \quad \text{für } n=1,2, \dots \end{aligned}$$

Wenn man anstelle einer linearen Funktion den Integranden f durch ein Polynom höheren Grades ersetzt, bekommt man die Simpson-Regel. Bei dieser verwendet man ein gerades n und die Intervalle $[x_{2i}, x_{2i+2}]$, $i = 0, \dots, \frac{n}{2} - 1$. Für den Näherungswert auf jedem der einzelnen Teilintervalle erhält man:

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x) dx \approx \frac{2h}{6} [f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2})]$$

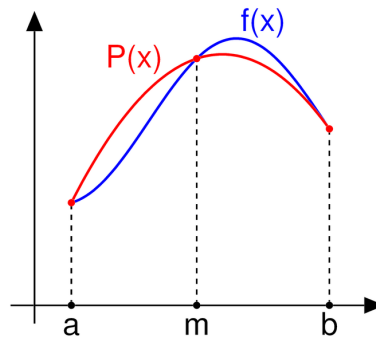


Abb. 2. Simpson-Regel

Diese Regel fordert also, dass die Anzahl der Zwischenintervalle n , die das Intervall $[0, t_n]$ teilen, gerade ist. Deshalb kann die Simpson-Regel nicht bei jedem Schritt verwendet werden. Für ein ungerades n wäre es möglich, die Simpson-Regel auf das Intervall $[0, t_{n-1}]$ und die Trapez-Regel anschließend auf $[t_{n-1}, t_n]$ anzuwenden. Wenn n ungerade ist, sollte allerdings die Trapez-Regel auf das Intervall $[0, t_1] = [0, h]$ angewendet werden, und anschließend die Simpson-Regel eingesetzt werden. An dem Schritt t_n wird die höchste Genauigkeit verlangt, welche durch die Simpson-Regel hier gewährleistet wird. Die beiden Ergebnisse müssen addiert werden, um das zu berechnende Integral auf das Intervall $[0, t_n]$ anzunähern.

Nun wird die Trapez-Regel auf das Intervall $[0, t_1] = [0, h]$ angewendet, und anschließend die Simpson-Regel eingesetzt:

$$\begin{aligned} S_0(h) &= 0 \\ S_1(h) &= \frac{h}{2}(u_0 + u_1) \\ S_n(h) &= S_{n-2} + \frac{h}{3}(u_{n-2} + 4u_{n-1} + u_n) \quad \text{für } n=2,3, \dots \end{aligned}$$

Ein weiteres Verfahren, das hier angewendet werden könnte, ist die modifizierte Euler-Methode, welche noch eine Größenordnung genauer ist, als die explizite Euler-Methode. Dies wird in *Abbildung 3* deutlich.

2.2 Runge-Kutta-Verfahren

Wenn man für das explizite Euler-Verfahren zur Lösung einer Differentialgleichung die Fehleranalyse betrachtet, wird deutlich, dass man aufgrund von Rundungsfehlern die Schrittweite nicht beliebig klein wählen kann. Das Ziel ist es, eine Konsistenzordnung von $\mathcal{O}(h_p)$, wobei p möglichst groß sein soll, zu erhalten. Deswegen wird, um das Anfangswertproblem zu lösen, nun ein Verfahren höherer Ordnung verwendet.

Mithilfe der Formeln für die numerische Integration bekommt man Verfahren höherer Ordnung. Es geht um die Anfangswertaufgabe $y' = f(t, y)$, $y(t_0) = y_0$ in dem Intervall $\mathbb{I} = [t_0, t_0 + T]$. f ist eine stetige Funktion: $f : D \subset \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}^n$. Nun wird das Intervall in ein Gitter $t_0 < T_1 < \dots < t_n = t_0 + T$ eingeteilt und die Integration der Differentialgleichung ergibt dann:

$$y(t) = y(t_0) + \int_{t_0}^t f(s, y(s)) ds$$

Für die Teilintervalle $[t_j, t_{j+1}] \subset \mathbb{I}$ erhält man, dass

$$y_{j+1} = y_j + \int_{t_j}^{t_{j+1}} f(s, y(st)) ds$$

Die erhaltenen Integrale $\int_{t_j}^{t_{j+1}} f(s, y(st)) ds$ werden jetzt durch die Integrationsformeln $h_j \sum_{l=1}^m \gamma_l f(s_l, y(s_l))$, $s_l \in [t_j, t_{j+1}]$ ersetzt, in welchen auch variable Schrittweiten h_j zugelassen werden.

Die Integrale über die Teilintervalle können mit den Formeln der numerischen Integration folgendermaßen approximiert werden:

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} f(s, y(st)) ds \approx h_j \sum_{l=1}^m \gamma_l f(s_l, y(s_l)), s_l \in [t_j, t_{j+1}]$$

Da $y(s_l)$ unbekannt ist, wird eine Näherung für $f(s_l, y(s_l))$ benötigt. Der Ansatz dafür lautet folgendermaßen:

$$f(s_l, y(s_l)) \approx k_l$$

Bei expliziten Runge-Kutta-Verfahren kann man mit bereits berechneten $k_1, \dots, k_{l-1}$ dann $y(s_l)$ annähern:

$$y(s_l) \approx y_j + h_j(\beta_{l,1}k_1 + \dots + \beta_{l,l-1}k_{l-1})$$

Jetzt sei $s_1 = t_j$ und $s_l = t_j + \alpha_l h_j$, und für α_l soll gelten: $\alpha_l = \sum_{r=1}^{l-1} \beta_{l,r}$. Mit diesen Voraussetzungen wird nun ein Gleichungssystem konstruiert:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_j, y_j) \\ k_2 &= f(t_j + \alpha_2 h_j, y_j + h_j \beta_{2,1} k_1) \\ k_3 &= f(t_j + \alpha_3 h_j, y_j + h_j(\beta_{3,1} k_1 + \beta_{3,2} k_2)) \\ &\vdots \\ k_m &= f(t_j + \alpha_m h_j, y_j + h_j(\beta_{m,1} k_1 + \dots + \beta_{m,m-1} k_{m-1})) \end{aligned}$$

Durch eine Linearkombination der berechneten k_j erhält man das Verfahren:

$$u_{j+1} = u_j + h_j(\gamma_1 k_1 + \dots + \gamma_m k_m)$$

Ein solches Verfahren, das die Stufenwerte k_i hat, heißt m -stufiges Runge-Kutta-Verfahren. Daraus ergeben sich verschiedene Methoden. Dazu zählt auch das explizite Euler-Verfahren 1. Ordnung; es gilt: $m = 1$, $\gamma_1 = 1$, $u_{j+1} = u_j + h_j f(t_j, u_j)$. Für $m = 4$ erhält man das Klassische Runge-Kutta-Verfahren

4. Ordnung, welches gleichzeitig der Simpson-Regel der numerischen Integration entspricht:

$$\begin{array}{c|ccc}
 0 & & & \\
 \alpha_2 & \beta_{2,1} & & \\
 \alpha_3 & \beta_{3,1} & & \\
 \vdots & \vdots & & \\
 \alpha_m & \beta_{m,1} & \dots & \beta_{m,m-1} \\
 \hline
 & \gamma_1 & \dots & \gamma_{m-1} & \gamma_m
 \end{array}
 \quad
 \text{Hier gilt: }
 \begin{array}{cccc}
 0 & & & \\
 \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \\
 \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \\
 1 & 0 & 0 & 1 \\
 \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6}
 \end{array}$$

Nun wird diese weitere Möglichkeit, das klassische 4-stufige Runge-Kutta-Verfahren, um die Gleichung ($\diamond$) numerisch zu lösen, ausgeführt. Um von u_n mit der Schrittgröße h u_{n+1} zu erhalten, sieht das Problem ($\diamond$), wenn man das Runge-Kutta-Verfahren verwendet, folgendermaßen aus:

$$f(t, u) = \frac{u}{\kappa} \left[1 - u - \int_0^t u(x) dx \right] \Rightarrow f(t_n, u_n) = \frac{u_n}{\kappa} [1 - u_n - S_n(h)]$$

$$\begin{aligned}
 k_1 &= f(t_n, u_n) \\
 &= \frac{u_n}{\kappa} [1 - u_n - S_n(h)] \\
 \xi_1 &= u_n + \frac{h}{2} k_1 \\
 k_2 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, \xi_1\right) \\
 &= \frac{1}{\kappa} \xi_1 \left[1 - \xi_1 - S_n(h) - \frac{h}{4} (u_n + \xi_1) \right] \\
 \xi_2 &= u_n + \frac{h}{2} k_2 \\
 k_3 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, \xi_2\right) \\
 &= \frac{1}{\kappa} \xi_2 \left[1 - \xi_2 - S_n(h) - \frac{h}{4} (u_n + \xi_2) \right] \\
 \xi_3 &= u_n + h k_3 \\
 k_4 &= f(t_n + h, \xi_3) \\
 &= \frac{1}{\kappa} \xi_3 \left[1 - \xi_3 - S_n(h) - \frac{h}{6} (u_n + 4\xi_2 + \xi_3) \right]
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow u_{n+1} = u_n + h \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

Hier wird wiederum die Trapez-Regel verwendet, um das Integral $\int u dx$ in dem Intervall $[t_n, t_{n+\frac{1}{2}}]$ anzunähern, indem man k_2 und k_3 berechnet. Um das Integral in $[t_n, t_{n+1}]$ anzunähern, setzt man die Simpson-Regel ein und berechnet k_4 ; für dieses Intervall kann ebenso die Trapez-Regel verwendet werden. Im letzten Schritt des Runge-Kutta-Verfahren wird u_{n+1} festgelegt, so dass durch geeignete Rekursionsbeziehungen, wie die Simpson-Regel oder Trapez-Regel, $S_{n+1}(h)$ bestimmt werden kann.

Es könnten auch die 5-stufige Runge-Kutta-Fehlberg-Methode und die 6-stufige Runge-Kutta-Verner-Methode verwendet werden; da die Zwischenwerte der Knoten nicht gleichmäßig groß sind, ist dies nicht so einfach. Das heißt, es werden Zwischenrechnungen benötigt, um von dem Schritt t_n auf den Schritt t_{n+1} zu kommen. Diese treten in den Integralen auf, so dass auf der uneinheitlichen Partition $[t_n, t_{n+1}]$ die Trapezregel oder die Integration von Interpolationspolynomen erforderlich sein kann.

2.3 Ergebnisse der numerischen Lösungen

Abbildung 3 zeigt die numerischen Lösungen von $(\diamond)$ für den Fall $\kappa = 0,1$ mit $u_0 = 0,1$, welche durch verschiedene Methoden erhalten wurden; die Lösungen wurden mit der expliziten Euler-Methode, der modifizierten Euler-Methode und dem klassischen 4-stufigen Runge-Kutta-Verfahren berechnet. Bei allen Methoden wird die Trapez-Regel verwendet, um das Integral anzunähern. Selbst wenn man stattdessen die Simpson-Regel einsetzt, ändern sich die Ergebnisse nicht merklich. Abbildung 3 zeigt auch die numerische Lösung von dem System der zwei Differentialgleichungen 1. Ordnung, die durch die Runge-Kutta-Fehlberg-Methode erhalten wurde und im nächsten Kapitel näher erläutert wird. In allen aufgeführten Lösungsverfahren wurde das Intervall $0 \leq t \leq 2$ in 20 Schritte unterteilt.

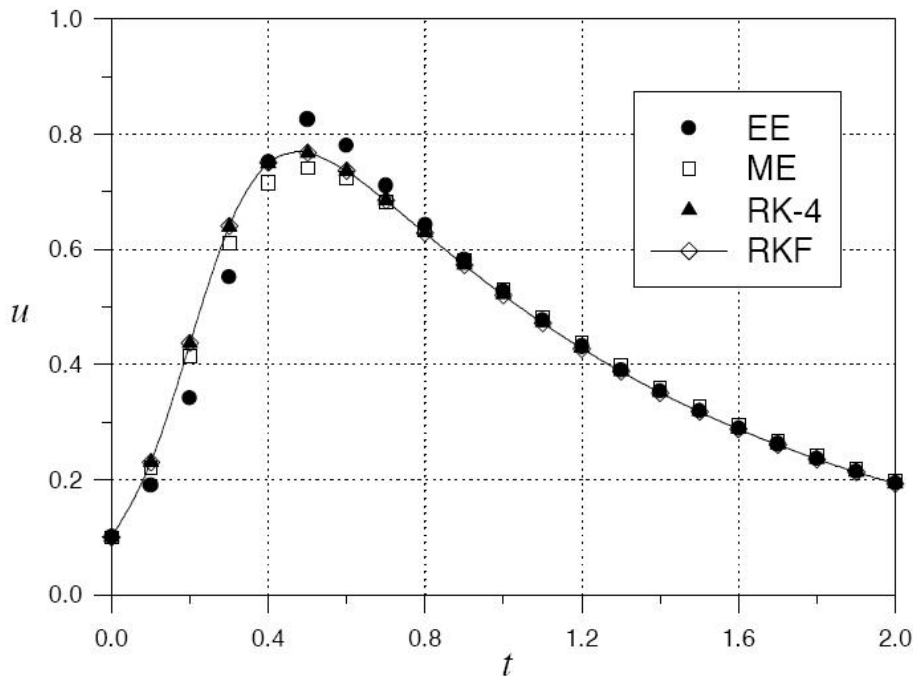


Abb. 3. Numerische Lösungen von $(\diamond)$ mit $\kappa = 0.1$ und $u_0 = 0.1$ mit Hilfe von EE = explizite Euler-Methode, ME = modifizierte Euler-Methode, RK-4 = 4-stufiges Runge-Kutta-Verfahren und die numerische Lösung des Systems mit RKF = Runge-Kutta-Fehlberg-Methode

3 Numerische Lösung des Modells als System

Im Folgenden wird eine weitere numerische Lösung vorgestellt. Dazu wird die integrale gewöhnliche Differentialgleichung 1. Ordnung in ein System von zwei Anfangswertproblemem 1. Ordnung umgeformt.

3.1 Numerische Lösung des Problems als System

Um ein solches gekoppeltes System von zwei Differentialgleichungen 1. Ordnung aus dem vorliegenden Problem zu erhalten, schreibt man $y = \ln u$. Somit gilt: $u = e^y$ und mit Einsetzen in ($\diamond$) ergibt sich:

$$\kappa \frac{dy}{dt} e^y = e^y - e^{y^2} - e^y \int_0^t e^{y(\tau)} d\tau$$

Teilt man diese Gleichung durch e^y , erhält man:

$$\kappa \frac{dy}{dt} = 1 - e^y - \int_0^t e^{y(\tau)} d\tau$$

Leitet man diese Gleichung nach t ab, erhält man folgende Differentialgleichung 2. Ordnung:

$$\kappa y'' = -y' e^y - e^y \quad (\triangle)$$

Setzt man nun $x = y'$ gilt: (1) $x' = y''$ und (2) $u' = (e^y)' = y' e^y = xu$. Mit diesen Gleichungen (1), (2) und mit ($\triangle$) kann man die erhaltene gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung in ein System umformen:

$$x' = -\frac{x+1}{\kappa} u \quad x(0) = \frac{1-u_0}{\kappa}$$

$$u' = xu \quad u(0) = u_0$$

Dabei stellt $u = \frac{u'}{x}$ die relative Änderung von u dar, und beschreibt somit die Schwankung der Population.

Auf folgende Weise erhält man die Anfangsbedingung $x(0) = \frac{1-u_0}{\kappa}$: Ausgangslage ist wieder die Gleichung ($\diamond$), welche man durch u und durch κ teilt, so dass man folgende Gleichung erhält:

$$\frac{u'}{u} = \frac{1 - u - \int_0^t u(\tau) d\tau}{\kappa}$$

Da $x = \frac{u'}{u}$ und $\int_0^t u(\tau) d\tau \xrightarrow{t \rightarrow 0} 0$ gilt, folgt daraus: $x(0) = \frac{1-u_0}{\kappa}$

Dieses System von Differentialgleichungen kann nun analytisch in der 'phase plane' oder wie hier durch den Einsatz von numerischen Methoden gelöst werden. Man verwendet höherstufige numerische Methoden, um ein solches gekoppeltes System von zwei Anfangswertproblemen 1. Ordnung zu lösen. Drei solcher Methoden sind das 4-stufige Runge-Kutta-Verfahren, die 5-stufige Runge-Kutta-Fehlberg-Methode und die 6-stufige Runge-Kutta-Verner-Methode, auf welche hier nicht näher eingegangen wird.

Wird dieses gekoppelte System numerisch gelöst, kann folgendes beobachtet werden:

- $u(t) \rightarrow 0$, für festes κ und u_0 mit $t \rightarrow \infty$
- $x(t) \rightarrow k(u_0, \kappa)$, für $t \rightarrow \infty$ mit $k(u_0, \kappa)$ als negative Konstante, welche die Zerfallsrate beschreibt.

Für $t \rightarrow \infty$, sozusagen für große Zeiträume, ist eine genauere Modellierung der Populations-Entwicklung möglich. Dafür wird die Malthus-Gleichung eingesetzt.

Diese Gleichung, die zur Beschreibung von Populationsdynamiken dient, ist nach Thomas Robert Malthus, einem britischen Ökonomen, benannt, wobei $p(t)$ für die Populationsgröße zu einem bestimmten Zeitpunkt t und q für die Wachstumsrate der Population steht: $p(t+1) = qp(t)$. Auf die vorliegenden Angaben bezogen, sieht die Gleichung folgendermaßen aus: mit $u' = xu$ und $x(t) \rightarrow k(u_0, \kappa)$ für $t \rightarrow \infty$ folgt:

$$\frac{du}{dt} = k(u_0, \kappa)u$$

Die numerischen Ergebnisse zeigen (wie die Berechnungen bei der singulären Perturbation), dass für die Konstante $k(u_0, \kappa)$, mit $\kappa \rightarrow 0^+$ und u_0 beliebig, gilt: $k(u_0, \kappa) \rightarrow -1$.

Nun wird davon ausgegangen, dass die Konstante $k(u_0, \kappa)$ als Zerfallskonstante für hohe Zeitpunkte existiert. Man verwendet wiederum die Gleichung ($\diamond$) und teilt sie durch u :

$$\frac{\kappa}{u} \frac{du}{dt} = 1 - u - \int_0^t u(x) dx$$

Durch Einsetzen der Malthus-Gleichung ergibt sich:

$$\kappa k(u_0, \kappa) = 1 - u - \int_0^t u(x) dx$$

Da $t \rightarrow \infty$ und $u(t) \rightarrow 0$ erhält man diese Beziehung:

$$\kappa k(u_0, \kappa) = 1 - I(u_0, \kappa)$$

wobei:

$$I(u_0, \kappa) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t u(\tau) d\tau < \infty$$

Für $t \rightarrow \infty$ nähert sich das Integral $\int_0^t u(\tau) d\tau$ an eine positive, endliche Konstante an.

Diese Beziehung verdeutlicht, dass eine gewisse Anzahl von Tieren immer wegfällt und das Wachstum somit reduziert wird. Je größer der Wert für κ wird, desto geringer ist das Wachstum der Population.

3.2 Ergebnis der numerischen Lösung als System

Abbildung 4 zeigt die numerischen Lösungen für verschiedene Werte von κ , nachdem das System aus den beiden Anfangswertproblemen 1. Ordnung mit dem Runge-Kutta-Fehlberg-Verfahren gelöst wurde, wobei $u_0 = 0, 1$. *Abbildung 4* zeigt auch die äußere Lösung (für $k \rightarrow 0$), die durch die singuläre Perturbation erhalten wurde.

Literaturverzeichnis

1. TEBBEST KEVIN G./ MACKI JACK, *Classroom Notes*; Society for Industrial and Applied Mathematics, September 1997

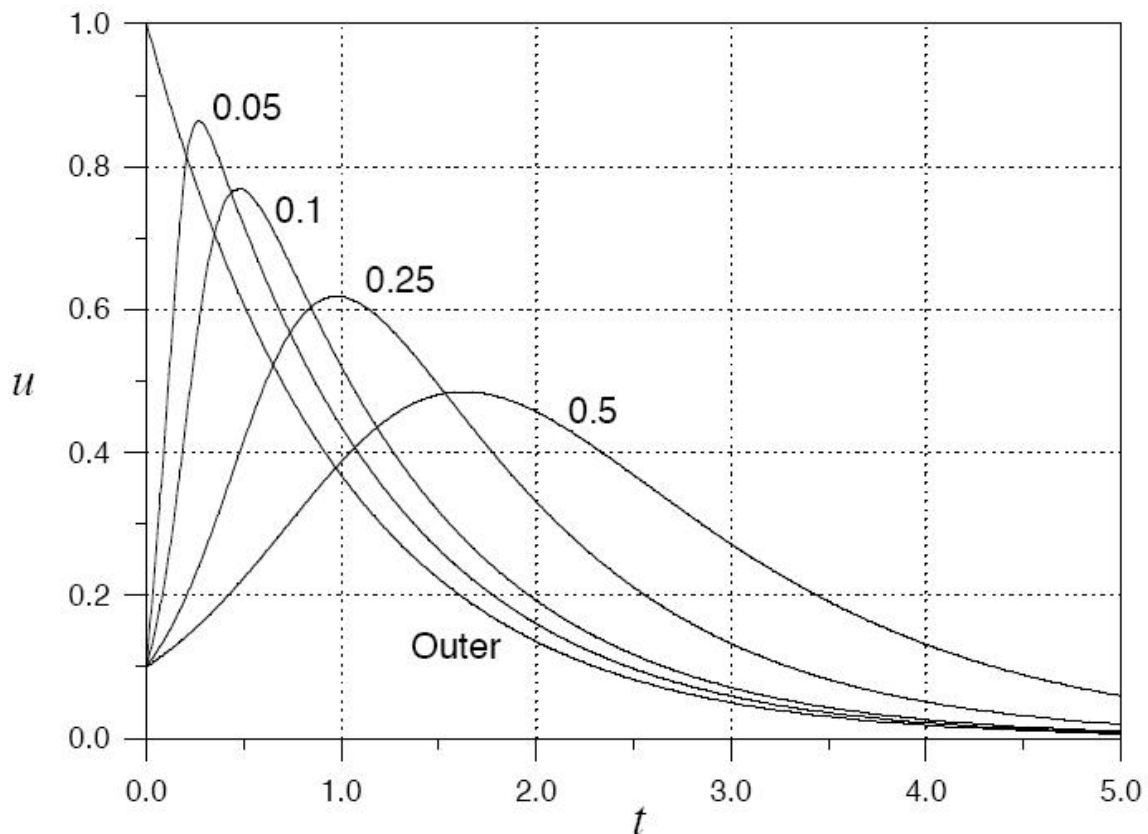


Abb. 4. Näherungslösungen mit Runge-Kutta-Fehlberg-Methode von ($\diamond$) für $u_0 = 0.1$ und mit $\kappa = 0.05, 0.1, 0.25$ und 0.5 (weiterhin dargestellt: äußere Lösung durch singuläre Perturbation)

2. QUARTERONI ALFIO, PROF./SACCO RICCARDO, PROF./SALERI FAUSTO, PROF., *Numerische Mathematik 2*; Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg 2002
3. BOLLHÖFER MATTHIAS, DR./MEHRMANN VOLKER, PROF. DR., *Numerische Mathematik*; Vieweg Verlag, Wiesbaden, 1. Auflage November 2004
4. KOPKA HELMUT, *L^AT_EX Band 1: Einführung*; Pearson Studium Verlag, München, 3., überarbeitete Auflage 2002
5. <http://de.wikipedia.org/wiki/Malthusgleichung> [17.09.09, 19:08 Uhr]
6. <http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/b/bb/Sehnentrapezformel.svg> [17.09.09]
7. http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/1/13/Simpsons_method_illustration.png [17.09.09]

Analytische Lösungen des Populationsmodells von Volterra

Sophie Päusch

sophie.paeusch@uni-ulm.de

1 Vorstellung des Populationsmodells von Volterra

Für das Bevölkerungswachstum einer Art in einem geschlossenen System hat Volterra 1931 folgende Gleichung aufgestellt:

$$\frac{dp}{dt} = ap - bp^2 - cp \int_0^{\tilde{t}} p(x) dx \qquad p(0) = p_0$$

Der Koeffizient $a > 0$ steht für die Geburtsrate, $b > 0$ für die intraspezifische Konkurrenz und $c > 0$ für die Toxizität.

Mit Toxizität ist ein Parameter gemeint, der die Population minimiert. Das kann beispielsweise bei einer Bakterienkultur in einem begrenzten Medium der Anstieg von Kohlendioxid sein, oder der Verbrauch der begrenzten Nahrungsressourcen.

Die Variable p_0 beschreibt die Anfangspopulation, während $p = p(\tilde{t})$ die Population zum Zeitpunkt $\tilde{t}$ darstellt.

Zur Entstehung der Gleichung:

ap beschreibt den Zuwachs der Gleichung, d.h. die Geburtsrate abzüglich der Sterberate

$-bp^2$ beschreibt den (negativen) Zuwachs der Population durch intraspezifische Konkurrenz (intraspezifisch bedeutet innerhalb der Population/Art)

Zum Konkurrenzdruck allgemein: Der Konkurrenzdruck ist von der Dichte einer Population abhängig. Nimmt die Anzahl der Tiere in einer Population zu, so steigt der Konkurrenzdruck, dem nicht alle Individuen gewachsen sind, sodass mit einer Abnahme der Population zu rechnen ist. Nimmt die Anzahl der Tiere in einem bestimmten Lebensraum jedoch ab, sinkt der Konkurrenzdruck wieder und die Population nimmt wieder zu. Ein theoretisches Gleichgewicht einer stabilen Population bezeichnet man als Tragfähigkeit (carrying capacity). Eine Population ist stabil, wenn sich Geburtenrate und Sterberate im Gleichgewicht befinden).

$-cp \int_0^{\tilde{t}} p(x) dx$ beschreibt den (negativen) Zuwachs der Gleichung durch die Toxizität, d.h. wenn die Population sehr groß ist, ist die Toxizität ebenfalls groß und es kommt zu einer erhöhten Dezimierung der Population, als wenn die Population klein ist und damit auch die Toxizität. Der Effekt der Toxizität ist also bei einer kleinen, wachsenden Population viel geringer als bei einer großen, da im ersten Fall ein kleiner Integralwert multipliziert wird, im zweiten Fall ein großer.

Die verschiedenen Dimensionen des Problems werden durch folgenden Ansatz beseitigt:

$$t = \frac{\tilde{t}}{b/c} \qquad u = \frac{p}{a/b}$$

Die dimensionslosen Variablen t und u bringen die Gleichung auf die dimensionslose Form:

$$\kappa \frac{du}{dt} = u - u^2 - u \int_0^t u(x) dx \qquad u(0) = u_0 \qquad (\diamond)$$

Dies ist eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung, wobei $\kappa \equiv \frac{c}{ab}$ ein dimensionsloser Parameter ist.

Hier zur Verdeutlichung der Gleichung ein Schaubild als Beispiel:

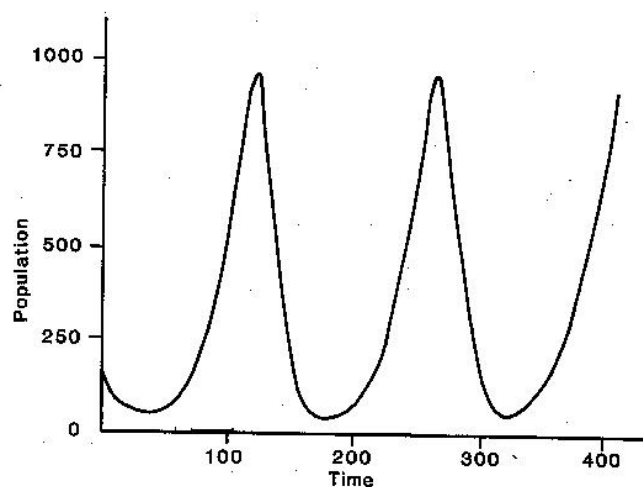


Abb. 1. Beispiel für das Wachstum einer Population

Die einzige Lösung für das theoretische Gleichgewicht (Tragfähigkeit) der Population, die durch die Hauptgleichung $(\diamond)$ ausgedrückt wird, ist $u(t) = 0$. Das bedeutet, dass es bei diesem Modell nie ein Gleichgewicht gibt.

Die analytische Lösung des Problems:

$$u(t) = u_0 \exp \left(\frac{1}{\kappa} \int_0^t \left[1 - u(\tau) - \int_0^\tau u(x) dx \right] d\tau \right) \qquad (1)$$

zeigt uns, dass $u(t) > 0$ für alle t , wenn $u_0 > 0$.

Im Folgenden stelle ich zwei verschiedene Lösungen vor, die die Gleichung $(\diamond)$ lösen.

2 Small's Näherungslösung der Hauptgleichung $(\diamond)$ mit singulärer Störungsmethode

Hier wird die Lösung der Hauptgleichung $(\diamond)$ gezeigt, für den Fall, dass $\kappa \ll 1$. Bei dieser Methode bekommt man eine innere und eine äußere Lösung, die durch asymptotisches Abgleichen die Nähe-

rungslösung für das Problem ergeben. Aus $\kappa \ll 1$ folgt, dass $\frac{c}{ab} \ll 1$, was wiederum für unsere Population bedeutet, dass die Toxizität (c) eine eher geringe Rolle spielt.

Kurz gesagt, diese Lösung kann angewendet werden, wenn man Aussagen über eine kleine, wachsende Population machen möchte.

Bei kleinen, schnell wachsenden Populationen (z.B. Kaninchen) ist das Wachstum in der Anfangsphase exponentiell und nimmt dann, wenn die Population groß ist, wieder stark ab usw.

Wenn man sich das ganze im Detail anschaut, hier am Beispiel einer Bakterienkultur, kann man folgendes sehen:

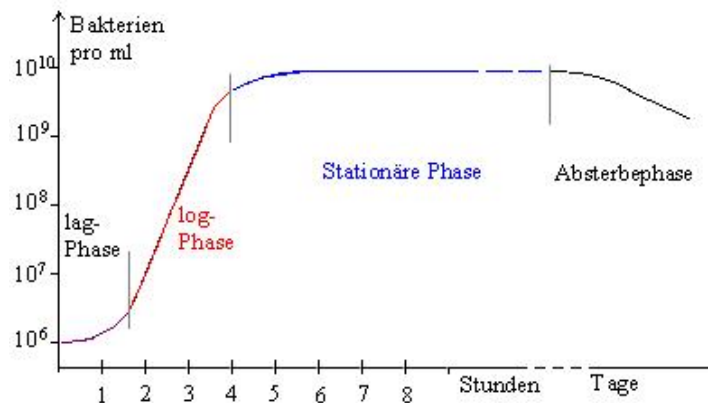


Abb. 2. Bild zum Wachstum einer Bakterienkultur in geschlossenem System

Man kann zwei Abschnitte erkennen: zu Beginn steigt die Population schnell an (innere Lösung) während sie anschließend ins Stocken kommt und dann wieder abfällt. Der Übergang τ liegt hier bei $t=4$. Links davon, zwischen 0 und τ , steigt die Population exponentiell, rechts von τ fällt sie nach einiger Zeit aufgrund der Toxizität und der interspezifischen Konkurrenz stetig gegen 0 (äußere Lösung). Man kann hier die singuläre Störungsmethode anwenden um eine annähernde Lösung zu bekommen.

Äußere Lösung:

Wenn $\kappa \rightarrow 0^+$ in der Hauptgleichung ($\diamond$) dann wird daraus ein Problem ohne Störung, dessen Lösung so aussieht:

$$u(t) = 1 - \int_0^t u(x) dx \quad (2)$$

Die Ableitung nach t ergibt: $\frac{du}{dt} = -u$. Die Lösung dieser Gleichung sieht dann aus wie folgt:

$$u_a(t) = e^{-t} \quad (3)$$

und ist unsere äußere Lösung (für große t außerhalb der Begrenzung).

Innere Lösung:

Um die innere Lösung der Hauptgleichung ($\diamond$) berechnen zu können wird sie umgeformt. Die Zeit innerhalb der Begrenzung ist als $\tau = \frac{t}{\delta}$ definiert mit $\delta = \delta(\kappa)$, sodass $\tau = \mathcal{O}(1)$ nahe der Begrenzung liegt. Man kann zeigen, dass $\delta = \mathcal{O}(\kappa)$. Mit $\tau = \frac{t}{\kappa}$ wird die Gleichung ($\diamond$) zu:

$$\frac{du}{d\tau} = u - u^2 - \kappa u \int_0^\tau u(x) dx \quad (\diamond\diamond)$$

Wenn $\kappa \rightarrow 0^+$ in ($\diamond\diamond$) erhalten wir wieder ein Problem ohne Störung, welches der logistischen Gleichung entspricht. Berechnet man die Lösung der Gleichung ($\diamond\diamond$) für $u(\tau)$ und formt diese wieder um nach

der Variablen t , so erhält man mit der Anfangsbedingung...die innere Lösung, die in der Begrenzung $t = \mathcal{O}(\kappa)$ gilt:

$$u_i(t) = \frac{1}{1 + (1/u_0 - 1)e^{-t/\kappa}} \quad (4)$$

Das Zusammensetzen der inneren und äußeren Lösung ergibt eine Näherungslösung der Hauptgleichung ($\diamond$):

$$u(t) = e^{-t} - 1 + \frac{1}{1 + (1/u_0 - 1)e^{-t/\kappa}}$$

Diese gilt für alle $t \geq 0$ und $\kappa \ll 1$ und ist genauer als für $\kappa \rightarrow 0$

3 Lösungen im Zweidimensionalen (Phasenebene)

Wir definieren $y(t) = \int_0^t u(x) dx$ in der Hauptgleichung ($\diamond$) um folgendes System zu erhalten:

$$\begin{aligned} y'(t) &= u(t) & y(0) &= 0 \\ u'(t) &= u(t)(1 - u(t) - y(t))/\kappa & u(0) &= u_0 \end{aligned} \quad (5)$$

Dieses System (5) kann numerisch gelöst werden oder in der Phasenebene, wie im folgenden zu sehen ist:

$$u(y) = (1 + \kappa - y) - (1 + \kappa - u_0) e^{-y/\kappa} \quad (6)$$

Man kann zeigen, dass wenn $t \rightarrow \infty$ mit $\kappa > 0$ und festem u_0 , $u(t) \rightarrow 0$, dann geht $y(t)$ gegen eine endliche Konstante und $\frac{u'}{u}$ geht gegen eine negative Konstante.

Die relevanten Trajektorien des Systems (5) sind die, die der positiven u -Achse entspringen, $(y, u) = (0, u_0)$ für $u_0 > 0$. Folglich ist $u(t) > 0$ für alle t in der analytischen Lösung (1). Das heißt, die relevanten Trajektorien liegen alle im 1. Quadranten. Hier ist das System (5) für den Fall $\kappa = 0,5$ dargestellt. Die Trajektorie, die von (6) dargestellt wird und den Anfangspunkt $(y_0, x_0) = (0, 0)$ hat, ist ein Grenzfall

Wir sehen, dass $u(y)$ auf der Geraden $\mathcal{L} : 1 - u - y = 0$ ein Maximum hat. Für die Werte unterhalb/links von $\mathcal{L}$ gilt $u'(y) > 0$, d.h. $u(y)$ steigt, für die Werte oberhalb/rechts von $\mathcal{L}$ gilt $u'(y) < 0$, d.h. $u(y)$ fällt. Für alle Anfangswerte $u_0 < 1$ steigt $u(y)$ bis zur Geraden $\mathcal{L}$ und fällt dann monoton gegen 0. Wenn der Anfangswert $u_0 \geq 1$ ist, fällt $u(y)$ monoton gegen Null in dem Maß, wie t ansteigt. Das Maximum ist dann u_0 . In allen Fällen ist $u(t)$ nach oben durch ein endliches Maximum beschränkt und nach unten durch 0. Das System (5) zeigt also, dass $y(t)$ monoton und beschränkt ist und man kann daraus schließen, dass $y(t)$ für $t \rightarrow \infty$ auf einer gegebenen Trajektorie gegen eine endliche Grenze $I(u_0, \kappa)$ geht.

Literaturverzeichnis

1. http://www.uni-magdeburg.de/exph/mathe_gl/dg11.pdf (06.11.09)
2. KOPKA HELMUT, *L^AT_EX Band 1: Einführung*; Pearson Studium Verlag, München, 3. überarbeitete Auflage 2002
3. WALTER WOLFGANG, *Gewöhnliche Differentialgleichungen*; Springer Verlag, 7. überarbeitete Auflage 2000

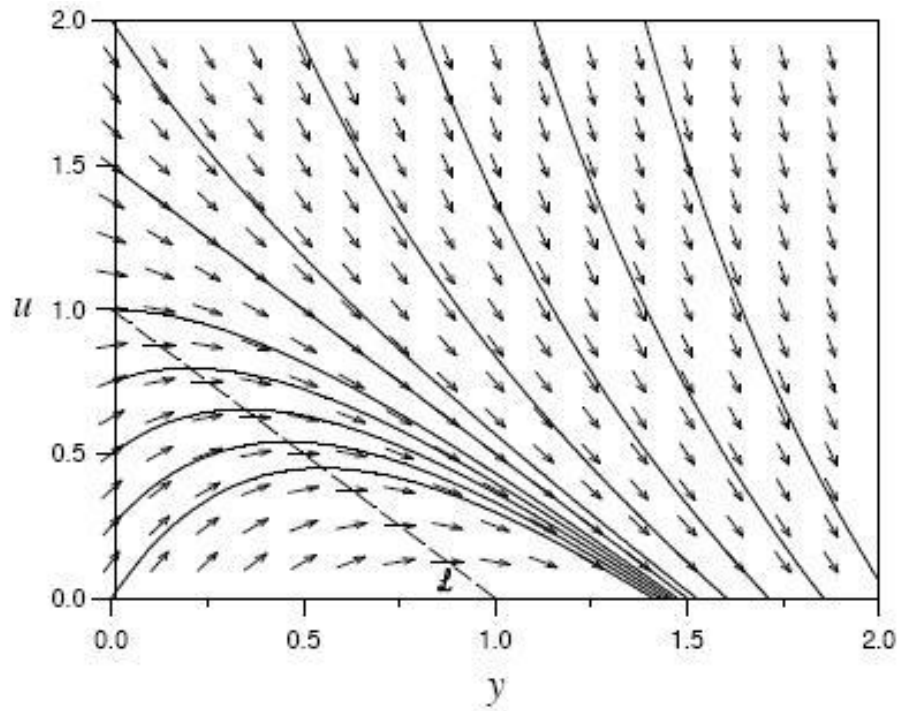


Abb. 3. Schaubild von System (5) für $\kappa = 0.5$ Zu sehen sind einige relevante Trajektorien und die Gerade $\mathcal{L}$ auf der $u(t)$ das Maximum erreicht für $u_0 \leq 1$

Zeitplan

Uhrzeit	Name	Vortragstitel
Fr 12:00-12:30	Begrüßung	
Fr, 12:30-13:15	Daniel Ruf	Einführung in gewöhnliche Differentialgleichungen
Fr, 13:15-14:45	Kerstin Schick Hendrik Lang	Polulation
Pause		
Fr, 15:00-16:30	Manuela Lassu Aljoscha Himmighofen	Infektionen
Fr, 16:45-18:15	Helmut Weidle Benjamin Wenger	Viren und Prionen
Sa, 08:00-09:30	Seeburger Stephanie Maria Bruno	Paarbildung
Sa, 09:30-11:00	Anja Bachmann Karen Huep	Genetik
Pause		
Sa, 11:15-12:15	Kröner Birgit	Enzyme
Sa, 12:15-13:45	Pascal Heiter Mladjan Radic	Delaunay-Netze
Pause		
Sa, 15:00-16:30	Katrin Egl Sophie Päusch	Volterra-Populationsmodell
Sa, 16:30-17:00	Diskussion und Ende	