

Mathematik 2 für Biowissenschaften  
Differentialgleichungen und Graphentheorie

Elke Rosenberger

Stephan Menz

10. Dezember 2020



# Vorbemerkung

In der Vorlesung Mathematik 2 für Biowissenschaften werden mathematische Methoden und Modelle von gewöhnlichen Differentialgleichungen behandelt, die in den Biowissenschaften von gewisser Bedeutung sind. Nach einer kurzen Einführung in die Theorie von Differenzgleichungen werden gewöhnliche Differentialgleichungen und Differentialgleichungssysteme zur Beschreibung biologischer Prozesse behandelt. Neben analytischen und approximativen Lösungsverfahren werden hierbei qualitative Methoden zur Analyse des Systemverhaltens eingeführt, insbesondere die Theorie von stabilen und instabilen Gleichgewichtszuständen. Anschließend werden einfache Graphen und Netzwerke zur Beschreibung von Prozessen wie z.B. Protein–Protein-Interaktionen oder genregulatorischen Prozessen behandelt und Methoden zur Untersuchung der Dynamiken auf Netzwerken und zur Netzwerkanalyse vorgestellt.

Elke Rosenberger & Stephan Menz





# Weiterführende Literatur

Zu den jeweiligen Themenkomplexen empfiehlt sich zur weiteren Studie:

- Differenzen-/Differentialgleichungen :
  - B. Aulbach, *Gewöhnliche Differenzialgleichungen*, Spektrum Akademischer Verlag, 2. Auflage, 2010
  - W. Walter, *Gewöhnliche Differentialgleichungen*, Springer Verlag, 7. Auflage, 2000
  - S. Elaydi, *An Introduction to Difference Equations*, Springer Verlag, 3. Auflage, 2005
  - H. Heuser, *Gewöhnliche Differentialgleichungen: Einführung in Lehre und Gebrauch*, Vieweg+Teubner Verlag, 6. Auflage, 2009
  - D. Kaplan und L. Glass, *Understanding Nonlinear Dynamics*, Springer Verlag, 1. Auflage, 1995.
  - S.H. Strogatz, *Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering*, Westview Press, 1. Auflage, 2001
- mathematische Modelle biologischer Prozesse :
  - F. Brauer und C. Castillo-Chavez, *Mathematical Models in Population Biology and Epidemiology*, Springer Verlag, 2. Auflage, 2012
  - L. Edelstein-Keshet, *Mathematical Models in Biology*, SIAM, 2005
  - J.W. Prüss, R. Schnaubelt und R. Zacher, *Mathematische Modelle in der Biologie: Deterministische homogene Systeme*, Birkhäuser Verlag, 1. Auflage, 2008
- Graphen, Netzwerke und Motive:
  - U. Alon, *An Introduction to Systems Biology: Design Principles of Biological Circuits*, Chapman & Hall/CRC, 1. Auflage, 2007
  - G. Caldarelli, *Scale-Free Networks: Complex Webs in Nature and Technology*, Oxford University Press, 1. Auflage, 2007
  - R. Cohen, *Complex Networks: Structure, Robustness and Function*, Cambridge University Press, 1. Auflage, 2010



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Differenzgleichungen</b>	<b>1</b>
1.1	Allgemeine Differenzgleichungen . . . . .	1
1.2	Lineare Differenzgleichungen . . . . .	4
1.3	Iterationsmethoden . . . . .	7
1.3.1	Die Cobweb-Methode . . . . .	7
1.3.2	Numerische Iteration . . . . .	8
1.4	Nichtlineare Differenzgleichungen . . . . .	9
1.5	Gleichgewichtszustände und Stabilität . . . . .	11
1.6	Parameterabhängige Bifurkationen und Chaos . . . . .	14
<b>2</b>	<b>Differentialgleichungen</b>	<b>19</b>
2.1	Typen von Differentialgleichungen . . . . .	20
2.1.1	Allgemeine Differentialgleichungen . . . . .	20
2.1.2	Konstantes Wachstum . . . . .	22
2.1.3	Die homogene Evolutionsgleichung . . . . .	24
2.1.4	Die inhomogene Evolutionsgleichung . . . . .	27
2.1.5	Gleichgewichtszustände und Stabilität . . . . .	28
2.1.6	Die logistische Differentialgleichung . . . . .	31
2.2	Lösungsverfahren . . . . .	34
2.2.1	Trennung der Veränderlichen . . . . .	34
2.2.2	Variation der Konstanten . . . . .	36
2.2.3	Substitutions-Verfahren . . . . .	39
2.3	Qualitative Methoden und Näherungsverfahren . . . . .	41
2.3.1	Richtungsfelder . . . . .	41
2.3.2	Das Euler-Verfahren . . . . .	42
<b>3</b>	<b>Differentialgleichungssysteme</b>	<b>45</b>
3.1	Allgemeine Differentialgleichungssysteme 1. Ordnung . . . . .	45
3.2	Homogene lineare Differentialgleichungssysteme . . . . .	47
3.2.1	Einschub Lineare Algebra . . . . .	50
3.3	Das Räuber-Beute-System . . . . .	52
3.4	Stabilität von Gleichgewichtszuständen, Linearisierung . . . . .	56
<b>4</b>	<b>Graphen- &amp; Netzwerktheorie</b>	<b>61</b>
4.1	Graphentheoretische Grundlagen . . . . .	61
4.1.1	Das Königsberger Brückenproblem . . . . .	65
4.1.2	Einfache Graphen . . . . .	68
4.1.3	Weitere Klassen von Graphen . . . . .	70
4.2	Matrixdarstellung von Graphen . . . . .	72
4.2.1	Anwendungen der Adjazenzmatrix . . . . .	73

4.3	Zufallsspaziergang auf einem Graphen, Markovketten . . . . .	75
4.4	Boolsche Netzwerke . . . . .	81
4.5	Clusteranalyse von Graphen . . . . .	84
4.5.1	Andere Darstellungsformen . . . . .	88
4.6	Komplexe Netzwerke . . . . .	88
4.7	Dynamik auf Netzwerken . . . . .	88
4.8	Netzwerk-Motive . . . . .	88

# Kapitel 1

## Differenzengleichungen

In der Biologie, speziell der Ökologie, werden *Differenzengleichungen* (oft auch *Rekursionsgleichungen* genannt) intensiv zur Modellierung und Untersuchung von Populationsdynamiken genutzt. Betrachten wir dazu einleitend ein kurzes Beispiel.

BEISPIEL 1.1 *Jedes Jahr im Mai begibt sich eine Biologiestudentin auf das Universitätsgelände um Fliegen zu fangen. Die Anzahl gefangener Fliegen trägt sie als Diagramm auf, siehe Abb. 1.1.*

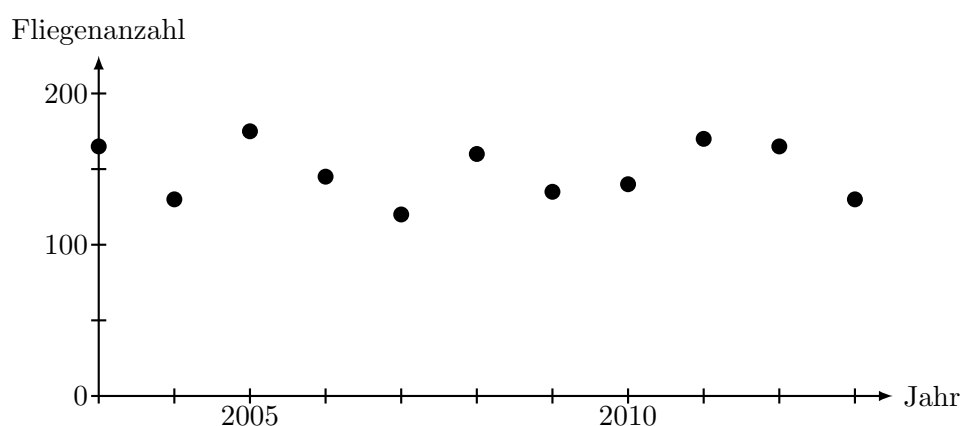


Abbildung 1.1: Anzahl gefangener Fliegen pro Jahr.

Anhand der gewonnenen Daten versucht sie ein Modell für die Änderung der Fliegenpopulation zu entwickeln. Neben äußeren Faktoren (Wetter, Fressfeinde, Nahrung, Fangenerfolg, ...), die die Studentin zunächst vereinfachend vernachlässigen möchte, ist zu erwarten, dass die Fliegenanzahl von der Anzahl an im Vorjahr gelegten Eiern abhängt, und damit gerade von der vorjährigen Fliegenanzahl. Dieser Zusammenhang lässt sich allgemein ausdrücken als

$$X_{t+1} = F(X_t), \quad (1.1)$$

wobei  $X_t$  die Fliegenanzahl im Jahr  $t$  bezeichnet. Die Funktion  $F$  beschreibt hierbei den Zusammenhang zwischen einer Fliegenanzahl  $X_t$  im Jahr  $t$  und der sich ergebenden Fliegenanzahl  $X_{t+1}$  im Folgejahr  $t + 1$ .

### 1.1 Allgemeine Differenzengleichungen

Obige Gleichung ist eine allgemeine Form einer Differenzengleichung, wobei  $X_t$  als *Zustand* des modellierten Systems zur Zeit  $t$  bezeichnet wird. Die Differenzengleichung (1.1)

beschreibt dann die *Dynamik* des Systems, also die Veränderung des Zustandes  $X_t$  mit der Zeit  $t$ . Die genaue Gestalt der Funktion  $F$  wird hierbei von den im Modell berücksichtigten Faktoren abhängen. Da in der Regel aber nie sämtliche Faktoren berücksichtigt werden können, wird eine Differenzgleichung (wie jedes Modell) die wirkliche Entwicklung der Population immer nur *näherungsweise* beschreiben.

Im Bsp. 1.1 wird angenommen, dass sich die Fliegenanzahl  $X_{t+1}$  für ein Folgejahr  $t + 1$  direkt aus der Anzahl  $X_t$  im Vorjahr  $t$  berechnen lässt. Eine Differenzgleichung dieser Art heißt autonome Differenzgleichung erster Ordnung. Allgemeiner könnte  $F$  auch selbst von der Zeit  $t$  und von weiteren, früheren Zuständen abhängen.

DEFINITION 1.2 (a) *Die Differenzgleichung*

$$X_{t+1} = F(t + 1, X_t, X_{t-1}, \dots, X_{t-(k-1)}), \quad t \in \mathbb{N}, t \geq k, \quad (1.2)$$

heißt nicht-autonome Differenzgleichung  $k$ -ter Ordnung. Falls  $F$  nicht selbst von der Zeit  $t$  abhängt, dann heißt die Differenzgleichung autonom.

(b) Eine Lösung von (1.2) zu den Anfangswerten  $X_0, X_1, \dots, X_{k-1}$  ist eine (reelle) Folge  $(X_t)_{t \in \mathbb{N}}$ , das heißt eine Abbildung  $X : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$ , so dass  $X_t$  für  $t \in \{0, 1, \dots, k-1\}$  durch die Anfangswerte gegeben ist und  $X_t$  für  $t \geq k$  der Gleichung (1.2) genügt.

BEMERKUNG 1.3 Die ersten Folgenglieder der Lösung von (1.1) zu gegebenem Anfangswert  $X_0$  lassen sich iterativ bestimmen. So gilt

$$\begin{aligned} X_1 &= F(X_0) \\ X_2 &= F(X_1) = F(F(X_0)) =: F^2(X_0) \\ X_3 &= F(X_2) = F^2(X_1) = F^3(X_0) \\ &\dots = \end{aligned} \quad (1.3)$$

Analog gilt das auch für die Lösung von (1.2), wobei die Iteration hier startet mit

$$X_k = F(k, X_{k-1}, X_{k-2}, \dots, X_0).$$

BEISPIEL 1.4 Aus der (autonomen) Differenzgleichung zweiter Ordnung

$$X_{t+1} = F(X_t, X_{t-1}) = X_t + X_{t-1}, \quad (1.4)$$

ergibt sich zu den Anfangswerten  $X_0 = 1$  und  $X_1 = 1$  als Lösung die bekannte Fibonacci-Folge  $\{1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, \dots\}$ , welche Leonardo von Pisa (später Fibonacci genannt) bereits im Jahr 1202 als hypothetisches Wachstumsmodell einer Kaninchenpopulation einführte, siehe Abb. 1.2.

Fibonacci ging hierbei von folgenden vereinfachenden Annahmen aus:

- Zu Beginn existiert genau ein neugeborenes Paar Kaninchen (männlich und weiblich).
- Neugeborene Kaninchen werden nach einem Monat geschlechtsreif und die Austragungszeit eines trächtigen Kaninchens beträgt ebenfalls ein Monat. Die Zeit wird deshalb in diskrete Schritte von einem Monat unterteilt.
- Am Ende eines jeden Monats paaren sich die geschlechtsreifen Kaninchen und gebären am Ende des Folgemonats ein neues Kaninchenpaar (männlich und weiblich).
- Die Geburtenrate ist wesentlich größer als die Sterberate, so dass in erster Näherung das Sterben der Kaninchen vernachlässigt werden kann.

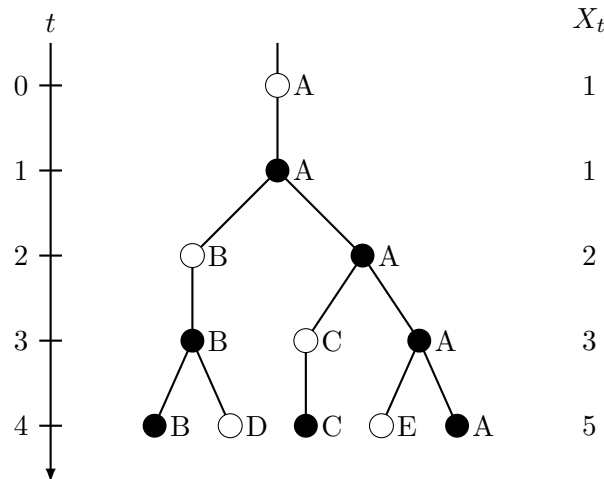


Abbildung 1.2: Fibonacci's hypothetisches Wachstumsmodell einer Kaninchenpopulation. Zeugungsfähige Kaninchenpaare sind als schwarze Knoten, neugeborene Kaninchenpaare als weiße Knoten dargestellt. Entlang des Graphen lässt sich die Geschichte des ursprünglichen Paares A verfolgen (welches niemals stirbt). Links ist die Zeit  $t$  (in Monaten) und rechts die Anzahl an Kaninchenpaaren  $X_t$  gekennzeichnet.

- Die Population kann unbegrenzt wachsen (d.h. die Ressourcen der Umgebung sind unerschöpflich) und kein Kaninchen verlässt die Population oder kommt von außerhalb hinzu (d.h. es ist keine Migration möglich).

Die Differenzgleichung (1.4) mit  $X_0 = 1$  und  $X_1 = 1$  beschreibt das Wachstum der Population unter diesen Annahmen, wobei  $X_t$  die Anzahl an Kaninchenpaaren im Monat  $t$  angibt.

Wenngleich eher als arithmetische Fragestellung untersucht, nähert sich das Verhältnis zweier aufeinanderfolgender Fibonacci-Zahlen  $X_{t+1}/X_t$  mit steigendem  $t$  interessanterweise dem Teilungsverhältnis  $\Phi = (1 + \sqrt{5})/2$  des Goldenen Schnittes<sup>1</sup> an, welcher in vielen unterschiedlichen Strukturen der Natur anzutreffen ist. Hierzu bemerken wir zunächst, dass gemäß der Differenzgleichung (1.4) gilt

$$\frac{X_{t+1}}{X_t} \stackrel{\text{Gl. (1.4)}}{=} \frac{X_t + X_{t-1}}{X_t} = 1 + \frac{X_{t-1}}{X_t}. \tag{1.6}$$

Nehmen wir an das  $R := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{X_{t+1}}{X_t}$  existiert, so folgt aus (1.6) sofort, dass für  $R$  gelten muss

$$R = 1 + \frac{1}{R} \Leftrightarrow R^2 - R - 1 = 0. \tag{1.7}$$

Die einzige positive Lösung dieser quadratischen Gleichung ist gerade  $R = (1 + \sqrt{5})/2$ .

Allgemein ist eine Differenzgleichung ein (zeitlich) diskretes Modell, das dem System nur zu ausgewählten Zeitpunkten bestimmte Zustandswerte zuordnet. Das betrachtete

<sup>1</sup>Als Goldener Schnitt wird ein spezielles Teilungsverhältnis einer Größe bezeichnet, z.B. Strecke, Fläche oder Winkel, in der das Verhältnis vom Ganzen ( $a + b$ ) zum größeren Teil  $a$  dem Verhältnis vom größeren Teil  $a$  zum kleineren Teil  $b$  entspricht, d.h.

$$\frac{a + b}{a} = \frac{a}{b} =: \Phi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}. \tag{1.5}$$

Zeitintervall muss hierbei nicht immer *ein* Jahr oder Monat sein, sondern wird sich sinnvollerweise nach der *Generationenfolge* der betrachteten Art richten. Zum Beispiel blühen die meisten Bambusarten synchron periodisch, je nach Art alle 20–120 Jahre, und sterben dann ab. Bei bestimmten Zikadenarten beträgt die Generationenfolge 13 oder 17 Jahre (nota bene: beides sind Primzahlen), und bei bestimmten Lachsarten ca. 1–5 Jahre. In all diesen Fällen stirbt die Vorgängergeneration nach Eiablage bzw. Blüte ab (es gibt keine überschneidenden Generationen).

## 1.2 Lineare Differenzgleichungen

Kehren wir zum Eingangsbeispiel 1.1 von nicht überschneidenden Generationen zurück. Unter der Annahme, dass eine Generation immer dem gesamten Nachwuchs der Vorgängergeneration entspricht und jedes Individuum eine durchschnittliche Anzahl  $R$  an Nachkommen hat, ergibt sich  $F(X_t) = R \cdot X_t$  und somit die *lineare Differenzgleichung*

$$X_{t+1} = R \cdot X_t, \quad (1.8)$$

wobei der Faktor  $R$  auch als *Reproduktionsrate* bezeichnet wird. Hier ist  $F$  also eine lineare Funktion (Ursprungsgerade mit Anstieg  $R$ ), siehe Abb. 1.3.

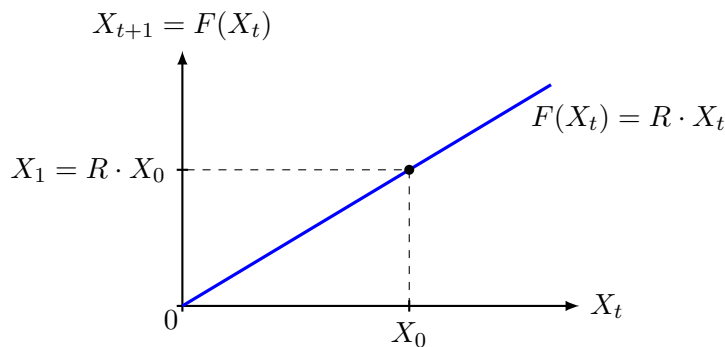


Abbildung 1.3: Darstellung der linearen Funktion  $F(X_t) = R \cdot X_t$ .

Wie in Gleichung (1.3) gezeigt, lassen sich die ersten Folgeglieder der Lösung einer Differenzgleichung für gegebene Anfangswerte *iterativ* bestimmen. So ergibt sich für die lineare Differenzgleichung (1.8)

$$X_1 = R \cdot X_0, \quad X_2 = R \cdot X_1 = R \cdot (R \cdot X_0) = R^2 \cdot X_0, \quad X_3 = R \cdot X_2 = R^3 \cdot X_0, \dots \quad (1.9)$$

Dies führt auf den allgemeinen Lösungsansatz

$$X_t = R^t \cdot X_0. \quad (1.10)$$

Durch Induktion lässt sich leicht verifizieren, dass (1.10) tatsächlich eine Lösung von (1.8) ist: Für  $t = 0$  ergibt sich offensichtlich  $X_0 = X_0$ , also eine wahre Aussage. Außerdem folgt aus (1.10) durch Ersetzen von  $t$  durch  $t + 1$

$$X_{t+1} = R^{t+1} \cdot X_0 = R \cdot (R^t \cdot X_0) \stackrel{\text{Gl. (1.10)}}{=} R X_t, \quad (1.11)$$

also genügt die durch (1.10) bestimmte Folge der Differenzgleichung  $X_{t+1} = R X_t$  mit Anfangswert  $X_0$  wie behauptet.

Wir sehen also, dass die lineare Differenzgleichung (1.8) zum geometrischen Wachstum/Abfall (1.10) führt, siehe Abb. 1.4.



Für den Fall  $R = 1$  folgt unmittelbar  $X_{t+1} = X_t$  für alle  $t \in \mathbb{N}$  und somit, dass die Größe der Population sich mit der Zeit nicht verändert (wir sagen, die Population befindet sich in einem *Gleichgewichtszustand*  $X_0$ , siehe Definition 1.5). Im Fall  $R = 1$  ist also jeder mögliche Wert von  $X_0$  ein Gleichgewichtszustand. Ist  $R \neq 1$ , dann ist der einzige Gleichgewichtszustand  $X = 0$ , denn für den Anfangswert  $X_0 = 0$  folgt  $X_t = 0$  für alle  $t \in \mathbb{N}$ .

Der Fall  $R < 0$  ist für Populationsmodelle irrelevant (es gibt keine negative Anzahl an Nachkommen), taucht aber unter Umständen in anderen Zusammenhängen auf. In diesem Fall lässt sich ein alternierendes Verhalten beobachten, siehe Abb. 1.5.

Im Folgenden nehmen wir immer  $R > 0$  an.

Wie oben diskutiert kann es Werte für  $X_t$  geben, die sich mit der Zeit nicht ändern, die Größe der Population bleibt dann also gleich. Das sind die Gleichgewichtszustände.

**DEFINITION 1.5**  $X^*$  heißt Gleichgewichtszustand (*Fixpunkt, stationäre Lösung*) einer Differenzgleichung  $X_{t+1} = F(X_t)$ , falls  $F(X^*) = X^*$  gilt.

**BEMERKUNG 1.6** Falls  $X_t = X^*$  für ein  $t \in \mathbb{N}$ , dann folgt  $X_{t+1} = F(X^*) = X^*$ . Damit ist also  $X_T = X^*$  für alle  $T \geq t$ , d.h. das System ändert seinen Zustand nicht mehr.

Nun betrachten wir eine etwas allgemeinere lineare Differenzgleichung:

Besteht die Möglichkeit das  $M$  Individuen pro Generationenfolge immigrieren ( $M > 0$ ) bzw. emigrieren ( $M < 0$ ), so ergibt sich die inhomogene Differenzgleichung

$$X_{t+1} = R \cdot X_t + M = F(X_t). \quad (1.12)$$

Die Funktion  $F$  ist in diesem Fall also ein Gerade mit Anstieg  $R$ , die die  $y$ -Achse im Punkt  $M$  schneidet, siehe Abb. 1.6. Um zu prüfen, ob (1.12) Gleichgewichtszustände besitzt, schreiben wir

$$F(X^*) = R \cdot X^* + M \stackrel{!}{=} X^* \Leftrightarrow X^* \cdot (1 - R) \stackrel{!}{=} M.$$

Somit existiert genau ein Gleichgewichtszustand  $X^*$  falls  $R \neq 1$ , nämlich

$$X^* = \frac{M}{1 - R} \quad (1.13)$$

Um die Lösung von (1.12) (im Fall  $R \neq 1$ ) zu finden, betrachten wir als neue Größe die Abweichung  $Z_t := X_t - X^*$  von diesem Gleichgewichtszustand zur Zeit  $t$ . Aus (1.12) ergibt sich dann als Differenzgleichung für  $Z_t$ :

$$Z_{t+1} = X_{t+1} - \frac{M}{1 - R} \stackrel{\text{Gl. (1.12)}}{=} R \cdot X_t + M - \frac{M}{1 - R} = R \cdot \underbrace{\left( X_t - \frac{M}{1 - R} \right)}_{=Z_t} = R \cdot Z_t. \quad (1.14)$$

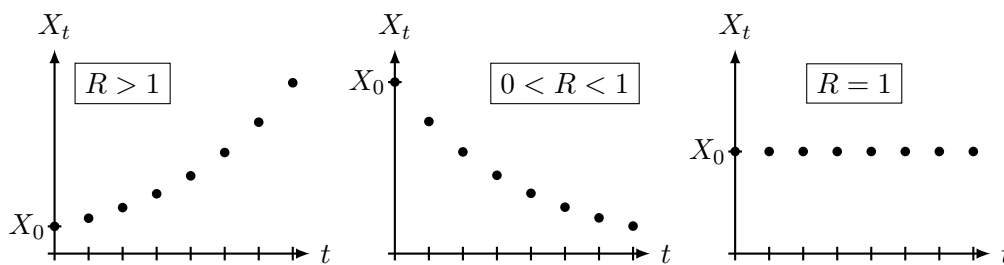


Abbildung 1.4: Verhalten der linearen Differenzgleichung (1.8) für unterschiedliche positive Raten  $R$ .

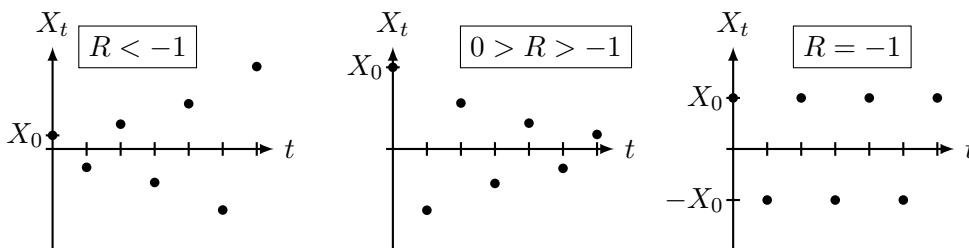


Abbildung 1.5: Verhalten der linearen Differenzgleichung (1.8) für unterschiedliche *negative* Raten  $R$ .

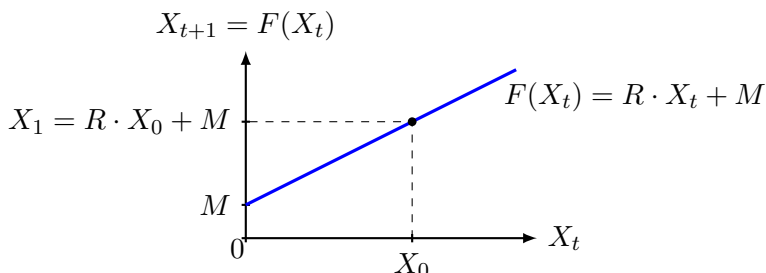


Abbildung 1.6: Darstellung der linearen Funktion  $F(X_t) = R \cdot X_t + M$  für  $R, M > 0$ .

Die Abweichung  $Z_t$  entwickelt sich also gemäß der homogenen Differenzgleichung  $Z_{t+1} = RZ_t$ , welche zu gegebenem Anfangswert  $Z_0 = X_0 - X^*$  nach (1.10) die Lösung  $Z_t = R^t \cdot Z_0$  besitzt.

Die inhomogene Differenzgleichung (1.12) besitzt demzufolge die Lösung

$$X_t = Z_t + X^* = R^t \cdot Z_0 + \frac{M}{1-R} = R^t \cdot \left( X_0 - \frac{M}{1-R} \right) + \frac{M}{1-R}. \quad (1.15)$$

**BEISPIEL 1.7** Sei die Reproduktionsrate einer Fliegenart auf dem Universitätsgelände  $R = \frac{3}{4} < 1$ , aber jährlich gelangen von aussen  $M = 25$  Fliegen zusätzlich hinzu. Dann sind  $X^* = \frac{25}{1-\frac{3}{4}} = 25 \cdot 4 = 100$  Fliegen ein Gleichgewichtszustand auf dem Campus. Sind zunächst  $X_0 = 60$  Fliegen auf dem Campus, so sind nach (1.15) für das Folgejahr bereits  $X_1 = \frac{3}{4} \cdot (60 - 100) + 100 = 70$  Fliegen zu erwarten.

**BEMERKUNG 1.8** Differenzgleichungen können auch auf beliebige Zeitintervalle mit überschneidenden Generationen verallgemeinert werden. Zum Beispiel ergibt sich in

$$X_{t+1} = X_t + B \cdot X_t - D \cdot X_t = (1 + B - D) \cdot X_t \quad (1.16)$$

die Population  $X_{t+1}$  zur Zeit  $t+1$  direkt aus der Vorgängerpopulation  $X_t$ , wobei zusätzlich  $B \geq 0$  neue Individuen pro Vorgängerindividuum geboren werden und ein Anteil  $D \geq 0$  der Vorgängerpopulation stirbt. Wir bezeichnen den Faktor  $B$  auch als Geburtenrate und  $D$  als Sterberate. Für letzteren muss natürlich noch  $D \leq 1$  gelten, da ansonsten mehr Individuen sterben würden als vorhanden sind. In der Tat ist die Differenzgleichung (1.16) äquivalent zur homogenen Differenzgleichung (1.8), wenn wir die (Netto-)Reproduktionsrate gemäß  $R := (1 + B - D) \geq 0$  definieren.

## 1.3 Iterationsmethoden

Da Differenzgleichungen nicht immer analytisch lösbar sind, ist man im Allgemeinen auf andere Verfahren angewiesen. Diese lassen in der Regel zumindest das qualitative Verhalten der Lösung (Wachstum, Abfall, Gleichgewichtszustände etc.) leicht erkennen.

### 1.3.1 Die Cobweb-Methode

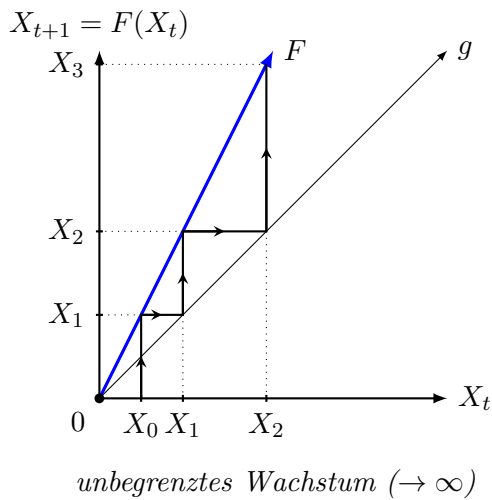
Ein Cobweb-Diagramm ist die graphische Darstellung der möglichen Dynamik der Lösung einer Differenzgleichung  $X_{t+1} = F(X_t)$ . Die Erstellung eines Cobweb-Diagramms entspricht einer graphischen Iteration der gegebenen Differenzgleichung für unterschiedliche Anfangswerte. Es handelt sich also um ein graphisches Verfahren, mit dem zu gegebenem  $X_0$  dann  $X_1, X_2, X_3, \dots$  bestimmt werden.

Hierbei verfahren wir folgendermaßen:

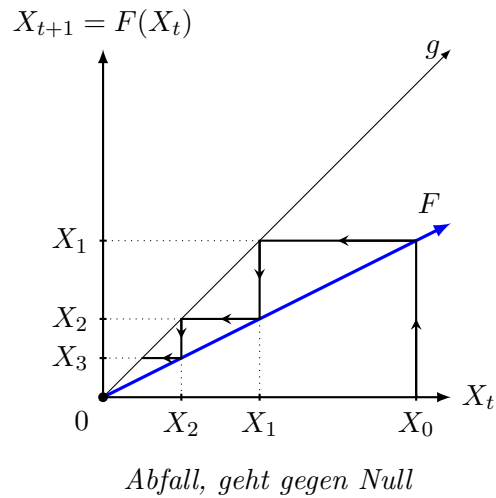
- (a) Wir zeichnen in ein Koordinatensystem den Graphen der Funktion  $F$  zusammen mit der Winkelhalbierenden (Graph der Funktion  $g$  mit  $g(X) = X$ ) ein.
- (b) Wir wählen einen Anfangspunkt  $P_0 = (X_0, 0)$  auf der  $x$ -Achse und verbinden diesen *vertikal* mit dem Graphen von  $F \Rightarrow$  Die  $y$ -Komponente des Schnittpunktes  $P_1 = (X_0, F(X_0)) = (X_0, X_1)$  ist gerade  $X_1$ .
- (c) Nun verbinden wir  $P_1$  (also den gerade erreichten Schnittpunkt) *horizontal* mit der Winkelhalbierenden  $g$  (die  $x$ -Koordinate des so erreichten Punktes  $P_2 = (X_1, g(X_1)) = (X_1, X_1)$  ist wiederum  $X_1$ ).
- (d) Wir verbinden nun  $P_2$  *vertikal* mit dem Graphen von  $F \Rightarrow$  der Schnittpunkt  $P_3 = (X_1, F(X_1)) = (X_1, X_2)$  liefert als  $y$ -Komponente  $X_2$ .
- (e) Nun iterieren wir Schritt 3 und 4, um von  $X_2 \Rightarrow X_3 \Rightarrow X_4 \Rightarrow \dots$  zu bestimmen.

Im Folgenden betrachten wir zur Veranschaulichung der Cobweb-Methode einige lineare Differenzgleichungen als einfache Beispiele.

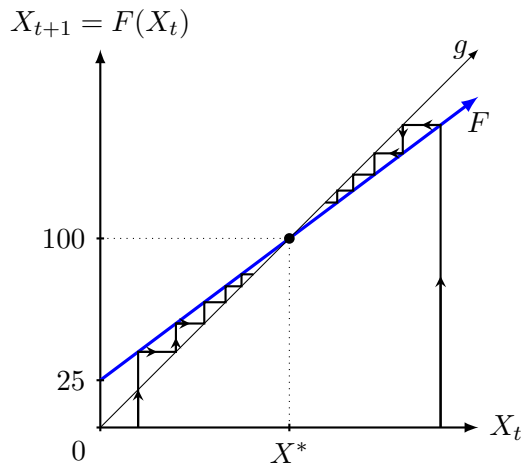
BEISPIEL 1.9  $X_{t+1} = F(X_t) = 2 \cdot X_t$



BEISPIEL 1.10  $X_{t+1} = F(X_t) = \frac{1}{2} \cdot X_t$



BEISPIEL 1.11  $X_{t+1} = F(X_t) = \frac{3}{4} \cdot X_t + 25$



$X_t$  konvergiert gegen den Gleichgewichtszustand  $X^* = 100$ , unabhängig davon ob die Population zu Beginn niedriger oder höher ist. (Beobachtung: Gleichgewichtszustand = Schnittpunkt von  $F$  mit der Winkelhalbierenden  $g$ !)

### 1.3.2 Numerische Iteration

Wir können das selbe iterative Verfahren auch rein rechnerisch durchführen um eine Differenzgleichung zu untersuchen. Hierzu wählen wir erneut einen Anfangswert  $X_0$  und berechnen sukzessive  $X_1 = F(X_0)$ ,  $X_2 = F(X_1)$ , ... Wir setzen also iterativ das Ergebnis eines Rechenschritts wieder in die Funktion  $F$  ein um den Folgezustand zu berechnen.

BEISPIEL 1.12  $X_{t+1} = F(X_t) = 2 \cdot X_t$

Für  $X_0 = 2$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} X_1 &= 2 \cdot 2 = 4, \\ X_2 &= 2 \cdot 4 = 8, \\ X_3 &= 2 \cdot 8 = 16, \\ X_4 &= 2 \cdot 16 = 32, \\ X_5 &= 2 \cdot 32 = 64, \dots \end{aligned}$$

BEISPIEL 1.13  $X_{t+1} = F(X_t) = \frac{3}{4} \cdot X_t + 25$

Für  $X_0 = 20$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} X_1 &= \frac{3}{4} \cdot 20 + 25 = 40, \\ X_2 &= \frac{3}{4} \cdot 40 + 25 = 55, \\ X_3 &= \frac{3}{4} \cdot 55 + 25 = 66.25, \\ X_4 &= \frac{3}{4} \cdot 66.25 + 25 = 74.6875, \\ X_5 &= \frac{3}{4} \cdot 74.6875 + 25 = 81.015625, \dots \end{aligned}$$

Wir halten fest, dass es bei beiden Iterationsverfahren (Cobweb/numerisch) notwendig ist, konkrete Werte für die Parameter  $R$ ,  $M$ ,  $X_0$  einzusetzen. Dies ist bei einer analytischen Lösung nicht notwendig.

### 1.4 Nichtlineare Differenzgleichungen

Die Modelle, die wir den Differenzgleichungen (1.8) und (1.12) zugrunde gelegt haben, sind nicht sehr realistisch, da sie unbegrenzt Wachstum erlauben. Es wird nicht berücksichtigt, dass einer Population nur begrenzt natürliche Ressourcen (Nahrung, Raum etc.) zur Verfügung stehen. Man würde erwarten, dass die Reproduktivität einer Population mit wachsender Individuenanzahl sinkt. Insbesondere wird die Anzahl der Individuen im nächsten Zeitschritt sogar fallen, wenn einen bestimmten Wert  $K > 0$  überschreitet. Den Parameter  $K$  können wir hierbei als *Kapazität* (Tragfähigkeit) des natürlichen Milieus verstehen. Für die Funktion  $F$  sollte demnach gelten, dass

$$F(X_t) < X_t, \quad \text{falls } X_t > K, \tag{1.17}$$

so dass die Population nicht weit über  $K$  „hinauswachsen“ kann.

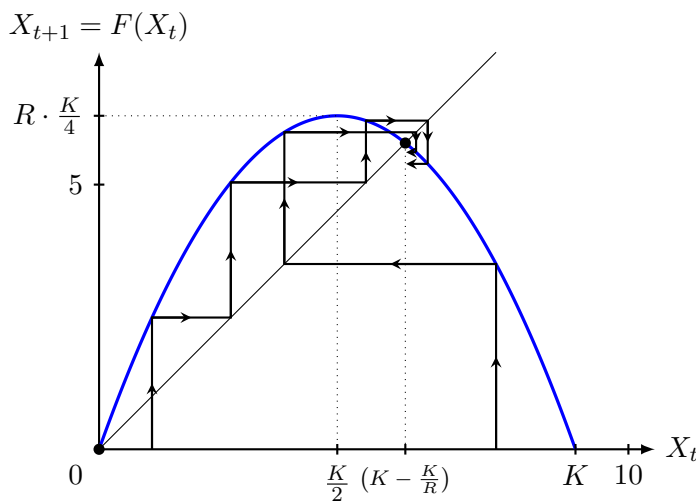


Abbildung 1.7: Cobweb-Diagramm der logistischen Differenzgleichung (1.18), für  $R = 2.8$  und  $K = 9$ .

Um zu realisieren, dass die Reproduktionsrate  $R$  sinkt, wenn sich die Größe der Population  $X_t$  der Kapazität  $K$  annähert, ist ein möglicher Ansatz, die konstante Rate  $R$  zu ersetzen durch  $\tilde{R}(X_t) := R(1 - \frac{X_t}{K})$ . Als Funktion  $F$  ergibt sich dann die Parabel  $F(X) = (R \cdot X - \frac{R}{K} \cdot X^2)$ , die eine Nullstelle bei  $X = 0$  und eine bei  $X = K$  besitzt. Da ferner  $F(X_t) < 0 < X_t$  für alle  $X_t > K > 0$ , erfüllt diese Funktion die Bedingung (1.17).

Dies führt zur *logistischen Differenzgleichung*

$$X_{t+1} = F(X_t) = R \cdot \left(1 - \frac{X_t}{K}\right) \cdot X_t, \tag{1.18}$$

die auch als (diskreter) Verhulst-Prozeß bekannt ist.

Um einen ersten Eindruck vom qualitativen Verhalten der logistischen Differenzgleichung (1.18) zu erhalten, betrachten wir ein zugehöriges Cobweb-Diagramm, siehe Abb. 1.7. Es existieren zwei Gleichgewichtszustände, einer bei  $X_1^* = 0$  (Aussterben) und ein weiterer,  $X_2^* \neq 0$ , bei

$$F(X_2^*) = R \cdot \left(1 - \frac{X_2^*}{K}\right) \cdot X_2^* \stackrel{!}{=} X_2^* \quad \begin{matrix} X_2^* \neq 0 \\ \Rightarrow \end{matrix} \quad 1 - \frac{X_2^*}{K} \stackrel{!}{=} \frac{1}{R} \quad \Rightarrow \quad X_2^* = K - \frac{K}{R} \tag{1.19}$$

welcher für uns nur für  $R > 1$  von Relevanz ist, da dann  $X_2^* = \left(K - \frac{K}{R}\right) > 0$ . Nichtnegative Individuenanzahlen sind für sämtliche nichtnegativen Anfangswerte  $X_0 \leq K$  garantiert, wenn zusätzlich

$$R \cdot \frac{K}{4} \leq K \quad \Leftrightarrow \quad R \leq 4. \quad (1.20)$$

(Frage: Wie könnten für ein nichtnegatives  $X_0 \leq K$  aber  $R > 4$  negative Anzahlen auftreten?) Wir beobachten, dass für  $R > 1$  und „nicht-triviale“ Anfangswerte  $X_0 \neq 0$  oder  $X_0 \neq K$  (und  $X_0 \neq \frac{K}{2}$ , falls  $R = 4$ ) eine Lösung der logistischen Differenzgleichung (1.18) sich anscheinend dem positivem Gleichgewichtszustand  $X_2^*$  annähert, siehe Abb. 1.7. Dies gilt jedoch nur so lange auch  $R < 3$ , wie wir in Abschnitt 1.6 sehen werden.

Analog zu Bemerkung 1.8 können wir auch hier überlappende Generationenfolgen betrachten. In diesem Fall beschreibt die oben beschriebene Reproduktionsrate  $\tilde{R}(X_t)$  nur die Änderung der Populationsgröße und es ergibt sich die logistische Differenzgleichung

$$X_{t+1} = X_t + R \cdot \left(1 - \frac{X_t}{K}\right) \cdot X_t \quad (1.21)$$

mit den Gleichgewichtszuständen  $X_1^* = 0$  und  $X_2^* = K$ .

Ein anderer Ansatz, der das Problem von negativen Anzahlen gänzlich vermeidet, ist z.B. durch die Differenzgleichung

$$X_{t+1} = \exp\left[R \cdot \left(1 - \frac{X_t}{K}\right)\right] \cdot X_t \quad (1.22)$$

gegeben, die 1954 von B. Ricker als Populationsmodell vorgeschlagen wurde. Wir können obige Differenzgleichung als eine Modifikation der linearen Differenzgleichung (1.8) auffassen, wobei die (maximale) Reproduktionsrate durch den Term ‘ $\exp(R)$ ’ gegeben ist, deren Einfluß auf die Populationsdynamik mit steigendem  $X_t$  über den zusätzlichen Faktor ‘ $\exp\left(-R \cdot \frac{X_t}{K}\right)$ ’ immer stärker abgeschwächt wird. Unabhängig vom genauen Wert von  $R$  gilt in diesem Modell immer  $X_t \geq 0$  für alle  $t$ , wenn auch initial  $X_0 \geq 0$ . Zur Untersuchung des qualitativen Verhaltens betrachten wir wieder ein zugehöriges Cobweb-Diagramm, siehe Abb. 1.8.

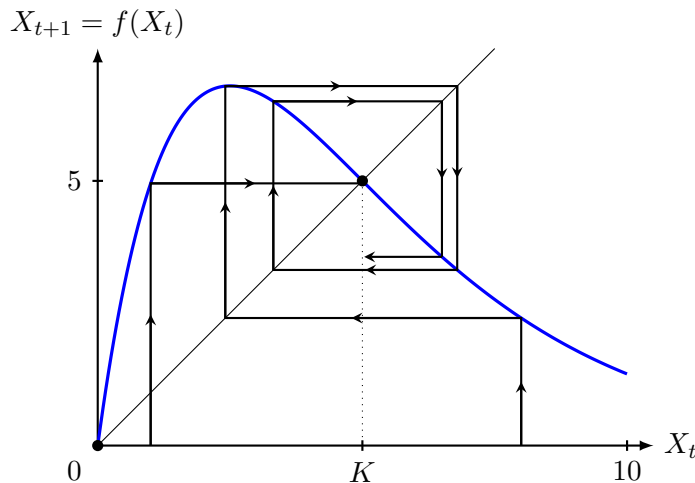


Abbildung 1.8: Cobweb-Diagramm der Differenzgleichung (1.22), für  $R = 2$  und  $K = 5$ .

Im Ricker Modell (1.22) existieren erneut zwei Gleichgewichtspunkte,  $X_1^* = 0$  und

$$F(X_2^*) = \exp\left[R \cdot \left(1 - \frac{X_2^*}{K}\right)\right] \cdot X_2^* \stackrel{!}{=} X_2^* \quad \Leftrightarrow \quad \exp\left[R \cdot \left(1 - \frac{X_2^*}{K}\right)\right] \stackrel{!}{=} 1 \quad \Rightarrow \quad X_2^* = K > 0.$$

Die Kapazität  $K$  ist also auch ein Gleichgewichtszustand im Modell. Wir können  $K$  als „Populationsoptimum“ auffassen, da  $F(X_t) < X_t$  für Populationen  $X_t > K$  und ferner  $F(X_t) > X_t$  für alle positiven  $X_t < K$ . Eine Lösung mit Anfangswert  $X_0 > 0$  nähert sich somit über die Zeit immer mehr dem Gleichgewichtszustand  $X_2^* = K$  an, siehe Abb. 1.8.

## 1.5 Gleichgewichtszustände und Stabilität

Wie wir anhand der bisherigen Beispiele gesehen haben, stellt die Betrachtung möglicher Gleichgewichtszustände ein wichtiges Hilfsmittel bei der Untersuchung des Verhaltens von Lösungen einer Differenzgleichung dar. Ein System befindet sich in einem Gleichgewichtszustand, wenn es sich nicht mehr verändert, sobald es diesen Zustand erreicht (oder in diesem Zustand startet) (vgl. Def. 1.5 und Bem. 1.6). (Mit „System“ kann hier z.B. die Population von Fliegen gemeint sein, mit „Zustand“ eine bestimmte Größe dieser Population.)

Wir hatten z.B. gesehen, dass  $X^* = 0$  immer ein Gleichgewichtszustand der linearen Differenzgleichung  $X_{t+1} = R \cdot X_t$  ist, und  $X_1^* = 0$  und  $X_2^* = (K - \frac{K}{R})$  bzw.  $X_2^* = K$  Gleichgewichtszustände der nichtlinearen Differenzgleichungen (1.18), (1.21) und (1.22) sind.

Nun fragen wir uns, was passiert, wenn sich das System nicht exakt in einem Gleichgewichtszustand  $X^*$  befindet, sondern nur in dessen Nähe. Nähert es sich  $X^*$  an? Oder entfernt es sich weiter von  $X^*$ , sobald es auch nur ein bisschen davon entfernt ist?

**BEISPIEL 1.14** Die lineare Differenzgleichung  $X_{t+1} = R \cdot X_t$  besitzt für  $R \neq 1$  nur einen Gleichgewichtszustand  $X^* = 0$ . Mit der Cobweb-Methode können wir sehen, dass sich für  $R > 1$  das System von diesem Zustand weiter entfernt, sobald es ein wenig von  $X^*$  entfernt ist, vgl. Bsp. 1.9. Für  $R < 1$  dagegen nähert sich das System dem Gleichgewichtszustand 0 an, vgl. Bsp. 1.10, unabhängig vom Anfangswert  $X_0$ .

Die Frage nach der *Stabilität* eines Gleichgewichtszustandes wollen wir mit der folgenden Definition genauer fassen:

**DEFINITION 1.15** Sei  $X^*$  ein Gleichgewichtszustand einer Differenzgleichung  $X_{t+1} = F(X_t)$ :

*i.*  $X^*$  heißt stabil, wenn für alle  $\varepsilon > 0$  ein  $\delta_\varepsilon > 0$  existiert, so dass gilt

$$|X_{t_0} - X^*| < \delta_\varepsilon \implies |X_t - X^*| < \varepsilon \quad \text{für alle } t \geq t_0, t, t_0 \in \mathbb{N}. \quad (1.23)$$

*ii.*  $X^*$  heißt lokal asymptotisch stabil, falls  $X^*$  stabil ist und ein  $\delta > 0$  existiert, so dass falls

$$|X_{t_0} - X^*| < \delta \implies \lim_{t \rightarrow \infty} |X_t - X^*| = 0. \quad (1.24)$$

*iii.*  $X^*$  heißt global asymptotisch stabil, falls  $X^*$  stabil ist und es gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |X_t - X^*| = 0. \quad (1.25)$$

*iv.*  $X^*$  heißt neutral stabil, falls  $X^*$  stabil, aber nicht asymptotisch stabil ist.

*v.*  $X^*$  heißt instabil, falls  $X^*$  nicht stabil ist.

Das bedeutet mit anderen Worten:

$X^*$  ist stabil, wenn das System in der Nähe des Zustandes  $X^*$  bleibt, sobald es zu irgendeinem Zeitpunkt  $t_0$  in der Nähe von  $X^*$  war.  $X^*$  ist asymptotisch stabil, wenn sich das System diesem Gleichgewichtszustand sogar immer stärker annähert, sobald es ihm einmal nah genug gekommen ist. Ist der Gleichgewichtspunkt sogar global asymptotisch stabil, dann wird sich das System unabhängig vom Anfangszustand  $X_0$  mit der Zeit diesem Zustand immer stärker annähern.

**BEISPIEL 1.16** Wir betrachten erneut die lineare Differenzengleichung  $X_{t+1} = R \cdot X_t$ . Hier ist  $X^* = 0$  global asymptotisch stabil für  $R < 1$  und instabil für  $R > 1$ . Für  $R = 1$  ist jeder Zustand ein Gleichgewichtszustand, der zwar stabil (z.B. mit  $\delta_\varepsilon = \varepsilon$ ) aber nicht asymptotisch stabil ist.

**BEISPIEL 1.17** Bei der logistischen Differenzengleichung (1.18) hatten wir gesehen, siehe Abb. 1.7, dass für  $R = 2.8$  und  $K = 9$  der Gleichgewichtszustand  $X_1^* = 0$  instabil und  $X_2^* = (K - \frac{K}{R})$  asymptotisch stabil ist (offensichtlich nur lokal für  $X_0 \leq K$ , da für  $X_0 > K$  keine positive Lösung existiert).

Die Stabilität von Gleichgewichtszuständen lässt sich mit folgendem Satz untersuchen:

**THEOREM 1.18** Sei  $X^*$  ein Gleichgewichtszustand der Differenzengleichung  $X_{t+1} = F(X_t)$  und die Funktion  $F$  sei stetig differenzierbar bei  $X^*$ . Dann ist  $X^*$  lokal asymptotisch stabil, falls  $|F'(X^*)| < 1$ , und instabil, falls  $|F'(X^*)| > 1$ .

Die Idee hinter Satz 1.18 ist, das Verhalten der Lösung einer gegebenen Differenzengleichung mit der Lösung einer linearen Differenzengleichung (lokal) zu vergleichen, welche die gegebene Differenzengleichung bei  $X^*$  approximiert.

**BEISPIEL 1.19** Wir betrachten die Beispiele 1.16 und 1.17 hinsichtlich Satz 1.18:

(a) Für die lineare Differenzengleichung mit  $F(X) = R \cdot X$  gilt  $|F'(X)| = |R|$ , also ist 0 (lokal) asymptotisch stabil für  $R < 1$  und instabil für  $R > 1$ .

(b) Für die logistische Differenzengleichung mit  $F(X) = R \cdot (1 - \frac{X}{K}) \cdot X$  gilt  $|F'(X)| = |R \cdot (1 - \frac{2X}{K})|$ , also ist  $|F'(0)| = |R|$  und damit der Gleichgewichtszustand  $X_1^* = 0$  lokal asymptotisch stabil für  $R < 1$  und instabil für  $R > 1$ .

Da  $|F'(K - \frac{K}{R})| = |2 - R|$  hängt auch die Stabilität von des zweiten Gleichgewichtszustandes  $X_2^* = (K - \frac{K}{R})$  vom Wert von  $R$  ab. So ist  $X_2^*$  lokal asymptotisch stabil für  $1 < R < 3$  und instabil sowohl für  $R < 1$  als auch für  $R > 3$ .

Neben den echten Gleichgewichtszuständen gibt es auch Zustände, die zwar im obigen Sinn instabil sind, bei denen das System aber ein periodisches Verhalten zeigt. Das System durchläuft dann immer wieder den selben Zyklus von Zuständen.

**DEFINITION 1.20** Ein  $k$ -Tupel von Zuständen  $(\tilde{X}_1, \tilde{X}_2, \dots, \tilde{X}_k)$  bildet einen  $k$ -Zyklus der Differenzengleichung  $X_{t+1} = F(X_t)$ , falls gilt

$$\tilde{X}_{j+1} = F(\tilde{X}_j) \quad \text{für } j = 1, \dots, k-1 \quad \text{und} \quad \tilde{X}_1 = F(\tilde{X}_k). \quad (1.26)$$

Insbesondere gilt dann für alle  $j = 1, \dots, k$

$$\tilde{X}_j = F^k(\tilde{X}_j) =: \underbrace{F(F(\dots F(\tilde{X}_j)\dots))}_{k\text{-mal}}. \quad (1.27)$$



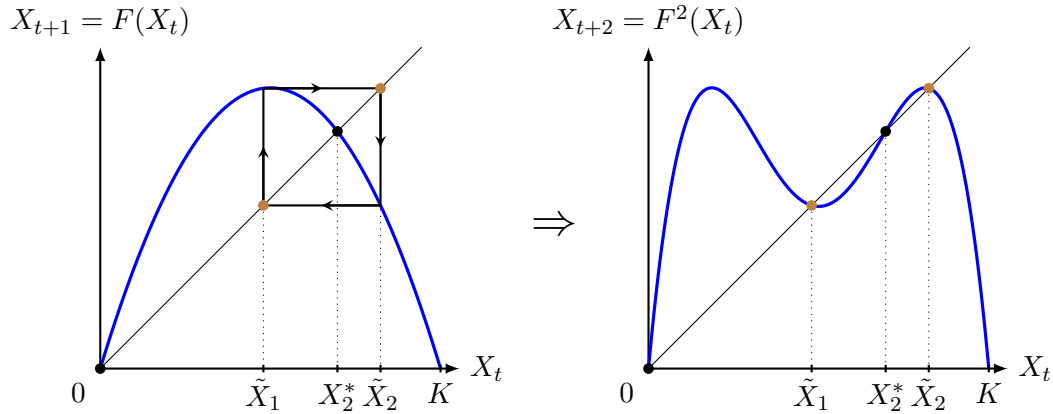


Abbildung 1.9: 2-Zyklus der logistischen Differenzgleichung (1.18), für  $R = 3.3$  und  $K = 9$ .

Liegt z.B. ein 2-Zyklus vor, so ergeben sich dessen Zustände als zusätzliche Schnittpunkte (neben den Gleichgewichtspunkten) der Funktion  $X_{t+2} = F^2(X_t)$  mit der Winkelhalbierenden, siehe Abb. 1.9.

Analog zu Gleichgewichtszuständen gibt es auch bei Zyklen das Konzept der Stabilität. So kann ein System auch *periodisch stabil* zwischen Umgebungen von den Zuständen eines Zyklus wechseln oder sich diesen Zuständen periodisch immer stärker annähern. Es entsteht dann sozusagen eine *stabile Gleichgewichtsmenge*  $\{\tilde{X}_1, \tilde{X}_2, \dots, \tilde{X}_k\}$ , die sogar asymptotisch stabil sein kann.

DEFINITION 1.21 Ein  $k$ -Zyklus heißt lokal asymptotisch stabil, falls ein  $\delta > 0$  existiert, so dass

$$\min_{j=1, \dots, k} |X_{t_0} - \tilde{X}_j| < \delta \quad \Rightarrow \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \min_{j=1, \dots, k} |X_t - \tilde{X}_j| = 0. \quad (1.28)$$

Auch hier gibt es ein analytisches Kriterium, um zu entscheiden, ob ein Zyklus lokal asymptotisch stabil ist.

THEOREM 1.22 Sei  $(\tilde{X}_1, \dots, \tilde{X}_k)$  ein  $k$ -Zyklus einer Differenzgleichung  $X_{t+1} = F(X_t)$  und sei  $F$  stetig differenzierbar an den Punkten  $\tilde{X}_1, \dots, \tilde{X}_k$ . Dann ist der  $k$ -Zyklus lokal asymptotisch stabil, falls

$$|F'(\tilde{X}_1)| \cdot |F'(\tilde{X}_2)| \cdot \dots \cdot |F'(\tilde{X}_k)| < 1.$$

BEISPIEL 1.23 Wir betrachten die logistische Differenzgleichung  $X_{t+1} = R \cdot (1 - \frac{X_t}{K}) \cdot X_t$  mit  $R = 3.3$  und  $K = 9$  und dessen Gleichgewichtszustand  $X_2^* = (K - \frac{K}{R})$ . Für  $R = 3.3$  ist dieser zwar instabil, siehe Bsp. 1.19b, aber es lässt sich ein 2-Zyklus um  $X_2^*$  beobachten, siehe Abb. 1.9. Dieser Zyklus ist durch die Zustände  $\tilde{X}_1$  und  $\tilde{X}_2$  gegeben, welche keine Gleichgewichtszustände der logistischen Differenzgleichung (und damit ungleich  $X_1^* = 0$  und  $X_2^*$ ) sind, aber zusätzliche Gleichgewichtszustände von

$$X_{t+2} = F^2(X_t) = F(F(X_t)) = R \cdot F(X_t) \cdot \left(1 - \frac{F(X_t)}{K}\right) \quad (1.29)$$

sein müssen, siehe Def. 1.20. Somit ergibt sich

$$\begin{aligned} \tilde{X}_i &\stackrel{!}{=} F^2(\tilde{X}_i) = R^2 \cdot \left(1 - \frac{F(\tilde{X}_i)}{K}\right) \cdot \left(1 - \frac{\tilde{X}_i}{K}\right) \cdot \tilde{X}_i \\ \stackrel{(a)}{\Rightarrow} 1 &\stackrel{!}{=} R^2 \cdot \left(1 - \frac{F(\tilde{X}_i)}{K}\right) \cdot \left(1 - \frac{\tilde{X}_i}{K}\right) = R^2 \cdot \left(1 - \frac{R \cdot \left(1 - \frac{\tilde{X}_i}{K}\right) \cdot \tilde{X}_i}{K}\right) \cdot \left(1 - \frac{\tilde{X}_i}{K}\right) \\ \stackrel{(b)}{\Leftrightarrow} 0 &\stackrel{!}{=} R^2(1 - R\tilde{x}_i(1 - \tilde{x}_i))(1 - \tilde{x}_i) - 1 = R^3(2\tilde{x}_i^2 - \tilde{x}_i^3) - R^2(1+R)\tilde{x}_i + R^2 - 1 \\ \stackrel{(c)}{\Rightarrow} 0 &\stackrel{!}{=} R^3\tilde{x}_i^2 - R^2(1+R)\tilde{x}_i + R(1+R) \Rightarrow \tilde{x}_{1,2} = \frac{1 + R \pm \sqrt{(1+R)(R-3)}}{2R} \\ \stackrel{(d)}{\Rightarrow} \tilde{X}_{1,2} &= \frac{K}{2R} \cdot \left(1 + R \pm \sqrt{(1+R)(R-3)}\right), \end{aligned}$$

wobei wir:

- (a) durch  $\tilde{X}_i$  dividiert haben, dies ist hier möglich da nach Voraussetzung  $\tilde{X}_i \neq X_1^* = 0$  ist
- (b) die Substitution  $\tilde{x}_i := \tilde{X}_i/K$  durchgeführt haben
- (c) die Gleichung durch  $(\tilde{x}_i - \frac{X_2^*}{K}) = (\tilde{x}_i - 1 + 1/R)$  geteilt haben, um die bekannte Nullstelle, die durch den Gleichgewichtspunkt gegeben ist, zu eliminieren,
- (d)  $\tilde{X}_i = \tilde{x}_i \cdot K$  resubstituiert haben.

Also ist  $\tilde{X}_1 = \frac{3}{22} \cdot (43 + \sqrt{129}) \approx 7.4$  und  $\tilde{X}_2 = \frac{3}{22} \cdot (43 - \sqrt{129}) \approx 4.3$  für  $R = 3.3$  und  $K = 9$ . Dieser 2-Zyklus ist nach Satz 1.22 für  $R = 3.3$  lokal asymptotisch stabil, siehe Abb. 1.10, da gilt

$$\begin{aligned} |F'(\tilde{X}_1)| \cdot |F'(\tilde{X}_2)| &= \left|R \cdot \left(1 - \frac{2 \cdot \tilde{X}_1}{K}\right)\right| \cdot \left|R \cdot \left(1 - \frac{2 \cdot \tilde{X}_2}{K}\right)\right| \\ &= \left|1 + \sqrt{(1+R)(R-3)}\right| \cdot \left|1 - \sqrt{(1+R)(R-3)}\right| \\ &= |1 - (1+R)(R-3)| = |R^2 - 2R - 4| < 1, \end{aligned}$$

für Werte von  $R$  zwischen 3 und  $(1 + \sqrt{6}) \approx 3.45$ .

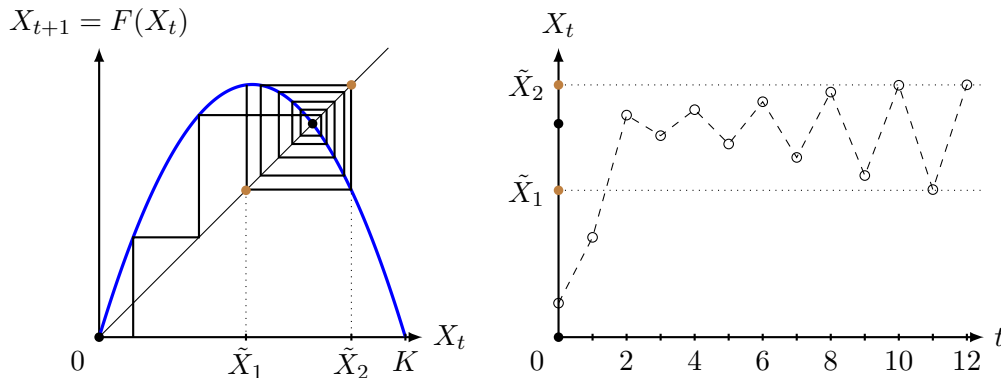


Abbildung 1.10: Stabilität des 2-Zyklus der logistischen Differenzgleichung (1.18), für  $R = 3.3$  und  $K = 9$ .

### 1.6 Parameterabhängige Bifurkationen und Chaos

Wie wir in den vorangegangenen Beispielen gesehen haben, kann sich das qualitative Verhalten eines Systems mit Veränderung der Werte bestimmter Parameter grundlegend ändern. So hängt z.B. die Stabilität eines Gleichgewichtszustandes von den Parameterwerten ab. Außerdem kann es passieren, dass bei Änderung des Wertes eines Parameters zusätzliche Gleichgewichtszustände oder Zyklen entstehen. Einen solchen Wechsel im qualitativen Verhalten des Systems nennt man *Bifurkation*.

So hatten wir z.B. für die lineare Differenzengleichung  $X_{t+1} = R \cdot X_t$  eine Bifurkation bei  $R = 1$  beobachtet, siehe Bsp. 1.19a, bei der die Stabilität des Gleichgewichtszustandes  $X^* = 0$  von asymptotisch stabil ( $R < 1$ ) zu instabil ( $R > 1$ ) wechselt. Bei der logistischen Differenzengleichung  $X_{t+1} = R \cdot (1 - \frac{X_t}{K}) \cdot X_t$  identifizierten wir mehrere Bifurkationen, siehe Bsp. 1.19b und 1.23. Für  $R < 1$  ist  $X_1^* = 0$  asymptotisch stabil, so dass die Population, unabhängig vom Anfangswert, letztendlich ausstirbt. Für  $1 < R < 3$  ist der Gleichgewichtszustand  $X_2^* = (K - \frac{K}{R})$  asymptotisch stabil, die Population nähert sich im Laufe der Zeit an. Für  $3 < R < (1 + \sqrt{6}) \approx 3.45$  liegt ein asymptotisch stabiler 2-Zyklus vor und  $X_t$  alterniert letztendlich zwischen den zugehörigen Zuständen  $\tilde{X}_1$  und  $\tilde{X}_2$ . Für  $R$  zwischen  $(1 + \sqrt{6})$  und ungefähr 3.54 entsteht ein asymptotisch stabiler 4-Zyklus, das heißt im Grenzwert  $t \rightarrow \infty$  wechselt  $X_t$  zwischen vier Werten (eine Bifurkation führt bei  $R = (1 + \sqrt{6})$

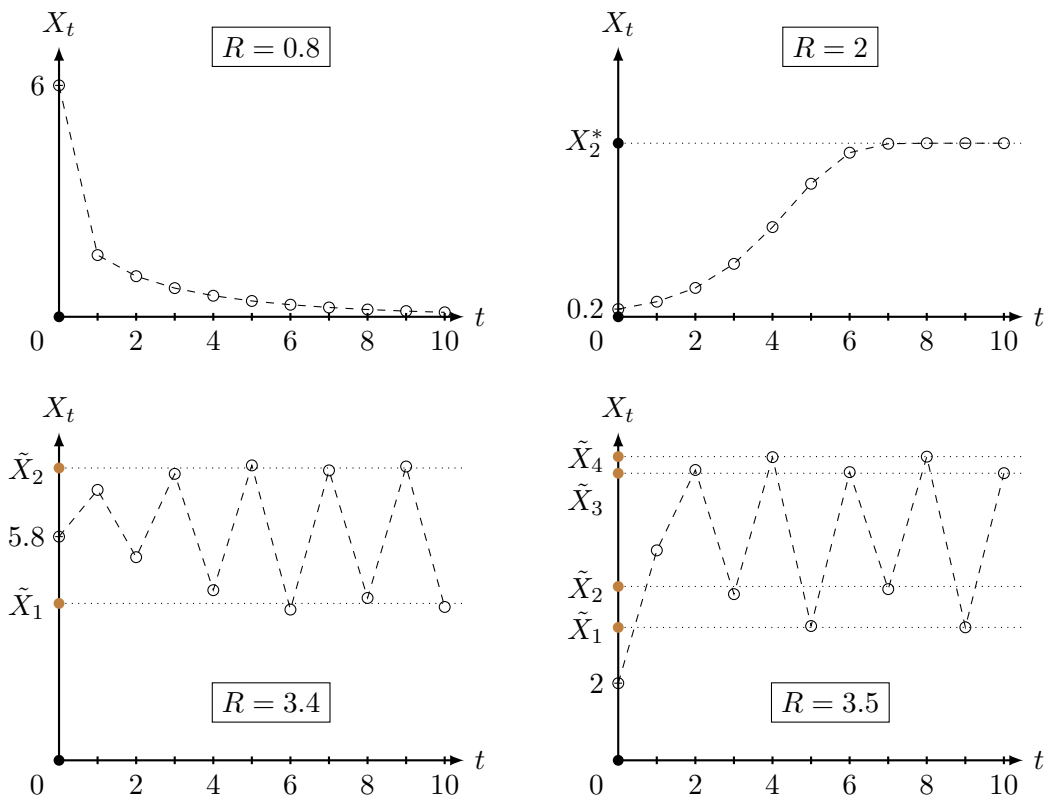


Abbildung 1.11: Qualitatives Verhalten der logistischen Differenzengleichung (1.18) für unterschiedliche Reproduktionsraten  $R$ , aber identische Kapazitäten  $K = 9$ . Für  $R < 1$  ist der Gleichgewichtszustand  $X_1^* = 0$  asymptotisch stabil (oben links), für  $1 < R < 3$  der Gleichgewichtszustand  $X_2^* = (K - \frac{K}{R})$  (oben rechts). Für  $3 < R \lesssim 3.45$  liegt ein asymptotisch stabiler 2-Zyklus (unten links) und für  $3.45 \lesssim R \lesssim 3.54$  schließlich ein asymptotisch stabiler 4-Zyklus (unten rechts) vor.

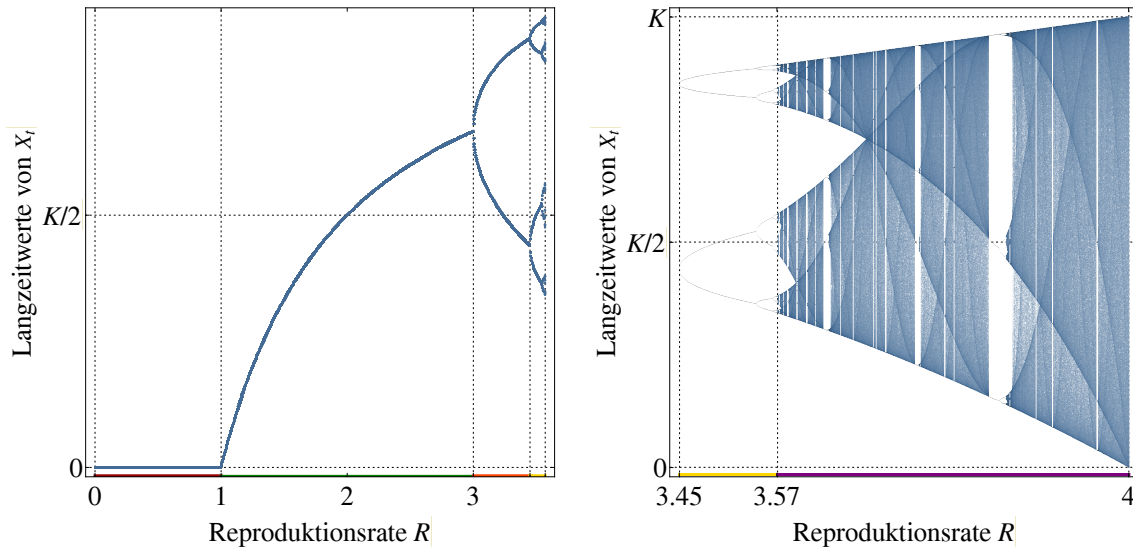


Abbildung 1.12: Bifurkationen der logistischen Differenzgleichung (1.18) für Reproduktionsraten  $R$  aus dem Bereich  $0 \leq R \leq 3.57$  (linke Abbildung) und aus dem Bereich  $3.45 \leq R \leq 4$  (rechte Abbildung) und identische Kapazitäten  $K = 9$ .

zu einer Periodenverdopplung). Diese qualitativ unterschiedlichen Systemverhalten sind in Abb. 1.11 gezeigt. In Abb. 1.12 sind die Gleichgewichts- bzw. Zyklenzustände dargestellt, die sich in Abhängigkeit von  $R$  ergeben.

Steigt der Wert von  $R$  über 3.54 hinaus, so kommt es zu weiteren Periodenverdopplungen, so dass  $X_t$  (für große  $t \in \mathbb{N}$ ) zwischen 8, dann 16, 32, ... Zuständen wechselt. Die zugehörigen Wertebereiche für  $R$ , in denen diese Zyklen stabil sind, werden immer kleiner, bis schliesslich für  $R \approx 3.57$  keine endlichen Zyklen mehr vorliegen, siehe Abb. 1.12 (rechts). Wir sprechen in diesem Zusammenhang von *chaotischem Verhalten*.

Chaos ist einem dynamischen System durch zwei wichtige Eigenschaften geprägt, siehe Abb. 1.13: (a) Zum einen gibt es weder stabile Gleichgewichtszustände noch stabile Zyklen, das Systemverhalten ist also instabil und aperiodisch. (b) Zum anderen führen kleinste Veränderungen in den Anfangswerten nach einer kurzen Zeit zu völlig unterschiedlichen Zuständen. Letzteres ist eine typische Eigenschaft chaotischer Systeme, die eine Vorhersage über deren Langzeitverhalten sehr schwierig macht, wenn die Anfangswerte nicht ausreichend genau bekannt bzw. bestimmbar sind (bekanntes Bsp.: Wettervorhersage).

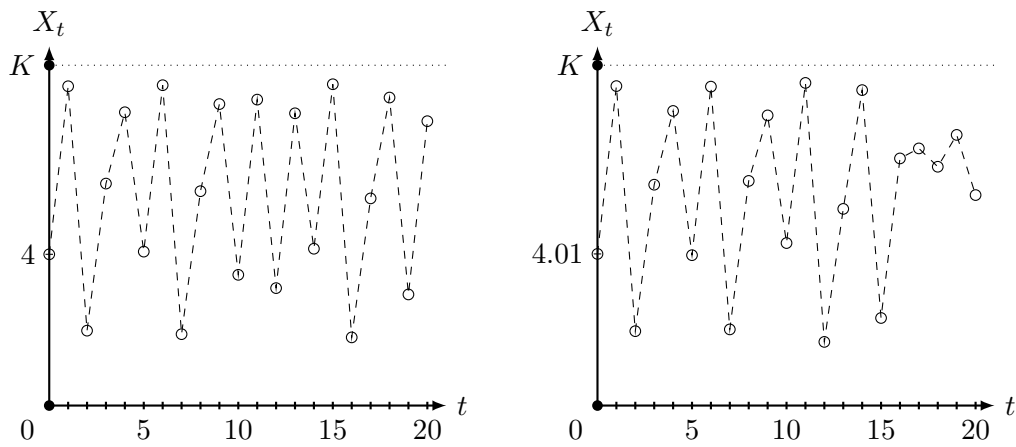


Abbildung 1.13: Chaotisches Verhalten der logistischen Differenzgleichung (1.18) für unterschiedliche Anfangswerte  $X_0 = 4$  (links) und  $X_0 = 4.01$  (rechts), mit  $R = 3.8$  und  $K = 9$ . Anfänglich (bis etwa  $t = 10$ ) bewirkt die Störung in den Anfangswerten nur geringfügige Unterschiede im Systemverhalten. Danach sind jedoch größere Abweichungen zu beobachten, die schließlich (bei etwa  $t = 15$ ) zu qualitativ unterschiedlichen Prognosen des Systemverhaltens führen.



## Kapitel 2

# Differentialgleichungen

Ähnlich wie bei den Differenzgleichungen geht es auch bei Differentialgleichungen um die Dynamik eines Systems von Zuständen bzw. Größen. Allerdings wird jetzt davon ausgegangen, dass der Zustand sich nicht nur zu bestimmten Zeiten ändert (wie z.B. bei der Entstehung neuer Fliegen aus den im Vorjahr abgelegten Eiern), sondern dass die Veränderung eines Zustandes *kontinuierlich* mit der Zeit stattfindet.

Oft liegen biologischen Prozessen nicht wirklich kontinuierliche Veränderungen zugrunde, können aber als solche beschrieben werden. Zum Beispiel kann die Teilung von Zellen in einer Kultur als kontinuierlich beschrieben werden, wenn sehr viele Zellen betrachtet werden, die sich jeweils zu unterschiedlichen Zeitpunkten teilen. Dann wird das Zeitintervall zwischen zwei aufeinanderfolgenden Teilungen in der gesamten Zellkultur sehr klein. Näherungsweise kann man das zu betrachtende Zeitintervall dann vereinfachend gegen Null gehen lassen und erhält somit anstatt einer Differenzgleichung eine Differentialgleichung, also ein zeitlich kontinuierliches Modell.

Betrachten wir eine Differenzgleichung der Form

$$X_{t+\Delta t} = F_{\Delta t}(X_t), \quad (2.1)$$

wobei  $\Delta t$  für die Länge des Zeitintervalls steht (bisher hatten wir stets  $\Delta t = 1$  und haben dies nicht weiter in der Notation für  $F$  festgehalten). Für kurze Zeiten  $\Delta t$  ist zu erwarten, dass die Zustandsänderung  $\Delta X_t := (X_{t+\Delta t} - X_t)$  ebenfalls gering sein wird. Mathematisch kann dann davon ausgegangen werden, dass sich die Funktion  $F_{\Delta t}$  darstellen lässt als

$$F_{\Delta t}(X_t) = X_t + \Delta t \cdot f(X_t) + o(\Delta t), \quad (2.2)$$

wobei  $f$  eine anhand von  $F_{\Delta t}$  zu bestimmende Funktion ist und  $o(\Delta t)$  unbestimmte Restterme zusammenfaßt, die für  $\Delta t \rightarrow 0$  schneller als linear verschwinden, d.h.  $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{o(\Delta t)}{\Delta t} = 0$ . Die Zustandsänderung  $\Delta X_t$  in Relation zum Zeitintervall  $\Delta t$  kann somit beschrieben werden durch

$$\frac{\Delta X_t}{\Delta t} = \frac{X_{t+\Delta t} - X_t}{\Delta t} \stackrel{\text{Gl. (2.1)}}{=} \frac{F_{\Delta t}(X_t) - X_t}{\Delta t} \stackrel{\text{Gl. (2.2)}}{=} f(X_t) + \frac{o(\Delta t)}{\Delta t}. \quad (2.3)$$

Für den Grenzfall  $\Delta t \rightarrow 0$ , ergibt sich aus dieser Gleichung nun die Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt} X_t := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta X_t}{\Delta t} = f(X_t). \quad (2.4)$$

Es gibt aber auch Differentialgleichungen, die nicht (ausschließlich) als Näherung an eine Differenzgleichung zu verstehen sind, sondern in denen z.B. eine Änderungsgeschwindigkeit als Funktion der betrachteten Größe und evtl. der Zeit dargestellt wird.

BEISPIEL 2.1 Für einen Stromkreis mit anliegender Spannungsquelle (Spannung  $U$ ), Widerstand  $R$  und einer Spule mit Induktivität  $L$  liefern das Faraday'sche Induktionsgesetz und der Kirchhoff'sche Satz den Zusammenhang

$$U = R \cdot I + L \cdot \frac{d}{dt}I. \quad (2.5)$$

Das ist eine Differentialgleichung, deren Lösung den zeitlichen Verlauf der Stromstärke  $I(t)$  (zu einer gegebenen Anfangsstromstärke  $I_0$ ) beschreibt.

## 2.1 Typen von Differentialgleichungen

### 2.1.1 Allgemeine Differentialgleichungen

Analog zu Differenzgleichungen höherer Ordnung können in Differentialgleichungen auch Ableitungen höherer Ordnung auftreten.

DEFINITION 2.2 (a) Eine (gewöhnliche) Differentialgleichung  $n$ -ter Ordnung ist eine Gleichung der Form

$$x^{(n)}(t) = f(t, x(t), x'(t), \dots, x^{(n-1)}(t)), \quad (2.6)$$

wobei  $x^{(i)}(t) := \frac{d^i}{dt^i}x(t)$  die  $i$ -te Ableitung der Funktion  $x : I \rightarrow \mathbb{R}$  nach  $t$  bezeichnet.  $I \subset \mathbb{R}$  bezeichnet ein Intervall. Die Funktion  $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ , auch Richtungs- oder Vektorfeld genannt, ist hierbei eine stetige Funktion, die ihren Definitionsbereich  $D \subseteq \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$  auf  $\mathbb{R}$  abbildet.

- (b) Hängt  $f$  nicht explizit von der unabhängigen Variable  $t$  ab, so spricht man von einer autonomen Differentialgleichung.
- (c) Ein Anfangswertproblem (AWP) ist eine Differentialgleichung (2.6) zusammen mit  $n$  Anfangswerten

$$x(t_0) = x_0, \quad \dot{x}(t_0) := \frac{d}{dt}x(t_0) = x_1, \quad \ddot{x}(t_0) := \frac{d^2}{dt^2}x(t_0) = x_2, \dots, x^{(n-1)}(t_0) = x_{n-1}, \quad (2.7)$$

wobei  $t_0 \in I$  und  $x_i \in \mathbb{R}$  gilt.

- (d) Unter der Lösung eines Anfangswertproblems ist eine Funktion  $x \in \mathbb{C}^n(I, \mathbb{R})$ , also eine  $n$ -mal stetig-differenzierbare Funktion von  $I$  nach  $\mathbb{R}$ , die die Gleichungen (2.6) und (2.7) erfüllt.  $x$  wird auch als Lösungskurve oder Trajektorie bezeichnet.

BEMERKUNG 2.3 In biologischen oder physikalischen Zusammenhängen bezeichnet  $x(t)$  oft den Zustand eines Systems zur Zeit  $t$ . Im allgemeinen muss die Variable  $t$  aber nicht die Zeit beschreiben sondern kann auch eine beliebige andere Größe sein. Statt  $x(t)$  wird dann auch  $f(x)$  geschrieben, hier ist  $f$  die gesuchte Funktion und  $x$  die Variable.

BEMERKUNG 2.4 Hängt die gesuchte Funktion von mehreren Veränderlichen ab und treten in der Differentialgleichung auch partielle Ableitungen nach unterschiedlichen Veränderlichen auf, so sprechen wir von einer partiellen Differentialgleichung (im Gegensatz zur oben eingeführten gewöhnlichen Differentialgleichung). Partielle Differentialgleichungen treten z.B. in der klassischen Mechanik auf, wo Größen betrachtet werden, die vom Ort und Impuls abhängen (und damit im drei-dimensionalen Raum von sechs Veränderlichen). In dieser Vorlesung befassen wir uns nur mit gewöhnlichen Differentialgleichungen.



Im Folgenden betrachten wir vorrangig Differentialgleichungen der Ordnung  $n = 1$ , also der Form

$$\dot{x}(t) := \frac{d}{dt}x(t) = f(t, x(t)). \quad (2.8)$$

Gleichwohl sei an dieser Stelle erwähnt, dass in der Physik sehr häufig Differentialgleichungen zweiter Ordnung auftreten, da nach dem zweiten Newton'schen Gesetz gilt

$$F(t, x(t)) = m \cdot a(t). \quad (2.9)$$

Hier bezeichnet  $F$  die Kraft, die auf ein Objekt wirkt,  $m$  dessen Masse und  $a$  seine Beschleunigung, das heisst

$$a(t) = \ddot{x}(t) := \frac{d^2}{dt^2}x(t), \quad (2.10)$$

wenn  $x(t)$  die Position des Objektes zur Zeit  $t$  bezeichnet.

**BEISPIEL 2.5** *Wir betrachten ein Gewicht mit Masse  $m$ , das an einer Feder mit Rückstellkraft  $F(x(t)) = -k \cdot x(t)$  (Hooke'sches Gesetz) befestigt ist, wobei  $k > 0$  die Federkonstante und  $x(t)$  die Auslenkung der Feder zur Zeit  $t$  bezeichnet. Nach dem zweiten Newton'schen Gesetz (2.9) ergibt sich dann näherungsweise für kleine Auslenkungen die Differentialgleichung*

$$-k \cdot x(t) = F(x(t)) \stackrel{\text{Gl. (2.9)}}{=} m \cdot a(t) \stackrel{\text{Gl. (2.10)}}{=} m \cdot \ddot{x}(t) \Leftrightarrow \ddot{x}(t) + \omega^2 \cdot x(t) = 0, \quad (2.11)$$

mit  $\omega := \sqrt{\frac{k}{m}} > 0$ . Dies ist eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung, die auch als (ungedämpfter) harmonischer Oszillator bekannt ist, wobei  $\omega$  der Kreisfrequenz des Oszillators entspricht. Da die Funktion  $x(t)$  gemäß der Differentialgleichung (2.11) eine zweite Ableitung besitzen soll, die bis auf den konstanten Faktor  $(-\omega^2)$  wieder gleich  $x(t)$  ist, machen wir den Lösungsansatz

$$x(t) = C \cdot e^{\lambda t}, \quad (2.12)$$

wobei  $\lambda$  und  $C$  Konstante bezeichnet, die von der Differentialgleichung und den Anfangswerten abhängen wird.

In der Tat, zweimaliges Ableiten unseres Exponentialansatzes (2.12) nach der Zeit  $t$  liefert

$$\ddot{x}(t) \stackrel{\text{Gl. (2.10)}}{=} \frac{d^2}{dt^2}x(t) \stackrel{\text{Gl. (2.12)}}{=} \lambda^2 \cdot C \cdot e^{\lambda t} \Leftrightarrow \ddot{x} - \lambda^2 \cdot x = 0, \quad (2.13)$$

was der zu lösenden Differentialgleichung (2.11) entspricht, wenn  $\lambda^2 = -\omega^2$  bzw.  $\lambda_{1,2} = \pm i\omega$  gilt. Somit haben wir zwei mögliche komplexe Lösungen  $x_1(t) = C_1 \cdot e^{+i\omega t}$  und  $x_2(t) = C_2 \cdot e^{-i\omega t}$  gefunden, deren Summe

$$x(t) = C_1 \cdot e^{+i\omega t} + C_2 \cdot e^{-i\omega t} \quad (2.14)$$

eine allgemeine komplexe Lösung der Differentialgleichung (2.11) ist, was sich durch zweimaliges Ableiten nach  $t$  schnell nachprüfen lässt. Liegt nun z.B. zu Beginn der Schwingung ( $t_0 = 0$ ) eine Auslenkung  $x(0) = x_0$  in Ruhelage  $\dot{x}(0) = 0$  vor, so folgt zunächst

$$x(0) = C_1 + C_2 \stackrel{!}{=} x_0 \quad \Rightarrow \quad C_2 = x_0 - C_1$$

und ferner

$$\dot{x}(0) := \frac{d}{dt}x|_{t=0} = i\omega \cdot (C_1 - C_2) = i\omega \cdot (2C_1 - x_0) \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad C_1 = \frac{x_0}{2}.$$

Somit ergibt sich in diesem Fall die spezielle Lösung

$$x(t) = \frac{x_0}{2} \cdot (e^{+i\omega \cdot t} + e^{-i\omega \cdot t}) = x_0 \cdot \cos(\omega \cdot t), \quad (2.15)$$

was gerade einer konstanten Schwingung mit Frequenz  $\omega$  und maximaler Auslenkung  $x_0$  entspricht. (Vereinfachend haben wir hierbei Reibungsverluste vernachlässigt. Ferner bietet das Hooke'sche Gesetz lediglich eine Näherung für sehr kleine Auslenkungen.)

### 2.1.2 Konstantes Wachstum

Das denkbar einfachste Anfangswertproblem beschreibt ein System mit konstantem Wachstum oder Abfall  $m$  pro Zeiteinheit mit Anfangswert  $x_0$ , also

$$\frac{d}{dt}x(t) = m, \quad x(t_0) = x_0. \quad (2.16)$$

Dies ist eine Differentialgleichung erster Ordnung, die ferner *inhomogen* ist (d.h. eine Konstante, in diesem Fall  $m$ , fließt additiv ein). Da die rechte Seite dieser Differentialgleichung nicht von  $x$  abhängt, können wir beide Seiten direkt integrieren

$$\int_{t_0}^t \frac{d}{ds}x(s) ds \stackrel{\text{Gl. (2.16)}}{=} \int_{t_0}^t m ds = \left[ m \cdot s \right]_{s=t_0}^{s=t} = m \cdot (t - t_0). \quad (2.17)$$

Aus dem *Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung* folgt ferner, dass gilt

$$\int_{t_0}^t \frac{d}{ds}x(s) ds = x(t) - x(t_0). \quad (2.18)$$

**BEMERKUNG 2.6** Der letzte Zusammenhang lässt sich auch etwas allgemeiner durch die Substitutionsregel einsehen, nach der für eine stetige Funktion  $f$  gilt, dass

$$\int_{t_0}^t \left\{ f(x(s)) \cdot \frac{d}{ds}x(s) \right\} ds = \int_{x(t_0)}^{x(t)} f(y) dy. \quad (2.19)$$

Für  $f = 1$  folgt Gleichung (2.18), denn

$$\int_{t_0}^t \left\{ 1 \cdot \frac{d}{ds}x(s) \right\} ds \stackrel{\text{Gl. (2.19)}}{=} \int_{x(t_0)}^{x(t)} 1 dy = \left[ y \right]_{y=x(t_0)}^{y=x(t)} = x(t) - x(t_0). \quad (2.20)$$

Insgesamt ergibt sich aus Gleichung (2.17) und (2.18), dass die allgemeine Lösung der Differentialgleichung (2.16) gegeben ist durch

$$x(t) = m \cdot (t - t_0) + x_0. \quad (2.21)$$

Somit wächst  $x(t)$  linear mit der Zeit  $t$ , falls  $m > 0$ . Für  $m < 0$  fällt  $x(t)$  linear mit der Zeit  $t$  ab. Ist  $m = 0$ , so ist  $x(t)$  konstant, d.h.  $x(t) = x_0$  für alle  $t$ .

**BEISPIEL 2.7** Aus einem Loch fließt Wasser aus einem Eimer mit konstanter Rate  $w$  Milliliter pro Stunde. In diesem Fall beschreibt die Differentialgleichung  $\dot{x}(t) = -w \frac{ml}{h}$  die Wassermenge  $x(t)$  im Eimer zur Zeit  $t$  nur solange richtig, bis der Eimer leer ist (es gibt keine negative Wassermenge). Danach genügt  $x(t)$  der Differentialgleichung  $\dot{x}(t) = 0$ . Ist z.B.  $x(0) = 10l = 10000ml$  und  $w = 500$ , dann folgt aus (2.21), dass die Wassermenge im Eimer nach 6 Stunden gegeben ist durch

$$x(6h) = -500 \frac{ml}{h} \cdot 6h + 10000ml = -3000 + 10000ml = 7000ml = 7l.$$

Die Zeit  $T$  bis der Eimer leer ist (und damit die Zeit, in der die Wassermenge durch die Differentialgleichung  $\dot{x} = -wml/h$  beschrieben wird) lässt sich bestimmen, indem in der Gleichung (2.21) einfach  $x(T) = 0$  gesetzt und dann nach  $T$  umgestellt wird:

$$0 = -500 \frac{ml}{h} \cdot T + 10000ml \quad \Leftrightarrow \quad T = \frac{10000ml}{500ml/h} = \frac{100}{5}h = 200h$$

Nach 200 Stunden ist der Eimer leer, also  $x(200h) = 0$ .

Das Anfangswertproblem (2.16) ist ein Spezialfall einer größeren Klasse von Differentialgleichungen, deren Lösung sich wie oben beschrieben durch direkte Integration ermitteln lässt. Dies gilt immer, wenn in der Gleichung  $x$  oder eine Ableitung von  $x$  nur einmal auftaucht und in der Gleichung nur mit einer vorgegebenen stetigen Funktion  $f(t)$  verknüpft wird.

**SATZ 2.8** Sei  $n \in \mathbb{N} \setminus 0$ ,  $I \subset \mathbb{R}$  ein Intervall und  $f : I \rightarrow \mathbb{R}$  eine stetige Funktion. Dann ergibt sich die Lösung des Anfangswertproblems

$$\frac{d^n}{dt^n} x(t) = x^{(n)}(t) = f(t), \quad x(t_0) = x_0, \dots, x^{(n-1)}(t_0) = x_{n-1} \quad (2.22)$$

iterativ durch Integration unter Verwendung von (2.18) zu

$$x(t) = F_n(t) + \sum_{k=0}^{n-1} (x_k - F_{n-k}(t_0)) \frac{(t-t_0)^k}{k!}. \quad (2.23)$$

Hierbei bezeichnet  $F_1$  die Stammfunktion von  $f$  und  $F_k$  für  $2 \leq k \leq n$  jeweils die Stammfunktion von  $F_{k-1}$ .

**Beweis:** Mit vollständiger Induktion:

Wir setzen  $A(n) : \Leftrightarrow x(t)$  aus (2.23) löst das AWP (2.22).

Induktionsverankerung ( $A(1)$  ist wahr):

Setzen wir

$$x(t) = F_1(t) + \sum_{k=0}^0 (x_k - F_{n-k}(t_0)) \frac{(t-t_0)^k}{k!} = F_1(t) + x_0 - F_1(t_0),$$

dann folgt  $x(t_0) = x_0$  und Ableiten liefert  $\frac{d}{dt} x(t) = f(t)$ , da  $\frac{d}{dt} F_1(t) = f(t)$ .

Induktionsschritt (für alle  $n \geq 1$  gilt  $A(n-1) \Rightarrow A(n)$ ):

Sei  $n \geq 2$ , so dass  $A(n-1)$  wahr ist (andernfalls ist die Implikation immer erfüllt). Sei  $x(t)$  gegeben durch (2.23). Dann gilt  $x(t_0) = x_0$  und differenzieren beider Seiten liefert wegen  $\frac{d}{dt} F_n(t) = F_{n-1}(t)$  und  $\frac{k}{k!} = \frac{1}{(k-1)!}$ .

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} x(t) &= \frac{d}{dt} F_n(t) + \sum_{k=0}^{n-1} (x_k - F_{n-k}(t_0)) \frac{d}{dt} \frac{(t-t_0)^k}{k!} \\ &= F_{n-1}(t) + \sum_{k=1}^{n-1} (x_k - F_{n-k}(t_0)) \frac{(t-t_0)^{k-1}}{(k-1)!} \\ &= F_{n-1}(t) + \sum_{\tilde{k}=0}^{n-2} (x_{\tilde{k}+1} - F_{n-1-\tilde{k}}(t_0)) \frac{(t-t_0)^{\tilde{k}}}{\tilde{k}!}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

wobei wir im letzten Schritt  $\tilde{k} = k-1$  gesetzt haben. Da  $A(n-1)$  nach Voraussetzung gilt, ist durch (2.24) eine Lösung des Anfangswertproblems  $y^{(n-1)}(t) = f(t)$  mit  $y(t_0) = y_0 =$

$x_1, \dots, y^{(n-2)}(t_0) = y_{n-2} = x_{n-1}$  gegeben. Das ist aber gerade das Anfangswertproblem, das  $y(t) = \frac{d}{dt}x(t)$  erfüllen muss, wenn  $x(t)$  das AWP (2.22) löst.  $\square$

**BEMERKUNG 2.9** Die Formel (2.23) ergibt sich durch iterative Integration mit dem Hauptsatz:

$$\begin{aligned} x^{(n-1)}(t) &= \int_{t_0}^t f(s) ds + x_{n-1} = F_1(t) - F_1(t_0) + x_{n-1} \\ x^{(n-2)}(t) &= \int_{t_0}^t (F_1(t) - F_1(t_0) + x_{n-1}) dt_1 + x_{n-2} \\ &=: F_2(t) - F_2(t_0) + (t - t_0)(x_{n-1} - F_1(t_0)) + x_{n-2} \\ &\vdots \\ &\vdots \\ x(t) &= F_n(t) - F_n(t_0) + \frac{(t - t_0)^{n-1}}{(n-1)!} (x_{n-1} - F_1(t_0)) + \dots + (t - t_0)(x_1 - F_{n-1}(t_0)) + x_0. \end{aligned}$$

### 2.1.3 Die homogene Evolutionsgleichung

Wir betrachten nun den nächst-komplizierteren Fall, in dem die Änderung der Größe  $x(t)$  direkt proportional zu  $x(t)$  selbst ist. Dies trifft z.B. auf den radioaktiven Zerfall oder die exponentielle Wachstumsphase (log-Phase) von Bakterienkulturen zu. In diesem Fall ergibt sich eine Differentialgleichung der Form

$$\frac{d}{dt}x(t) = k \cdot x(t), \quad (2.25)$$

welche über eine *Wachstums-* bzw. *Zerfallskonstante*  $k \neq 0$  charakterisiert ist (für  $k = 0$  wären wir wieder im oben beschriebenen Fall). Hierbei handelt es sich um eine Differentialgleichung erster Ordnung, die keinen additiven Term unabhängig von  $x$  aufweist und daher als homogen bezeichnet wird. Die Gleichung (2.25) wird als *homogene Evolutionsgleichung* bezeichnet. Diese kann als Grenzfall  $\Delta t \rightarrow 0$  der linearen Differenzgleichung

$$X_{t+\Delta t} = k \cdot X_t \cdot \Delta t + X_t \quad \Leftrightarrow \quad \frac{X_{t+\Delta t} - X_t}{\Delta t} = k \cdot X_t$$

betrachtet werden.

Da eine zugehörige Lösung  $x(t)$  entsprechend der Differentialgleichung (2.25) eine 1. Ableitung besitzt, die bis auf den konstanten Faktor  $k$  wieder gleich  $x(t)$  ist, verfolgen wir, ähnlich wie in Bsp. 2.5, den Lösungsansatz

$$x(t) = C \cdot e^{\lambda \cdot (t-t_0)}, \quad (2.26)$$

wobei  $C$  wieder einen konstanten Faktor bezeichnet, der vom gegebenen Anfangswert abhängen wird. Ableiten des Exponentialansatzes (2.26) nach der Zeit  $t$  liefert

$$\frac{d}{dt}x(t) = \lambda \cdot C \cdot e^{\lambda \cdot (t-t_0)} = \lambda \cdot x(t), \quad (2.27)$$

was offensichtlich der Differentialgleichung (2.25) entspricht, wenn wir  $\lambda = k$  setzen. Da nach Gl. (2.26) ferner  $x(t_0) = C$  gilt, ist die Lösung der homogenen Evolutionsgleichung (2.25) gegeben durch

$$x(t) = x_0 \cdot e^{k \cdot (t-t_0)}, \quad (2.28)$$

wobei  $x_0$  gerade ein beliebiger Anfangswert zur Anfangszeit  $t_0$  ist. Abhängig von  $k$  wird  $x(t)$  somit exponentiell wachsen ( $k > 0$ ) oder abfallen ( $k < 0$ ). (Für  $k = 0$  wäre  $x(t)$  konstant, also  $x(t) = x_0$  für alle  $t \in \mathbb{R}$ .)

Wir fassen obiges Ergebnis als Satz zusammen:

SATZ 2.10 *Das Anfangswertproblem*

$$\frac{d}{dt}x(t) = k \cdot x(t) \quad \text{mit} \quad x(t_0) = x_0$$

besitzt die eindeutige Lösung

$$x(t) = x_0 \cdot e^{k \cdot (t-t_0)}, \quad \text{für alle } t \in \mathbb{R}.$$

BEISPIEL 2.11 *Betrachten wir hierzu zwei Beispiele:*

- (a) Sei  $x(t)$  die Individuenanzahl einer Spezies mit konstanter Geburtenrate  $b$  und Sterberate  $d$  pro Individuum und Zeiteinheit, dann wird die Änderung von  $x(t)$  mit der Zeit beschrieben durch

$$\frac{d}{dt}x(t) = (b - d) \cdot x(t) \quad (2.29)$$

und somit ergibt sich die Lösung  $x(t) = x_0 \cdot e^{k \cdot t}$ , wobei  $k := (b - d)$  und  $x_0$  die Individuenanzahl zur Zeit  $t_0 = 0$  ist. Je nachdem ob die Geburtenrate  $b$  grösser oder kleiner als die Sterberate  $d$  ist, wächst ( $k > 0$ ) oder fällt ( $k < 0$ ) die Individuenanzahl also exponentiell mit der Zeit  $t$ .

- (b) Radioaktiver Zerfall: Sei  $x(t)$  die Anzahl an Isotopen, die zum Zeitpunkt  $t$  in einer Probe vorhanden ist. Die zeitliche Veränderung von  $x(t)$  kann über die Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt}x(t) = -\alpha \cdot x(t) \quad (2.30)$$

beschrieben werden, wobei  $\alpha > 0$  die Zerfallskonstante des Isotops bezeichnet. Diese Konstante kann über die Halbwertszeit  $t_{\frac{1}{2}}$  ermittelt werden, welche für ein gegebenes Isotop experimentell bestimmbar ist, z.B. beträgt  $t_{\frac{1}{2}} \approx 7,04 \times 10^8$  Jahre für Uranium-235. Wir wissen, dass die Lösung der Differentialgleichung (2.30) durch  $x(t) = x_0 \cdot e^{k \cdot t}$  gegeben ist, wobei  $k := -\alpha < 0$  und  $x_0$  die Anzahl an Isotopen zum Zeitpunkt  $t_0 = 0$  bezeichnet. Da sich nach Ablauf der Halbwertszeit  $t_{\frac{1}{2}}$  diese initiale Anzahl  $x_0$  halbiert hat, also  $x(t_{\frac{1}{2}}) = x_0/2$ , ergibt sich

$$x(t_{\frac{1}{2}}) = x_0 \cdot e^{-\alpha \cdot t_{\frac{1}{2}}} \stackrel{!}{=} \frac{x_0}{2} \quad \Rightarrow \quad \alpha = \frac{-\ln(\frac{1}{2})}{t_{\frac{1}{2}}} = \frac{\ln(2)}{t_{\frac{1}{2}}}. \quad (2.31)$$

BEMERKUNG 2.12 Für Wachstumsprozesse ( $k > 0$ ) ist die homogene Evolutionsgleichung (2.25) als ein Modell zu verstehen, dass das Systemverhalten über einen begrenzten (möglicherweise kurzen) Zeithorizont beschreibt. Ansonsten würde es zu unbegrenztem Wachstum führen, was natürlich physikalisch unrealistisch ist (wie bereits im Zusammenhang mit Differenzgleichungen diskutiert).

BEISPIEL 2.13 Unter günstigen Bedingungen teilt sich *Escherichia coli* (*E. coli*) etwa alle 20 Minuten. Wie viele Bakterien wären demnach innerhalb von 48 Stunden aus einer *E. coli* Zelle entstanden?

Sei  $x(t)$  die Bakterienanzahl zur Zeit  $t$ . Liegen initial  $x(0) = x_0$  Bakterien vor, so hat sich deren Anzahl nach  $T_2 = 20\text{min} = \frac{1}{3}h$  verdoppelt, also  $x(T_2) = 2x_0$ . Ähnlich wie in Bsp. 2.11a, kann die zeitliche Veränderung von  $x(t)$  durch die Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt}x(t) = k \cdot x(t) \quad (2.32)$$

beschrieben werden, wobei sich die Wachstumskonstante  $k > 0$  aus der Verdopplungszeit  $T_2 = \frac{1}{3}h$  ergibt als

$$2x_0 = x_0 e^{kT_2} \quad \Rightarrow \quad k = \frac{\ln(2)}{T_2} = 3 \ln(2) \frac{1}{h}. \quad (2.33)$$

Somit würde die Anzahl an Bakterien, die aus einer Zelle (also  $x_0 = 1$ ) hervorgegangen sind, zur Zeit  $t = 48h$  theoretisch

$$x(t = 48h) = e^{3 \ln(2) \cdot 48} = e^{144 \ln(2)} = e^{\ln(2^{144})} = 2^{144} \approx 2.23 \times 10^{43} \quad (2.34)$$

betragen, was aber mehr als unrealistisch ist. Zum Beispiel beträgt das Gewicht einer *E. coli*-Zelle ca.  $10^{-15} \text{kg}$ . Die gesamte Kultur würde nach 48 Stunden somit mehr als  $10^{28} \text{kg}$  wiegen und die Masse der Erde (ca.  $6 \times 10^{24} \text{kg}$ ) bereits um ein Tausendfaches übersteigen.

**BEMERKUNG 2.14** Wie wir in den vorangegangenen Beispielen gesehen haben, lässt sich eine konkrete Lösung einer Differentialgleichung (also der Wert von  $x(t)$  zu einer bestimmten Zeit  $t$ ) nur dann angeben, wenn auch der Anfangswert  $x_0$  bekannt ist. (Bei Differentialgleichungen höherer Ordnung  $n$  werden hierfür sogar Anfangswerte für  $x, x', \dots, x^{(n-1)}$  benötigt.) Für unterschiedliche Anfangswerte wird auch der Wert von  $x(t)$  zu einer bestimmten Zeit  $t$  unterschiedlich sein.

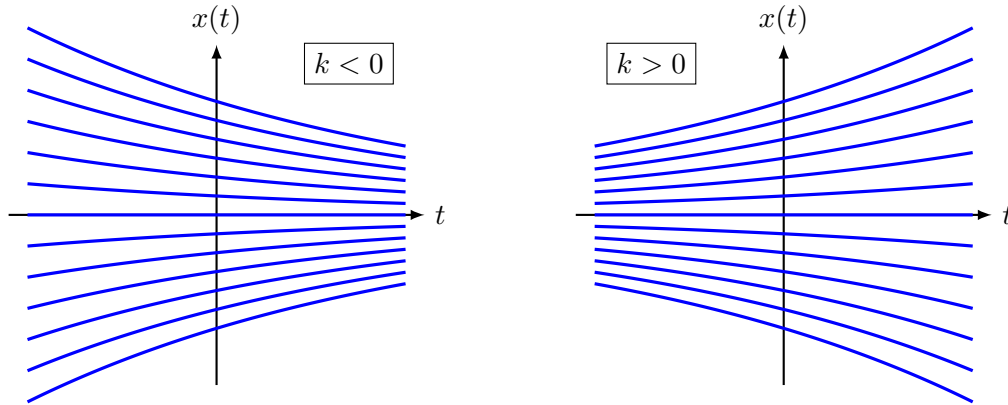


Abbildung 2.1: Phasenporträt der homogenen Evolutionsgleichung (2.25) für negatives (links) und positives (rechts) Wachstum.

In Wirklichkeit besitzt eine Differentialgleichung also immer eine ganze *Schar* oder *Familie* von Lösungen. Die geometrische Darstellung einer solchen Lösungsschar bezeichnet man als *Phasenporträt* einer Differentialgleichung, siehe Abb. 2.1. Wir sprechen von einem *Anfangswertproblem*, wenn eine Differentialgleichung und zugehörige Anfangswerte vorgegeben sind. Während eine Differentialgleichung an sich also eine Familie von Funktionen als Lösung besitzt, ist die Lösung eines Anfangswertproblems (insofern es eindeutig lösbar ist) also eine spezielle Funktion in dieser Funktionenschar.

#### 2.1.4 Die inhomogene Evolutionsgleichung

Die einfachste Methode um äußere Einflüsse in die Dynamik mit einzubeziehen, ist durch die *inhomogene Evolutionsgleichung*

$$\frac{d}{dt}x(t) = k \cdot x(t) + m \quad (2.35)$$

gegeben. Dies ist eine Wachstumsgleichung mit Wachstumskonstante  $k \neq 0$  und konstanter Störung  $m \neq 0$ .

BEISPIEL 2.15 *Zwei Beispiele zur möglichen Anwendung der inhomogenen Evolutionsgleichung (2.35) sind:*

- (a) *Die Veränderung eines Fischbestandes, der sich mit Wachstumskonstante  $k > 0$  vermehrt, aber einem konstanten Abfischen mit Abfangrate  $m < 0$  unterliegt.*
- (b) *Die Inaktivierung/Aktivierung eines Proteins  $P$ , gemäß*



wobei  $P_a$  die aktive und  $P_i$  die inaktive Proteinform und  $k_a, k_i > 0$  die Reaktionsratenkonstanten der Aktivierung bzw. Inaktivierung von  $P$  bezeichnen. Nach dem Massenwirkungsgesetz kann die Konzentrationsveränderung von aktivem Protein  $P_a$  durch die Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt}[P_a] = -k_i \cdot [P_a] + k_a \cdot [P_i] \quad (2.37)$$

beschrieben werden, wobei  $[P_a]$  und  $[P_i]$  die Konzentration von  $P_a$  bzw.  $P_i$  bezeichnen. Da sich die totale Proteinkonzentration  $[P_{tot}] := [P_a] + [P_i]$  im System (2.36)

nicht verändert, d.h.  $[P_{tot}]$  ist eine Erhaltungsgröße, kann obige Differentialgleichung umgeformt werden zu

$$\frac{d}{dt}[P_a] = -k_i \cdot [P_a] + k_a \cdot ([P_{tot}] - [P_a]) = -(k_i + k_a) \cdot [P_a] + k_a \cdot [P_{tot}], \quad (2.38)$$

worin  $k := -(k_i + k_a) < 0$  und  $m := k_a \cdot [P_{tot}] > 0$  konstante Parameter sind.

Bevor wir zu Methoden kommen, mit denen wir, unter anderem, die inhomogene Evolutionsgleichung (2.35) lösen können, diskutieren wir zunächst das Konzept von Gleichgewichtszuständen und deren Stabilität.

### 2.1.5 Gleichgewichtszustände und Stabilität

Wie bei den Differenzgleichungen stellt sich nun auch bei der Untersuchung des durch eine Differentialgleichung beschriebenen Systems die Frage nach möglichen Gleichgewichtszuständen und deren Stabilität.

**DEFINITION 2.16** Eine konstante Lösung  $x(t) = x^*$ , für alle  $t \in I$ , einer Differentialgleichung  $\dot{x}(t) = f(x(t))$  heißt Gleichgewichtszustand (oder Fixpunkt oder stationäre Lösung) der Differentialgleichung. Für sie gilt  $f(x^*) = 0$  für alle  $t \in I$ .

Da ein Gleichgewichtszustand  $x(t) = x^*$  nach Definition konstant ist, folgt sofort  $\dot{x}(t) = 0$  und damit die in der Definition genannte Bedingung  $f(x^*) = 0$ , die zur Bestimmung der Gleichgewichtspunkte verwendet wird.

**BEISPIEL 2.17** Für die inhomogene Evolutionsgleichung  $\dot{x}(t) = k \cdot x(t) + m$ , mit  $k, m \neq 0$ , ergibt sich

$$k \cdot x^* + m \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad x^* = -\frac{m}{k}. \quad (2.39)$$

Die konstante Funktion  $x(t) = x^* = -\frac{m}{k}$  ist also der einzige Gleichgewichtszustand der inhomogenen Evolutionsgleichung.

Analog zu dem Fall von Differenzgleichungen charakterisieren wir die Gleichgewichtszustände von Differentialgleichungen wieder anhand ihrer Stabilität.

**DEFINITION 2.18** Ein Gleichgewichtszustand  $x(t) = x^*$  einer Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt}x(t) = f(x(t)) \quad (2.40)$$

heißt

- i.* stabil, wenn das System in der Nähe des Zustandes  $x^*$  bleibt, sobald es einmal nahe genug an  $x^*$  gekommen ist. Genauer, wenn für alle  $\varepsilon > 0$  ein  $\delta_\varepsilon > 0$  existiert, so dass für alle  $t_0 \in \mathbb{R}$  gilt:

$$|x(t_0) - x^*| < \delta_\varepsilon \quad \Rightarrow \quad |x(t) - x^*| < \varepsilon \quad \text{für alle } t \geq t_0. \quad (2.41)$$

- ii.* lokal asymptotisch stabil, falls  $x^*$  stabil ist und ein  $\delta > 0$  existiert, so dass für alle  $t_0 \in \mathbb{R}$  gilt:

$$|x(t_0) - x^*| < \delta \quad \Rightarrow \quad \lim_{t \rightarrow \infty} |x(t) - x^*| = 0. \quad (2.42)$$

- iii.* global asymptotisch stabil, falls  $x^*$  für alle  $\delta > 0$  lokal asymptotisch stabil ist, d.h. falls gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |x(t) - x^*| = 0.$$



*iv.* neutral stabil, falls  $x^*$  stabil, aber nicht asymptotisch stabil ist.

*v.* instabil, falls  $x^*$  nicht stabil ist.

Auch im Fall der Differentialgleichungen gibt es wieder ein Kriterium um zu prüfen, ob ein Gleichgewichtszustand lokal asymptotisch stabil ist.

**SATZ 2.19** Sei  $x(t) = x^*$  ein Gleichgewichtszustand der Differentialgleichung (2.40), es gelte also  $f(x^*) = 0$ . Weiterhin sei die Funktion  $f$  stetig differenzierbar bei  $x^*$ . Dann gilt:

(a) falls  $f'(x^*) < 0$ , dann ist  $x^*$  lokal asymptotisch stabil.

(b) falls  $f'(x^*) > 0$ , dann ist  $x^*$  instabil.

**BEISPIEL 2.20** Wir betrachten die inhomogene Evolutionsgleichung  $\frac{d}{dt}x(t) = k \cdot x(t) + m$  und ihren Gleichgewichtszustand  $x^* = -\frac{m}{k}$ , für  $k, m \neq 0$ . Da gilt

$$f(x) = k \cdot x + m \quad \Rightarrow \quad f'(x^*) = k, \quad (2.43)$$

ergibt sich die Stabilität von  $x^*$  direkt aus dem Vorzeichen der Wachstumskonstanten  $k$ : Falls  $k < 0$ , nähert sich die Lösung dem Punkt  $x^* = -\frac{m}{k}$  mit der Zeit an. Falls  $k > 0$ , entfernt sich die Lösung von diesem Punkt.

### Allgemeine Lösung der inhomogenen Evolutionsgleichung

Ähnlich wie bei der analogen Differenzgleichung (1.12), können wir die allgemeine Lösung der inhomogenen Evolutionsgleichung (2.35) über Betrachtung der Abweichung zum Gleichgewichtszustand  $x^* = -\frac{m}{k}$  herleiten. Wir betrachten also

$$z(t) := x(t) - x^* = x(t) + \frac{m}{k}. \quad (2.44)$$

Die Differentialgleichung, der diese Abweichung  $z(t)$  genügt, ergibt sich durch Ableiten zu

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}z(t) &\stackrel{\text{Gl. (2.44)}}{=} \frac{d}{dt}(x(t) - x^*) \stackrel{\text{Def. 2.16}}{=} \frac{d}{dt}x(t) \stackrel{\text{Gl. (2.35)}}{=} k \cdot x(t) + m \\ &\stackrel{\text{Gl. (2.44)}}{=} k \cdot \left(z(t) - \frac{m}{k}\right) + m = k \cdot z(t). \end{aligned} \quad (2.45)$$

Somit erfüllt  $z(t)$  die homogene Evolutionsgleichung  $\dot{z}(t) = kz(t)$ , deren Lösung  $z(t) = z_0 e^{k(t-t_0)}$  wir für gegebenen Anfangswert  $z(t_0) = z_0$  bereits im vorherigen Kapitel hergeleitet haben, siehe Satz 2.10. Die Lösung der inhomogenen Evolutionsgleichung (2.35) ergibt sich demnach zu

$$\begin{aligned} x(t) &\stackrel{\text{Gl. (2.44)}}{=} z(t) + x^* = z_0 \cdot e^{k \cdot (t-t_0)} + x^* \stackrel{\text{Gl. (2.44)}}{=} (x_0 - x^*) \cdot e^{k \cdot (t-t_0)} + x^* \\ &= \left(x_0 + \frac{m}{k}\right) \cdot e^{k \cdot (t-t_0)} - \frac{m}{k}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

wobei  $x_0$  ein Anfangswert zur Anfangszeit  $t_0$  ist. Diese Familie von Lösungen der inhomogenen Evolutionsgleichung ist im Phasenporträt in Abb. 2.2 dargestellt. Dieses ist ähnlich zum Phasenporträt der homogenen Evolutionsgleichung, siehe Abb. 2.1, aber im direkten Vergleich dazu längs der  $y$ -Achse um den Wert  $x^*$  verschoben.

Wir fassen das Ergebnis der obigen Rechnungen als Satz zusammen:

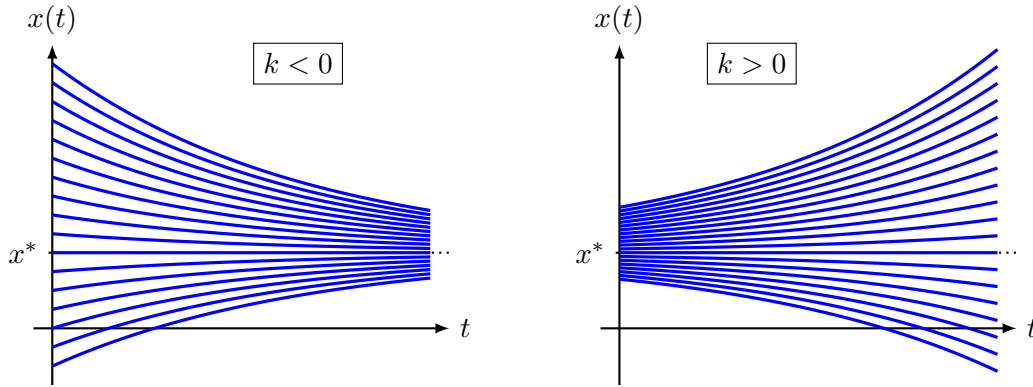


Abbildung 2.2: Phasenporträt der inhomogenen Evolutionsgleichung (2.35) für negatives (links) und positives (rechts) Wachstum aber identischem Gleichgewichtszustand  $x^* > 0$ .

SATZ 2.21 Seien  $m, k \neq 0$  konstant, dann besitzt das Anfangswertproblem

$$\frac{d}{dt}x(t) = k \cdot x(t) + m \quad \text{mit} \quad x(t_0) = x_0$$

die eindeutige Lösung

$$x(t) = \left( x_0 + \frac{m}{k} \right) \cdot e^{k \cdot (t-t_0)} - \frac{m}{k}, \quad \text{für alle } t \in \mathbb{R}.$$

BEISPIEL 2.22 Wir betrachten das Bsp. 2.15b zur Inaktivierung/Aktivierung eines Proteins. Wie wir gesehen hatten, läßt sich die Konzentrationsveränderung von aktivem Protein  $P_a$  über die Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt}[P_a](t) = -(k_i + k_a) \cdot [P_a](t) + k_a \cdot [P_{tot}] \quad (2.47)$$

beschreiben. Hierbei sind  $k_i, k_a > 0$  die Reaktionsraten-Konstanten der Protein-Inaktivierung bzw. -Aktivierung,  $[P_a]$  bezeichnet die Konzentration von aktivem Protein und  $[P_{tot}]$  ist die totale Proteinkonzentration. Anhand unserer Betrachtungen zum Gleichgewichtszustand der inhomogenen Evolutionsgleichung und dessen Stabilität folgt, dass die Gleichgewichtskonzentration von aktivem Protein gegeben ist durch

$$[P_a]^* = \frac{k_a \cdot [P_{tot}]}{k_i + k_a} > 0. \quad (2.48)$$

$[P_a]^*$  ist gemäß Satz 2.19 (lokal) asymptotisch stabil ist, da  $-(k_i + k_a) < 0$ . Sei  $[P_a]_0$  die initiale Konzentration von  $P_a$  zur Zeit  $t = 0$ , dann beträgt nach Satz 2.21 die Konzentration von  $P_a$  zur Zeit  $t$

$$[P_a](t) = \left( [P_a](0) - \frac{k_a \cdot [P_{tot}]}{k_i + k_a} \right) \cdot e^{-(k_i+k_a) \cdot t} + \frac{k_a \cdot [P_{tot}]}{k_i + k_a}, \quad (2.49)$$

welche sich im Laufe der Zeit exponentiell der Gleichgewichtskonzentration  $[P_a]^*$  annähert.

Ähnlich wie bei der Betrachtung der Halbwerts- oder Verdopplungszeit für die homogene Evolutionsgleichung wollen wir die Geschwindigkeit dieser Annäherung von  $[P_a]_t$  an die Gleichgewichtskonzentration  $[P_a]^*$  charakterisieren. Hierzu betrachten wir die Abweichung  $[\widetilde{P}_a]_t := [P_a]_t - [P_a]^*$  zu einer Zeit  $t$ , die nach (2.49) gegeben ist durch

$$[\widetilde{P}_a](t) = [\widetilde{P}_a](0) \cdot e^{-(k_i+k_a) \cdot t}.$$

Damit konvergiert  $[\widetilde{P}_a](t)$  für  $t \rightarrow \infty$  exponentiell schnell gegen null, wobei die Rate durch die Summe der beiden Reaktionsraten festgelegt ist.

Die Zeit  $\tau$ , in der sich eine anfängliche Abweichung  $[\widetilde{P}_a](0)$  halbiert, nennen wir Antwortzeit. Sie ist demnach gegeben durch

$$[\widetilde{P}_a](\tau) = [\widetilde{P}_a](0) \cdot e^{-(k_i+k_a)\cdot\tau} \stackrel{!}{=} \frac{[\widetilde{P}_a](0)}{2} \quad \Rightarrow \quad \tau = \frac{\ln(2)}{k_i + k_a}. \quad (2.50)$$

Im Gegensatz zur Gleichgewichtskonzentration  $[P_a]^*$ , siehe Gl. (2.48) ist die Antwortzeit des Systems offensichtlich unabhängig von der totalen Proteinkonzentration  $[P_{tot}]$ .

### 2.1.6 Die logistische Differentialgleichung

Wie wir am Beispiel des Wachstum einer *E. coli*-Kolonie gesehen hatten, siehe Bsp. 2.13, ist ein anhaltendes exponentielles Wachstum aufgrund von *begrenzten* Ressourcen und Platz unrealistisch. Hinzu kommen die Effekte eines erhöhten Infektionsrisikos oder Parasitenbefalls bei hohen Populationsdichten. Eine einfache Evolutionsgleichung wird Wachstumsprozesse daher nur für begrenzte, kurze Zeiten sinnvoll beschreiben.

Betrachten wir noch einmal Bsp. 2.11a, in der sich eine Population gemäß  $\frac{d}{dt}x = (b-d) \cdot x$  mit Geburtenrate  $b$  und Sterberate  $d$  entwickelt. Nach den obigen Überlegungen erscheint es sinnvoll, diese beiden Raten nicht als konstant anzusetzen, sondern in Abhängigkeit von der Individuenanzahl  $x$  zu variieren. Setzen wir also  $k := (b-d)$  als Wachstumskonstante, so ist es sinnvoll, dass  $k$  mit wachsendem  $x$  kleiner wird.

In realen Systemen beobachtet man, dass die Anzahl einer Spezies (Bakterien, Fliegen etc.) bis zu einer gewissen *Sättigungsgrenze* der Umgebung ansteigt. Diese Sättigungsgrenze bezeichnen wir als *Kapazität* des Systems. Ein Ansatz für eine Differentialgleichung, die die Kapazität eines Systems berücksichtigt, geht auf das Jahr 1838 und den flämisch Differentialgleichung, deren analoge Differenzengleichung wir in Abschnitt 1.4 bereits ausführliche untersucht haben, hat die Form

$$\frac{d}{dt}x(t) = \underbrace{\tilde{k} \cdot \left(1 - \frac{x(t)}{K}\right)}_{=k(x)} \cdot x(t), \quad (2.51)$$

wobei  $K > 0$  die Kapazität des Systems angibt und  $k(x) = \tilde{k} \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right)$ , mit  $\tilde{k} > 0$ , als eine von  $x$  abhängige Wachstumsrate verstanden werden kann. Für sehr kleine Werte von  $x$  ist  $k(x) \approx \tilde{k}$ . Nähert sich  $x$  der Kapazität  $K$ , so geht  $k(x)$  gegen Null. Das Wachstum der Population wird mit einer steigenden Anzahl  $x$  also immer langsamer bzw. für  $x = K$  vollständig unterbunden.

Eine etwas allgemeinere Form der logistischen Differentialgleichung ist

$$\frac{d}{dt}x(t) = \tilde{k} \cdot x(t) - d \cdot x(t)^2. \quad (2.52)$$

Hier können wir  $\tilde{k}$  als konstante Geburtenrate und den Term  $(d \cdot x)$  als eine zur Individuenanzahl  $x$  proportional wachsende Sterberate verstehen. Mit der Wahl  $d := \frac{\tilde{k}}{K}$  ist obige Differentialgleichung mathematisch identisch zur Differentialgleichung (2.51). Der Faktor  $d = \frac{\tilde{k}}{K}$  wird in diesem Zusammenhang gelegentlich auch als *Depressionsfaktor* bezeichnet.

BEISPIEL 2.23 *Auf Basis der seit 1790 erhobenen USA-Volkszählung hatte Verhulst die Werte  $\tilde{k} = 0,03134$  und  $d = 1,5887 \times 10^{-10}$  pro Jahr ermittelt. Als Bezugsjahr ( $t = 0$ ) wählte er dabei 1790, mit einer Bevölkerungszahl von  $x_0 = 3,9$  Millionen. Über die logistische Differentialgleichung (2.51) ergab sich so z.B. für 1950 eine prognostizierte Bevölkerungszahl*

von ca. 148,4 Millionen, die tatsächliche Anzahl betrug 150,7 Millionen. Die logistische Beschreibung lieferte also über ca. 100 Jahre eine sehr genaue Prognose. Jedoch ergibt sich als Grenzbevölkerungszahl (= Kapazität)  $K = \frac{\tilde{k}}{d} \approx 197,3$  Millionen, die in Wirklichkeit seit 1970 und mit derzeit ca. 314,4 Millionen bereits weit überschritten ist.

Die Gleichgewichtszustände der logistischen Differentialgleichung (2.51) ergeben sich durch

$$\tilde{k} \cdot \left(1 - \frac{x^*}{K}\right) \cdot x^* \stackrel{!}{=} 0 \quad \text{zu} \quad x_1^* = 0 \quad \text{und} \quad x_2^* = K. \quad (2.53)$$

Deren Stabilität läßt sich, gemäß Satz 2.19, mit Hilfe von

$$f(x) = \tilde{k} \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right) \cdot x = \tilde{k} \cdot x - \frac{\tilde{k}}{K} \cdot x^2 \quad \Rightarrow \quad f'(x) = \tilde{k} - 2 \cdot \frac{\tilde{k}}{K} \cdot x \quad (2.54)$$

bestimmen. Da demnach  $f'(0) = \tilde{k}$  gilt, ist der Gleichgewichtszustand  $x_1^* = 0$  instabil, falls  $\tilde{k} > 0$ . In diesem Fall ist der Gleichgewichtszustand  $x_2^* = K$  asymptotisch stabil, da  $f'(K) = -\tilde{k}$ . (Falls  $\tilde{k} < 0$ , so ist die Situation genau andersherum.) Somit wird sich eine Lösung der logistischen Differentialgleichung für  $\tilde{k}, x_0 > 0$  im Laufe der Zeit der Kapazität  $K$  annähern.

Ähnlich wie bei der inhomogenen Evolutionsgleichung, können wir für  $\tilde{k}, x_0 > 0$  eine Lösung der logistischen Differentialgleichung über Betrachtung der Abweichung zum (asymptotisch stabilen) Gleichgewichtszustand herleiten. Weitere Methoden zur Bestimmung der analytischen Lösung einer Differentialgleichung lernen wir im nächsten Kapitel kennen. Zunächst betrachten wir jedoch die *relative Abweichung*  $y(t)$  zum Gleichgewichtszustand  $x_2^* = K$ , definiert als

$$y(t) := \frac{x(t) - K}{x(t)} = 1 - \frac{K}{x(t)}. \quad (2.55)$$

Differenziation von  $y(t)$  nach der Zeit  $t$  führt auf die Differentialgleichung (für  $y$ )

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} y(t) &\stackrel{\text{Gl. (2.55)}}{=} \frac{d}{dt} \left(1 - \frac{K}{x(t)}\right) \stackrel{\text{Kettenregel}}{=} \frac{K}{x(t)^2} \cdot \frac{d}{dt} x(t) \stackrel{\text{Gl. (2.51)}}{=} \frac{K}{x(t)^2} \cdot \tilde{k} \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right) \cdot x \\ &= \tilde{k} \cdot \left(\frac{K}{x} - 1\right) \stackrel{\text{Gl. (2.55)}}{=} -\tilde{k} \cdot y(t), \end{aligned}$$

deren Lösung  $y(t) = y_0 \cdot e^{-\tilde{k}(t-t_0)}$  zu gegebenem Anfangswert  $y(t_0) = y_0$  uns bereits vertraut ist, siehe Satz 2.10. Daraus ergibt sich als Lösung  $x(t)$  von (2.51)

$$x(t) \stackrel{\text{Gl. (2.55)}}{=} \frac{K}{1 - y(t)} = \frac{K}{1 - \bar{x}_0 \cdot e^{-\tilde{k}t}} \stackrel{\text{Gl. (2.55)}}{=} \frac{K}{1 - \left(1 - \frac{K}{x_0}\right) \cdot e^{-\tilde{k}t}}. \quad (2.56)$$

Die Lösung (2.56) der logistischen Differentialgleichung (2.51) wird auch *logistische Wachstumsfunktion* genannt und ist in Abb. 2.3 für unterschiedliche Anfangswerte  $x_0 > 0$ , aber identisches  $\tilde{k} > 0$  dargestellt. Die Lösungskurven haben einen sogenannten *sigmoidalen* (S-förmigen) Verlauf. Für kleine Anfangswerte  $x_0$  beobachten wir ein rapides (nahezu exponentielles) Wachstum. Da mit steigenden Werten von  $x$  die Wachstumsrate  $k(x) = \tilde{k} \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right)$  abnimmt, verringert sich der Zuwachs in  $x(t)$  mit der Zeit  $t$ , bis sich für Werte nahe  $K$  schließlich eine Sättigung einstellt. Für  $\tilde{k}, x_0 > 0$  konvergieren die Lösungen auf diese Weise gegen  $K$ , wie wir es auch in der vorhergehenden Stabilitätsuntersuchung feststellen konnten.

**BEMERKUNG 2.24** *Im Gegensatz zur logistischen Differenzengleichung ist bei der logistischen Differentialgleichung offensichtlich kein zyklisches oder gar chaotisches Verhalten möglich. Dies hängt damit zusammen, dass eine Lösung einer Differentialgleichung von vornherein stetig differenzierbar sein muss.*

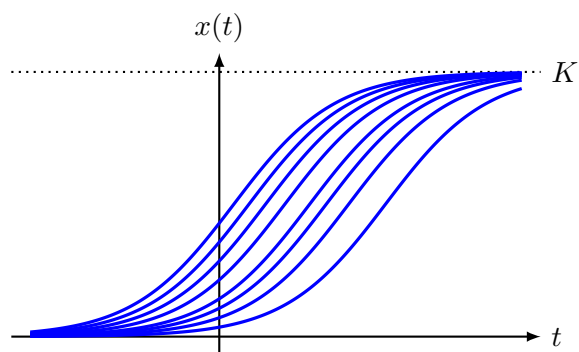


Abbildung 2.3: Phasenporträt der logistischen Differentialgleichung (2.51) für ein  $\tilde{k} > 0$  und unterschiedliche  $x_0 > 0$ .

## 2.2 Lösungsverfahren

Zwar lassen sich Differentialgleichungen im Allgemeinen sehr viel leichter handhaben als Differenzgleichungen, weil hier Methoden der Integration und Differenziation zur Verfügung stehen und die Lösungen meist auch regulärer sind (siehe Bemerkung 2.24 zum Vergleich der logistischen Differenzgleichung und der logistischen Differentialgleichung), dennoch gibt es kein allgemeines Verfahren, sondern je nach Art der Differentialgleichung verschiedene Methoden. Etliche Differentialgleichungen sind darüber hinaus auch nicht geschlossen lösbar.

Da im Zweifelsfall immer die Recherche in entsprechender Fachliteratur notwendig sein wird, sollen an dieser Stelle lediglich wichtige Verfahren zur Lösung spezieller Typen von Differentialgleichungen kurz vorgestellt werden.

### 2.2.1 Trennung der Veränderlichen

Mit der Methode der *Trennung der Veränderlichen* lassen sich *separierbare* Differentialgleichungen erster Ordnung lösen, d.h. das zugehörige Anfangswertproblem läßt sich in die Form

$$\frac{d}{dt}x(t) = f(x(t)) \cdot g(t) \quad \text{mit} \quad x(t_0) = x_0 \quad (2.57)$$

bringen. Hierbei sind  $f : J \rightarrow \mathbb{R}$  and  $g : I \rightarrow \mathbb{R}$  zwei stetige Funktionen, die ihren jeweiligen Definitionsbereich  $I, J \subseteq \mathbb{R}$  auf  $\mathbb{R}$  abbilden.

**SATZ 2.25** *Falls  $f(x_0) \neq 0$ , dann existiert ein offenes Intervall  $I_0 \subseteq I$  mit  $t_0 \in I_0$ , so dass jede Lösung des Anfangswertproblems (2.57) die Gleichung*

$$\int_{x_0}^{x(t)} \frac{1}{f(y)} dy = \int_{t_0}^t g(s) ds \quad (2.58)$$

*für alle  $t \in I_0$  erfüllt. Insbesondere gibt es auf  $I_0$  nur eine einzige Lösung, die sich durch Integration beider Seiten von Gleichung (2.58) ergibt.*

**BEMERKUNG 2.26** *Auch wenn Gleichung (2.58) unter Umständen nicht explizit integriert werden kann, ist eine eindeutige Lösung des Anfangswertproblems (2.57) durch diese Gleichung festgelegt.*

**BEISPIEL 2.27** *Wir betrachten zwei Beispiele aus dem vorherigen Kapitel zur Anwendung der Trennung der Veränderlichen:*

- (a) *Offenbar liegt die homogene Evolutionsgleichung  $\dot{x}(t) = k \cdot x(t)$  mit  $x(t_0) = x_0$  bereits in der Form (2.57) vor (wähle  $f(x(t)) = x(t)$  und  $g(t) = k$ ). Somit ergibt sich für den Fall  $f(x_0) = x_0 \neq 0$  gemäß Satz 2.25 die zugehörige Lösung als*

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x(t)} \frac{1}{y} dy = \int_{t_0}^t k ds &\Rightarrow \ln(|x(t)|) - \ln(|x_0|) = k \cdot (t - t_0) \\ &\Rightarrow x(t) = x_0 \cdot e^{k \cdot (t - t_0)}, \quad (2.59) \end{aligned}$$

*für alle  $t \in \mathbb{R}$ . Dies ist in Übereinstimmung mit unseren vorherigen Ergebnissen, siehe Satz 2.10. Falls  $x_0 = 0$ , so ist das System im Gleichgewicht und es würde gelten  $x(t) = 0$ , für alle  $t \in \mathbb{R}$ .*

- (b) Mittels Trennung der Veränderlichen lässt sich leicht die verallgemeinerte homogene Evolutionsgleichung mit zeitabhängigem Koeffizienten

$$\dot{x}(t) = a(t)x(t), \quad x(t_0) = x_0 \neq 0 \quad (2.60)$$

lösen, wobei wir annehmen, dass  $a : I \rightarrow \mathbb{R}$  stetig auf einem Intervall  $I \subset \mathbb{R}$  mit  $t_0 \in I$  ist. Analog zu (2.59) ergibt sich aus (2.58)

$$\int_{x_0}^{x(t)} \frac{1}{y} dy = \int_{t_0}^t a(s) ds \quad \Rightarrow \quad \ln(|x(t)|) - \ln(|x_0|) = \int_{t_0}^t a(s) ds$$

und damit als Lösung von (2.60)

$$x(t) = x_0 \cdot e^{\int_{t_0}^t a(s) ds} \quad (2.61)$$

für alle  $t \in I \subset \mathbb{R}$ .

- (c) Wir betrachten die logistische Differentialgleichung

$$\dot{x} = \tilde{k} \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right) \cdot x \quad \text{mit} \quad x(0) = x_0. \quad (2.62)$$

Durch Wahl von  $f(x) = x \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right)$  und  $g(t) = \tilde{k}$  erfüllt diese offensichtlich die Form (2.57). Für  $x_0 = 0$  oder  $x_0 = K$  gilt  $f(x_0) = 0$  und das System befindet sich im Gleichgewicht, so dass  $x(t) = x_0$  für alle  $t \in \mathbb{R}$ . Wir betrachten den Fall  $x_0 \neq 0$  oder  $K$ , in dem  $f(x_0) \neq 0$  gilt und, gemäß Satz 2.25, die zugehörige Lösung des Anfangswertproblems (2.62) durch die Gleichung

$$\int_{x_0}^{x(t)} \frac{1}{y \cdot \left(1 - \frac{y}{K}\right)} dy = \int_{t_0}^t \tilde{k} ds \quad \Rightarrow \quad \int_{x_0}^{x(t)} \frac{1}{y \cdot \left(1 - \frac{y}{K}\right)} dy = \tilde{k} \cdot (t - t_0) \quad (2.63)$$

bestimmt ist.

Um das Integral auf der linken Seite dieser Gleichung zu berechnen, führen wir eine Partialbruchzerlegung durch, d.h. wir zerlegen die zu integrierende rationale Funktion gemäß

$$\frac{1}{y \cdot \left(1 - \frac{y}{K}\right)} = \frac{C_1}{y} + \frac{C_2}{\left(1 - \frac{y}{K}\right)}, \quad (2.64)$$

wobei  $C_1$  und  $C_2$  unbekannte, noch zu ermittelnde Konstanten sind. Multiplikation dieser Gleichung mit  $y \cdot \left(1 - \frac{y}{K}\right)$  ergibt zunächst

$$1 = C_1 \cdot \left(1 - \frac{y}{K}\right) + C_2 \cdot y = C_1 + y \cdot \left(C_2 - \frac{C_1}{K}\right),$$

und über Koeffizientenvergleich folgt weiter, dass  $C_1 = 1$  und

$$C_2 - \frac{C_1}{K} \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad C_2 = \frac{C_1}{K} = \frac{1}{K}$$

gelten muss. Somit haben wir

$$\frac{1}{y \cdot \left(1 - \frac{y}{K}\right)} = \frac{1}{y} + \frac{1}{K} \cdot \frac{1}{\left(1 - \frac{y}{K}\right)} = \frac{1}{y} + \frac{1}{K - y}. \quad (2.65)$$

Für die Lösung der logistischen Differentialgleichung ergibt sich aus Gleichung (2.63) auf diese Weise

$$\begin{aligned}
 \tilde{k} \cdot (t - t_0) &= \int_{x_0}^{x(t)} \frac{1}{y \cdot \left(1 - \frac{y}{K}\right)} dy \stackrel{\text{Gl. (2.65)}}{=} \int_{x_0}^{x(t)} \frac{1}{y} dy + \int_{x_0}^{x(t)} \frac{1}{K - y} dy \\
 \Leftrightarrow \tilde{k} \cdot (t - t_0) &= \int_{x_0}^{x(t)} \frac{1}{y} dy - \int_{x_0}^{x(t)} \frac{1}{y - K} dy = \int_{x_0}^{x(t)} \frac{1}{y} dy - \int_{x_0 - K}^{x(t) - K} \frac{1}{y} dy \\
 \Rightarrow \tilde{k} \cdot (t - t_0) &= \ln(|x(t)|) - \ln(|x_0|) - \ln(|x(t) - K|) + \ln(|x_0 - K|) \\
 &\Leftrightarrow \ln(|x(t) - K|) = \ln(|x(t)|) + \ln\left(\frac{|x_0 - K|}{|x_0|}\right) - \tilde{k} \cdot (t - t_0) \\
 &\Rightarrow x(t) - K = x(t) \cdot \frac{x_0 - K}{x_0} \cdot e^{-\tilde{k} \cdot (t - t_0)} \\
 &\Leftrightarrow x(t) \left(1 - \frac{x_0 - K}{x_0} \cdot e^{-\tilde{k} \cdot (t - t_0)}\right) = K \\
 &\Leftrightarrow x(t) = \frac{K}{1 - \left(1 - \frac{K}{x_0}\right) \cdot e^{-\tilde{k} \cdot (t - t_0)}},
 \end{aligned}$$

für alle  $t \in \mathbb{R}$ . Dieses Ergebnis entspricht gerade der Lösung (2.56), die wir in Abschnitt 2.1.6 bereits auf anderem Weg hergeleitet hatten.

### 2.2.2 Variation der Konstanten

Das Verfahren der *Variation der Konstanten* wurde von L. Euler eingeführt und später durch J.L. Lagrange weiterentwickelt. Hierbei handelt es sich um eine Methode zur Bestimmung der allgemeinen Lösung einer inhomogenen linearen Differentialgleichung erster Ordnung, d.h. einer Differentialgleichung der Form

$$\frac{d}{dt}x(t) = a(t) \cdot x(t) + b(t), \quad (2.66)$$

mit zeitabhängigen Koeffizienten  $a(t) : I \rightarrow \mathbb{R}$  und  $b(t) : I \rightarrow \mathbb{R}$ , die auf dem Intervall  $I \subseteq \mathbb{R}$  stetig sind. Die grundlegende Idee ist, zunächst die zugehörige homogene Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt}x_h(t) = a(t) \cdot x_h(t) \quad (2.67)$$

zu betrachten, deren allgemeine Lösungen gegeben ist durch (vgl. (2.61))

$$x_h(t) = C \cdot e^{\int_{t_0}^t a(s) ds}. \quad (2.68)$$

Nun wird die Konstante  $C$  durch eine von  $t$  abhängige Funktion  $C(t)$  ersetzt (wir lassen also  $C$  mit der Zeit *variieren*, d.h. wir wählen als *Lösungsansatz* für die inhomogene Differentialgleichung (2.66)

$$x(t) = C(t) \cdot e^{\int_{t_0}^t a(s) ds} \quad (2.69)$$

und bestimmen die Funktion  $C : I \rightarrow \mathbb{R}$  so, dass  $x(t)$  die Differentialgleichung löst.

Zunächst folgt für  $t = t_0$  aus Gleichung (2.69) unmittelbar

$$x(t_0) = C(t_0) \cdot e^{\int_{t_0}^{t_0} a(s) ds} = C(t_0). \quad (2.70)$$



Differenziation des Ansatzes (2.69) nach der Zeit  $t$  ergibt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}x(t) &= e^{\int_{t_0}^t a(s) ds} \cdot \frac{d}{dt}C(t) + C(t) \cdot a(t) \cdot e^{\int_{t_0}^t a(s) ds} \\ &= e^{\int_{t_0}^t a(s) ds} \cdot \frac{d}{dt}C(t) + a(t) \cdot x(t). \end{aligned} \quad (2.71)$$

Einsetzen von (2.71) in die inhomogene Differentialgleichung (2.66) liefert

$$e^{\int_{t_0}^t a(s) ds} \cdot \frac{d}{dt}C(t) + a(t) \cdot x(t) = a(t) \cdot x(t) + b(t)$$

und damit ergibt sich für  $C(t)$

$$\begin{aligned} e^{\int_{t_0}^t a(s) ds} \cdot \frac{d}{dt}C(t) = b(t) &\Leftrightarrow \frac{d}{dt}C(t) = b(t) \cdot e^{-\int_{t_0}^t a(s) ds} \\ &\Rightarrow C(t) - C(t_0) = \int_{t_0}^t b(\tau) \cdot e^{-\int_{t_0}^{\tau} a(s) ds} d\tau \\ &\Leftrightarrow C(t) = x(t_0) + \int_{t_0}^t b(\tau) \cdot e^{-\int_{t_0}^{\tau} a(s) ds} d\tau. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Durch Einsetzen von (2.72) in den Ansatz (2.69) ergibt sich als Lösung der inhomogenen Differentialgleichung (2.66) zum Anfangswert  $x(t_0) = x_0$

$$x(t) = e^{\int_{t_0}^t a(s) ds} \cdot \left\{ x_0 + \int_{t_0}^t b(\tau) \cdot e^{-\int_{t_0}^{\tau} a(s) ds} d\tau \right\}. \quad (2.73)$$

Wir fassen dieses Ergebnis wieder als Satz zusammen:

**SATZ 2.28** *Das Anfangswertproblem  $\frac{d}{dt}x(t) = a(t) \cdot x(t) + b(t)$  mit  $x(t_0) = x_0$  und auf dem Intervall  $I \subset \mathbb{R}$  mit  $t_0 \in I$  stetigen Funktionen  $a : I \rightarrow \mathbb{R}$  und  $b : I \rightarrow \mathbb{R}$ , besitzt die eindeutige Lösung*

$$x(t) = e^{\int_{t_0}^t a(s) ds} \cdot \left\{ x_0 + \int_{t_0}^t b(\tau) \cdot e^{-\int_{t_0}^{\tau} a(s) ds} d\tau \right\}, \quad (2.74)$$

für alle  $t \in I$ .

**BEMERKUNG 2.29** (a) *Anstatt sich die Formel (2.74) einzuprägen, ist es sinnvoller sich das zugrundeliegende Verfahren zu merken.*

(b) *Die allgemeine Lösung  $x(t)$  in Gleichung (2.66) (also noch ohne Festlegung eines Anfangswertes) ist von der Form*

$$x(t) = x_h(t) + x_p(t), \quad (2.75)$$

wobei in  $x_h(t)$  die allgemeine Lösung (2.68) der homogenen Differentialgleichung (2.67) und

$$x_p(t) := e^{\int_{t_0}^t a(s) ds} \cdot \left\{ \int_{t_0}^t b(\tau) \cdot e^{-\int_{t_0}^{\tau} a(s) ds} d\tau \right\}$$

eine spezielle, partikuläre Lösung der inhomogenen Differentialgleichung (2.66) zum Anfangswert  $x_p(t_0) = 0$  ist. Für die inhomogene Evolutionsgleichung (2.35) mit Lösung (2.46) zum Anfangswert  $x(t_0) = x_0$  wäre die allgemeine Lösung  $x = x_h + x_p$  mit

$$x_h(t) = C \cdot e^{k \cdot (t-t_0)} \quad \text{und} \quad x_p(t) = \frac{m}{k} \cdot \left( e^{k \cdot (t-t_0)} - 1 \right).$$

- (c) Sind  $x_1(t)$  und  $x_2(t)$  zwei Lösungen der inhomogenen Differentialgleichung (2.66) zu den Anfangswerten  $x_1(t_0) = x_0$  und  $x_2(t_0) = 0$ , dann gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(x_1 - x_2)(t) &= \frac{d}{dt}x_1(t) - \frac{d}{dt}x_2(t) \\ &= a(t) \cdot x_1(t) + b(t) - a(t) \cdot x_2(t) - b(t) \\ &= a(t)(x_1 - x_2)(t). \end{aligned}$$

Also löst  $x_H(t) = (x_1 - x_2)(t)$  die homogene Differentialgleichung (2.67) zum Anfangswert  $x_H(t_0) = x_0$  und  $x_1(t) = x_H(t) + x_2(t)$ . Damit sehen wir, dass jede Lösung von (2.66) von der Form (2.75) ist.

BEISPIEL 2.30 Wir betrachten zwei Beispiele zur Anwendung der Variation der Konstanten:

- (a) Die inhomogene Evolutionsgleichung  $\dot{x}(t) = k \cdot x(t) + m$  für  $x(0) = x_0$ .

1. *Homogene Lösung:* Die homogene Evolutionsgleichung  $\dot{x}_h(t) = k \cdot x_h(t)$  besitzt die allgemeine Lösung  $x_h(t) = C \cdot e^{k \cdot t}$ .
2. *Variation der Konstanten:* Der Lösungsansatz  $x(t) = C(t) \cdot e^{k \cdot t}$  liefert  $C(0) = x_0$  und

$$\dot{x}(t) = e^{k \cdot t} \cdot \dot{C}(t) + k \cdot C(t) \cdot e^{k \cdot t} = e^{k \cdot t} \cdot \dot{C}(t) + k \cdot x(t). \quad (2.76)$$

Einsetzen dieser Gleichung in die inhomogene Evolutionsgleichung ergibt

$$\dot{C}(t) = m \cdot e^{-k \cdot t} \quad \Rightarrow \quad C(t) = C(0) + m \cdot \int_0^t e^{-k \cdot s} ds = x_0 + \frac{m}{k} \cdot (1 - e^{-k \cdot t}). \quad (2.77)$$

3. Einsetzen von (2.77) in den Lösungsansatz (2.76) liefert schließlich

$$x(t) = \left\{ x_0 + \frac{m}{k} \cdot (1 - e^{-k \cdot t}) \right\} \cdot e^{k \cdot t} = \left( x_0 + \frac{m}{k} \right) \cdot e^{k \cdot t} - \frac{m}{k},$$

in Übereinstimmung mit unserem Ergebnis aus Abschnitt 2.1.5.

- (b) Die inhomogene Differentialgleichung

$$\dot{x}(t) = \sin(t) \cdot x(t) + \sin(t) \quad \text{mit Anfangswert} \quad x(\pi) = 3. \quad (2.78)$$

1. *Homogene Lösung:* Die allgemeine Lösung der homogenen Differentialgleichung

$$\dot{x}_h(t) = \sin(t) \cdot x_h(t)$$

bestimmen wir mittels Trennung der Veränderlichen. Da kein Anfangswert festgelegt werden soll, lassen wir hierbei die unteren Grenzen der Integrale unbestimmt, wir ermitteln sozusagen nur die Stammfunktionen. Aus (2.58) ergibt sich

$$\begin{aligned} \int^{x_h(t)} \frac{1}{y} dy &= \int^t \sin(s) ds \quad \Rightarrow \quad \ln(|x(t)|) = -\cos(t) + \tilde{C} \\ &\Rightarrow \quad x(t) = C \cdot e^{-\cos(t)}. \end{aligned} \quad (2.79)$$

2. Variation der Konstanten: Aus (2.79) ergibt sich der Lösungsansatz

$$x(t) = C(t) \cdot e^{-\cos(t)} \quad \text{mit} \quad C(\pi) = x(\pi) \cdot e^{\cos(\pi)} = 3e^{-1} \quad (2.80)$$

und

$$\dot{x}(t) = e^{-\cos(t)} \cdot \dot{C}(t) + \sin(t) \cdot x(t). \quad (2.81)$$

Einsetzen von (2.81) in (2.78) ergibt

$$\begin{aligned} \dot{C}(t) = \sin(t) \cdot e^{\cos(t)} &\Rightarrow C(t) = C(\pi) + \int_{\pi}^t \sin(s) \cdot e^{\cos(s)} ds \\ &\stackrel{\tau := \cos(s)}{\Rightarrow} C(t) = 3e^{-1} - \int_{-1}^{\cos(t)} e^{\tau} d\tau \\ &\Rightarrow C(t) = 3e^{-1} - e^{\cos(t)} + e^{-1} = 4e^{-1} - e^{\cos(t)}. \end{aligned} \quad (2.82)$$

3. Einsetzen von (2.82) in den Lösungsansatz (2.80) liefert schließlich

$$x(t) = (4e^{-1} - e^{\cos(t)}) \cdot e^{-\cos(t)} = 4 \cdot e^{-\cos(t)-1} - 1 \quad (2.83)$$

als spezielle Lösung des Anfangswertproblems (2.78). Wir überprüfen dies kurz:

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= 4 \sin(t) e^{-\cos(t)-1} \quad \text{und} \\ \sin(t) \cdot x(t) + \sin(t) &= \sin(t) \cdot (4 \cdot e^{-\cos(t)-1} - 1) + \sin(t) = 4 \sin(t) e^{-\cos(t)-1} \\ &= \sin(t) \cdot x(t) + \sin(t) \quad \checkmark \\ x(\pi) &= 4 \cdot e^{-\cos(\pi)-1} - 1 = 4 \cdot e^{1-1} - 1 = 3. \quad \checkmark \end{aligned}$$

*Bemerkung:* Wir hätten auch länger mit einer allgemeinen Konstanten  $C(\pi)$  rechnen und diese erst zum Schluss an  $x(\pi)$  anpassen können.

### 2.2.3 Substitutions-Verfahren

Manchmal gelingt es durch Substitution  $y \mapsto z = f(y)$ , von der gegebenen Differentialgleichung in  $y$  auf eine Differentialgleichung für  $z$  zu kommen, deren Lösung schon bekannt ist. Mit Kettenregel ergibt sich hierbei  $\dot{z}(t) = \frac{d}{dy} f(y(t)) \cdot \dot{y}(t)$ . Rücksubstitution liefert dann die gesuchte Lösung  $y(t)$  der ursprünglichen Differentialgleichung.

Für dieses Verfahren haben wir schon zwei Beispiele kennengelernt:

- Die inhomogene Evolutionsgleichung konnten wir mittels der Substitution  $y \mapsto z = y - y^*$  auf die homogene Evolutionsgleichung zurückführen (siehe Abschnitt 2.1.5).
- Die Logistische Differentialgleichung ließ sich durch die Substitution  $y \mapsto z = 1 - \frac{K}{y}$  ebenfalls auf die homogene Evolutionsgleichung zurückführen (siehe Abschnitt 2.1.6).

Ein etwas allgemeineres Beispiel ist die Bernoulli-Differentialgleichung.

**Bernoulli-Differentialgleichung**

Für stetige Funktionen  $g, h : I \rightarrow \mathbb{R}$  und einen Parameter  $\alpha \in \mathbb{R}$  betrachten wir die Differentialgleichung

$$\dot{y}(t) = g(t) \cdot y(t) + h(t) \cdot y^\alpha(t) . \quad (2.84)$$

Eine Differentialgleichung dieser Form wird Bernoulli-Differentialgleichung genannt.

Zur Lösung substituieren wir

$$y \mapsto z = y^{1-\alpha} . \quad (2.85)$$

Dann ergibt sich mit Kettenregel und (2.84)

$$\begin{aligned} \dot{z}(t) &= (1-\alpha)y^{-\alpha}(t) \cdot \dot{y}(t) \stackrel{\text{Gl. (2.84)}}{=} (1-\alpha)y^{-\alpha}(t) \left( g(t) \cdot y(t) + h(t) \cdot y^\alpha(t) \right) \\ &= (1-\alpha)g(t) \cdot y^{1-\alpha}(t) + (1-\alpha)h(t) \end{aligned}$$

und damit als Differentialgleichung für  $z$  mit (2.85)

$$\dot{z}(t) = (1-\alpha)g(t) \cdot z(t) + (1-\alpha)h(t) , \quad (2.86)$$

also eine Differentialgleichung der Form (2.66) (eine inhomogene lineare Differentialgleichung mit zeitabhängigen Koeffizienten). Wie in Abschnitt 2.2.2 ausführlich behandelt lässt sich (2.86) mittels Variation der Konstanten lösen. Sofern möglich liefert die Rück-Substitution  $y = z^{\alpha-1}$  dann eine Lösung  $y(t)$  der Gleichung (2.84).

**BEISPIEL 2.31** *Ein Beispiel für eine Bernoulli-Differentialgleichung mit  $\alpha = 2$  ist die verallgemeinerte Logistische Differentialgleichung*

$$\dot{x}(t) = g(t) \cdot x(t) - h(t) \cdot x(t)^2 .$$

## 2.3 Qualitative Methoden und Näherungsverfahren

Auch wenn die vorangegangenen Abschnitte vielleicht den Eindruck erweckten, dass sich Differentialgleichungen über einen geeigneten Ansatz immer lösen lassen, ist das im Allgemeinen nicht der Fall, sondern lediglich für einige spezielle Typen von Differentialgleichungen möglich. Deshalb betrachten wir im Folgenden Techniken, die auf beliebige Differentialgleichungen anwendbar sind und qualitative Einsichten bzw. numerische Näherungslösungen ermöglichen.

### 2.3.1 Richtungsfelder

Eine wichtige Methode, die sich insbesondere für die graphische Lösung von Differentialgleichungen eignet, ist die Technik der *Richtungsfelder*. Sei eine Differentialgleichung der Form  $\dot{x}(t) = f(t, x(t))$  gegeben. Dann kennen wir zwar nicht zwangsläufig die Funktion  $x(t)$ , die diese Differentialgleichung löst, aber wir kennen die Steigung  $\dot{x}(t)$  von  $x(t)$  an jedem Punkt  $(t, x)$ . Sie ist gerade durch  $f(t, x)$  gegeben. Werden diese Steigungen als Vektoren an verschiedenen Punkten in einem  $(t, x)$ -Koordinatensystem aufgetragen, so lässt sich die Lösung  $x(t)$  durch verfolgen der Vektoren sozusagen ablesen.

**DEFINITION 2.32** Gegeben sei die Differentialgleichung  $\dot{x}(t) = f(t, x(t))$  mit einer Funktion  $f : I \times J \rightarrow \mathbb{R}$  für  $I, J \subseteq \mathbb{R}$ . Dann definieren wir zu jedem Punkt  $(t, x) \in I \times J$  einen Richtungsvektor  $\vec{v}(t, x)$ , gemäß  $\vec{v}(t, x) = (1, f(t, x))$ . Die Gesamtheit aller Richtungsvektoren bezeichnen wir als *Richtungsfeld der Differentialgleichung*.

Da für das weitere Vorgehen lediglich die Ausrichtung von  $\vec{v}(t, x)$  und nicht dessen Länge relevant ist, wird ein Richtungsfeld vereinfachend oft durch Vektoren gleicher Länge dargestellt. Praktisch können wir ein Richtungsfeld wie folgt darstellen: Zu beliebig ausgewählten Punkten  $(t_1, x_1), \dots, (t_n, x_n)$  in einem  $(t, x)$ -Koordinatensystem ermitteln wir die Steigung der zugehörigen Richtungsvektoren  $\vec{v}(t_j, x_j)$ ,  $j = 1, \dots, n$ , durch Einsetzen der Koordinaten  $(t_j, x_j)$  in die Differentialgleichung. Von den Punkten  $(t_1, x_1), \dots, (t_n, x_n)$  ausgehend, zeichnen wir dann Vektoren gleicher Länge mit den jeweils ermittelten Steigungen  $f(t_j, x_j)$  auf. Typischerweise werden für die Darstellung eines Richtungsfeldes Punkte aus einem gleichmäßigen, rechteckigen Gitter gewählt. In Abb. 2.4 sind die auf diese Weise erzeugten Richtungsfelder von drei unterschiedlichen Differentialgleichungen gezeigt.

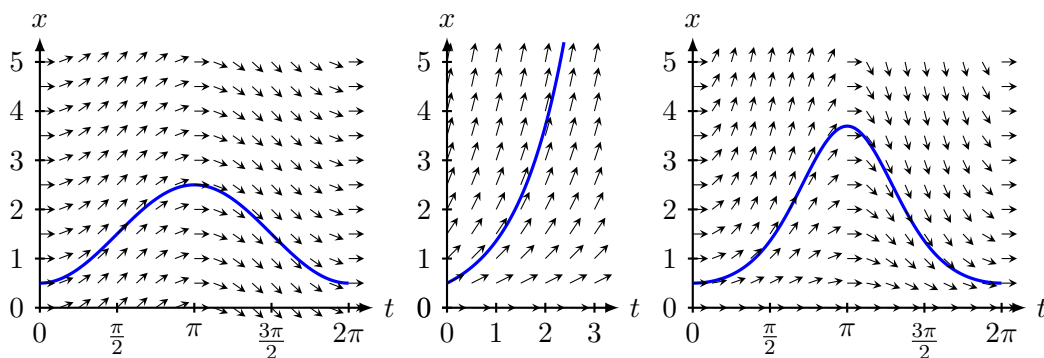


Abbildung 2.4: Richtungsfelder der Differentialgleichungen  $\frac{d}{dt}x(t) = \sin(t)$ ,  $\frac{d}{dt}x(t) = x(t)$  und  $\frac{d}{dt}x(t) = \sin(t) \cdot x(t)$  (von links nach rechts) und zugehörige Lösungen für  $x(0) = 0.5$ .

Die Lösungen der Differentialgleichungen sind Kurven im Richtungsfeld, deren *Tangentenrichtungen* gerade den Richtungsvektoren entsprechen. Anschaulich gesprochen, können wir die Richtungsvektoren als Strömungslinien in einem Medium (z.B. Wasser) auffassen.

Eine Lösung ergibt sich dann durch „Treibenlassen“ in diesem Strömungs- bzw. Richtungsfeld, siehe Abb. 2.4.

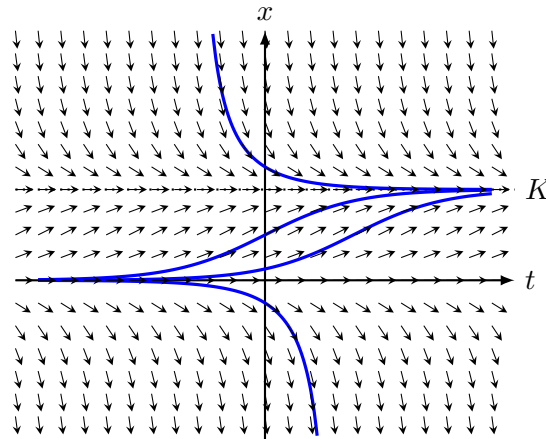


Abbildung 2.5: Richtungsfeld der logistischen Differentialgleichung (2.51) für  $k > 0$  und zugehörige Lösungen für unterschiedliche Anfangswerte  $x(0) = x_0$ .

Auch wenn wir durch Betrachtung eines Richtungsfeldes keine Formel für die Lösung einer Differentialgleichung erhalten, so lässt sich trotzdem viel über deren qualitatives Verhalten ablesen. In Abb. 2.5 ist das Richtungsfeld der logistischen Differentialgleichung (2.51) und vier verschiedene Lösungen zu unterschiedlichen Anfangswerten  $x(0) = x_0$  dargestellt. Die beiden Kurven zu den Anfangswerten  $0 < x_0 < K$  zeigen die uns bereits bekannte sigmoidale Annäherung an den Gleichgewichtszustand  $K$ . Lösungen zu Anfangswerten  $x_0 < 0$  bzw.  $x_0 > K$ , die wir bislang nicht betrachtet hatten, zeigen ein völlig anderes Verhalten. Insbesondere wird anhand des Richtungsfeldes deutlich, dass diese Lösungen nicht für alle Zeiten  $t \in \mathbb{R}$  definiert sind.

### 2.3.2 Das Euler-Verfahren

Das denkbar einfachste Verfahren zur Konstruktion einer numerischen Näherungslösung einer Differentialgleichung ist das *Euler-Verfahren*. Dieses folgt dem Prinzip der graphischen Darstellung eines Richtungsfeldes. Durch Wahl einer festen Zeitschrittweite  $\Delta t$  wird hierbei (künstlich) aus der gegebenen Differentialgleichung eine Differenzgleichung konstruiert, man „diskretisiert“ die Differentialgleichung in der Zeit. Die resultierende Differenzgleichung kann dann numerisch iteriert werden, siehe Abschnitt 1.3.2.

Gegeben sei eine Differentialgleichung der Form  $\dot{x}(t) = f(t, x(t))$  mit Anfangswerten  $(t_0, x_0)$ , also  $x(t_0) = x_0$ . Weiter sei  $\Delta t > 0$  eine frei gewählte Schrittweite. Nun wollen wir den Zustand  $x(t_1)$  zur Zeit  $t_1 := t_0 + \Delta t$  näherungsweise berechnen. Taylor-Entwicklung von  $x(t_1)$  ergibt

$$\begin{aligned} x(t_1) &= x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + \left. \frac{d}{dt}x(t) \right|_{t=t_0} \cdot \Delta t + R(x, \Delta t) \\ &= x_0 + f(t_0, x_0) \cdot \Delta t + R(x, \Delta t), \end{aligned} \quad (2.87)$$

wobei  $|R(x, \Delta t)| \leq C \cdot (\Delta t)^2$  für geeignetes  $C > 0$ . Der Ausdruck  $x_1 := x_0 + f(t_0, x_0) \cdot \Delta t$  wird also für *kleine Werte* von  $\Delta t$  eine gute Näherungslösung für  $x(t_1)$  liefern. Ausgehend von den Werten  $(t_1, x_1)$  können wir nun auf gleiche Weise die Werte  $(t_2, x_2)$  berechnen, die sich näherungsweise nach einem weiteren  $\Delta t$ -Schritt vom Zeitpunkt  $t_1$  zu  $t_2 := t_1 + \Delta t$  ergeben.

Allgemein verstehen wir unter dem *Euler-Verfahren* die resultierende Iterationsvorschrift

$$\begin{aligned} t_{i+1} &:= t_i + \Delta t, \\ x_{i+1} &:= x_i + f(t_i, x_i) \cdot \Delta t, \end{aligned} \quad (2.88)$$

für  $i = 0, 1, \dots$ , zu Anfangswerten  $(t_0, x_0)$ . Die Durchführung dieser Iteration liefert dann eine Folge von  $(t_i, x_i)$ -Werten, die eine Näherungslösung der exakten Werte von  $x(t)$  zu den Zeiten  $t = t_0, t_1, t_2, \dots$  ist.

**BEISPIEL 2.33 (a)** Die Differentialgleichung  $\frac{d}{dt}x(t) = x(t) + t^2$  mit  $x(0) = 1$  besitzt die (z.B. über Variation der Konstanten ermittelbare) analytische Lösung

$$x(t) = 3 \cdot e^t - t^2 - 2 \cdot t - 2. \quad (2.89)$$

In der Tat liefert Differenziation von Gl. (2.89) nach der Zeit  $t$

$$\frac{d}{dt}x(t) = 3 \cdot e^t - 2 \cdot t - 2 = x(t) + t^2 \quad (2.90)$$

und für  $t = 0$  ergibt sich  $x(t = 0) = 3 - 2 = 1$ . Zur Zeit  $t = 1$  beträgt der korrekte Wert von  $x(t)$  demnach

$$x(1) = 3 \cdot e - 1 - 2 - 2 = 3 \cdot e - 5 \approx 3.155. \quad (2.91)$$

Für das Euler-Verfahren ergibt sich durch Diskretisierung der Differentialgleichung (2.89) die Iterationsvorschrift

$$t_{i+1} = t_i + \Delta t \quad \text{und} \quad x_{i+1} = x_i + (x_i + t_i^2) \cdot \Delta t, \quad (2.92)$$

für  $i = 0, 1, \dots$  mit Anfangswerten  $t_0 = 0$  und  $x_0 = 1$ . Wählen wir  $\Delta t = 0.5$ , so ergibt sich z.B. die Wertefolge

$$\begin{aligned} t_1 = 0.5, & \quad \text{und} \quad x_1 = 1 + (1 + 0^2) \cdot 0.5 = 1.5, \\ t_2 = 1, & \quad \text{und} \quad x_2 = 1.5 + (1.5 + (0.5)^2) \cdot 0.5 = 2.375. \end{aligned}$$

Eine kleinere Schrittweite  $\Delta t$  liefert eine genauere Näherungslösung, erfordert aber auch mehr Rechenschritte. So ergibt sich für  $\Delta t = 0.2$  beispielsweise

$$\begin{aligned} t_1 = 0.2, & \quad \text{und} \quad x_1 = 1 + (1 + 0^2) \cdot 0.2 = 1.2, \\ t_2 = 0.4, & \quad \text{und} \quad x_2 = 1.2 + (1.2 + (0.2)^2) \cdot 0.2 = 1.448, \\ t_3 = 0.6, & \quad \text{und} \quad x_3 = 1.448 + (1.448 + (0.4)^2) \cdot 0.2 = 1.7696, \\ t_4 = 0.8, & \quad \text{und} \quad x_4 = 1.7696 + (1.7696 + (0.6)^2) \cdot 0.2 = 2.19552, \\ t_5 = 1, & \quad \text{und} \quad x_5 = 2.19552 + (2.19552 + (0.8)^2) \cdot 0.2 \approx 2.76. \end{aligned}$$

**(b)** Diskretisierung der logistischen Differentialgleichung  $\dot{x}(t) = k \cdot \left(1 - \frac{x(t)}{K}\right) \cdot x(t)$  liefert die Differenzengleichung

$$x_{i+1} = x_i + k \cdot \left(1 - \frac{x_i}{K}\right) \cdot x_i \cdot \Delta t = (1 + k \cdot \Delta t) \cdot \left(1 - \frac{x_i}{K + \frac{K}{k \cdot \Delta t}}\right) \cdot x_i, \quad (2.93)$$

was gerade der logistischen Differenzgleichung (1.18) mit Reproduktionsrate  $R_{\Delta t} := (1 + k \cdot \Delta t)$  und Kapazität  $K_{\Delta t} := \left(K + \frac{K}{k \cdot \Delta t}\right)$  entspricht. Wie wir in Abschnitt 1.4 gesehen hatten, besitzt diese die beiden Gleichgewichtszustände  $x_1^* = 0$  und

$$x_2^* = K_{\Delta t} - \frac{K_{\Delta t}}{R_{\Delta t}} = K \cdot \left(1 + \frac{1}{k \cdot \Delta t} - \frac{1 + \frac{1}{k \cdot \Delta t}}{1 + k \cdot \Delta t}\right) = K. \quad (2.94)$$

Offensichtlich gilt nun  $R_{\Delta t} > 1$  für alle  $k, \Delta t > 0$ , so dass, unabhängig von gegebener Wachstumskonstante  $k$  und gewählter Schrittweite  $\Delta t$ , der Gleichgewichtszustand  $x_1^* = 0$  im Euler-Verfahren immer instabil sein wird, siehe Abschnitt 1.5. Dies ist in Übereinstimmung mit unseren Ergebnissen aus Abschnitt 2.1.6 zu den Gleichgewichtszuständen der logistischen Differentialgleichung und deren Stabilität. Ferner ergibt sich, dass

$$R_{\Delta t} = 1 + k \cdot \Delta t \ll 3 \quad \Leftrightarrow \quad \Delta t \ll \frac{2}{k} \quad (2.95)$$

gelten sollte, damit der positive Gleichgewichtszustand  $x_2^* = K$  nach Diskretisierung asymptotisch stabil bleibt und kein zyklisches oder gar chaotisches Verhalten im Euler-Verfahren entsteht, siehe Abschnitt 1.6.

**BEMERKUNG 2.34** Wie wir in Beispiel 2.33a gesehen haben, nimmt die Genauigkeit der numerischen Näherungslösung für kleinere Schrittweiten zu. Allgemein gilt für das Euler-Verfahren hierbei ein (asymptotisch) linearer Zusammenhang zwischen Schrittweite und resultierendem Fehler der Näherungslösung. Das heißt, dass z.B. die Halbierung einer kleinen Schrittweite  $\Delta t$  auch den Fehler der zugehörigen numerischen Lösung halbieren wird. Gleichzeitig steigt für kleineres  $\Delta t$  aber auch der Rechenaufwand, da mehr Rechenschritte erforderlich werden um die Lösung zu einem bestimmten Zeitpunkt zu ermitteln.

In Beispiel 2.33b haben wir darüber hinaus gesehen, dass sich aufgrund der gewählten Schrittweite mitunter sogar qualitative Unterschiede zwischen numerischer und exakter Lösung ergeben können. Statt des Euler-Verfahrens werden in der Praxis daher üblicherweise etwas kompliziertere Verfahren verwendet, z.B. Runge–Kutta-Verfahren, die ähnlichen mathematischen Prinzipien folgen, aber für unterschiedliche Typen von Anfangswertproblemen optimiert sind und auf diese Weise eine bessere Annäherung an deren Lösung ermöglichen.



# Kapitel 3

## Differentialgleichungssysteme

Die Beschreibung der zeitlichen Entwicklung von mehreren, miteinander wechselwirkenden Größen führt zu *Systemen von Differentialgleichungen*. Nach der allgemeine Formulierung von Differentialgleichungs-Systemen anhand gekoppelter gewöhnlicher Differentialgleichungen 1. Ordnung untersuchen wir einfürend das Modell eines Räuber-Beute-Systems, wie es bereits 1925 von Alfred J. Lotka und, unabhängig davon, 1926 von Vito Volterra aufgestellt wurde. Anschliessend betrachten wir den Spezialfall eines homogenen linearen Differentialgleichungs-Systems etwas ausführlicher. Eine systematische und umfassendere Behandlung von Differentialgleichungs-Systemen muss der weiterführenden Literatur vorbehalten bleiben.

### 3.1 Allgemeine Differentialgleichungssysteme 1. Ordnung

Ein allgemeines Differentialgleichungssystem beschreibt die Dynamik von mehreren zeitabhängigen Größen, die sich gegenseitig beeinflussen. Diese gegenseitige Beeinflussung führt zu einer Kopplung der Differentialgleichungen.

DEFINITION 3.1 (a) *Ein Differentialgleichungssystem erster Ordnung ist ein System von  $n \in \mathbb{N}$  Differentialgleichungen erster Ordnung der Form*

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}x_1(t) &= F_1(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)), \\ \frac{d}{dt}x_2(t) &= F_2(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)), \\ &\vdots \\ \frac{d}{dt}x_n(t) &= F_n(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)), \end{aligned} \tag{3.1}$$

wobei  $F_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  stetige Funktionen von einem (gemeinsamen) Definitionsbereich  $D \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$  nach  $\mathbb{R}$  bezeichnen. Hängen die Funktionen  $F_1, F_2, \dots, F_n$  hierbei nicht explizit von der Zeit  $t$  ab, so sprechen wir von einem autonomen System von  $n$  Differentialgleichungen erster Ordnung.

(b) *Eine Lösung des Differentialgleichungssystems (3.1) zu den Anfangswerten  $x_1(t_0) = x_{1,0}, \dots, x_n(t_0) = x_{n,0}$  ist eine (vektorwertige) Funktion*

$$\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) : I \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad \vec{x}(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)),$$

für die gilt  $\vec{x}(t_0) = (x_{1,0}, x_{2,0}, \dots, x_{n,0})$  und deren Komponenten den Differentialgleichungen (3.1) genügen.

- (c) Unter einer allgemeinen Lösung von (3.1) verstehen wir eine Familie von Lösungen von (3.1) zu verschiedenen Anfangswerten, also mit  $n$  noch frei zu bestimmenden Konstanten  $C_1, C_2, \dots, C_n$ .

Definieren wir die (vektorwertige) Funktion  $\vec{F} = (F_1, F_2, \dots, F_n) : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ , dann lässt sich das Differentialgleichungssystem (3.1) auch kurz schreiben als

$$\frac{d}{dt}\vec{x}(t) = \vec{F}(t, \vec{x}(t)). \quad (3.2)$$

BEMERKUNG 3.2 Eine beliebige Differentialgleichung  $n$ -ter Ordnung

$$y^{(n)}(t) = f(t, y(t), \dot{y}(t), \dots, y^{(n-1)}(t)) \quad (3.3)$$

lässt sich umschreiben in ein System von  $n$  Differentialgleichungen erster Ordnung: Wir definieren Funktionen  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$  durch

$$x_1(t) := y(t), \quad x_2(t) := \dot{y}(t), \quad x_3(t) := \ddot{y}(t), \quad \dots, \quad x_n(t) := y^{(n-1)}(t). \quad (3.4)$$

Dann ergibt sich das Differentialgleichungssystem

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t) &= \frac{d}{dt}y(t) = x_2(t) \\ \dot{x}_2(t) &= \frac{d}{dt}\dot{y}(t) = \ddot{y}(t) = x_3(t) \\ \dot{x}_3(t) &= \frac{d}{dt}\ddot{y}(t) = y^{(3)}(t) = x_4(t) \\ &\vdots \\ \dot{x}_{n-1}(t) &= \frac{d}{dt}y^{(n-2)}(t) = y^{(n-1)}(t) = x_n(t) \\ \dot{x}_n(t) &= \frac{d}{dt}y^{(n-1)}(t) = y^{(n)}(t) = f(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)). \end{aligned}$$

oder  $\dot{\vec{x}}(t) = \vec{F}(t, \vec{x}(t))$  in der komprimierten Schreibweise (3.2) mit  $F_k(t, \vec{x}(t)) = x_{k+1}(t)$  für  $1 \leq k \leq n-1$  und  $F_n(t, \vec{x}(t)) = f(t, \vec{x}(t))$ .

Umgekehrt lassen sich ebenso manche, aber bei weitem nicht alle, Differentialgleichungssysteme zu einer einzigen Differentialgleichung höherer Ordnung umformulieren.

BEISPIEL 3.3 Aus der Differentialgleichung zweiter Ordnung  $\ddot{y}(t) = ay(t)$  (mit  $a \in \mathbb{R}$  konstant) ergibt sich mit  $x_1(t) := y(t)$  und  $x_2(t) := \dot{y}(t)$  das Differentialgleichungssystem

$$\dot{\vec{x}}(t) = \begin{pmatrix} \dot{x}_1(t) \\ \dot{x}_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{y}(t) \\ \ddot{y}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2(t) \\ ax_1(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ a & 0 \end{pmatrix} \vec{x}(t).$$

Analog zu den in Abschnitt 2.1.5 diskutierten Gleichgewichtszuständen von Differentialgleichungen lassen sich diese auch für Differentialgleichungs-Systeme einführen.

DEFINITION 3.4 Ein Vektor  $\vec{x}^* \in \mathbb{R}^n$  ist ein Gleichgewichtszustand des Differentialgleichungs-Systems  $\dot{\vec{x}}(t) = \vec{F}(\vec{x}(t))$ , falls gilt  $\vec{F}(\vec{x}^*) = \vec{0}$ .

### 3.2 Homogene lineare Differentialgleichungssysteme

Ist in einem autonomen System (3.2) von  $n$  Differentialgleichungen die Funktion  $\vec{F} = (F_1, F_2, \dots, F_n)$  eine lineare Abbildung von  $\mathbb{R}^n$  nach  $\mathbb{R}^n$  *linear*<sup>1</sup> dann gibt es eine (quadratische)  $n \times n$ -Matrix  $\mathbf{A}$ , so dass gilt

$$\frac{d}{dt}\vec{x}(t) = \mathbf{A} \cdot \vec{x}(t), \quad (3.5)$$

Ein Differentialgleichungssystem der Form (3.5) wird *homogenes lineares Differentialgleichungssystem* genannt. Ist  $\mathbf{A}$  die Matrix

$$\mathbf{A} := \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

dann sind die Funktionen  $F_k$  in der Darstellung (3.1) also gerade gegeben durch

$$\begin{aligned} F_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= a_{1,1} \cdot x_1 + a_{1,2} \cdot x_2 + \dots + a_{1,n} \cdot x_n, \\ F_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= a_{2,1} \cdot x_1 + a_{2,2} \cdot x_2 + \dots + a_{2,n} \cdot x_n, \\ &\vdots \\ F_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= a_{n,1} \cdot x_1 + a_{n,2} \cdot x_2 + \dots + a_{n,n} \cdot x_n. \end{aligned} \quad (3.7)$$

**BEMERKUNG 3.5** Analog zu Differenzen- und Differentialgleichungen sprechen wir von einem inhomogenen linearen Differentialgleichungssystem, wenn es noch eine additive Konstante gibt, wenn also für ein  $\vec{b} = (b_1, b_2, \dots, b_n) \in \mathbb{R}^n$  das Differentialgleichungssystem gegeben ist durch  $\dot{\vec{x}}(t) = \mathbf{A} \cdot \vec{x}(t) + \vec{b}$ .

Liegt die quadratische Matrix  $\mathbf{A}$  in (3.5) in *Diagonalform* vor, gilt also

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

dann hängt jede Funktion  $f_k$  tatsächlich nur (linear) von  $x_k(t)$  ab und ist unabhängig von den anderen  $x_j(t)$ ,  $j \neq k$  (vgl. (3.7)). Damit ist dann das Differentialgleichungssystem effektiv *entkoppelt* und die einzelnen Differentialgleichungen können unabhängig voneinander wie in Abschnitt 2.1.3 beschrieben gelöst werden:

$$\frac{d}{dt}\vec{x}(t) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix} \cdot \vec{x}(t) \Leftrightarrow \begin{cases} \frac{d}{dt}x_1(t) = \lambda_1 x_1(t), \\ \vdots \\ \frac{d}{dt}x_n(t) = \lambda_n x_n(t), \end{cases} \quad (3.9)$$

<sup>1</sup>Eine Abbildung  $L : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  heisst *linear*, wenn für alle  $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^n$  und  $a \in \mathbb{R}$  gilt  $L(a \cdot \vec{x}) = a \cdot L(\vec{x})$  und  $L(\vec{x} + \vec{y}) = L(\vec{x}) + L(\vec{y})$ . Zu jeder linearen Abbildung  $L$  von  $\mathbb{R}^n$  nach  $\mathbb{R}^m$  gibt es eine eindeutige  $m \times n$ -Matrix  $\mathbf{A}_L$ , so dass gilt  $L(\vec{x}) = \mathbf{A}_L \cdot \vec{x}$ .

mit Lösungen  $x_i(t) = x_i(0) \cdot e^{\lambda_i t}$ ,  $i = 1, \dots, n$ , für alle  $t \in \mathbb{R}$ , gemäß Satz 2.10.

Allgemein ist die Lösung des linearen Differentialgleichungssystem (3.5) zu Anfangswerten  $\vec{x}(t_0) = (x_1(t_0), x_2(t_0), \dots, x_n(t_0))^T$  gegeben als

$$\vec{x}(t) = e^{\mathbf{A}(t-t_0)} \cdot \vec{x}(t_0), \quad \text{für alle } t \in \mathbb{R}, \quad (3.10)$$

wobei das *Matrixexponential* von  $\mathbf{A}t$  durch folgende Potenzreihe<sup>2</sup> definiert<sup>3</sup> ist:

$$e^{\mathbf{A}(t-t_0)} := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(t-t_0)^k}{k!} \mathbf{A}^k = \mathbf{1} + (t-t_0)\mathbf{A} + \frac{(t-t_0)^2}{2!} \mathbf{A}^2 + \dots + \frac{(t-t_0)^n}{n!} \mathbf{A}^n + \dots, \quad (3.11)$$

mit  $\mathbf{1}$  als Bezeichnung für die  $(n \times n)$ -*Einheitsmatrix*, d.h.

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Im Allgemeinen ist die Definition (3.11) von  $e^{\mathbf{A}(t-t_0)}$  als Grenzwert einer unendlichen Reihe allerdings ungeeignet um die Lösung (3.10) eines linearen Differentialgleichungssystem auch praktisch zu berechnen. Stattdessen bietet sich die Transformation der Matrix  $\mathbf{A}$  auf *Jordan'sche Normalform* an (genauer hierzu siehe Abschnitt 3.2.1).

Es kann gezeigt werden, dass es zu jeder quadratischen Matrix  $\mathbf{A}$  eine invertierbare Matrix  $\mathbf{Q}$  gibt, so dass gilt

$$\mathbf{J} = \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{Q}, \quad (3.13)$$

wobei  $\mathbf{J}$  eine Jordan-Matrix ist (die Inverse  $\mathbf{Q}^{-1}$  einer invertierbaren Matrix  $\mathbf{Q}$  ist nach Definition diejenige Matrix, für die gilt  $\mathbf{Q}^{-1} \mathbf{Q} = \mathbf{1} = \mathbf{Q} \mathbf{Q}^{-1}$ ).

Eine Jordan-Matrix ist eine Matrix der Form

$$\mathbf{J} = \mathbf{D} + \mathbf{N} \quad (3.14)$$

wobei  $\mathbf{D}$  eine Diagonalmatrix (also von der Form (3.8), auf der Diagonalen stehen gerade die Eigenwerte von  $\mathbf{A}$ , siehe Abschnitt 3.2.1) und  $\mathbf{N}$  eine *nilpotente* Matrix<sup>4</sup> ist. Außerdem gilt  $DN = ND$  (oder  $DN - ND =: [D, N] = 0$ ).

Diese Tatsache können wir uns zur Berechnung von  $e^{\mathbf{A}(t-t_0)}$  zunutze machen. Da mit (3.13) gilt  $\mathbf{A} = \mathbf{Q} \mathbf{J} \mathbf{Q}^{-1}$ , folgt sofort

$$\mathbf{A}^2 = \mathbf{Q} \mathbf{J} \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{Q} \mathbf{J} \mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{Q} \mathbf{J}^2 \mathbf{Q}^{-1}$$

<sup>2</sup>Die Exponentialfunktion  $e^x = \exp(x)$  ist für  $x \in \mathbb{R}$  (oder auch  $x \in \mathbb{C}$ ) definiert durch die Potenzreihe  $e^x := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \dots$ , die für alle  $x \in \mathbb{R}$  oder  $\mathbb{C}$  absolut konvergent ist (Quotientenkriterium). Hierbei bezeichnet  $k! = k \cdot (k-1) \cdot (k-2) \cdot \dots \cdot 2 \cdot 1$  die Fakultät von  $k$ .

<sup>3</sup>Im Raum der  $n \times n$ -Matrizen definieren wir die Supremums-Norm  $\|\mathbf{A}\|_{\infty} := \sup_{\vec{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{\|\mathbf{A} \cdot \vec{x}\|}{\|\vec{x}\|}$ , wobei  $\|\vec{x}\|$  die übliche Norm (=Länge) des Vektors  $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$  bezeichnet. Es lässt sich zeigen, dass die Reihe in (3.11) bzgl. der Supremums-Norm absolut konvergent ist (dass also die Reihe  $\sum \frac{1}{k!} \|\mathbf{A}t\|_{\infty}^k$  in  $\mathbb{R}$  konvergiert). Da in einem vollständigen Raum jede absolut konvergente auch konvergent ist, gibt es eine  $n \times n$ -Matrix  $\mathbf{B}$ , so dass gilt  $B = e^{\mathbf{A}(t-t_0)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^N \frac{(\mathbf{A}t)^k}{k!}$ . Die Definition in (3.11) ist also sinnvoll. Leider ermöglicht sie noch nicht, die Matrix  $B$  tatsächlich auch zu berechnen.

<sup>4</sup>Eine Matrix  $\mathbf{N}$  heisst nilpotent, wenn es ein  $k \in \mathbb{N}$  gibt, so dass  $\mathbf{N}^k = \mathbf{0}$ , wobei  $\mathbf{0}$  die Null-Matrix bezeichnet. Das kleinste solche  $k$  heisst Nilpotenzgrad von  $\mathbf{N}$ . Ist  $\mathbf{N}$  eine  $n \times n$ -Matrix, dann ist der Nilpotenzgrad maximal  $n$ .

(da  $\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Q} = \mathbf{1}$ ) und analog für alle  $k \in \mathbb{N}$

$$\mathbf{A}^k = \mathbf{Q}\mathbf{J}^k\mathbf{Q}^{-1}.$$

Eingesetzt in (3.11) liefern diese Überlegungen sofort

$$\begin{aligned} e^{\mathbf{A}(t-t_0)} &= e^{\mathbf{Q}\mathbf{J}\mathbf{Q}^{-1}(t-t_0)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(t-t_0)^k}{k!} (\mathbf{Q}\mathbf{J}\mathbf{Q}^{-1})^k \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(t-t_0)^k}{k!} \mathbf{Q}\mathbf{J}^k\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{Q} \left( \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(t-t_0)^k}{k!} \mathbf{J}^k \right) \mathbf{Q}^{-1} \\ &= \mathbf{Q}e^{\mathbf{J}(t-t_0)}\mathbf{Q}^{-1}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

wobei wir im vorletzten Schritt das Distributivgesetz für die Multiplikation von Matrizen (siehe Abschnitt 3.2.1) und im letzten wieder die Definition der  $e$ -Funktion benutzt haben. Gleichung (3.15) liefert mit (3.14) und (3.21) (da  $[D, N] = 0$ ) zunächst

$$e^{\mathbf{A}(t-t_0)} = \mathbf{Q}e^{(\mathbf{D}+\mathbf{N})(t-t_0)}\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{Q} \left( e^{\mathbf{D}(t-t_0)} \cdot e^{\mathbf{N}(t-t_0)} \right) \mathbf{Q}^{-1}. \quad (3.16)$$

Die Matrizen  $e^{\mathbf{D}(t-t_0)}$  und  $e^{\mathbf{N}(t-t_0)}$  lassen sich nun aber berechnen. Für eine Diagonalmatrix der Form (3.8) gilt, wie sich leicht nachprüfen lässt, für  $k \in \mathbb{N}$

$$\mathbf{A}^k = \begin{pmatrix} \lambda_1^k & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^k & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n^k \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

die Diagonalelemente werden also einfach potenziert. Daraus ergibt sich mit (3.11) die Gleichung

$$e^{\mathbf{D}(t-t_0)} = \begin{pmatrix} e^{\lambda_1(t-t_0)} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2(t-t_0)} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & e^{\lambda_n(t-t_0)} \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

die Exponentialfunktion einer Diagonalmatrix ergibt sich also einfach, indem die Exponentialfunktion der Diagonalelemente genommen wird.

Da die Matrix  $\mathbf{N}$  nilpotent ist, lässt sich  $e^{\mathbf{N}(t-t_0)}$  direkt aus der Definition (3.11) berechnen, da die unendliche Summe abbricht. Ist  $L$  der Nilpotenzgrad von  $\mathbf{N}$ , dann gilt  $\mathbf{N}^k = \mathbf{0}$  für alle  $k \geq L$  und damit

$$e^{\mathbf{N}(t-t_0)} = \sum_{k=0}^{L-1} \frac{(t-t_0)^k}{k!} \mathbf{N}^k. \quad (3.19)$$

Die Lösung des linearen Differentialgleichungssystem (3.5) zu Anfangswerten  $\vec{x}(t_0) = (x_1(t_0), x_2(t_0), \dots, x_n(t_0))^T$  ist nach Gleichung (3.10) also gegeben als

$$\vec{x}(t) = \mathbf{Q} \left( e^{\mathbf{D}(t-t_0)} \cdot e^{\mathbf{N}(t-t_0)} \right) \mathbf{Q}^{-1} \cdot \vec{x}(t_0), \quad \text{für alle } t \in \mathbb{R}, \quad (3.20)$$

wobei sich  $e^{\mathbf{D}(t-t_0)}$  und  $e^{\mathbf{N}(t-t_0)}$  nach (3.18) und (3.19) berechnen lassen.

BEISPIEL 3.6 Wir betrachten das Anfangswertproblem  $\dot{\vec{x}}(t) = \mathbf{A} \cdot \vec{x}(t)$  mit  $\vec{x}(0) = \vec{x}_0$  in  $\mathbb{R}^2$ , wobei gelte

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}, \quad \vec{x}_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Dann gilt für die Matrix

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$$

dass  $\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{Q}$  eine Jordan-Matrix ist, nämlich

$$\begin{pmatrix} 3 & -2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} =: \mathbf{J}.$$

Für

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{N} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ist also  $\mathbf{J} = \mathbf{D} + \mathbf{N}$ . Weiterhin gilt  $\mathbf{N}^2 = \mathbf{0}$  und damit

$$e^{\mathbf{D}t} = e^{2t}\mathbf{1} \quad \text{und} \quad e^{\mathbf{N}t} = \mathbf{1} + t\mathbf{N} = \begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Aus (3.20) ergibt sich also als Lösung des Anfangswertproblems

$$\vec{x}(t) = e^{2t} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 3 & -2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = e^{2t} \begin{pmatrix} 2-t \\ 1-t \end{pmatrix}.$$

Wir machen die Probe:

$$\begin{aligned} \vec{x}(0) &= e^0 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \frac{d}{dt} e^{2t} \begin{pmatrix} 2-t \\ 1-t \end{pmatrix} &= e^{2t} \left[ \begin{pmatrix} 4-2t \\ 2-2t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] = e^{2t} \begin{pmatrix} 3-2t \\ 1-2t \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix} e^{2t} \begin{pmatrix} 2-t \\ 1-t \end{pmatrix} &= e^{2t} \begin{pmatrix} 3-2t \\ 1-2t \end{pmatrix} \end{aligned}$$

### 3.2.1 Einschub Lineare Algebra

Seien  $\mathbf{A}$  eine reelle  $\ell \times m$ -Matrix und  $\mathbf{B}$  eine reelle  $m \times n$ -Matrix (die Zahl der Zeilen von  $\mathbf{B}$  ist also gleich der Zahl der Spalten von  $\mathbf{A}$ ), dann ist das Produkt  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$  der beiden Matrizen eine  $\ell \times n$ -Matrix  $\mathbf{C}$  mit den Elementen

$$c_{r,i} := \sum_{k=1}^m a_{rk} b_{ki}, \quad 1 \leq r \leq \ell, 1 \leq i \leq n.$$

Ist insbesondere  $\mathbf{A}$  eine reelle  $m \times n$ -Matrix und  $\vec{x}$  ein (Spalten)-Vektor in  $\mathbb{R}^n$ , also eine reelle  $n \times 1$ -Matrix, dann ist das Produkt  $\mathbf{A} \cdot \vec{x}$  eine reelle  $m \times 1$ -Matrix, also ein (Spalten)-Vektor in  $\mathbb{R}^m$ . Damit kann also jede reelle  $m \times n$ -Matrix  $\mathbf{A}$  als Abbildung von  $\mathbb{R}^n$  nach  $\mathbb{R}^m$  aufgefasst werden. Es lässt sich leicht nachprüfen, dass diese Abbildung linear ist.

Weiterhin gilt, dass die Multiplikation von Matrizen assoziativ ist (es gilt  $(\mathbf{A}\mathbf{B})\mathbf{C} = \mathbf{A}(\mathbf{B}\mathbf{C})$ ) und es gilt das Distributivgesetz  $\mathbf{A}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{A}\mathbf{B} + \mathbf{A}\mathbf{C}$  (hierbei muss die Anzahl der Zeilen und Spalten der Matrizen natürlich jeweils so sein, dass die Multiplikation überhaupt definiert ist).

Im Fall von quadratischen Matrizen (also Zeilenzahl = Spaltenzahl) lassen sich die beiden Produkte  $\mathbf{AB}$  und  $\mathbf{BA}$  bilden. Diese sind aber im Allgemeinen nicht gleich, d.h. es gilt nicht  $\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$  bzw. für den Kommutator

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] := \mathbf{AB} - \mathbf{BA} \neq \mathbf{0}$$

(wir sagen, die Multiplikation im Raum der  $n \times n$ -Matrizen ist nicht kommutativ).

Aus diesem Grund kann die Gleichung  $e^{a+b} = e^a e^b$  für reelle (oder komplexe) Zahlen  $a, b$  nicht direkt auf Matrizen übertragen werden. Vielmehr gilt die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel, von der wir hier nur die zwei folgenden Spezialfälle angeben wollen (für die allgemeine Formel sei auf die Literatur verwiesen):

$$e^{\mathbf{A}+\mathbf{B}} = \begin{cases} e^{\mathbf{A}}e^{\mathbf{B}} & \text{falls gilt } [\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{0} \\ e^{\mathbf{A}}e^{\mathbf{B}}e^{-\frac{1}{2}[\mathbf{A}, \mathbf{B}]} & \text{falls gilt } [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = \mathbf{0} = [\mathbf{B}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] \end{cases} \quad (3.21)$$

Wie wir schon gesehen haben, können reelle  $n \times n$ -Matrizen aufgefasst werden als lineare Abbildungen von (dem Vektorraum)  $\mathbb{R}^n$  in sich selbst.

Eine Zahl  $\lambda \in \mathbb{R}$  heisst *Eigenwert* einer reellen  $n \times n$ -Matrix  $\mathbf{A}$  (bzw. einer linearen Abbildung  $\mathbf{A} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ ), wenn ein Vektor  $\vec{v} \in \mathbb{R}^n$ ,  $\vec{v} \neq \mathbf{0}$ , existiert, so dass gilt

$$\mathbf{A} \cdot \vec{v} = \lambda \vec{v}. \quad (3.22)$$

Ein solcher Vektor heisst dann *Eigenvektor* zum Eigenwert  $\lambda$ . Da die Gleichung (3.22) mit einer beliebigen Zahl multipliziert werden kann, ist ein Eigenvektor immer nur in der Richtung festgelegt, nicht in der Länge (jedes Vielfache eines Eigenvektors ist auch Eigenvektor).

Anschaulich verändert ein Eigenvektor bei der Multiplikation mit der Matrix nur die Länge (um den Faktor  $\lambda$ ), die Richtung bleibt gleich.

Zur Berechnung der Eigenwerte einer Matrix verwenden wir, dass (3.22) genau dann für ein  $\vec{v} \neq \mathbf{0}$  gelöst werden kann, wenn gilt

$$p_A(\lambda) := \det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{1}) = \mathbf{0}. \quad (3.23)$$

Aus den Formel zur Berechnung der Determinante folgt, dass die Eigenwerte von  $\mathbf{A}$  also die (reellen) Nullstellen eines Polynoms vom Grad  $n$  in  $\lambda$  sind, des sogenannten charakteristischen Polynoms  $p_A(\lambda)$ . Zu den durch (3.23) bestimmten Eigenwerten lassen sich dann die zugehörigen Eigenvektoren mittels der Gleichung (3.22) berechnen.

**BEMERKUNG 3.7** *Ein Polynom vom Grad  $n$  hat nach dem Fundamentalsatz der Algebra  $n$  (möglicherweise komplexe) Nullstellen, diese können aber auch mehrfach auftreten. Die Zahl der verschiedenen reellen Nullstellen ist also maximal  $n$ .*

Die Vielfachheit eines Eigenwerts  $\lambda$  als Nullstelle des charakteristischen Polynoms wird als *algebraische Vielfachheit* des Eigenwerts bezeichnet. Die Anzahl der linear unabhängigen Eigenvektoren zu einem Eigenwert  $\lambda$  bezeichnen wir als *geometrische Vielfachheit*.

**BEISPIEL 3.8** *Wir berechnen die Eigenwerte der Matrix  $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}$ . Das charakteristische Polynom ergibt sich zu*

$$p_A(\lambda) = \det \begin{pmatrix} 1 - \lambda & 1 \\ -1 & 3 - \lambda \end{pmatrix} = (1 - \lambda)(3 - \lambda) + 1 = \lambda^2 - 4\lambda + 4 = (\lambda - 2)^2.$$

$\mathbf{A}$  hat also nur den Eigenwert  $\lambda = 2$ , dieser hat die algebraische Vielfachheit 2 (doppelte Nullstelle des charakteristischen Polynoms). Für einen Eigenvektor zum Eigenwert 2 muss gelten  $\mathbf{A} \cdot \vec{v} = 2\vec{v}$ , daraus ergibt sich das Gleichungssystem  $2v_1 + v_2 = 2v_1$  und  $2v_2 = 2v_2$ . Die erste Gleichung liefert sofort  $v_2 = 0$  und  $v_1$  beliebig. Damit sind alle Eigenvektoren von  $\mathbf{A}$  Vielfache von  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , die geometrische Vielfachheit von  $\lambda$  ist also 1.

Ist  $\mathbf{A}$  eine symmetrische reelle  $n \times n$ -Matrix (gilt also  $a_{ik} = a_{ki}$  für alle  $i, k \in \{1, 2, \dots, n\}$ ), dann sagt der Spektralsatz unter anderem aus, dass  $\mathbf{A}$   $n$  orthogonale Eigenvektoren besitzt und dass gilt

$$\mathbf{D} = \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{Q},$$

wobei die Spalten von  $\mathbf{Q}$  gerade die normierten Eigenvektoren von  $\mathbf{A}$  sind und  $\mathbf{D}$  eine Diagonalmatrix ist, deren Diagonalelemente gerade die Eigenwerte von  $\mathbf{A}$  sind.

Für nicht-symmetrische Matrizen lässt sich i.a. aber nur eine Darstellung (3.13) in Jordan-Form erreichen. Bei der Jordan-Matrix stehen auf der Diagonale die Eigenwerte der Matrix, jeweils direkt rechts von den Diagonalelementen steht jeweils eine 1 oder eine 0. Ansonsten ist die Matrix null. Eine Jordan-Matrix unterscheidet sich also von einer Diagonalmatrix dadurch, dass auf der sogenannten Nebendiagonale auch Einsen stehen können. Für die eingehendere Theorie zu Jordan-Matrizen, insbesondere zu den Fragen, wann auf der Nebendiagonale eine 1 steht und wie die Matrix  $\mathbf{Q}$  gewonnen wird, sei hier auf die Literatur verwiesen.

### 3.3 Das Räuber-Beute-System

Als *Räuber* und *Beute* bezeichnen wir zwei Klassen von Lebewesen, von denen sich die erste von der zweiten ernährt, z.B. Haie und Sardinen oder Luchse und Hasen. Wir möchten die zeitliche Veränderung der Anzahl von Räubern und Beute modellieren und definieren hierzu

$$\begin{aligned} R(t) &:= \text{Anzahl an Räuber zur Zeit } t, \\ B(t) &:= \text{Anzahl an Beute zur Zeit } t. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Vereinfachend nehmen wir an, dass sich Räuber ausschließlich von den Beutelebewesen ernähren und die Beute keine weiteren Feinde hat und über ein ausreichendes Nahrungsangebot verfügt. Die Wechselwirkungen zwischen Räuber- und Beutepopulation können nun über die *Lotka-Volterra-Gleichungen* beschrieben werden, welche lauten

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} R(t) &= -\beta \cdot R(t) + \delta \cdot B(t) \cdot R(t) =: F_1(R(t), B(t)), \\ \frac{d}{dt} B(t) &= +\alpha \cdot B(t) - \gamma \cdot B(t) \cdot R(t) =: F_2(R(t), B(t)). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Hierbei handelt es sich um ein Differentialgleichungs-System in dem zwei nicht-lineare Differentialgleichungen erster Ordnung miteinander gekoppelt sind. Die einzelnen Terme können wir wie folgt interpretieren:

- $(-\beta \cdot R(t))$  gibt den Rückgang (Zerfall) der Räuberpopulation  $R(t)$  durch Nahrungsmangel an.
- $(+\alpha \cdot B(t))$  beschreibt das ungestörte Wachstum der Beutepopulation  $B(t)$ .



Diese beiden Terme sind proportional zur zugehörigen Population, aber unabhängig von der jeweils anderen. Die *Wechselwirkungen* zwischen den Populationen und die Kopplung beider Differentialgleichungen ist über die zusätzlichen, nicht-linearen Terme im System gegeben:

- $(+\delta \cdot B(t) \cdot R(t))$  beschreibt das Wachstum der Räuber durch Beutefang.
- $(-\gamma \cdot B(t) \cdot R(t))$  beschreibt die Dezimierung der Beute durch die Räuber.

Die Konstanten  $\alpha, \beta, \gamma, \delta > 0$  lassen somit folgende Interpretation zu:

$$\begin{aligned} \alpha &= \text{Fertilitätsrate}, & \beta &= \text{Nahrungsbedarf der Räuber}, \\ \gamma &= \text{Jagdgeschick}, & \delta &= \text{Beuteverwertung}. \end{aligned}$$

Wir beginnen die Untersuchung des Lotka–Volterra-Systems (3.25) mit der Betrachtung von möglichen Gleichgewichtszuständen  $R(t) = R^*$  und  $B(t) = B^*$  für alle  $t \in \mathbb{R}$ . In diesem Fall soll also nach Definition 3.4 gelten

$$F_1(R^*, B^*) = R^* \cdot (\delta \cdot B^* - \beta) \stackrel{!}{=} 0 \quad \text{und gleichzeitig} \quad F_2(R^*, B^*) = B^* \cdot (\alpha - \gamma \cdot R^*) \stackrel{!}{=} 0,$$

was offensichtlich für

$$S_1 := (R_1^*, B_1^*) = (0, 0) \quad \text{und} \quad S_2 := (R_2^*, B_2^*) = \left( \frac{\alpha}{\gamma}, \frac{\beta}{\delta} \right) \quad (3.26)$$

erfüllt ist. Somit besitzt das Differentialgleichungs-System (3.25) die beiden Gleichgewichtszustände (oder stationären Lösungen)  $S_1 = (0, 0)$ , in dem Räuber und Beute ausgestorben sind, und  $S_2 = \left( \frac{\alpha}{\gamma}, \frac{\beta}{\delta} \right)$ , in dem Räuber und Beute vorhanden sind.

Zur Untersuchung des Verhaltens von nicht-stationären Lösungen nutzen wir zunächst die Methode des Richtungsfeldes. Obwohl die Lösungen des Differentialgleichungs-Systems (3.25) hierbei eigentlich in einem dreidimensionalen Raum, also einem  $(t, x, y)$ -Koordinatensystem zu veranschaulichen wären, erhalten wir wesentliche Informationen bereits aus der Projektion dieser Lösungen in die  $(x, y)$ -Ebene, dem sogenannten *Phasenraum*.

**DEFINITION 3.9** (a) *Unter dem Phasenporträt eines Differentialgleichungs-Systems der Form*

$$\frac{d}{dt}x_1(t) = F_1(x_1(t), x_2(t)) \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt}x_2(t) = F_2(x_1(t), x_2(t)), \quad (3.27)$$

*verstehen wir die Gesamtheit aller Lösungskurven im Phasenraum, die durch die Zuordnung  $t \rightarrow (x_1(t), x_2(t)) = \vec{x}(t)$  entstehen. Diese Kurven werden auch Trajektorien oder Orbits genannt.*

(b) *Das Richtungsfeld eines Differentialgleichungs-Systems der Form (3.27) ist die Gesamtheit der Richtungsvektoren (oder Geschwindigkeitsvektoren)*

$$\vec{v}(x_1, x_2) = (\dot{x}_1, \dot{x}_2) = (F_1(x_1, x_2), F_2(x_1, x_2)) = \vec{F}(\vec{x}). \quad (3.28)$$

Die Trajektorien ergeben sich dann wie in Kapitel 2.3.1 beschrieben durch „Treibenlassen“ im Richtungsfeld. In Abb. 3.1 nutzen wir das Richtungsfeld zur Untersuchung des Phasenporträts des Lotka–Volterra-Systems (3.25). Demnach scheinen nicht-stationäre Lösungen um den Gleichgewichtspunkt  $S_2 = (R_2^*, B_2^*) = \left( \frac{\alpha}{\gamma}, \frac{\beta}{\delta} \right)$  zu zirkulieren. Wenngleich

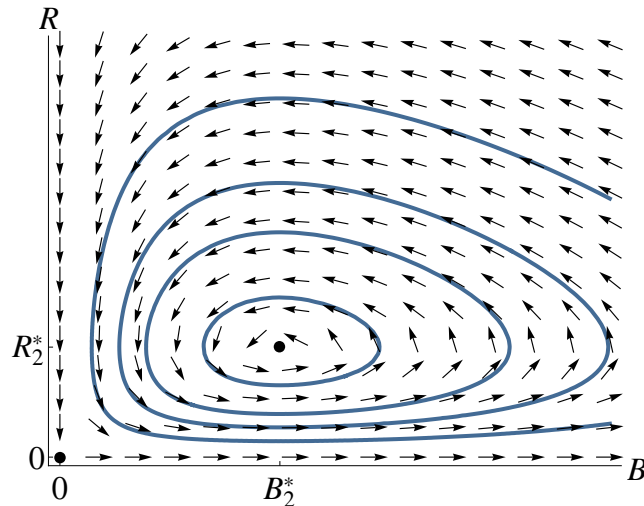


Abbildung 3.1: Richtungsfeld des Lotka–Volterra-Systems (3.25) und einige nicht-stationäre Lösungen.

in Abb. 3.1 bereits angedeutet, bleibt zunächst jedoch unklar ob diese Trajektorien *geschlossene* Kurven um den Punkt  $S_2$  bilden (ob es sich also um ein periodisches Verhalten handelt).

Zur weiteren Untersuchung betrachten wir zusätzlich numerische Näherungslösungen des Lotka–Volterra-Systems (3.25). Ausgehend von Anfangswerten  $R(t_0) = R_0$  und  $B(t_0) = B_0$  zu einer Anfangszeit  $t_0$ , müssen hierbei nun die beiden Zustandsvariablen  $R(t)$  und  $B(t)$  in der Zeit propagiert werden.

Für das Euler-Verfahren aus Abschnitt 2.3.2 ergibt sich durch Diskretisierung der Lotka–Volterra-Gleichungen (3.25) die Iterationsvorschrift

$$\begin{aligned} t_{i+1} &:= t_i + \Delta t, \\ R_{i+1} &:= R_i + F_1(R_i, B_i) \cdot \Delta t = R_i + R_i \cdot (\delta \cdot B_i - \beta) \cdot \Delta t, \\ B_{i+1} &:= B_i + F_2(R_i, B_i) \cdot \Delta t = B_i + B_i \cdot (\alpha - \gamma \cdot R_i) \cdot \Delta t, \end{aligned}$$

für  $i = 0, 1, 2, \dots$  zu Anfangswerten  $(t_0, R_0, B_0)$ . Die Ergebnisse einer numerisch berechneten Näherungslösung des Lotka–Volterra-Systems (3.25) sind in Abb. 3.2 dargestellt.

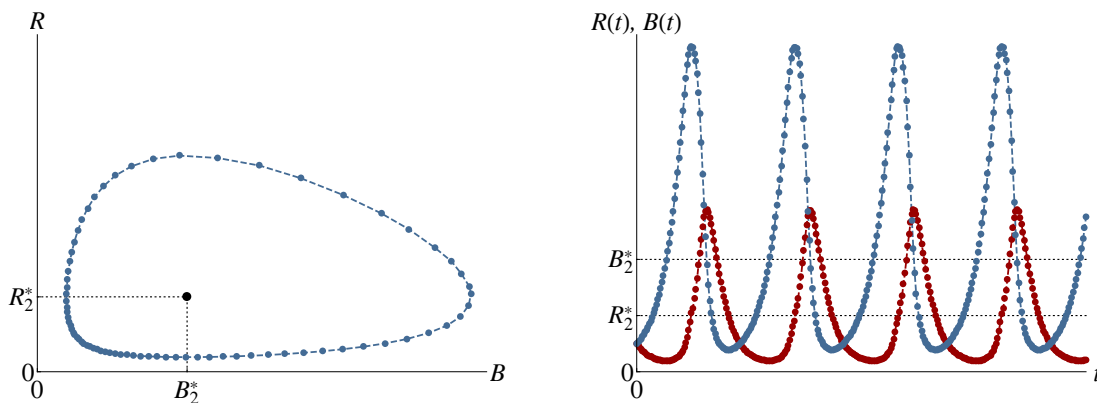


Abbildung 3.2: Darstellung einer numerische Lösung des Lotka–Volterra-Systems (3.25) im Phasenraum (links) und im zeitlichen Verlauf (rechts) von  $R(t)$  (rot) und  $B(t)$  (blau).

Erneut beobachten wir, dass diese im Phasenraum geschlossene Kurven um den nicht-trivialen Gleichgewichtspunkt  $S_2 = (R_2^*, B_2^*)$  zu bilden scheinen. Zusätzlich lässt der zeitliche Verlauf erkennen, dass dieser Zyklus um  $S_2$  anscheinend mit einer festen *Periodizität* erfolgt. Wie schon bei den Differentialgleichungen ergibt sich auch hier die Wahl der speziellen Lösungskurve aus den Anfangswerten  $(t_0, R_0, B_0)$ .

Die bisherigen Ergebnisse legen die Vermutung nahe, dass eine Funktion  $\mathcal{H} : \mathbb{R}_+^2 \rightarrow \mathbb{R}$  existiert, deren Wert entlang einer Lösungskurve des Lotka–Volterra-Systems (3.25) konstant bleibt und diese somit eindeutig charakterisiert. Mathematisch bedeutet das, dass zu beliebigen Anfangswerten  $(t_0, R_0, B_0)$  eine Konstante  $C \in \mathbb{R}$  gibt, so dass für alle  $t \in \mathbb{R}$  gilt

$$\mathcal{H}(R_0, B_0) = \mathcal{H}(R(t), B(t)) = C. \quad (3.29)$$

Eine solche Funktion heißt *Erhaltungsgröße*, *Invariante* oder auch *Erstes Integral* eines Differentialgleichungs-Systems. Die Definition (3.29) der Erhaltungsgröße  $\mathcal{H}$  ist äquivalent zu der Bedingung

$$\frac{d}{dt}\mathcal{H}(R(t), B(t)) = 0, \quad \text{für alle } t \in \mathbb{R} \quad (3.30)$$

bzw. nach der Kettenregel für Funktionen zweier Veränderlichen

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial R} \cdot \frac{d}{dt}R(t) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial B} \cdot \frac{d}{dt}B(t) = 0, \quad \text{für alle } t \in \mathbb{R}. \quad (3.31)$$

Um  $\mathcal{H}$  zu bestimmen, machen wir den Ansatz

$$\mathcal{H}(R, B) = \mathcal{F}(R) + \mathcal{G}(B). \quad (3.32)$$

Wir probieren also aus, ob wir eine Funktion  $\mathcal{H}$  finden, die einerseits eine Erhaltungsgröße ist (also der Gleichung (3.31) genügt) und die sich andererseits als Summe zweier Funktionen schreibt, die jeweils nur von einer der Variablen abhängen.

Eingesetzt in (3.31) muss für  $\mathcal{H}$  wie in (3.32) gelten

$$\left(\frac{d}{dR}\mathcal{F}(R(t))\right) \cdot \left(\frac{d}{dt}R(t)\right) + \left(\frac{d}{dB}\mathcal{G}(B(t))\right) \cdot \left(\frac{d}{dt}B(t)\right) = 0. \quad (3.33)$$

Genügen  $R(t)$  und  $B(t)$  der Lotka–Volterra-Gleichungen (3.25), dann ist (3.33) äquivalent zu

$$\mathcal{F}'(R) \cdot R \cdot (\delta \cdot B - \beta) + \mathcal{G}'(B) \cdot B \cdot (\alpha - \gamma \cdot R) = 0, \quad (3.34)$$

wobei wir hier zur Vereinfachung der Notation  $\mathcal{F}'(R) = \frac{d}{dR}\mathcal{F}(R)$  und  $\mathcal{G}'(B) = \frac{d}{dB}\mathcal{G}(B)$  gesetzt haben. Anhand dieser Gleichung können wir  $\mathcal{H}$  für nicht-konstante Lösungen des Lotka–Volterra-Systems (3.25) (also für  $(R, B) \neq (R_2^*, B_2^*)$ , vgl. (3.26)) bestimmen. Trennung der Veränderlichen in Gl. (3.34) ergibt zunächst

$$\frac{\mathcal{F}'(R) \cdot R}{\gamma \cdot R - \alpha} = \frac{\mathcal{G}'(B) \cdot B}{\delta \cdot B - \beta}. \quad (3.35)$$

Da die Funktionen  $\mathcal{F}$  und  $\mathcal{G}$  unseres Ansatzes (3.32) jeweils nur von einer der beiden Variablen  $R$  bzw.  $B$  abhängen und diese voneinander unabhängig variiert werden können, kann Gleichung (3.35) nur erfüllt sein, wenn beide Seiten konstant sind, d.h. wenn eine Konstante  $C \in \mathbb{R}$  existiert, so dass für alle  $R, B \in \mathbb{R}_+$  gilt

$$\frac{\mathcal{F}'(R) \cdot R}{\gamma \cdot R - \alpha} = C \quad \text{und} \quad \frac{\mathcal{G}'(B) \cdot B}{\delta \cdot B - \beta} = C. \quad (3.36)$$

Daraus ergibt sich

$$\mathcal{F}'(R) = C \cdot \left( \gamma - \frac{\alpha}{R} \right) \quad \text{und} \quad \mathcal{G}'(B) = C \cdot \left( \delta - \frac{\beta}{B} \right), \quad (3.37)$$

und durch Integration dieser Gleichungen folgt schließlich

$$\mathcal{H}(R, B) = C \cdot (\gamma \cdot R - \alpha \cdot \ln(R) + \delta \cdot B - \beta \cdot \ln(B)) + D, \quad (3.38)$$

wobei  $C$  und  $D$  beliebige Konstanten bezeichnen. Diese Funktion ist für sämtliche positiven Werte von  $R$  und  $B$  definiert und besitzt, je nach Vorzeichen von  $C$ , beim nicht-trivialen Gleichgewichtspunkt  $S_2 = (R_2^*, B_2^*)$  ein Minimum ( $C > 0$ ) bzw. Maximum ( $C < 0$ ). Nach Konstruktion ist der Wert von  $\mathcal{H}$  gerade entlang einer Trajektorie  $(R(t), B(t))$  der Lösungen der Lotka-Volterra-Gleichungen konstant.

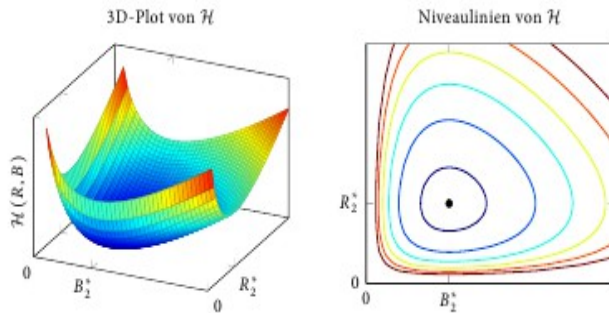


Abbildung 2.8: Darstellung der Erhaltungsgröße  $\mathcal{H}$  des Lotka-Volterra-Systems (2.34) für  $C > 0$ .

In Abb. 3.3 ist die Form von  $\mathcal{H}$  für  $C > 0$  dargestellt. Wir stellen fest, dass sich die im  $(R, B)$ -Phasenraum ergebenden Linien, entlang derer  $\mathcal{H}$  einen identischen, konstanten Wert hat (die sogenannten *Niveau-* oder *Höhenlinien* von  $\mathcal{H}$ ), eiförmige, geschlossene Kurven um  $S_2 = (R_2^*, B_2^*)$  bilden. Diese Niveaulinien von  $\mathcal{H}$  entsprechen gerade den nicht-konstanten Lösungen des Lotka-Volterra-Systems (3.25).

Wir fassen die Ergebnisse zu den Lotka-Volterra-Gleichungen (3.25) zusammen:

- Die Trajektorien des Lotka-Volterra-Systems bilden geschlossene, eiförmige Kurven um den nicht-trivialen Gleichgewichtspunkt  $S_2$  gegeben in (3.26).
- Verschiedene Trajektorien entsprechen unterschiedlichen Niveaulinien der Erhaltungsgröße  $\mathcal{H}$  gegeben in (3.38) und können sich somit nicht schneiden.
- Räuber-Beute-Systeme, die sich durch die Lotka-Volterra-Gleichungen modellieren lassen, ermöglichen eine Koexistenz beider Populationen mit stabilen, periodischen Schwankungen.

### 3.4 Stabilität von Gleichgewichtszuständen, Linearisierung

Analog zu Differentialgleichungen lassen sich auch Gleichgewichtszustände von Differentialgleichungs-Systemen in Bezug auf ihr Stabilitätsverhalten hin untersuchen. Wir betrachten

hier zunächst lineare Differentialgleichungssysteme  $\dot{\vec{x}} = \mathbf{A}\vec{x}$ . Für  $\mathbf{A}$  mit  $\det \mathbf{A} \neq 0$  ist der einzige Gleichgewichtszustand hier  $\vec{x}^* = \vec{0}$ . Beim eindimensionalen Fall, der homogenen (bzw. inhomogenen) Evolutionsgleichung, haben wir gesehen, dass sich die Stabilität des GGZ  $x^* = 0$  (bzw.  $x^* = m/k$ ) direkt aus dem Vorzeichen der Wachstumskonstanten  $k$  ablesen ließ. Statt der Wachstumskonstanten haben wir im Fall von Differentialgleichungssystemen nun die Matrix  $\mathbf{A}$ . Eine Matrix hat natürlich kein Vorzeichen, es lässt sich aber zeigen, dass es genügt, das Vorzeichen des maximalen Realteils der Nullstellen des charakteristischen Polynoms  $p_A$  zu kennen.

**SATZ 3.10** Sei  $\mathbf{A}$  eine reelle  $n \times n$ -Matrix und seien  $\lambda_i \in \mathbb{C}$ ,  $i = 1, \dots, n$  die Nullstellen des charakteristischen Polynoms  $p_A(\lambda)$ . Sei  $\gamma = \max_i \operatorname{Re}(\lambda_i)$ . Dann ist der Gleichgewichtszustand  $\vec{x}^* = \vec{0}$  des linearen Differentialgleichungs-Systems  $\dot{\vec{x}} = \mathbf{A} \cdot \vec{x}$

- (a) asymptotisch stabil, falls  $\gamma < 0$ .
- (b) instabil, fall  $\gamma > 0$
- (c) nicht asymptotisch stabil, falls  $\gamma = 0$ , aber stabil genau dann, wenn für alle  $\lambda_i$  mit  $\operatorname{Re}(\lambda_i) = 0$  die algebraische und geometrische Vielfachheit übereinstimmen.

Für  $\vec{b} \in \mathbb{R}^n$  betrachten wir nun das inhomogene lineare Differentialgleichungssystem  $\dot{\vec{x}} = \mathbf{A}\vec{x} + \vec{b}$ . Die Gleichgewichtszustände sind in diesem Fall die Lösungen des linearen Gleichungssystems  $\mathbf{A}\vec{x} = -\vec{b}$  (falls solche existieren). Ihre Stabilität ergibt sich analog zum obigen Fall.

**BEMERKUNG 3.11** Im Fall  $n = 2$  ergeben sich für  $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$  aus der  $p$ - $q$ -Formel als Nullstellen von  $p_A(\lambda)$

$$\lambda_{\pm} = \frac{a+d}{2} \pm \frac{\sqrt{(a-d)^2 + 4bc}}{2}.$$

Hier lässt sich eine vollständige Klassifizierung des GGZ  $\vec{x}^* = 0$  des Differentialgleichungssystems  $\dot{\vec{x}} = \mathbf{A}\vec{x}$  vornehmen, siehe Abbildung 3.4.

Eine Möglichkeit, das Verhalten eines nichtlinearen Differentialgleichungssystems  $\dot{\vec{x}}(t) = \vec{F}(\vec{x}(t))$  in der Nähe eines Gleichgewichtspunktes  $\vec{x}^*$  (also einer Nullstelle der Funktion  $\vec{F}$ ) zu untersuchen, besteht darin die Funktion  $\vec{F}$  durch ihre lineare Approximation bei  $\vec{x}^*$  zu ersetzen und das sich daraus ergebende lineare Differentialgleichungssystem mit Satz 3.10 zu untersuchen.

Mit dem Satz von Taylor gilt

$$\vec{F}(\vec{x}(t)) = \vec{F}(\vec{x}^*) + D\vec{F}|_{\vec{x}^*} \cdot (\vec{x}(t) - \vec{x}^*) + R,$$

wobei der Fehlerterm  $R$  von der Größenordnung  $|\vec{x}(t) - \vec{x}^*|^2$  ist. Hierbei ist  $D\vec{F}|_{\vec{x}^*}$  die Matrix der partiellen Ableitungen der Komponenten  $F_1, \dots, F_n$  von  $\vec{F}$  am Punkt  $\vec{x}^*$ , also

$$D\vec{F}|_{\vec{x}^*} := \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1} & \frac{\partial F_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1} & \frac{\partial F_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_n}{\partial x_1} & \frac{\partial F_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial x_n} \end{pmatrix} (\vec{x}^*).$$

Für eine Funktion  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  von mehreren Variablen wird die partielle Ableitung bzgl. einer Variablen  $x_i$  berechnet, indem nur nach  $x_i$  abgeleitet wird und alle anderen

Variablen als Konstanten behandelt werden. Zum Beispiel sind die partiellen Ableitungen der Funktion  $f(x, y) = x^2 \sin y$  gegeben durch  $\frac{\partial f}{\partial x} = 2x \sin y$  und  $\frac{\partial f}{\partial y} = x^2 \cos y$ .

Als Approximation des Differentialgleichungs-System  $\dot{\vec{x}}(t) = \vec{F}(\vec{x}(t))$  ergibt sich damit (da  $\vec{F}(\vec{x}^*) = 0$ )

$$\dot{\vec{x}}(t) = D\vec{F}|_{\vec{x}^*} \cdot (\vec{x}(t) - \vec{x}^*).$$

BEISPIEL 3.12 Die Funktion  $\vec{F}(x_1(t), x_2(t)) = \begin{pmatrix} x_2(t) \\ -\sin x_1(t) \end{pmatrix}$  hat die Nullstellen  $\vec{x}_1^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

und  $\vec{x}_2^* = \begin{pmatrix} \pi \\ 0 \end{pmatrix}$ . Damit ergibt sich

$$D\vec{F}|_{\vec{x}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\cos x_1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{also} \quad D\vec{F}|_{\vec{x}_1^*} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad D\vec{F}|_{\vec{x}_2^*} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Am Punkt  $\vec{x}_1^*$  ergeben sich  $\lambda_{1,\pm} = \pm i$  als Nullstellen des charakteristischen Polynoms  $p(\lambda) = (-\lambda)^2 + 1$ , es handelt sich also um einen elliptischen (und damit stabilen) Gleichgewichtspunkt. Das System oszilliert um diesen Punkt.

Am Punkt  $\vec{x}_2^*$  sind  $\lambda_{2,\pm} = \pm 1$  die Nullstellen des charakteristischen Polynoms  $p(\lambda) = (-\lambda)^2 - 1$ , es handelt sich also um einen hyperbolischen (und damit instabilen) Gleichgewichtspunkt.

Eigenvalues of $A$	Name	Flow
$\lambda_1 < 0 < \lambda_2$	Stable node	
$\lambda_1 > \lambda_2 > 0$	Unstable node	
$\lambda_1 = \lambda_2^* = \alpha + i\omega$ $\alpha > 0, \omega < 0$	Unstable spiral point	
$\lambda_1 = \lambda_2^* = i\omega$	Elliptic point	
$\lambda_1 = \lambda_2 < 0$ $b \neq 0$ or $c \neq 0$	Stable Imagocenter node	
$\lambda_1 < 0 < \lambda_2$	Hyperbolic point (unstable)	
$\lambda_1 = \lambda_2 < 0$ $b = c = 0$	Stable star	
$\lambda_1 = \lambda_2 > 0$ $b = c = 0$	Unstable star	
$\lambda_1 = \lambda_2^* = \alpha + i\omega$ $\alpha < 0, \omega < 0$	Stable spiral point	





## Kapitel 4

# Graphen- & Netzwerktheorie

Graphen bilden einen wichtigen Bestandteil der Diskreten Mathematik. Ein Graph ist hierbei eine abstrakte Struktur, in der bestimmte Objekte zusammen mit Verbindungen, die zwischen diesen Objekten bestehen, erfasst werden. Die Objekte nennt man die *Knoten* und die Verbindungen die *Kanten* eines Graphen. Häufig wird ein Graph zeichnerisch veranschaulicht, z.B. in dem Knoten als Punkte und Kanten als Linien dargestellt werden. Anschauliche Beispiele für Graphen sind Streckennetze von Verkehrsmitteln oder Stammbäume. In der *Graphentheorie* werden nun die verschiedenen Eigenschaften von Graphen und ihre Beziehungen zueinander untersucht. Klassische Anwendungen sind hierbei unter anderem Distanz- und Routenbestimmungen (z.B. das „Problem des Handlungsreisenden“) oder Planungsprobleme, die als Probleme der Graphenfärbung formuliert werden können (durch Kanten verbundene Knoten eines Graphen sollen hierbei unterschiedlich gefärbt und die Anzahl der verwendeten Farben gleichzeitig minimiert werden). Da viele graphentheoretische Probleme algorithmisch gelöst und algorithmische Probleme oft auf Graphen zurückgeführt werden können, ist die Graphentheorie auch in der Informatik von großer Bedeutung.

Eine vergleichsweise junge Disziplin, in der die Eigenschaften von komplexen, typischerweise großen Graphen untersucht werden, ist die *Netzwerktheorie*. Die Untersuchung von komplexen Graphen bzw. Netzwerken wurde hierbei anfänglich durch die empirische Auswertung von technischen (z.B. dem Internet oder dem World Wide Web) oder sozialen Netzwerken (z.B. Facebook oder andere Kommunikations-/Kollaborations-Netzwerke) angetrieben. Diese Netzwerke weisen Eigenschaften auf, die in vielen zuvor studierten, einfacheren Graphen nicht existieren und sich in speziellen Verteilungen im Auftreten von Objekten und Verbindungen kennzeichnen. So lassen sich in derartigen Netzwerken bspw. bestimmte Gemeinschaftsstrukturen oder eine ausgeprägte hierarchische Strukturierung der Objekte erkennen. Interessanterweise trifft dies auch auf viele biologische (z.B. metabolische oder genregulatorische) Netzwerke zu, die mutmaßlich auf Anforderungen wie Robustheit, Anpassungsfähigkeit und Modularität in der Evolution ihrer Architektur hinweisen. Bevor wir uns der Graphen- und Netzwerktheorie zuwenden, wollen wir kurz einige Beispiele von unterschiedlichen, vorrangig biologischen Netzwerken betrachten, siehe Abb. 4.1 und 4.2.

### 4.1 Graphentheoretische Grundlagen

Der Ursprung der Graphentheorie geht aus heutiger Sicht auf eine Arbeit von Leonard Euler aus dem Jahre 1735 zu dem sogenannten „Königsberger Brückenproblem“ zurück. Hierbei fragte man sich ob es möglich sei einen Spaziergang durch Königsberg (dem heutigen Kaliningrad) zu führen, bei dem jede der sieben Brücken genau einmal überquert

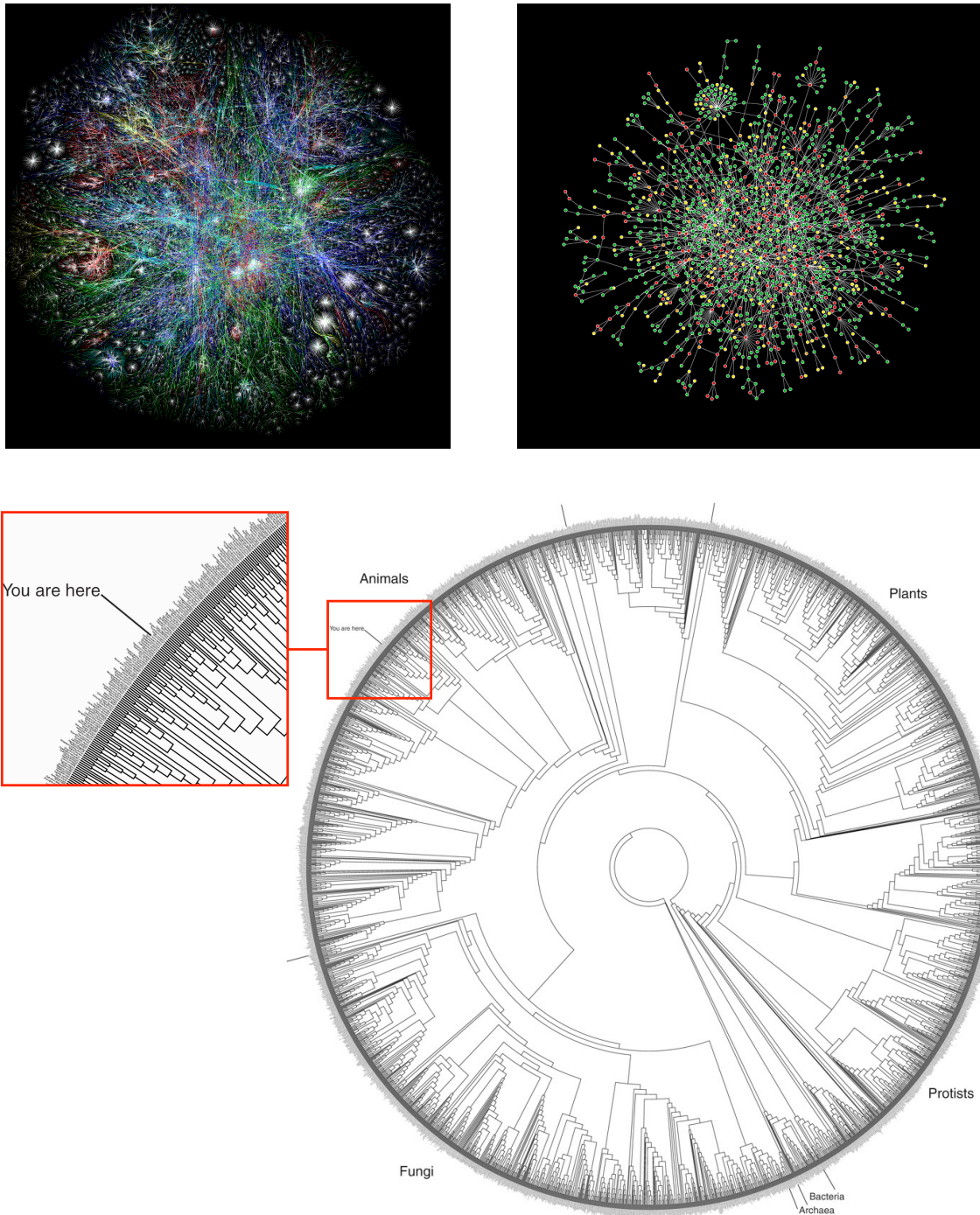


Abbildung 4.1: *Oben links*: Darstellung des weltweiten Internetverkehrs am 15. Januar 2005 (Quelle: Opte Project). *Oben rechts*: Protein-Protein-Interaktionsnetzwerk in *Saccharomyces cerevisiae*. Proteine sind als Knoten und Interaktion als Kanten dargestellt. Farben kennzeichnen den Effekt, den der Verlust des Proteins auf *S. cerevisiae* hat: tödlich (Rot), nicht tödlich (Grün), verlangsamtes Wachstum (Orange), unbekannt (Gelb) (Quelle: H. Jeong, University of Notre Dame). *Unten*: Phylogenetischer „Baum des Lebens“: etwa 3,000 Spezies, basierend auf deren rRNA-Sequenzen (Quelle: D.M. Hillis, D. Zwickl und R. Gutell, University of Texas).

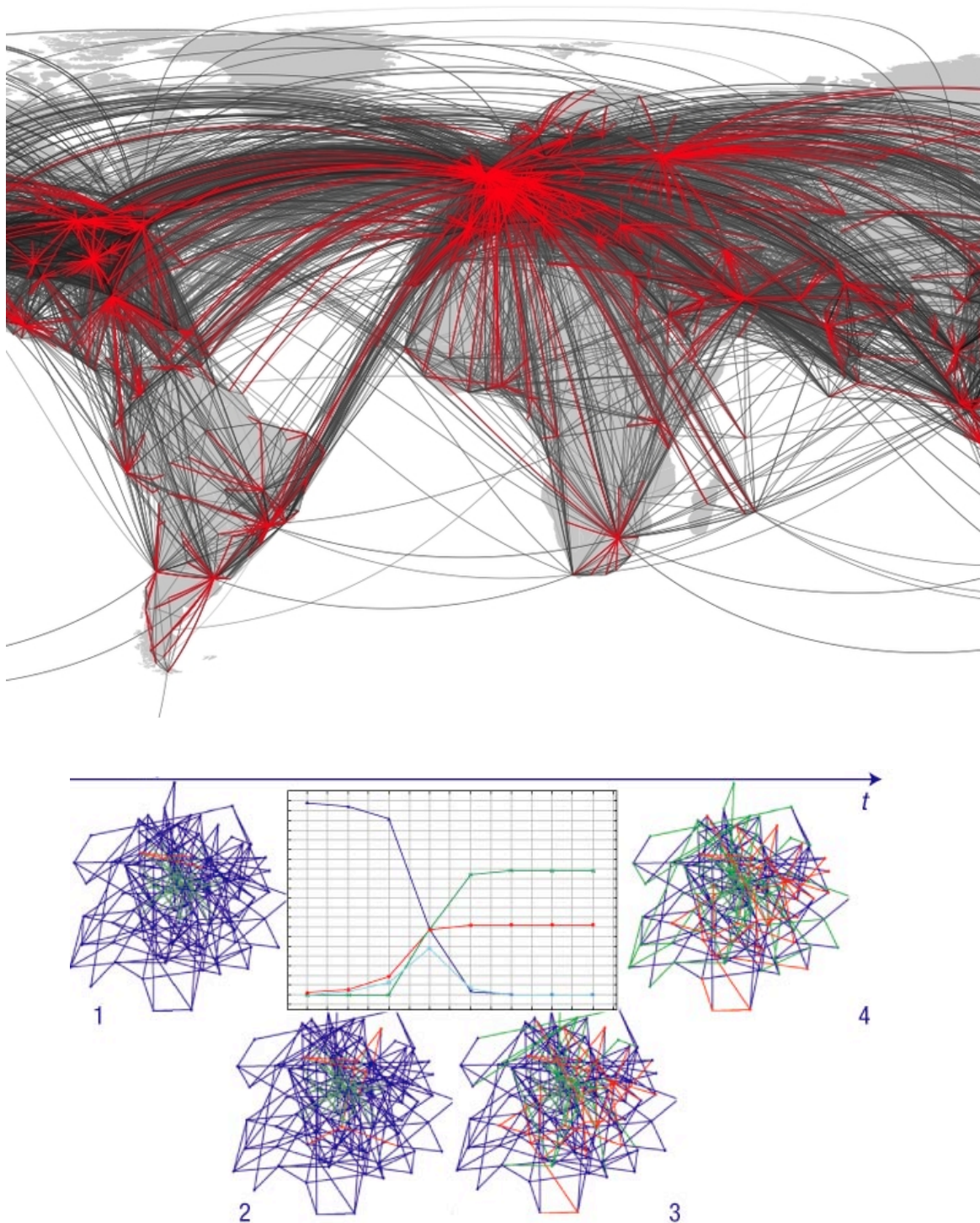


Abbildung 4.2: *Oben*: Darstellung internationaler Fluglinien, Stand: 2012 (Quelle: Research on Complex Systems Group, Northwestern University). *Unten*: Simulation einer Vireninfection in einem Netzwerk. Unterschiedliche Kantenfarbe kennzeichnen ob diese zur Infektion (Rot), teilweisen (Türkis) oder vollständigen (Grün) Immunisierung, oder noch nicht (Blau) genutzt wurde (Quelle: J. Goldenberg et al., Nature Physics 1, p. 184–188, 2005).

wird, siehe Abb. 4.3. Euler erkannte, dass zur Lösung des Problems eine vereinfachende Beschreibung hilfreich ist, die sich auf die entscheidenden strukturellen Eigenschaften des zugrundeliegenden Problems beschränkt; er reduzierte das Problem auf einen Graphen. Auf die Lösung des Königsberger Brückenproblems kommen wir in Abschnitt 4.1.1 zurück.

Wir kommen nun zur formalen Definition eines (endlichen, ungerichteten) Graphen.

**DEFINITION 4.1** (a) *Ein (endlicher) Graph  $G$  ist ein Tupel  $G = (V, E)$ , bestehend aus einer nicht-leeren endlichen Menge  $V$  (den Knoten = vertices) und einer Menge  $E$  (den Kanten = edges) mit Elementen der Form  $\{v_j, v_k\}$  oder  $\{v_i\}$  für  $v_i, v_j, v_k \in V$ , die Verbindungen zwischen zwei Knoten des Graphen darstellen.*

- (b) *Die Knotenanzahl  $n = |V|$  eines Graphen wird als dessen Ordnung und die Kantenanzahl  $m = |E|$  als dessen Größe bezeichnet.*
- (c) *Zwei Knoten  $v_j, v_k \in V$  heißen adjazent oder benachbart, falls sie durch eine Kante verbunden sind, d.h. falls gilt  $\{v_j, v_k\} \in E$ .*
- (d) *Zwei Kanten  $e_i, e_j \in E$  adjazent, wenn sie einen gemeinsamen Knoten besitzen, d.h. falls gilt  $e_i \cap e_j \neq \emptyset$ .*
- (e) *Eine Kante  $e_i \in E$  und ein Knoten  $v_j \in V$  werden als inzident bezeichnet, wenn gilt  $v_j \in e_i$ .*
- (f) *Eine Kante  $e_i \in E$  heißt Schlinge bzw. Loop, falls gilt  $|e_i| = 1$ , also  $e_i = \{v_k\}$  für ein  $v_k \in V$ . Die Kante verbindet dann sozusagen den Knoten  $v_k$  mit sich selbst.*
- (g) *Der Grad  $\text{grad } v_k$  eines Knotens  $v_k \in V$  ist gleich der Anzahl der mit  $v_k$  inzidenten Kanten, wobei Loops doppelt zählen, also*

$$\begin{aligned} \text{grad } v_k = & \#\{e_i \in E \mid e_i \text{ und } v_k \text{ sind inzident, } |e_i| = 2\} \\ & + 2\#\{e_i \in E \mid e_i \text{ und } v_k \text{ sind inzident, } |e_i| = 1\}. \end{aligned} \quad (4.1)$$

**BEMERKUNG 4.2** *Nach obiger Definition 4.1 eines Graphen  $G = (V, E)$  kann dessen Kantenmenge  $E$  auch leer sein, d.h.  $E = \emptyset$  und  $m = 0$ . Solche Graphen werden auch leere Graphen genannt. Der leere Graph mit einem Knoten ( $n = 1$ ) wird als trivialer Graph bezeichnet.*

In der nächsten Definition kommen wir nun zu dem Konzept von Wegen in Graphen, die mehrere Knoten nacheinander längs Kanten verbinden.

**DEFINITION 4.3** (a) *Ein Weg (Kantenzug, Kantenfolge oder Spaziergang) in einem Graphen  $G = (V, E)$  ist eine endliche Folge von (abwechselnd) Knoten und mit den Knoten verbundenen Kanten, wobei das erste und letzte Folgeglied Knoten sind, d.h.*

$$W = (v_0, e_1, v_1, e_2, v_2, \dots, e_\ell, v_\ell) \quad \text{mit} \quad e_i = \{v_{i-1}, v_i\} \quad (i = 1, 2, \dots, \ell),$$

wobei  $v_i \in V$  und  $e_j \in E$ . Ein Weg folgt also beginnend von einem Knoten  $v_0$  adjazenten Kanten in einem Graphen bis zu einem Knoten  $v_\ell$ .

- (b) *Die Anzahl  $\ell$  an durchlaufenen Kanten bezeichnet die Länge des Weges  $W$ , und die Knoten  $v_0$  und  $v_\ell$  werden Endknoten von  $W$  genannt. Knoten, die keine Endknoten sind, nennt man auch innere Knoten des Weges.*
- (c) *Ein Weg  $W = v_0$  mit der Länge  $\ell = 0$  heißt trivialer Weg.*



Wichtige Typen von Wegen sind:

- *Pfade*: Sind sämtliche Knoten eines Weges unterschiedlich, so bezeichnet man diesen als *Pfad*. Der triviale Weg  $W = v_0$  ist auch ein Pfad.
- *Zykel*: Sind die beiden Endknoten eines nicht-trivialen Weges  $W$  ( $\ell > 0$ ) identisch, d.h.  $v_0 = v_\ell$ , so ist  $W$  *geschlossen* und wird als *Zykel* im Graphen bezeichnet. Der *triviale Zykel* mit Länge  $\ell = 1$  ist eine Schlinge. Pfade und Wege mit verschiedenen Endknoten heißen *offen*.
- *Kreise*: Analog zur Definition von Pfaden wird ein nicht-trivialer Zykel mit Länge  $\ell > 1$ , dessen innere Knoten  $v_1, \dots, v_{\ell-1}$  alle unterschiedlich sind, als *Kreis* bezeichnet. Der *triviale Kreis* hat die Länge  $\ell = 2$ .
- *Eulerweg*: Ein Eulerweg ist ein Weg, der jede Kante des Graphen genau einmal durchläuft.
- Ein geschlossener Eulerweg heißt *Eulerkreis*. Entgegen seinem Namen ist der Eulerkreis kein Kreis, sondern ein Zykel, da sich in ihm Knoten wiederholen dürfen.
- *Hamiltonkreis/Hamiltonpfad*: Ein Hamiltonkreis (bzw. Hamiltonpfad) ist ein Kreis (bzw. Pfad) der Länge  $\ell = n = |V|$ , jeder Knoten des Graphen wird also (genau) einmal durchlaufen.

In der folgenden Definition sind einige Eigenschaften von Graphen zusammengefasst.

DEFINITION 4.4 *Ein Graph  $G = (V, E)$  heißt*

- (a) *zusammenhängend, falls für alle Knotenpaare  $v_i, v_k \in V$  ein Weg in  $G$  existiert, der  $v_i$  und  $v_k$  als Endknoten hat.*
- (b) *regulär, falls alle Knoten den selben Grad haben.*
- (c) *Euler-Graph, falls  $G$  einen Euler-Kreis enthält.*

#### 4.1.1 Das Königsberger Brückenproblem

Wir kommen nun zurück zur Diskussion der oben erwähnten Fragestellung von Euler, ob es in Königsberg einen Spaziergang gibt, bei dem jede Brücke genau einmal überquert wird.

Zur Lösung des Königsberger Brückenproblems sind Details wie z.B. Straßen, Gebäude oder sogar die Entfernungen zwischen den unterschiedlichen Stadtteilen irrelevant. Entscheidend ist allein die durch die Brücken gegebene Verbindungsstruktur zwischen den unterschiedlichen Stadtteilen. Diese Struktur kann als ein *Graph* festgehalten werden, siehe Abb. 4.3 (rechts), in dem jeder Stadtteil als ein *Knoten* dargestellt wird. Jede durch eine Brücke gegebene Verbindung zwischen zwei Stadtteilen kann im Graphen als eine Linie (genannt *Kante*) zwischen den entsprechenden Knoten eingezeichnet werden. Das Königsberger Brückenproblem überträgt sich dann zur Frage: „Existiert im Graphen ein Eulerweg, also ein Weg, der jede Kante des Graphen genau einmal enthält?“

Klar ist, dass hierzu jede Brücke (bzw. Kante) überhaupt erreichbar sein muss, d.h. die Brückenstruktur bzw. der Graph muss *zusammenhängend* sein. Zur weiteren Lösung des Problems ist nun die Anzahl an Kanten entscheidend, die an einen jeweiligen Knoten im Graphen grenzen, also sein *Grad*. Ist der Grad z.B. 2, so stellt der Knoten eine Art „Überquerungspunkt“ dar, der durch eine Kante (Brücke) erreicht und durch eine weitere

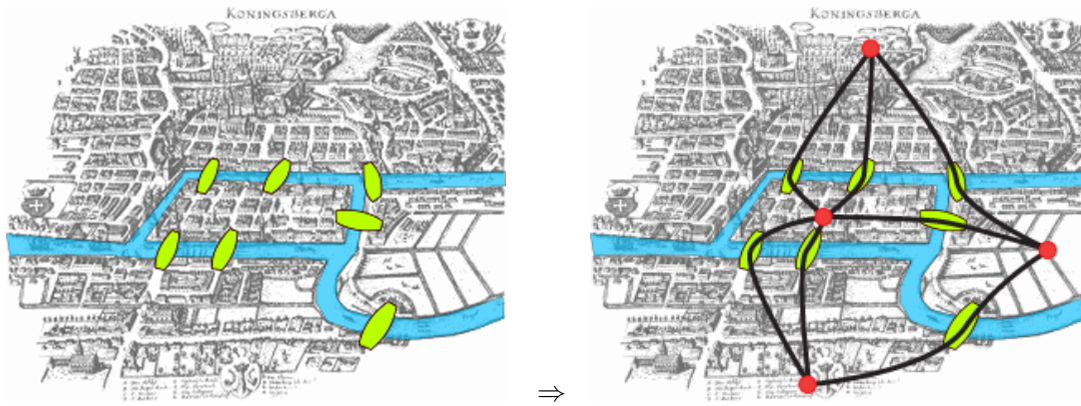


Abbildung 4.3: Das Königsberger Brückenproblem. Links: Eine Karte von Königsberg zu Euler's Zeiten. Durch die Stadt fließt die Pregel (Blau) über die insgesamt sieben Brücken (Grün) verlaufen. Rechts: Die Verbindungsstruktur der Stadt kann als Graph beschrieben werden, in dem Knoten (Rot) den getrennten Stadtteilen und Kanten (Schwarz) den verbindenden Brücken entsprechen.

verlassen werden kann. Ist der Grad eines Knoten grösser als 2 aber immer noch eine gerade Zahl  $m = 2n$  (mit  $n \in \mathbb{N}$ ), so ändert sich an dieser Situation qualitativ nichts, außer dass dann  $n$  Paar Brücken existieren und der Knoten somit  $n$ -mal überquert werden kann. Im Gegensatz dazu stellen Knoten mit ungeradem Grad  $k = 2n + 1$ , nachdem sie  $n$ -mal überquert wurden, eine Art „Sackgasse“ dar und können somit nur Anfangs- oder Endknoten im gesuchten Königsberger Spaziergang sein.

Diese Überlegungen liefern in der Tat bereits die Lösung des Problems!

Allgemein gibt es in einem zusammenhängenden Graphen zwei Möglichkeiten für den Verlauf des Spaziergangs: Entweder (a) Anfangs- und Endpunkt sind identisch (der Spaziergang ist ein Rundgang) oder (b) Anfangs- und Endpunkt sind unterschiedlich (der Spaziergang ist kein Rundgang). Soll nun jede Brücke/Kante genau einmal genutzt werden, so müssen im Graphen also zusätzlich entweder (a) alle Knoten Überquerungspunkte oder (b) genau zwei Knoten Sackgassen sein. In allen anderen Fällen würde der Spaziergang nämlich früher oder später in einer Sackgasse enden, die nicht verlassen werden könnte ohne eine bereits genutzte Brücke/Kante ein weiteres mal zu überqueren. Somit existiert ein Spaziergang mit der gesuchten Eigenschaft nur dann, wenn der Graph zusammenhängend ist und entweder (a) alle Knoten einen geraden Grad oder (b) genau zwei Knoten einen ungeraden Grad besitzen.

Genauer gelten sogar die folgenden Äquivalenzen, die Gegenrichtung kann mit vollständiger Induktion gezeigt werden.

**SATZ 4.5** Sei  $G$  ein zusammenhängender Graph. Dann gilt:

- (a) Es gibt in  $G$  einen Euler-Kreis  $\iff$  alle Knotengrade in  $G$  sind gerade.
- (b) Es gibt in  $G$  einen offenen Euler-Weg  $\iff$   $G$  hat genau zwei Knoten mit ungeradem Grad.

*Beweis.* i) „ $\implies$ “:

Nach Voraussetzung gibt es einen Eulerkreis. Immer wenn dieser Kreis durch einen beliebigen Knoten  $v$  läuft, trägt er zwei zu den (schon genutzten) zu  $v$  inzidenten Kanten bei, da jede Kante nur einmal genutzt werden kann. Damit ist der Grad von  $v$  gerade, denn vom Eulerkreis nicht durchlaufene Kanten darf es nach Definition auch nicht geben (wenn

der Eulerkreis  $v$   $k$ -mal trifft, dann hat  $v$  den Grad  $2k$ ).

„ $\Leftarrow$ “:

Wir beweisen diese Richtung mit vollständiger Induktion in der Kantenzahl  $m$ .

*Behauptung:* Für alle  $m \in \mathbb{N}$  gilt: In jedem Graphen  $G = (V, E)$  mit  $|E| = m$  und  $\text{grad } v$  gerade gibt es einen Eulerkreis.

*Bew.:* Induktionsverankerung (Behauptung ist wahr für  $m = 0$ ):

Ein zusammenhängender Graph ohne Kanten kann nur einen Knoten mit Knotengrad Null besitzen, der gesuchte Eulerkreis ist der triviale Weg.

Induktionsschritt (gilt die Behauptung für alle  $k \in \mathbb{N}, k < m$ , dann gilt sie auch für  $m$ ):

Wir nehmen an,  $m$  sei so, dass die Behauptung für alle  $k < m$  gilt (nach Induktionsverankerung gibt es ein solches  $m$ , nämlich  $m = 1$ ). Sei nun  $G$  ein Graph mit  $m > 0$  Kanten, bei dem alle Knotengrade gerade sind (d.h. für jeden Knoten  $v_i \in V$  gibt es ein  $k_i \in \mathbb{N}$ , so dass gilt  $\text{grad } v_i = 2k_i$ ). Da  $G$  nach Voraussetzung zusammenhängend ist, folgt  $k_i > 0$  für alle  $i = 1, \dots, |V|$  (wäre ein Knotengrad null, dann wäre dieser Knoten isoliert). Nun unterscheiden wir zwei Fälle:

Fall 1:  $G$  enthält Schlingen: Entfernen wir eine Schlinge, dann erhalten wir einen Graphen mit Kantenzahl  $m - 1$ , nach Induktionsvoraussetzung enthält dieser Graph einen Eulerkreis. Dann enthält aber auch der ursprüngliche Graph mit der Schlinge einen Eulerkreis, indem wir von dem Knoten mit der Schlinge den Eulerkreis durchlaufen und am Ende noch einmal die Schlinge ansetzen.

Fall 2:  $G$  enthält keine Schlingen: Dann finden wir einen Kreis  $C$  in  $G$ : wir starten bei einem beliebigen Knoten  $v_1$  und laufen auf einer inzidenten Kante  $e_2$  zu einem adjazenten Knoten  $v_2$ . Die Kante  $e_2$  betrachten wir nun als „benutzt“. Da  $\text{grad } v_2 = 2k_2$ , gibt es bei  $v_2$  eine noch „unbenutzte“ inzidente Kante  $e_2$ . Auf dieser laufen wir zu einem Knoten  $v_3$ , der auch wieder eine unbenutzte Kante haben muss usw. So können wir nacheinander Knoten ablaufen, bis wir zum ersten mal wieder auf  $v_1$  treffen (auch  $v_1$  musste ja noch eine unbenutzte Kante haben). Entfernen wir nun die Kanten dieses Kreises aus dem Graphen, dann erhalten wir einen (evtl. nicht mehr zusammenhängenden) Graphen  $\tilde{G}$  mit kleinerer Kantenzahl. Da wir beim Entfernen des Kreises von jedem Knoten eine gerade Anzahl von Kanten wegstreichen, haben die Zusammenhangskomponenten  $\tilde{G}_1, \dots, \tilde{G}_r$  von  $\tilde{G}$  wieder alle nur Knoten mit gerader Knotenzahl. Nach Induktionsvoraussetzung gibt es also in jeder dieser Zusammenhangskomponenten einen Eulerkreis. Außerdem muss jedes  $\tilde{G}_i$  mindestens einen Knoten aus  $C$  enthalten. Damit erhalten wir aber in unserem ursprünglichen Graphen  $G$  einen Eulerkreis, indem wir bei einem Knoten  $v_1$  des Kreises  $C$  starten und den Kreis  $C$  ablaufen, wobei wir bei jedem Knoten, der zu einer der Zusammenhangskomponenten gehört, abbiegen und den Eulerkreis dieser Komponente einfügen. So entsteht der gesuchte Eulerkreis in  $G$ .

ii) „ $\Rightarrow$ “: Wir fügen zu dem Graphen mit dem Eulerweg eine Kante hinzu, die die beiden Endpunkte verbindet. Damit entsteht ein Eulerkreis, der neue Graph kann also nach i) nur gerade Knotengrade haben. Da sich durch das Hinzufügen der Kante der Knotengrad der beiden Endpunkte um jeweils 1 erhöht hat, muss dieser vorher ungerade gewesen sein, alle anderen Knoten müssen geraden Grad haben.

„ $\Leftarrow$ “: Zwischen den zwei Knoten mit ungeradem Grad setzen wir eine zusätzliche Kante ein, damit sind nun alle Knotengrade gerade, es gibt also nach i) einen Eulerkreis. Also muss der Weg ohne diese zusätzliche Kante ein offener Eulerweg gewesen sein.  $\square$

Betrachten wir nun den zu Königsberg gehörigen Graphen, siehe Abb. 4.3 (rechts). Dieser ist zwar zusammenhängend, aber der Grad von jedem der 4 Knoten ist ungerade und folglich kann kein Spaziergang existieren, bei dem jede Brücke genau einmal überquert

wird (es gibt keinen Eulerkreis).

Ein ähnliches aber wesentlich komplexeres Problem ist die Frage nach der Existenz eines *Hamiltonkreises*. Ein Hamiltonkreis ist ein Kreis, der sämtliche Knoten eines Graphen genau einmal enthält. Ein Pfad mit dieser Eigenschaft wird *Hamiltonpfad* genannt (siehe Abb. 4.4).

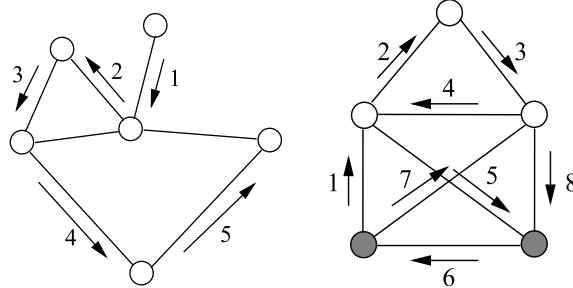


Abbildung 4.4: Links: Ein Hamiltonpfad. Rechts: Ein Eulerweg.

### 4.1.2 Einfache Graphen

Wir kommen nun zu spezielleren Arten von Graphen, insbesondere zu einfachen Graphen.

DEFINITION 4.6 (a) Ein einfacher Graph ist ein Graph  $G = (V, E)$ , der

- (a) keine Schlingen (also keine Kanten  $e \in E$  mit  $|e| = 1$ )
- (b) keine mehrfachen Kanten zwischen zwei Knoten (also keine Kanten  $e_i, e_j \in E$  mit  $i \neq j$  und  $e_i = e_j$ )

enthält. Zur Unterscheidung wird ein Graph, der diese Bedingung nicht erfüllt, auch als Multigraph bezeichnet.

- (b) Ein einfacher Graph heißt vollständig, falls alle Knoten benachbart sind. Ein vollständiger Graph der Ordnung  $|V| = n$  wird oft mit  $K_n$  bezeichnet.

BEMERKUNG 4.7 (a) In einem einfachen Graphen ist der maximale Grad eines Knotes  $|V| - 1$ .

- (b) Da adjazente Knoten in einfachen Graphen durch genau eine Kante miteinander verbunden sind, ist ein Weg  $W = (v_0, e_1, v_1, e_2, v_2, \dots, e_l, v_l)$  in einem einfachen Graphen durch Angabe seiner Knoten  $v_0, v_1, v_2, \dots, v_l$  bereits eindeutig spezifiziert.

Bei einem einfachen Graphen ist die maximal mögliche Anzahl der Kanten (also die Größe) schon durch die Zahl der Knoten (also die Ordnung) festgelegt. Genauer gilt:

SATZ 4.8 Sei  $G = (V, E)$  ein vollständiger Graph der Ordnung  $|V| = n \geq 2$  und der Größe  $|E| = m$ . Dann gilt

$$m = \binom{n}{2} = \frac{n(n-1)}{2}.$$

*Beweis.* Mit vollständiger Induktion nach  $n$ .

Beh.: Für alle  $n \geq 2$  gilt  $A(n) : \Leftrightarrow m = \binom{n}{2}$ .

Induktionsverankerung ( $A(2)$  ist wahr):

In einem einfachen vollständigen Graphen mit zwei Knoten gibt es genau eine Kante (nämlich die Kante zwischen den zwei Knoten), also ist  $m = 1$ . Andererseits gilt  $\binom{2}{2} =$



$2/2 = 1$  und damit ist die Behauptung wahr für  $n = 2$ .

Induktionsschritt (für alle  $n \in \mathbb{N}, n \geq 2$  gilt  $A(n) \Rightarrow A(n+1)$ ):

Falls  $A(n)$  falsch ist, dann ist die Implikation immer richtig, es ist also nichts zu zeigen. Sei also  $n \in \mathbb{N}$  so gewählt, dass  $A(n)$  wahr ist (nach Induktionsverankerung gibt es ein solches  $n$ ). Dann ist zu zeigen, dass auch  $A(n+1)$  wahr ist.

Wir betrachten zunächst den vollständigen Graphen  $K_n$  der Ordnung  $n$ , der nach obiger Annahme also  $\frac{n(n-1)}{2}$  Kanten hat. Um nun zum vollständigen Graphen  $K_{n+1}$  der Ordnung  $n+1$  zu kommen, müssen wir einen Knoten hinzufügen (den  $(n+1)$ -ten Knoten) und diesen mit allen  $n$  anderen Knoten verbinden. Dabei entstehen also  $n$  neue Kanten (die  $n$  Kanten zwischen dem neuen Knoten mit den  $n$  ursprünglichen Knoten). Damit hat also der so erweiterte Graph die ursprünglichen  $\frac{n(n-1)}{2}$  Kanten plus die  $n$  neuen Kanten, also insgesamt

$$\frac{n(n-1)}{2} + n = \frac{n(n-1) + 2n}{2} = \frac{n^2 - n + 2n}{2} = \frac{n^2 + n}{2} = \frac{(n+1)n}{2} = \binom{n+1}{2}$$

Kanten und damit ist auch  $A(n+1)$  wahr.  $\square$

**BEMERKUNG 4.9** Ein einfacher Graph  $G$  mit Ordnung  $n$  und Größe  $m$  wird oft kurz mit  $G(n, m)$  bezeichnet. Aus Satz 4.8 folgt unmittelbar, dass für einfachen Graphen immer gilt  $m \leq \binom{n}{2}$ .

Weitere wichtige Beispiele von einfachen Graphen sind (siehe auch Abb. 4.5):

**DEFINITION 4.10** Ein einfacher Graph  $G = (V, E)$  heißt

- (a) Baum, falls er zusammenhängend und kreisfrei ist (in ihm also keine Kreise existieren). Die Knoten eines Baumes, die nur einen einzigen Nachbarknoten besitzen, werden Blätter genannt.
- (b) Wald, falls er kreisfrei ist (er kann dann also aus mehreren Bäumen bestehen).
- (c)  $k$ -partit, falls sich seine Knotenmenge  $V$  in  $k$  disjunkte Teilmengen  $V_1, V_2, \dots, V_k$  zerlegen lässt, so dass sämtliche Knoten einer Teilmenge nicht adjazent sind.  
Für den Fall  $k = 2$  spricht man auch von bipartiten Graphen.
- (d) vollständig  $k$ -partit, falls jeder Knoten einer Teilmenge mit sämtlichen Knoten der anderen Teilmengen verbunden ist.

**BEMERKUNG 4.11** Ein Baum mit  $n$  Knoten hat immer  $n - 1$  Kanten und jeder Baum besitzt mindestens ein Blatt.

Es ist oft naheliegend und hilfreich einen Knoten in einem Baum als dessen Wurzel zu betrachten. Bäume mit einer festen Wurzel werden *verwurzelte Bäume* genannt. Zum Beispiel bildet Fibonacci's Wachstumsmodell einer Kaninchenpopulation einen verwurzelten Baum, in dem das initiale neugeborene Kaninchenpaar der Wurzel entspricht (siehe Abb. 1.2).

Ein Baum ist immer bipartit, jedoch ist nicht jeder bipartite Graph auch ein Baum. Jeder  $k$ -partite Graph ist auch  $(k+i)$ -partit, mit  $i \in \mathbb{N}$  und  $(k+i) \leq n$ . Ein vollständig  $k$ -partiter Graph ist nicht vollständig im Sinn von Definition 4.6.

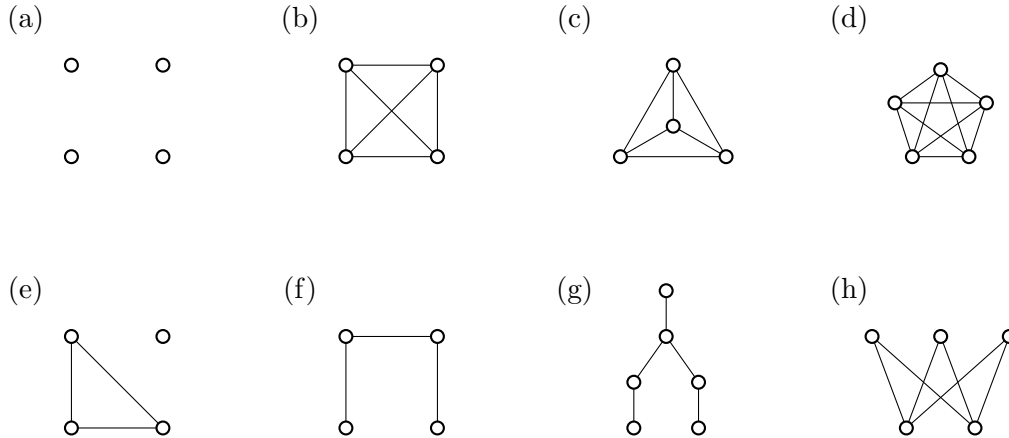


Abbildung 4.5: Einige einfache Graphen: (a) der leere Graph mit Ordnung 4, (b) der vollständige Graph  $K_4$ , (c) eine andere Darstellung von  $K_4$ , (d) der vollständige Graph  $K_5$ , (e) ein nicht-zusammenhängender Graph mit Ordnung 4 und Größe 3, (f) ein zusammenhängender Graph mit Ordnung 4 und Größe 3, (g) ein Baum mit Ordnung 6 und Größe 5, (h) der vollständig bipartite Graph mit Ordnung 5 und Größe 6.

### 4.1.3 Weitere Klassen von Graphen

Anhand der zulässigen Kantenmenge haben wir bereits zwischen einfachen Graphen und Multigraphen unterschieden, siehe Def. 4.6. Nun lassen sich zu den bisher betrachteten Graphen noch weitere Strukturen hinzunehmen, so kann z.B. den Kanten eine Richtung zugeordnet werden, oder auch eine Zahl (die dann z.B. als Länge/Entfernung, Leitfähigkeit, Kapazität... interpretiert werden kann) oder beides.

**DEFINITION 4.12** (a) Ein gewichteter Graph  $G_w = (V, E, w)$  ist ein Graph  $G = (V, E)$  zusammen mit einer Abbildung  $w : E \rightarrow \mathbb{R}$ , die jeder Kante eine reelle Zahl (Wert, Gewicht) zuordnet.

(b) Ein gerichteter Graph  $\vec{G}$  ist ein Tupel  $\vec{G} = (V, \vec{E})$ , wobei  $V$  eine nichtleere, endliche Menge ist (die Knotenmenge) und  $\vec{E} \subset V \times V$ , jede Kante  $e \in \vec{E}$  ist also ein geordnetes Paar der Form  $e = (v_i, v_j)$  mit  $v_j, v_k \in V$ . Hierbei legt die Reihenfolge der Knoten die Richtung fest, d.h.  $e$  zeigt von  $v_i$  nach  $v_j$ , und wird graphisch deshalb als Pfeil dargestellt.

Zur Unterscheidung werden Graphen in denen, wie zuvor, Kanten nicht gerichtet sind auch als ungerichtete Graphen bezeichnet.

(c) Ein orientierter Graph ist ein gerichteter Graph, der weder Schlingen noch mehrfachen Kanten zwischen zwei Knoten (unabhängig von deren Richtung) enthält. Ein orientierter Graph ist also das gerichtete Analogon eines einfachen Graphen.

(d) Ein gerichteter, gewichteter Graph  $\vec{G}_w = (V, \vec{E}, w)$  ist ein gerichteter Graph  $\vec{G} = (V, \vec{E})$  zusammen mit einer Abbildung  $w : \vec{E} \rightarrow \mathbb{R}$ .

Für gerichtete Graphen führen wir noch weitere Definitionen ein:

**DEFINITION 4.13** Sei  $\vec{G} = (V, \vec{E})$  ein gerichteter Graph mit  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ .

(a) Dann ist der Eingangsgrad  $\text{grad}_{\text{ein}} v_i$  eines Knotens gegeben durch die Anzahl der Kanten, die nach  $v_i$  zeigen, der Ausgangsgrad  $\text{grad}_{\text{aus}} v_i$  eines Knotens  $v_i$  bezeichnet

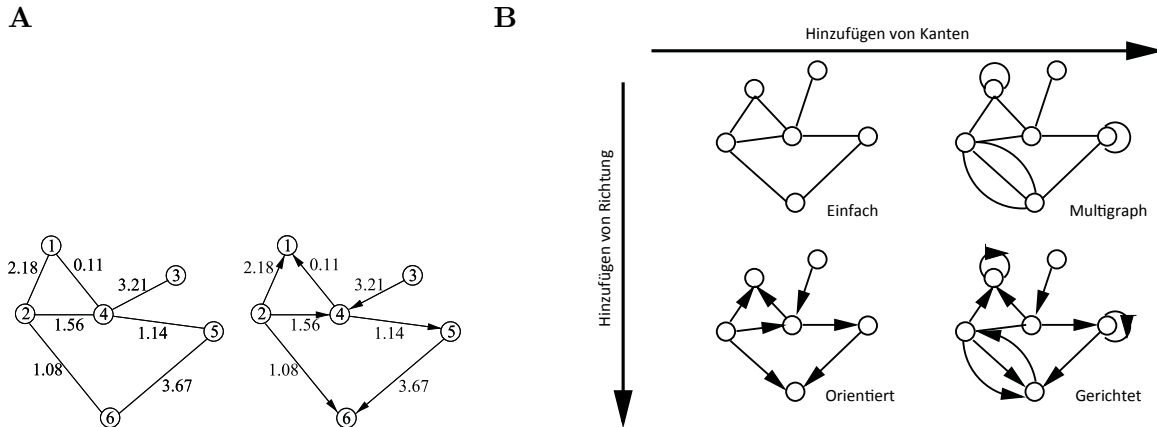


Abbildung 4.6: Graphklassen: Ein einfacher ungerichteter Graph und ein orientierter Graph mit jeweiligen Kantengewichten (A). Erweiterungsmöglichkeiten von einfachen Graphen durch Hinzufügen von Kanten bzw. Richtung (B). (Quelle: G. Caldarelli, *Scale-Free Networks: Complex Webs in Nature and Technology*, Oxford University Press, 1. Auflage, 2007.)

die Anzahl der Kanten, die von  $v_i$  weg zeigen, d.h.

$$\text{grad}_{\text{ein}} v_i := \#\{e_k \in \vec{E} \mid \exists v_\ell \in V : e_k = (v_\ell, v_i)\}$$

$$\text{grad}_{\text{aus}} v_i := \#\{e_k \in \vec{E} \mid \exists v_\ell \in V : e_k = (v_i, v_\ell)\}.$$

- (b)  $\vec{G}$  heißt zusammenhängend, wenn der zugrundeliegende ungerichtete Graph zusammenhängend ist.
- (c) Ein Weg der Länge  $\ell$  in  $\vec{G}$  ist eine endliche Folge  $W = (v_0, e_1, v_1, e_2, v_2, \dots, e_\ell, v_\ell)$  von abwechselnd Knoten  $v_i \in V$  und Kanten  $e_j \in \vec{E}$ , so dass gilt  $e_j = (v_{j-1}, v_j)$  für alle  $j = 1, \dots, \ell$  (der Weg muss also stets der vorgegebenen Kantenrichtung folgen).
- (d)  $\vec{G}$  heißt stark zusammenhängend, falls es für alle Knotenpaare  $v_j, v_k \in V$  einen Weg gibt, der diese also Endpunkte hat.

Analog zur Definition des Eingangs- und Ausgangsgrades können wir bei gewichteten (gerichteten) Graphen einen gewichteten (Eingangs- und Ausgangs)-Knotengrad definieren:

DEFINITION 4.14 (a) Sei  $G_w = (V, E, w)$  ein gewichteter Graph. Dann ist der gewichtete Grad  $\text{grad}_w v$  eines Knotens  $v \in V$  gegeben durch die Summe der Gewichte an zu  $v$  inzidenten Kanten, also

$$\text{grad}_w v := \sum_{e \text{ inzident zu } v} w(e).$$

- (b) Sei  $\vec{G}_w = (V, \vec{E}, w)$  ein gewichteter gerichteter Graph. Dann ist der gewichtete Eingangsgrad  $\text{grad}_{\text{ein},w} v$  eines Knotens  $v \in V$  gegeben durch die Summe der Gewichte an Kanten, die nach  $v$  zeigen, der gewichtete Ausgangsgrad  $\text{grad}_{\text{aus},w} v$  eines Kno-

tens  $v$  bezeichnet die Summe der Gewichte an Kanten, die von  $v$  weg zeigen, d.h.

$$\begin{aligned} \text{grad}_{\text{ein},w} v &:= \sum_{\{e_k \in \vec{E} \mid \exists v_\ell \in V : e_k = (v_\ell, v)\}} w(e_k) \\ \text{grad}_{\text{aus},w} v &:= \sum_{\{e_k \in \vec{E} \mid \exists v_\ell \in V : e_k = (v, v_\ell)\}} w(e_k). \end{aligned}$$

Für gewichtete (gerichtete) Graphen gibt es viele Anwendungen. Eines der bekanntesten ist die Frage nach dem kürzesten Weg für einen Handlungsreisenden, der bestimmte Orte (in beliebiger Reihenfolge) aufsuchen muss (traveling salesman problem). Die Orte sind Knoten, die Gewichte an den Kanten Entfernungen zwischen den Orten. Ist  $A$  der Wohnort (=Knoten) des Reisenden, dann wird der kürzeste (im Sinne der Gewichte = Entfernungen) Weg gesucht, der in  $A$  beginnt und endet und bei dem jeder Knoten mindestens einmal aufgesucht.

## 4.2 Matrixdarstellung von Graphen

Graphen lassen sich nicht nur zeichnerisch, sondern auch mithilfe von Matrizen repräsentieren. Dies erlaubt unter anderem den Einsatz von Methoden der linearen Algebra zur Untersuchung der Eigenschaften von Graphen. Die *Adjazenzmatrix* (Nachbarschaftsmatrix)  $\mathbf{A}_G$  eines Graphen  $G$  mit  $n$  Knoten ist eine  $n \times n$ -Matrix, die die Anzahl an Kanten zwischen adjazenten Knoten in  $G$  festhält. Das heißt, wenn wir die Knoten von  $G$  durchnummerieren, so ist der Eintrag  $a_{ij}$  in der  $i$ -ten Zeile und  $j$ -ten Spalte von  $\mathbf{A}_G$  gleich  $k$ , wenn vom  $i$ -ten zum  $j$ -ten Knoten genau  $k$  Kanten verlaufen. Existiert keine Kante, so ist der Eintrag gleich 0.

DEFINITION 4.15 (a) Sei  $G = (V, E)$  ein Graph mit  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ . Dann ist die Adjazenz-Matrix  $\mathbf{A}_G$  eine  $n \times n$ -Matrix mit den Einträgen

$$a_{jk} = \#\{e_i \in E \mid e_i = \{v_j, v_k\}\},$$

das Matrixelement  $a_{jk}$  gibt also die Anzahl der Kanten zwischen den Knoten  $v_j$  und  $v_k$  an.

(b) Sei  $\vec{G} = (V, \vec{E})$  ein gerichteter Graph mit  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ . Dann ist die Adjazenz-Matrix  $\mathbf{A}_{\vec{G}}$  eine  $n \times n$ -Matrix mit den Einträgen

$$a_{jk} = \#\{e_i \in E \mid e_i = (v_j, v_k)\},$$

das Matrixelement  $a_{jk}$  gibt also die Anzahl der Kanten an, die vom Knoten  $v_j$  auf den Knoten  $v_k$  zeigen.

(c) Sei  $G_w = (V, E, w)$  ein gewichteter Graph mit  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ . Dann ist die gewichtete Adjazenz-Matrix  $\mathbf{A}_{G_w}^w$  eine  $n \times n$ -Matrix mit den Einträgen

$$a_{jk}^w = \sum_{\{v_j, v_k\} \in E} w(\{v_j, v_k\}),$$

das Matrixelement  $a_{jk}^w$  gibt also die Summe der Gewichte der Kanten zwischen den Knoten  $v_j$  und  $v_k$  an.

(d) Sei  $\vec{G}_w = (V, \vec{E}, w)$  ein gerichteter, gewichteter Graph mit  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ . Dann ist die gewichtete Adjazenz-Matrix  $\mathbf{A}_{\vec{G}_w}^w$  eine  $n \times n$ -Matrix mit den Einträgen

$$a_{jk}^w = \sum_{(v_j, v_k) \in \vec{E}} w((v_j, v_k)),$$

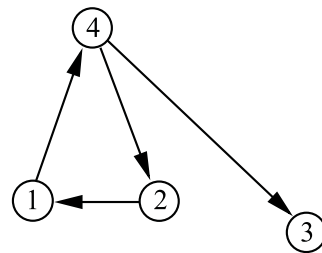
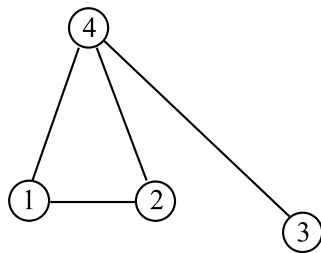
das Matrixelement  $a_{jk}^w$  gibt also die Summe der Gewichte der Kanten an, die vom Knoten  $v_j$  auf den Knoten  $v_k$  zeigen.

Es folgt, dass die Adjazenzmatrix eines ungerichteten Graphen immer symmetrisch ist. Dies gilt im Allgemeinen nicht für gerichtete Graphen. Die Diagonaleinträge von einfachen und orientierten Graphen sind immer gleich Null, wie in obigen Beispielen, da Schlingen hier ausgeschlossen sind. Bei Multigraphen trifft dies im Allgemeinen nicht zu. In Multigraphen sind des Weiteren auch Einträge  $a_{ij} > 1$  möglich, da mehrfache Kanten zwischen zwei Knoten zugelassen sind.

Nachfolgend sind die Adjazenzmatrizen von zwei Graphen dargestellt:

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

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



Eine andere Darstellung ist über die *Inzidenzmatrix*  $\mathbf{B}$  eines Graphen  $G$  gegeben, in der jedem Knoten eine Zeile und jeder Kante eine Spalte zugeordnet wird. Die  $n \times m$  Einträge  $b_{ij}$  einer Inzidenzmatrix halten dann fest ob ein Knoten  $v_i$  in einer Kante  $e_j$  enthalten ist, wobei z.B. für ungerichtete Graphen

$$b_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{wenn } v_i \in e_j, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{4.2}$$

Eine Darstellung mit Inzidenzmatrizen hat sich zwar für verschiedene theoretische Betrachtungen als nützlich erwiesen, ist aber für die meisten Anwendungen eher ungeeignet.

### 4.2.1 Anwendungen der Adjazenzmatrix

Im Weiteren betrachten wir als erste Anwendungsmöglichkeiten der Adjazenzmatrix die Berechnung von Knotengraden und der Anzahl an möglichen Wegen zwischen zwei Knoten.

Für ungerichtete Graphen  $G = (V, E)$  mit  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$  ergibt sich der Knoten-grad  $\text{grad } v_j$  des Knotens  $v_j$  mittels der Adjazenzmatrix  $\mathbf{A}_G$  als  $i$ -te Zeilen- bzw. Spalten-summe:

$$\text{grad } v_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} + 2a_{ii} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n a_{ki} + 2a_{ii}. \tag{4.3}$$

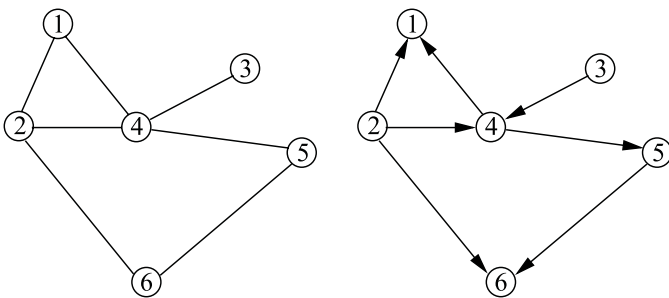
Für gewichtete ungerichtete Graphen  $G_w$  ergibt sich mit (4.3) der gewichtete Knotengrad  $\text{grad}_w v_i$ , wenn wir die Matrixelemente  $a_{ij}$  durch die Elemente  $a_{ij}^w$  der gewichteten der gewichteten Adjazenzmatrix  $\mathbf{A}_{G_w}$  ersetzen.

In gerichteten Graphen  $\vec{G}$  lassen sich *Eingangsgrad*  $\text{grad}_{\text{ein}} v_i$  und *Ausgangsgrad*  $\text{grad}_{\text{aus}} v_i$  mittels der Adjazenzmatrix  $\mathbf{A}_{\vec{G}}$  bestimmen durch Summation der  $i$ -ten Spalte bzw. Zeile:

$$\text{grad}_{\text{ein}} v_i = \sum_{j=1}^n a_{j,i} \quad \text{und} \quad \text{grad}_{\text{aus}} v_i = \sum_{j=1}^n a_{i,j}. \quad (4.4)$$

In gewichteten gerichteten Graphen  $\vec{G}_w$  ergibt sich analog zu oben aus (4.4) wieder der gewichtete Ein- und Ausgangsgrad von  $v_i$ , wenn wieder statt  $a_{ij}$  die Elemente  $a_{ij}^w$  der gewichteten Adjazenzmatrix  $\mathbf{A}_{\vec{G}_w}$  verwendet werden.

Betrachten wir wieder einige Beispiele.



**BEISPIEL 4.16** Im ungerichteten Graphen (links) hat der Knoten 4 den Grad  $k(4) = 4$ . Im orientierten Graphen (rechts) hat der Knoten 4 als Eingangsgrad  $\text{grad}_{\text{ein}}(4) = 2$  und als Ausgangsgrad  $\text{grad}_{\text{aus}}(4) = 2$ . Sind die Kanten wie in Abb. 4.6A gewichtet, ergibt sich im ungerichteten Graphen  $\text{grad}^w(4) = 6,02$  und im orientierten Graphen  $\text{grad}_{\text{ein}}^w(4) = 4,77$  und  $\text{grad}_{\text{aus}}^w(4) = 1,25$ .

Wir kommen nun zur Berechnung der Anzahl an Wegen einer vorgegebenen Länge  $L$  zwischen zwei Knoten. Hierzu lässt sich zunächst unmittelbar festhalten, dass nach Definition der  $(i, j)$ -te Eintrag der Adjazenzmatrix  $\mathbf{A}_G$  eines Graphen  $G$  die Anzahl an unterschiedlichen Wegen der Länge  $L = 1$  (den Kanten) von einem Knoten  $v_i$  zu einem Knoten  $v_j$  in  $G$  angibt.

Die Anzahl an längeren Wegen ( $L > 1$ ) von  $v_i$  zu  $v_j$  ergibt sich aus den möglichen Kombinationen zwischen adjazenten Kanten in  $G$ , welche, wie wir in folgendem Satz festhalten und anschließend beweisen wollen, anhand der Adjazenzmatrix  $\mathbf{A}_G$  direkt berechnet werden kann.

**SATZ 4.17** Die Anzahl an unterschiedlichen Wegen der Länge  $L \in \mathbb{N}$  von einem Knoten  $v_i$  zu einem Knoten  $v_j$  in einem Graphen  $G = (V, E)$  mit  $V = (v_1, v_2, \dots, v_n)$  ist durch den  $(i, j)$ -ten Eintrag in der  $L$ -ten Potenz  $\mathbf{A}_G^L$  der Adjazenzmatrix  $\mathbf{A}_G$  von  $G$  gegeben.

*Beweis.* Wir beweisen den Satz mittels Vollständiger Induktion.

Für  $L = 1$  gilt die Aussage nach Definition der Adjazenzmatrix  $\mathbf{A}_G$  von  $G$ , da ein Weg der Länge 1 gerade durch eine Kante zwischen  $v_i$  und  $v_j$  gegeben ist.

Diesem Induktionsanfang folgend, müssen wir nun im Induktionsschritt die Gültigkeit folgender Hypothese zeigen: Wenn  $\mathbf{A}_G^k$  die Anzahl an unterschiedlichen Wegen der Länge  $k \geq 1$  angibt, so sind in  $\mathbf{A}_G^{k+1}$  die Anzahl an unterschiedlichen Wegen der Länge  $k + 1$  angegeben.

Sei  $a_{ij}$  der  $(i, j)$ -te Eintrag von  $\mathbf{A}_G$ ,  $b_{ij}$  der  $(i, j)$ -te Eintrag von  $\mathbf{A}_G^k$  und  $c_{ij}$  der  $(i, j)$ -te Eintrag von  $\mathbf{A}_G^{k+1}$ . Da  $\mathbf{A}_G^{k+1} = \mathbf{A}_G \cdot \mathbf{A}_G^k$ , gilt gemäß den Regeln der Matrizenmultiplikation

$$c_{ij} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \dots + a_{in}b_{nj} = \sum_{h=1}^n a_{ih}b_{hj}. \tag{4.5}$$

Nach Definition entspricht  $a_{ih}$  hierbei wieder der Anzahl an Kanten von  $v_i$  zu einem Knoten  $v_h$  ( $h = 1, \dots, n$ ) in  $G$  und, nach Induktionsannahme, entspricht  $b_{hj}$  der Anzahl an unterschiedlichen Wegen der Länge  $k \geq 1$  von diesem  $v_h$  zu  $v_j$  in  $G$ . Dies liefert gerade das gewünschte Resultat, denn jeder beliebige Weg der Länge  $k + 1$  von  $v_i$  nach  $v_j$  muss sich aus einer Kante von  $v_i$  zu einem Knoten  $v_h$  und einem Weg der Länge  $k$  von diesem  $v_h$  zu  $v_j$  zusammensetzen. Die gesamte Anzahl an Wegen der Länge  $k + 1$  zwischen  $v_i$  und  $v_j$  ergibt sich dann aus der Anzahl an den in  $G$  möglichen Kombinationen von allen solchen Wegen der Länge 1 und  $k$ , wie gerade in Gl. (4.5) gegeben.  $\square$

**BEMERKUNG 4.18** *Eine verwandte Fragestellung zur Anzahl an Wegen einer bestimmten Länge von einem Knoten  $v_i$  zu einem Knoten  $v_j$  ist die nach der Länge des kürzesten Weges von  $v_i$  zu  $v_j$ , die als Distanz bezeichnet wird.*

**DEFINITION 4.19** *Die Länge des kürzesten Weges/Pfades von einem Knoten  $v_i$  zu einem Knoten  $v_j$  wird als Distanz  $d(v_i, v_j)$  bezeichnet.*

Es gilt:

- $d(v_i, v_i) = 0$  für alle  $i = 1, \dots, n$ .
- Wir setzen  $d(v_i, v_j) = \infty$ , falls kein Weg von  $v_i$  zu  $v_j$  existiert.
- In ungerichteten Graphen ist  $d(v_i, v_j) = d(v_j, v_i)$ , in gerichteten Graphen im Allgemeinen nicht.
- Die Distanz  $d(v_i, v_j)$  entspricht dem kleinsten Exponenten  $k = 0, \dots, n$  für den der  $(i, j)$ -te Eintrag in  $\mathbf{A}_G^k$  verschieden von Null ist (wobei  $\mathbf{A}_G^0 = \mathbf{1}$  die  $(n \times n)$ -Einheitsmatrix ist). Hieraus ergibt sich eine einfache Prozedur zur Berechnung sämtlicher Distanzen in einem Graphen: es werden einfach schrittweise die Potenzen  $\mathbf{A}_G^k$  ( $k = 0, \dots, n$ ) berechnet. Der Exponent  $k$  bei dem hierbei *erstmalig* der  $(i, j)$ -te Eintrag in  $\mathbf{A}_G^k$  größer als Null ist, gibt einem dann die Distanz  $d(v_i, v_j)$ . Sollte der  $(i, j)$ -te Eintrag in  $\mathbf{A}_G^k$  bis  $k = |E|$  Null bleiben, so können wir  $d(v_i, v_j) = \infty$  setzen, da bereits sämtliche (einfachen) Kombinationen aller Kanten in  $G$  berücksichtigt wurden.
- $\vec{G}$  ist genau dann stark zusammenhängend, wenn die Matrix  $\mathbf{B} := \sum_{k=0}^n \mathbf{A}_G^k$  nur positive Einträge hat.

### 4.3 Zufallsspaziergang auf einem Graphen, Markovketten

In diesem Kapitel befassen wir uns mit einer speziellen Anwendung von gerichteten gewichteten Graphen, dem Zufallsspaziergang auf Graphen. Anwendung finden diese z.B. in der Sequenz-Bioinformatik beim das Bestimmen von homologen Sequenzen.

Wir betrachten zunächst einen gerichteten, gewichteten Graphen  $\vec{G}_w = (V, \vec{E}, w)$  ohne Mehrfachkanten. Nun interpretieren wir die Knoten  $V = \{v_1, \dots, v_n\}$  des Graphen als mögliche Zustände eines Systems. Wir gehen davon aus, dass sich der Zustand in einem (diskreten) Zeitschritt verändern kann, dass es also Übergänge zwischen den Zuständen geben kann.

Dann interpretieren wir die Gewichte  $w_{i,k} := w((v_i, v_k))$  als Wahrscheinlichkeiten für einen Übergang (in einem Zeit-Schritt) vom Zustand  $v_i$  zum Zustand  $v_k$ . Sind zwei Knoten nicht benachbart, dann wird diese Wahrscheinlichkeit automatisch auf null gesetzt, ein direkter Übergang ist nicht möglich.

Startet der Prozess mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeitsverteilung auf der Knotenmenge (d.h. wird zu Beginn festgelegt, mit welcher Wahrscheinlichkeit die verschiedenen Zustände = Knoten angenommen werden), dann ergibt sich durch den Zufallsspaziergang nach jedem Schritt eine neue Wahrscheinlichkeitsverteilung.

Wir können zum Beispiel einen Zufallsspaziergang betrachten, der mit Wahrscheinlichkeit 1 im Knoten  $v_1$  startet. Sind nun die Wahrscheinlichkeiten für die Übergänge von  $v_1$  nach  $v_2$  und  $v_3$  (also  $w_{1,2}$  und  $w_{1,3}$  jeweils  $1/2$ , alle anderen null, dann befindet sich das System nach dem ersten Zeitschritt mit Wahrscheinlichkeit  $1/2$  in Zustand  $v_2$  und mit Wahrscheinlichkeit  $1/2$  im Zustand  $v_3$ . Die Wahrscheinlichkeit für alle anderen Zustände ist null.

Damit die Interpretation als Wahrscheinlichkeit sinnvoll ist, darf  $w$  nur Werte in  $[0, 1]$  annehmen und für die gewichteten Ausgangsknotengrade muss gelten

$$\text{grad}_{\text{aus},w} v_i = 1, \quad i = 1, \dots, n$$

(denn mir Wahrscheinlichkeit 1 muss ja nach dem Zeitschritt wieder irgendein Zustand angenommen werden).

Da es sich um Wahrscheinlichkeiten handelt, wird die Gewichtsfunktion in diesem Fall üblicherweise mit  $p$  und die gewichtete Adjazenzmatrix mit  $\mathbf{P}$  bezeichnet ( $p_{ik} := p(v_i, v_k) \in [0, 1]$  ist also die Wahrscheinlichkeit (= probability) für den Übergang von  $v_i$  nach  $v_k$ ). Verzichten wir darauf, Mehrfachkanten auszuschließen, dann ergeben sich die Matrixelemente als Summe der Gewichte über die entsprechenden Kanten wie in Definition 4.15.

DEFINITION 4.20 (a) Ein gerichteter gewichteter Graph  $\vec{G}_p = (V, \vec{E}, p)$  mit  $V = \{v_1, \dots, v_n\}$  und gewichteter Adjazenzmatrix  $\mathbf{P} = (p_{ik})$ , für den gilt

$$p_{ik} \in [0, 1] \quad \text{und} \quad \text{grad}_{\text{aus},p} v_i = \sum_{k=1}^n p_{ik} = 1, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.6)$$

ist der Übergangsgraph eines Zufallsspaziergangs (oder einer Markovkette). Die  $(n \times n)$ -Matrix  $P$  heißt Übergangsmatrix des Zufallsspaziergangs.

(b) Eine Anfangsverteilung auf  $V$  ist eine Zuordnung (Wahrscheinlichkeitsverteilung)

$$w_0 : V \rightarrow [0, 1], \quad v_j \mapsto w_0(v_j) = w_{0,j} \quad \text{mit} \quad \sum_{j=1}^n w_0(v_j) = 1.$$

Wir schreiben auch  $\vec{w}_0 := (w_{0,1}, w_{0,2}, \dots, w_{0,n})$  (Zeilenvektor). Der Wert  $w_0(v_i)$  bezeichnet die Wahrscheinlichkeit, dass am Anfang (zum Zeitpunkt 0) der Zustand  $v_i$  angenommen wird.

(c) Ein Zufallsspaziergang der Länge  $\ell$  auf einem Übergangsgraphen  $\vec{G}_p$  mit Übergangsmatrix  $\mathbf{P}$  zur Anfangsverteilung  $\vec{w}_0$  ist ein Weg  $W = (v_{j_0}, e_{j_1}, v_{j_1}, \dots, e_{j_\ell}, v_{j_\ell})$  der Länge  $\ell$ , dem die Wahrscheinlichkeit

$$p_W = w_{0,j_0} \prod_{k=0}^{\ell-1} p_{j_k j_{k+1}}$$



zugeordnet wird.

**BEMERKUNG 4.21** (a) Eine Matrix  $\mathbf{P} = (p_{ik})$  mit der Eigenschaft (4.6) wird auch als Zufallsmatrix bezeichnet.

(b) Der Begriff Markov-Kette beschreibt einen diskreten Zufallsprozeß, bei dem die Wahrscheinlichkeiten für die verschiedenen Zustände nach dem nächsten Schritt nur von dem aktuellen Zustand abhängen und nicht von der Vorgeschichte (also davon, wie der aktuelle Zustand erreicht wurde). Diese Eigenschaft wird auch Markov-Eigenschaft genannt.

(c) Allgemein bezeichnen wir als Wahrscheinlichkeitsverteilung  $w$  auf einer Menge  $V$  eine Abbildung  $w : V \rightarrow [0, 1]$ , für die gilt

$$\sum_{v \in V} w(v) = 1 . \tag{4.7}$$

Nummerieren wir die Elemente von  $V$ , also  $V = \{v_1, \dots, v_n\}$ , dann setzen wir  $\vec{w} = (w_1, \dots, w_n)$  mit  $w_j = w(v_j)$  und bezeichnen auch  $\vec{w}$  als Wahrscheinlichkeitsverteilung.

Analog zur der Bestimmung der Anzahl der verschiedenen Wege der Länge  $\ell$  zwischen zwei Knoten  $v_j$  und  $v_k$  mit Hilfe der Adjazenzmatrix (vgl. Satz 4.17), lässt sich die Wahrscheinlichkeit, dass bei einer Anfangsverteilung  $w_0$  nach  $\ell$  Schritten ein Zustand  $v_k$  angenommen wird, mittels der Übergangsmatrix  $\mathbf{P}$  berechnen.

**SATZ 4.22** Sei  $\ell \in \mathbb{N}$  und  $\vec{G}_p = (V, \vec{E}, p)$  mit  $V = \{v_1, \dots, v_n\}$  der Übergangsgraph eines Zufallsspaziergangs mit Übergangsmatrix  $\mathbf{P}$  und Anfangsverteilung  $\vec{w}_0$  auf  $V$ . Dann ist die Wahrscheinlichkeit, dass der Knoten  $v_j \in V$  der Endpunkt eines Zufallsspaziergangs der Länge  $\ell$  ist (also die Wahrscheinlichkeit, dass sich das System nach  $\ell$  Schritten im Zustand  $v_j$  befindet) gegeben durch

$$\vec{w}_{\ell,j} := (\vec{w}_0 \cdot P^\ell)_j ,$$

die  $j$ -te Komponente des Zeilenvektors  $\vec{w}_\ell = (w_{\ell,1}, \dots, w_{\ell,n})$  und  $\vec{w}_\ell$  ist eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $V$ .

*Beweis.* Mit vollständiger Induktion nach  $\ell$ :

I.V.: Die Behauptung gilt für  $\ell = 0$  nach Definition der Anfangsverteilung.

I.S.: Für  $j = 1, \dots, n$  sei  $\vec{w}_\ell$  eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $V$  und  $w_{\ell,j}$  sei die Wahrscheinlichkeit, dass sich das System nach  $\ell$  Schritten im Zustand  $v_j$  befindet. Die Wahrscheinlichkeit, vom Zustand  $v_j$  im nächsten Schritt zum Zustand  $v_k$  überzugehen, ist nach Definition gerade  $p_{jk}$ . Also ist die Wahrscheinlichkeit, nach  $\ell$  Schritten im Zustand  $v_j$  zu sein und nach dem  $\ell + 1$ -ten Schritt im Zustand  $v_k$ , gerade  $w_{\ell,j} p_{jk}$ . Starten wir nun nach den  $\ell$  Schritten in einem beliebigen Zustand, dann ergibt sich als Wahrscheinlichkeit, nach dem  $\ell + 1$ -ten Schritt in Zustand  $v_k$  zu sein durch Summation über die möglichen Zustände zur Zeit  $\ell$ , also

$$w_{\ell+1,k} = \sum_{i=1}^n w_{\ell,i} p_{ik} . \tag{4.8}$$

Das ist aber gerade die  $k$ -te Komponente von  $w_\ell \cdot P$  und damit folgt mit der Induktionsvoraussetzung

$$\vec{w}_{\ell+1} = \vec{w}_\ell \cdot P = \vec{w}_0 \cdot P^\ell \cdot P = \vec{w}_0 \cdot P^{\ell+1} .$$

Dass es sich bei  $\vec{w}_{\ell+1}$  auch wieder um eine Wahrscheinlichkeitsverteilung handelt, dass also gilt (4.7), folgt mit (4.8) und der Induktionsvoraussetzung, denn

$$\sum_{k=1}^n w_{\ell+1,k} = \sum_{k=1}^n \sum_{i=1}^n w_{\ell,i} \cdot p_{ik} = \sum_{i=1}^n \left( w_{\ell,i} \cdot \sum_{k=1}^n p_{ik} \right) \stackrel{\text{Gl. (4.6)}}{=} \sum_{i=1}^n w_{\ell,i} = 1.$$

□

Wir haben also insbesondere gesehen, dass sich zu einer gegebenen Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\vec{w}_t$  auf  $V$  zur Zeit  $t \in \mathbb{N}$  die Wahrscheinlichkeitsverteilung zur Zeit  $t+1$  immer durch „Anwendung“ der Übergangsmatrix  $\mathbf{P}$  von rechts ergibt, also

$$\vec{w}_{t+1} = \vec{w}_t \cdot \mathbf{P}. \quad (4.9)$$

Die Matrix  $\mathbf{P}^k$  ist auch wieder eine Zufallsmatrix (vgl. Bem. 4.21). Sie beschreibt den Übergang in  $k$  Schritten.

Die Struktur (4.9) ist analog zu Systemen von Differenzen- bzw. Differentialgleichungen, wobei wir hier aber die Matrix  $\mathbf{P}$  von rechts mit einem Zeilenvektor multiplizieren und damit wieder einen Zeilen-Vektor erhalten (statt durch Multiplikation einer Matrix von links mit einem Spaltenvektor wieder auf einen Spaltenvektor zu kommen).

**BEISPIEL 4.23** *Wir betrachten ein Karussell mit einem weißen, einem braunen und einem schwarzen Pferd. Ein Kind fährt fünf mal hintereinander und wechselt nach jeder Fahrt das Pferd. Falls es auf dem braunen oder schwarzen saß, geht es beim nächsten Mal mit gleicher Wahrscheinlichkeit auf eines der anderen Pferde. Falls es auf dem weißen saß, bleibt es mit Wahrscheinlichkeit  $1/3$  sitzen und wechselt mit Wahrscheinlichkeit  $2/3$  zu dem schwarzen Pferd.*

*Wir haben also  $V = \{v_1, v_2, v_3\} = \{\text{Weiß, Braun, Schwarz}\}$  und die Übergangsmatrix ist gegeben durch*

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1/3 & 0 & 2/3 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}.$$

*Startet das Kind auf dem weißen Pferd, dann ist die Anfangsverteilung  $\vec{w}_0 = (1, 0, 0)$ . Ein Zufallsspaziergang der Länge fünf ist dann zum Beispiel der Weg (Weiß, Braun, Schwarz, Braun, Weiß), der bei der Anfangsverteilung  $\vec{w}_0$  die Wahrscheinlichkeit*

$$p_W = 1 \cdot 0 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = 0$$

*hat (da nach Voraussetzung niemals vom weißen auf das braune Pferd gewechselt wird). Die Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $V$  nach zwei Schritten ist gegeben durch*

$$\begin{aligned} \vec{w}_2 &= \vec{w}_0 \cdot \mathbf{P}^2 = (1, 0, 0) \cdot \begin{pmatrix} 1/3 & 0 & 2/3 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}^2 = (1/3, 0, 2/3) \cdot \begin{pmatrix} 1/3 & 0 & 2/3 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix} \\ &= (1/9 + 2/6, 2/6, 2/9) = (8/18, 6/18, 4/18) \end{aligned}$$

*Damit ist die Wahrscheinlichkeit, dass das Kind nach zwei Wechseln wieder auf dem weißen Pferd sitzt, gerade  $8/18$ .*

**BEMERKUNG 4.24** *Wir sprechen von einem einfachen Zufallsspaziergang, wenn der zugrundeliegende Graph  $\vec{G}$  (oder  $G$ ) einfach ist (also insbesondere keine Schleifen enthält),*

alle Knoten einen positiven Ausgangsgrad haben und alle durch ausgehende Kanten benachbarten Zustände mit gleicher Wahrscheinlichkeit angenommen werden. In diesem Fall ergeben sich die Elemente  $p_{ik}$  der Übergangsmatrix  $\mathbf{P}$  durch Normierung der zugehörigen ungewichteten Adjazenzmatrix  $\mathbf{A}_{\vec{G}}$  mit den Ausgangsgraden. Der  $(i, j)$ -te Eintrag von  $\mathbf{P}$  ist dann also gegeben als

$$p_{i,j} = \frac{a_{i,j}}{\text{grad}_{\text{aus}}(v_i)} .$$

Ist  $G$  ungerichtet und damit  $\mathbf{P}_G$  symmetrisch, dann sprechen wir von einem einfachen, symmetrischen Zufallsspaziergang.

Ähnlich wie bei Differenzen- und Differentialgleichungen, die ja auch dynamische Systeme beschreiben, gibt es bei Zufallsspaziergängen das Konzept von Gleichgewichtszuständen. In diesem Fall ist das eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $V$ , die sich durch Anwenden der Übergangsmatrix nicht verändert. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das System in den jeweiligen Zuständen befindet, bleibt also nach jedem Schritt gleich.

DEFINITION 4.25 Sei  $\vec{G}_p = (V, \vec{E}, p)$  Übergangsgraph eines Zufallsspaziergangs mit Übergangsmatrix  $\mathbf{P}$ .

Eine Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\vec{\pi}$  auf  $V$  heißt invariante Verteilung oder Gleichgewichtsverteilung von  $\mathbf{P}$ , falls gilt

$$\vec{\pi} \cdot \mathbf{P} = \vec{\pi} . \tag{4.10}$$

Wie schon bei den Gleichgewichtszuständen für Differenzgleichungen gilt auch hier wieder: Falls für ein  $t_0 \in \mathbb{N}$  gilt  $\vec{w}_{t_0} = \vec{\pi}$ , dann gilt auch  $\vec{w}_t = \vec{\pi}$  für alle  $t \in \mathbb{N}, t \geq t_0$ .

Wie bei den früher behandelten dynamischen Systemen können wir uns auch hier wieder fragen, ob sich eine Wahrscheinlichkeitsverteilung mit der Zeit der Gleichgewichtsverteilung annähert, ob also gilt  $\vec{w}_t \rightarrow \vec{\pi}$  für  $t \rightarrow \infty$ . Der Ergodensatz liefert uns hinreichende Bedingungen dafür, dass diese Konvergenzaussage gilt. Wir benötigen zunächst die folgende Definition.

DEFINITION 4.26 Eine Übergangsmatrix  $\mathbf{P}$  heißt ergodisch, falls ein  $k \in \mathbb{N}$  existiert, so dass für alle  $i, j \in \{1, \dots, n\}$  gilt  $p_{ij}^{(k)} > 0$ . Hierbei bezeichnen  $p_{ij}^{(k)} \in [0, 1]$  die Matrixelemente der Zufallsmatrix  $\mathbf{P}^k$ .

Das bedeutet mit anderen Worten, dass es zwischen allen Knotenpaare einen Zufallsspaziergang der Länge  $k$  mit positiver Wahrscheinlichkeit gibt.

**Achtung:** Es muss ein  $k$  sein, dass für alle Paare  $v_i, v_j$  gilt. Es genügt nicht, dass für jedes Paar ein  $k$  existiert.

SATZ 4.27 (ERGODENSATZ FÜR MARKOV-KETTEN) Sei  $\mathbf{P}$  die Übergangsmatrix eines Zufallsspaziergangs auf dem Übergangsgraphen  $\vec{G}_p = (V, \vec{E}, p)$  mit  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ . Weiterhin sei  $\mathbf{P}$  ergodisch. Dann gibt es auf  $V$  eine eindeutige invariante Verteilung  $\vec{\pi} = (\pi_1, \dots, \pi_n)$  von  $\mathbf{P}$  mit  $\pi_i > 0$  für alle  $i = 1, \dots, n$  und es gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \vec{w}_t = \vec{\pi}$$

unabhängig von der Wahl der Anfangsverteilung  $\vec{w}_0 = (w_{0,1}, \dots, w_{0,n})$ .

Bewiesen ist dieser Satz z.B. in Georgii:Stochastik, De Gruyter-Verlag.

- BEMERKUNG 4.28** (a) *Ist der zugrundeliegende Graph  $G = (V, E)$  bipartit mit  $V = V_1 \cup V_2$ , dann muss der Zustand bei einem Zufallsspaziergang immer zwischen  $V_1$  und  $V_2$  wechseln (innerhalb von  $V_i$  gibt es ja keine Kanten, also ist die Übergangswahrscheinlichkeit zu allen Knoten innerhalb von  $V_i$  null). Damit kann die zugehörige Übergangsmatrix niemals ergodisch sein. In diesem Fall beobachten wir, dass die Verteilung  $\vec{w}_t$  unter Umständen gar nicht konvergiert. Nämlich dann, wenn der Zufallsspaziergang mit seiner Anfangsverteilung gänzlich in einer der beiden Partitionen des Graphen startet. In diesem Fall lässt sich ein periodisches Verhalten des Zufallsspaziergangs mit Periodizität 2 in seiner Verteilung beobachten.*
- (b) *Wegen (4.10) lässt sich eine invariante Verteilung  $\vec{\pi}$  als (Links)-Eigenvektor von  $\mathbf{P}$  zum Eigenwert 1 auffassen. Im Allgemeinen ist es möglich, dass der Eigenwert 1 mehrere Eigenvektoren besitzt, es also mehrere invariante Verteilungen gibt (z.B. wenn der Graph nicht zusammenhängend ist). Im Fall einer ergodischen Übergangsmatrix gibt es aber nach Satz 4.27 nur einen Eigenvektor zum Eigenwert 1 und damit eine eindeutige invariante Verteilung.*
- (c) *Eine notwendige (aber nicht hinreichende) Bedingung für die Ergodizität von  $\mathbf{P}$  ist, dass der zugrundeliegende gerichtete Graph stark zusammenhängend ist. Dann gilt, dass für alle  $v_i, v_k \in V$  ein  $\ell \in \mathbb{N}$  existiert, so dass gilt  $p_{ik}^{(\ell)} > 0$ , es muss aber nicht für alle Paare dasselbe  $\ell$  sein. Die Übergangsmatrix  $\mathbf{P}$  wird dann irreduzibel genannt.*

Sei nun  $G$  einfach, nicht bipartit und besitze keine isolierten Knoten (d.h.  $\text{grad } v_i > 0$  für alle  $i = 1, \dots, n$ ) und sei  $\mathbf{P}$  die Übergangsmatrix des einfachen symmetrischen Zufallsspaziergangs auf  $G$  (siehe Bem. 4.24). Dann konvergiert  $\vec{w}_t$  für  $t \rightarrow \infty$  gegen eine invariante Verteilung. Falls  $G$  zusätzlich zusammenhängend ist, dann ist die invariante Verteilung eindeutig und gegeben durch

$$\vec{\pi} = (\pi_1, \dots, \pi_n) \quad \text{mit} \quad \pi_i = \frac{\text{grad } v_i}{\sum_{j=1}^n \text{grad } v_j}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (4.11)$$

Um das zu sehen, erinnern wir uns zunächst, dass für den Grad eines Knoten  $v_i$  in einem ungerichteten Graphen ohne Schleifen gilt  $\text{grad } v_i = \text{grad}_{\text{aus}}(v_i) = \text{grad}_{\text{ein}}(v_i)$ .

Wir zeigen nun als erstes, dass die durch Gl. (4.11) gegebene Verteilung eine Wahrscheinlichkeitsverteilung mit positiven Einträgen ist. Offensichtlich gilt  $\pi_i > 0$  für alle  $i = 1, \dots, n$ , da nach Voraussetzung  $\text{grad } v_i > 0$  für alle  $i = 1, \dots, n$  gilt, und somit auch  $\sum_{j=1}^n \text{grad } v_j > 0$  ist. Des Weiteren ergibt sich

$$\sum_{i=1}^n \pi_i = \sum_{i=1}^n \frac{\text{grad } v_i}{\sum_{j=1}^n \text{grad } v_j} = 1.$$

Also ist die durch Gl. (4.11) gegebene Verteilung eine Wahrscheinlichkeitsverteilung. Es handelt sich hierbei in der Tat um eine Gleichgewichtsverteilung des Zufallsspaziergangs, denn

$$(\vec{\pi} \cdot \mathbf{P})_i = \sum_{j=1}^n \pi_j p_{ji} = \sum_{j=1}^n \frac{\text{grad } v_j}{\sum_{h=1}^n \text{grad } v_h} \frac{a_{ji}}{\text{grad } v_j} = \frac{\sum_{j=1}^n a_{ji}}{\sum_{h=1}^n \text{grad } v_h} = \frac{\text{grad } v_i}{\sum_{h=1}^n \text{grad } v_h} = \pi_i$$

für alle  $i = 1, \dots, n$ , und somit ist Gl. (4.10) erfüllt.

Es bleibt zu klären unter welchen Voraussetzungen der Zufallsspaziergang diese Gleichgewichtsverteilung auch erreicht, also wann  $\vec{w}_t$  für  $t \rightarrow \infty$  gegen  $\vec{\pi}$  aus Gleichung (4.11)

konvergiert. Hierzu betrachten wir zunachst ein einfaches Beispiel eines Zufallsspaziergangs auf einem nichtzusammenhangenden Graphen. Offensichtlich kann sich in diesem Fall der Zufallsspaziergang nicht uber solche Knotenmengen ausbreiten zwischen denen keine Wege existieren. Somit kann sich die Gleichgewichtsverteilung in Gl. (4.11) auf nicht-zusammenhangenden Graphen auch nicht einstellen. Diese Beobachtung konnen wir weiter analysieren.

Aus der linearen Algebra ist bekannt, dass jede symmetrische reelle  $n \times n$ -Matrix, wie  $\mathbf{P}$ ,  $n$  linear unabhangige reelle Eigenvektoren  $\vec{y}_i$  und  $n$  (nicht notwendig verschiedene) zugehorige reelle Eigenwerte  $\lambda_i$  besitzt. Damit bilden die Eigenvektoren eine Basis und die Anfangsverteilung  $\vec{w}_0$  hat eine Darstellung  $\vec{w}_0 = \sum_{i=1}^n C_i \vec{y}_i$ . Da nach Definition gilt  $\vec{y}_i \mathbf{P} = \lambda_i \vec{y}_i$  folgt mit Iteration sofort  $\vec{y}_i \mathbf{P}^t = \lambda_i^t \vec{y}_i$  fur  $t \in \mathbb{N}$ . Das bedeutet, dass wir die Verteilung  $\vec{w}_t$  des Zufallsspaziergangs nach  $t$  Schritten darstellen konnen als

$$\vec{w}_t = \vec{w}_0 \cdot \mathbf{P}^t = \vec{w}_0 = \sum_{i=1}^n C_i \vec{y}_i \mathbf{P}^t = C_1 \lambda_1^t \vec{y}_1 + \dots + C_n \lambda_n^t \vec{y}_n. \quad (4.12)$$

Wie wir gesehen haben, ist hierbei mindestens ein  $\lambda_i = 1$ . Ferner wird klar, dass allgemein  $|\lambda_i| \leq 1$  fur alle  $i = 1, \dots, n$  gelten muss, da ansonsten in Gl. (4.12) durch einen Term  $\lambda_i^t$  mit steigender Schrittzahl  $t$  die Eigenschaft (4.7) der Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\vec{w}_t$  zwangslaufig verletzt werden wurde.

Wie erklart dies unsere Beobachtung am Beispiel eines nichtzusammenhangenden Graphen? In diesem Fall besitzt der Eigenwert 1 von  $\mathbf{P}$  eine (geometrische) Vielfachheit groer als eins, d.h. es gibt mehrer Eigenvektoren  $\vec{y}_i$  zum Eigenwert 1 und in Gl. (4.12) gibt es mehrere  $i \in \{1, \dots, n\}$  mit  $\lambda_i = 1$ . Genauer lasst sich zeigen, dass dem Eigenwert 1 der ubergangsmatrix  $\mathbf{P}$  jeweils genau ein Eigenvektor zu jedem zusammenhangenden Teilgraphen zugeordnet ist (die in einem nichtzusammenhangenden Graphen vorliegen). Auf diesem Teilgraphen betrachtet besitzt so ein Eigenvektor die in Gl. (4.11) gegebene Form. Die gema Gl. (4.11) auf dem gesamten Graphen gegebene Gleichgewichtsverteilung ergibt sich dann als Linearkombination aller zum Eigenwert 1 zugehorigen Eigenvektoren.

Die obigen Ergebnisse wollen wir als Satz zusammenfassen.

**SATZ 4.29** *Die Verteilung  $\vec{w}_t = \vec{w}_0 \mathbf{P}^t$  eines einfachen symmetrischen Zufallsspaziergangs auf einem ungerichteten Graphen  $G = (V, E)$  ohne isolierte Knoten konvergiert gegen eine Gleichgewichtsverteilung, wenn  $G$  nicht bipartit ist.*

*Ist  $G$  zusatzlich zusammenhangend, so ist die Gleichgewichtsverteilung des Zufallsspaziergangs eindeutig und durch  $\pi_i = \frac{\text{grad } v_i}{\sum_{j=1}^n \text{grad } v_j}$ , fur  $i = 1, \dots, n$ , gegeben.*

**BEMERKUNG 4.30** *Ahnlich wie bei unseren uberlegungen zur Eindeutigkeit der Gleichgewichtsverteilung auf nichtzusammenhangenden Graphen kann man sich mit Hilfe der Darstellung (4.12) uberlegen, dass fur einen bipartiten Graphen die ubergangsmatrix  $\mathbf{P}$  den Eigenwert  $-1$  besitzen muss, dessen zugehoriger Eigenvektor (oder Vektoren) gerade das periodische Verhalten des Zufallsspaziergangs festhalt. Es gilt sogar, dass ein Graph genau dann bipartit ist, wenn  $\mathbf{P}$  den Eigenwert  $-1$  besitzt.*

## 4.4 Boolsche Netzwerke

Unter Boolschen Netzwerken verstehen wir die verwendung von gerichteten Graphen zur Behandlung sehr einfacher Formen von (vielen) gekoppelten Differenzgleichungen. Boolsche Netzwerke werden zum Beispiel zur (vereinfachten) Beschreibung von Bewegungsablaufen oder von genregulatorischen oder Transskriptions-Netzwerken und anderen biochemischen Prozessen verwendet werden.

Es handelt sich also wieder um die Beschreibung eines dynamischen Systems mit diskreten Zeitschritten, ähnlich wie beim Zufallsspaziergang. Hier gehen wir aber nun davon aus, dass jeder Knoten zu jedem Zeitpunkt  $t$  entweder den Wert null oder den Wert 1 annimmt (die Knoten sind „an- oder abgeschaltet“). Wir bezeichnen diesen Wert mit  $b_t(v)$ , es gilt also  $b_t(v) = 0$  oder  $b_t(v) = 1$ . Diese extreme Vereinfachung nur auf die Werte null und eins ist das, was mit dem Begriff „Boolsch“ assoziiert ist.

Welchen Wert  $b_{t+1}(v_k)$  ein Knoten  $v_k$  nach dem nächsten Zeitschritt annehmen wird, ergibt sich aus den Werten  $b_t(v_i)$  der über eingehende Kanten benachbarten Knoten  $v_i$  (es gilt also  $(v_i, v_k) \in \vec{E}$ ) zusammen mit der Festlegung einer entsprechenden Funktion bei  $v_k$ .

BEISPIEL 4.31 Wir betrachten zunächst als Beispiel den gerichteten Graphen  $\vec{G} = (V, \vec{E})$  mit  $V = \{v_1, v_2, v_3\}$  und  $\vec{E} = \{(v_1, v_1), (v_1, v_2), (v_1, v_3), (v_2, v_3), (v_3, v_2)\}$  (siehe Abbildung 4.7).

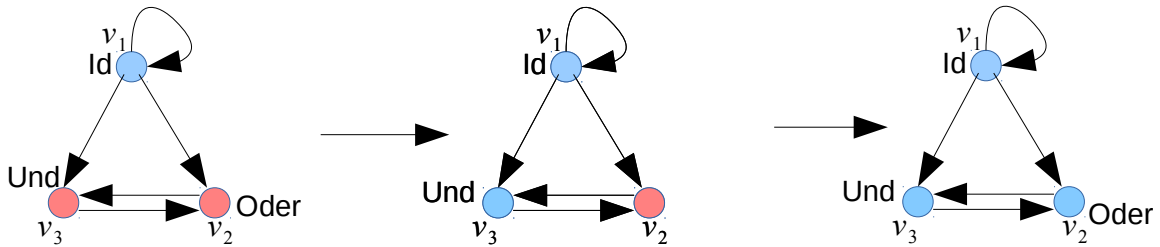


Abbildung 4.7: Bsp. 4.31, blau=0, rot=1, mit Booleschen Funktionen, zwei Zeitschritte

Nun wird zu einem Anfangszeitpunkt  $t = 0$  jedem Knoten der Wert null oder eins zugeordnet, also z.B.  $b_0(v_1) = 0$ ,  $b_0(v_2) = 1$  und  $b_0(v_3) = 1$ . Wir schreiben das als Vektor  $\vec{b}_0 = (0, 1, 1)$ . Der Wert der Knoten zur Zeit  $t = 1$  wird nun durch eine jeweils den Knoten zugeordnete Funktion  $f_{v_i}$  der Werte auf den (eingängig) benachbarten Knoten festgelegt, also  $f_{v_i} : \{0, 1\}^k \rightarrow \{0, 1\}$  falls von  $k$  Knoten eine Kante nach  $v_i$  zeigt. In unserem Beispiel ist der einzige mit einer eingehenden Kante mit  $v_1$  benachbarte Knoten ist wieder  $v_1$  selbst, wir haben also  $b_1(v_1) = f_1(b_0(v_1))$ . Zu  $v_2$  gibt es eingehende Kanten von  $v_1$  und  $v_3$ , es gilt also  $b_1(v_2) = f_2(b_0(v_1), b_0(v_3))$  und analog ergibt sich  $b_1(v_3) = f_3(b_0(v_1), b_0(v_2))$  für  $v_3$ .

DEFINITION 4.32 (a) Eine Variable  $b$  mit Werten in  $\{0, 1\}$  heißt Boolesche Variable.

(b) Eine Funktion  $f : \{0, 1\}^k \rightarrow \{0, 1\}$  heißt Boolesche Funktion mit  $k$  Eingängen. Die Menge der Booleschen Funktionen mit  $k$  Eingängen bezeichnen wir mit  $Bool_k$ .

Falls  $k = 1$  ist, es für die Funktion also nur einen „Input“ gibt, dann ergeben sich für so eine Zuordnungsvorschrift  $f$  überhaupt nur vier Möglichkeiten: der Wert wird übernommen (die „Identitätsabbildung“), er wird umgedreht (die „inverse Abbildung“), jeder Wert wird auf die 1 oder jeder Wert wird auf die 0 abgebildet (die „Eins-Abbildung“ und die „Null-Abbildung“):

Boolesche Funktionen mit einem Eingang

Name	Input	
	0	1
Identitat	0	1
Inverse	1	0
Null	0	0
Eins	1	1

Fur eine groere Zahl von Input-Variablen  $k$  gibt es naturlich sehr viel mehr mogliche Boolsche Funktionen. Es gibt jeweils  $2^k$  verschiedene Kombinationen der Werte an den  $k$  Knoten und  $2^{2^k}$  verschiedene Boolsche Funktionen mit  $k$  Eingangen (es gilt also  $\#\text{Bool}_k = 2^{2^k}$ ). Im Fall  $k = 2$  gibt es also vier verschiedene Kombinationen der Werte der beiden relevanten Knoten und  $2^4 = 16$  verschiedene Boolsche Funktionen, deren Namen zum Teil angelehnt sind an die Begriffe aus der Logik:

Boolsche Funktionen mit zwei Eingangen

	Name	Input			
		(0,0)	(0,1)	(1,0)	(1,1)
1.	Null (Widerspruch)	0	0	0	0
2.	Und	0	0	0	1
3.	Inhibition	0	0	1	0
4.	Transfer	0	0	1	1
5.	Inhibition	0	1	0	0
6.	Transfer	0	1	0	1
7.	X-Oder	0	1	1	0
8.	Oder	0	1	1	1
9.	Nicht-X-Oder	1	0	0	1
10.	Nicht-Oder	1	0	0	0
11.	Komplement	1	0	1	0
12.	Implikation	1	0	1	1
13.	Komplement	1	1	0	0
14.	Implikation	1	1	0	1
15.	Nicht-Und	1	1	1	0
16.	Eins (Tautologie)	1	1	1	1

BEISPIEL 4.33 *Kommen wir zuruck zu Beispiel 4.31. Setzen wir zum Beispiel  $f_1 = \text{Identitat}$ ,  $f_2 = \text{Oder}$  und  $f_3 = \text{Und}$ , dann ergibt sich fur die Werte der Knoten zu den Zeitpunkten  $t = 1$  und  $t = 2$  sofort  $\vec{b}_1 = (0, 1, 0)$  und  $\vec{b}_2 = (0, 0, 0)$  (vgl. Fig.4.7).*

*Die Zuordnung von allen moglichen Werten der Knoten  $\vec{b}_t$  zur Zeit  $t$  zu den sich ergebenden Werten  $\vec{b}_{t+1}$  zu Zeit  $t+1$  lasst sich in einer Tabelle, der sogenannten Wahrheitstafel darstellen. Fur Beispiel 4.31 ergibt sich (vgl. Fig. 4.7)*

Wahrheitstafel fur das Boolsche Netzwerk 4.31

$\vec{b}_t$	$\vec{b}_{t+1}$
(0, 0, 0)	(0, 0, 0)
(0, 0, 1)	(0, 0, 0)
(0, 1, 0)	(0, 0, 0)
(1, 0, 0)	(1, 1, 0)
(0, 1, 1)	(0, 1, 0)
(1, 0, 1)	(1, 1, 0)
(1, 1, 0)	(1, 1, 1)
(1, 1, 1)	(1, 1, 1)

Mit Hilfe der Wahrheitstafel lässt sich dann das Verhalten in mehreren Zeitschritten ablesen, z.B.  $(1, 0, 1) \longrightarrow (1, 1, 0) \longrightarrow (1, 1, 1) \longrightarrow (1, 1, 1)$ . Wir sehen, dass in diesem Beispiel die Zustände  $(0, 0, 0)$  und  $(1, 1, 1)$  stabil sind, sich also nicht verändern, und dass alle anderen Zustände nach wenigen Schritten in einen dieser beiden stabilen Zustände übergehen.

Nach diesen einleitenden Überlegungen und Beispielen kommen wir nun zur Definition von Booleschen Netzwerken:

DEFINITION 4.34 (a) *Ein gerichteter Graph  $\vec{G} = (V, \vec{E})$ , zusammen mit einer Zuordnung  $V \ni v_i \mapsto f_{v_i} \in \text{Bool}_{\text{grad}_m(v_i)}$ , heißt Boolesches Netzwerk. Hierbei ist  $f_{v_i}$  also eine Boolesche Funktion mit  $k_i$  Eingängen, wobei  $k_i$  der Eingangsgrad von  $v_i$  ist.*

(b) *Ein Zustand des Booleschen Netzwerkes ist eine Zuordnung  $b : V \rightarrow \{0, 1\}$ , wir schreiben auch  $\{0, 1\}^n \ni \vec{b} = (b(v_1), b(v_2), \dots, b(v_n))$ . Es wird also jedem Knoten die Zahl Null oder Eins zugeordnet.*

(c) *Die Zeitentwicklung des Booleschen Netzwerkes zu einem Anfangszustand  $\vec{b}_0$  zur Zeit  $t = 0$  ist gegeben durch*

$$\vec{b}_{t+1} = (\widehat{f}_{v_1}(\vec{b}_t), \widehat{f}_{v_2}(\vec{b}_t), \dots, \widehat{f}_{v_n}(\vec{b}_t)).$$

*Hierbei ist  $\widehat{f}_{v_i} := f_{v_i} \circ \Pi_{v_i}$  die Komposition aus  $f_{v_i}$  mit der Abbildung  $\Pi_{v_i} : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^{k_i}$ .  $\Pi_{v_i}$  wählt aus dem gesamten Zustandsvektor  $\vec{b}_t$  nur diejenigen Elemente  $b_{t,j}$  aus, für die gilt  $(v_j, v_i) \in \vec{E}$ , die also zu Knoten aus  $V$  gehören, von denen eine Kante auf  $v_i$  zeigt.*

BEMERKUNG 4.35 (a) *Haben alle Knoten im Graphen den Eingangsgrad 1, dann ist das Boolesche Netzwerk entweder eine Kette (string) oder ein Kreis (loop).*

(b) *Falls das Netzwerk eine Kette ist oder ein Kreis, bei dem mindestens einem der Knoten die konstante Funktion 0 oder 1 zugeordnet ist, dann ist die Zeitentwicklung nach spätestens  $n = \#V$  Schritten konstant (bzw. hat einen stabilen Zustand erreicht).*

(c) *In einem Kreis, in dem die Booleschen Funktionen nur die Identität oder die Inverse sind, gilt: Ist die Zahl der Knoten mit der Funktion Invers gerade, dann nimmt der Kreis nach spätestens  $n$  Schritten wieder den Anfangszustand an, die Zeitentwicklung beschreibt also einen Zykel der Länge  $\ell \leq n$ . Ist die Zahl der Knoten mit der Funktion Invers ungerade, dann wird der Anfangszustand nach spätestens  $2n$  Schritten wieder angenommen. Jeder Anfangszustand gehört also zu einem Zykel oder ist ein Gleichgewichtszustand.*

Biochemische Prozesse (z.B. genregulatorische oder Transskriptions-Netzwerke) lassen sich näherungsweise auch durch Boolesche Netzwerke beschreiben. Die Variablen sind dann eigentlich nicht boolesch, sondern können Werte in einem bestimmten Intervall annehmen, die assoziierten Funktionen sind sigmoidal. Die Identität ist dann eine Näherung für eine stetige Funktion, die monoton von null auf eins wächst, die Inverse beschreibt eine entsprechend fallende Funktion.

## 4.5 Clusteranalyse von Graphen

Bei der Clusteranalyse eines Graphen  $G$  wird der anhand der Kanten gegebene Zusammenhalt bzw. der Grad der *Cliquenbildung* der Knoten in  $G$  untersucht. Als Clique bezeichnet



man hierbei eine Teilmenge von Knoten in  $G$  die vollständig verbunden ist, bei der also zwischen jedem Knotenpaar eine Kante existiert. Dieser Zusammenhalt der Knoten kann über sogenannte Clusterkoeffizienten quantitativ erfasst werden, in denen die Anzahl an vorliegenden Verbindungen zwischen den zu einem Knoten adjazenten Knoten berücksichtigt werden.

### Clusterkoeffizienten

DEFINITION 4.36 *In einem einfachen Graphen  $G = (V, E)$  ist der lokale Clusterkoeffizient  $C(v_i)$  eines Knoten  $v_i \in V$  gegeben als*

$$C(v_i) = \begin{cases} \frac{\sum_{j,k=1, k>j}^n a_{i,j}a_{i,k}a_{j,k}}{k(v_i)(k(v_i)-1)/2} & \text{falls } k(v_i) > 1, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.13)$$

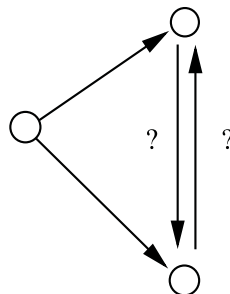
Der globale Clusterkoeffizient  $C(G)$  von  $G$  ist als Mittelwert sämtlicher lokalen Clusterkoeffizienten gegeben

$$C(G) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n C(v_i).$$

In einem einfachen Graphen entspricht die Anzahl an Nachbarknoten von  $v_i$  dem Grad  $k(v_i)$ . Falls  $v_i$  weniger als zwei Nachbarknoten besitzt, d.h.  $k(v_i) \leq 1$ , so können keine Kanten in dieser Nachbarschaft von  $v_i$  existieren, weshalb für diesen Fall  $C(v_i) = 0$  gesetzt werden kann. Falls  $k(v_i) > 1$ , können in einem einfachen Graphen die  $k(v_i)$ -vielen Knoten in der Nachbarschaft von  $v_i$  durch maximal  $k(v_i)(k(v_i) - 1)/2$  Kanten miteinander verbunden sein. Dies entspricht gerade dem Nenner von  $C(v_i)$  mit dem die tatsächliche Anzahl an Kanten zwischen den adjazenten Knoten von  $v_i$ , die sich aus der Summe  $\sum_{j,k=1, k>j}^n a_{i,j}a_{i,k}a_{j,k}$  ergibt, in Gl. (4.13) normiert wird. Der lokale Clusterkoeffizient  $C(v_i)$  kann somit maximal den Wert 1 haben, und zwar genau dann, wenn alle Nachbarknoten von  $v_i$  vollständig miteinander verbunden sind. Existiert keine einzige Kante zwischen den Nachbarknoten, so ist  $C(v_i) = 0$ . Wir betrachten zur Definition und Berechnung von Clusterkoeffizienten wieder ein einfaches Beispiel (siehe Vorlesung).

BEMERKUNG 4.37 *Die Definition von Clusterkoeffizienten kann auch auf (a) gerichtete und (b) gewichtete Graphen erweitert werden. Allerdings sind diese hier nicht mehr eindeutig, weil (a) die zugehörige Adjazenzmatrix nicht mehr symmetrisch bzw. (b) der in Gl. (4.13) zu verwendende Normierungsfaktor unklar ist.*

- (a) *In gerichteten Graphen ist es naheliegend, ähnlich wie bei den Knotengraden, zwischen dem Eingangs- und Ausgangskoeffizienten  $C_{in}(v_i)$  und  $C_{out}(v_i)$  eines Knoten zu unterscheiden. Jedoch ist hierbei unklar welche Richtung für die Kanten zwischen den adjazenten Knoten von  $v_i$  zu fordern ist:*



Üblicherweise tendiert man dazu beide Richtungen einzubeziehen, so dass

$$C_{in}(v_i) = \begin{cases} \frac{\sum_{j,k=1, k>j}^n a_{j,i}a_{k,i} \cdot \frac{a_{j,k} + a_{k,j}}{2}}{k_{in}(v_i)(k_{in}(v_i)-1)/2} & \text{falls } k_{in}(v_i) > 1 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.14)$$

und

$$C_{out}(v_i) = \begin{cases} \frac{\sum_{j,k=1, k>j}^n a_{i,j}a_{i,k} \cdot \frac{a_{j,k} + a_{k,j}}{2}}{k_{out}(v_i)(k_{out}(v_i)-1)/2} & \text{falls } k_{out}(v_i) > 1. \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.15)$$

Die globalen Eingangs- und Ausgangskoeffizienten  $C_{in}(G)$  und  $C_{out}(G)$  eines gerichteten Graphen  $G$  ergeben sich dann wieder aus den Mittelwerten der jeweiligen lokalen Clusterkoeffizienten:

$$C_{in}(G) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n C_{in}(v_i) \quad \text{und} \quad C_{out}(G) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n C_{out}(v_i).$$

- (b) Bei gewichteten Graphen möchte man die Kantengewichte in den Clusterkoeffizienten berücksichtigen. Jedoch stellt sich hierbei das Problem nach dem zu verwendenden Normierungsfaktor, da unklar ist welche Gewichte den möglicherweise fehlenden Kanten zwischen adjazenten Knoten von  $v_i$  zuzuweisen ist. Oft verwendet man gewichtete Clusterkoeffizienten, die hierzu das durchschnittliche Kantengewicht  $\langle w \rangle = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m w_i$ :

$$C^w(v_i) = \begin{cases} \frac{\sum_{j,k=1, k>j}^n a_{i,j}^w a_{i,k}^w a_{j,k}^w}{\langle w \rangle^3 k(v_i)(k(v_i)-1)/2} & \text{falls } k(v_i) > 1. \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.16)$$

Der globale gewichtete Clusterkoeffizient eines gewichteten Graphen  $G$  ergibt sich dementsprechend dann als

$$C^w(G) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n C^w(v_i).$$

## Clustering von Graphen

In vielen Anwendungen (z.B. in Interaktions- oder sozialen Netzwerken) ist man nun daran interessiert solche Knotenmengen eines Graphen zu identifizieren die in einen starken Zusammenhalt besitzen (also die Komponenten, die in engem Austausch miteinander stehen). Solche Knotenmengen werden als *Cluster* eines Graphen bezeichnet. Zur Identifizierung von möglichen Clustern bietet sich die Betrachtung eines Zufallsspaziergangs auf dem Graphen an, insbesondere ein träger Zufallsspaziergang aufgrund seines Konvergenzverhaltens. Anhand eines Zufallsspaziergangs kann ermittelt werden wie wahrscheinlich es ist ausgehend von einem Knoten  $v_i$  die anderen Knoten im Graphen innerhalb einer bestimmten Schrittzahl  $t$  zu erreichen. Diese Information ist in der  $i$ -ten Zeile der  $t$ -ten Potenz der Übergangsmatrix des Zufallsspaziergangs gegeben. Da die Knoten eines gesuchten Clusters in engem Austausch miteinander stehen sollen, sollten auch die zugehörigen

Zeilen in der  $t$ -ten Potenz der Übergangsmatrix für solche Knoten ähnlich sein. Über einen geeigneten Zeilenvergleich können wir also mögliche Cluster in einem Graphen identifizieren (siehe Beispiel aus der Vorlesung). Im sich so ergebenden *Clustering* eines Graphen, das sich durch Entfernen sämtlicher Kanten zwischen den gefundenen Knotenclustern ergibt, sollten idealerweise sämtliche Clusterkoeffizienten größere Werte annehmen als im nichtgeclusterten Graphen.

Ein geeignetes Clustering eines Graphen kann auch mit Hilfe der Eigenwerte und zugehörigen Eigenvektoren der Übergangsmatrix des Zufallsspaziergangs bestimmt werden. Betrachten wir hierzu zunächst einen nichtzusammenhängenden Graphen  $G$ , der sich aus zwei vollständigen Graphen zusammensetzt, die auf natürliche Weise zwei Cluster des Graphen bilden (siehe Vorlesung). Für sämtliche lokalen Clusterkoeffizienten gilt in diesem Fall  $C(v_i) = 1$ , für alle  $i = 1, \dots, n$ , und somit auch  $C(G) = 1$ . Wie wir wissen besitzt die zugehörige Übergangsmatrix  $\mathbf{T}_l$  eines trägen Zufallsspaziergangs auf  $G$  zwei Eigenvektoren zum Eigenwert  $\lambda_1 = 1$ . Modifizieren wir nun einen den Graphen, in dem wir ihn durch Einfügen einer zusätzlichen Kante zusammenhängend machen, so besitzt  $\mathbf{T}_l$  zum Eigenwert  $\lambda_1 = 1$  nur noch einen Eigenvektor. Gleichzeitig „entsteht“ allerdings ein Eigenwert  $\lambda_2$  der, im Vergleich zu allen anderen Eigenwerten, nahe an 1 liegt, d.h.

$$1 = \lambda_1 > \lambda_2 \gg \lambda_3 > \dots > \lambda_n \geq 0.$$

Der zu  $\lambda_2$  zugehörige Eigenvektor beschreibt jetzt gerade den (langsamen) Wahrscheinlichkeitsfluss zwischen den Knoten der beiden Cluster. Anhand der Vorzeichen seiner Einträge lässt sich somit das Clustering des Graphen ablesen (siehe Beispiel aus der Vorlesung). Dieses Prinzip pflanzt sich auch auf mehr als zwei Cluster fort, wobei dann mehrere Eigenwerte von  $\mathbf{T}_l$  nahe an  $\lambda_1 = 1$  liegen und das Clustering des Graphen sich aus den Kombinationen der zugehörigen Eigenvektoren ergibt.

## Distanz, Knotengrad und abgeleitete Grössen

- Definition Grad eines Knoten (ungewichtet/gewichtet) ✓
- Distanz ✓ (und Diameter)
- Definition Clusterkoeffizient (ungewichtet/gewichtet) ✓

### 4.5.1 Andere Darstellungsformen

- normierte Adjazenz-Matrix ✓
- (Kirchhoff'sche/Laplace'sche Matrix)
- Anwendung: Random Walk ✓ & Clustern ✓

## 4.6 Komplexe Netzwerke

Wichtige Eigenschaften und Größen von komplexen Netzwerken anhand von Barabasi und Oltvai's Review Artikel besprechen:

- Gradverteilung → Skalenfreiheit & Hubs ✓
- Clusterkoeffizientenverteilung → Modularität & Motife ✓
- Vergleich von Zufallsnetzwerken, skalen-freien & hierarchischen Netzwerken ✓

## 4.7 Dynamik auf Netzwerken

- (Boolean Networks)
- DGL-System ✓ (in Form von Zufallsspaziergängen)
- DGL-System ✓ (für Motife, explizit negative Feedback-Loop und Analogie zum Räuber-Beute Modell)
- (Bayesian Networks, Petri-Nets, etc.?)

## 4.8 Netzwerk-Motive

Wichtige Motife anhand von Uri Alon's Review Article besprechen:

- einfache Autoregulation
- Feedback-Loop ✓
- Feed-Forward-Loop ✓