Universität
Konstanz

Mathematik II

für Chemie, Life Science und Nanoscience

Vorlesung 1: Skalare Differentialgleichungen (Teil 1)

Dr. Stefan Frei, 20.04.2020

12 Differentialgleichungen

- **Wiederholung**: Die Ableitung

$$x'(t) := \lim_{h \to 0} \frac{x(t+h) - x(t)}{h}$$

  beschreibt die **Änderungsrate** einer Funktion $x(t)$ zum Zeitpunkt t.

- Zur Beschreibung vieler Prozesse in den Naturwissenschaften sind sowohl Funktionen selbst als auch deren Ableitungen notwendig

- **Definition**: Eine **Differentialgleichung** ist eine Gleichung, in die sowohl eine unbekannte Funktion $x(t)$ als auch deren Ableitungen (Veränderungsraten) $x'(t), x''(t)$, ... eingehen

- **Beispiel**: Wachstum einer Population $x(t)$ mit Geburtenrate λ

$$x'(t) = \lambda x(t)$$

12.1 Beispiele

Populationsdynamik: Veränderung einer Population $x(t)$ ist proportional zur Population

$$x'(t) = \lambda x(t), \quad \lambda > 0$$

Lösung diese Differentialgleichung?

- $x(t) = c\exp(\lambda t)$ ist Lösung mit beliebiger Konstante $c \in \mathbb{R}$ (unendlich viele Lösungen)
- "Beweis"

$$x'(t) = c\lambda\exp(\lambda t) = \lambda x(t)$$

- Exponentielles Wachstum
- Die Lösung ist eindeutig bestimmt, wenn wir zusätzlich $x(t_0)$ zu einem Zeitpunkt t_0 vorgeben, z.B.

$$x(0) = \alpha \quad \Rightarrow \; c\underbrace{\exp(0)}_{=1} = \alpha \quad \Rightarrow \; c = \alpha \text{ und damit } x(t) = \alpha\exp(\lambda t)$$

Radioaktiver Zerfall

- $x(t)$ Menge einer radioaktiven Substanz
- *Experimentell*: Zerfallsgeschwindigkeit $x'(t)$ **proportional** zur Substanzmenge $x(t)$

$$x'(t) = -kx(t)$$

  mit einer Proportionalitätskonstante $k > 0$.

- **Lösung** (wie oben)

$$x(t) = c \exp(-kt)$$

  mit beliebiger Konstante $c \in \mathbb{R}$

- c ist wieder eindeutig bestimmt bei Vorgabe eines Wertes $x(t_0)$
- $x(t)$ ist streng monoton fallend

Beispiel Chemische Reaktion

Bimolekulare Reaktion

$$A + B \to X$$

- Sei $x(t)$ die Konzentration des Produkts X zum Zeitpunkt t und a, b die Anfangskonzentrationen von A und B
- *Experimentell*: Veränderung $x'(t)$ ist proportional zu $a - x(t)$ und zu $b - x(t)$

$$x'(t) = \underbrace{k(a - x(t))(b - x(t))}_{=:f(x(t))}$$

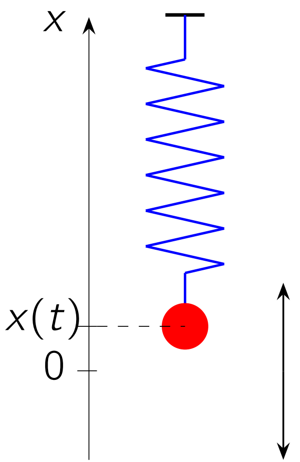
- Die rechte Seite $f(\cdot)$ ist hier nichtlinear in $x(t)$. Lösung der DGL später
- Bisher betrachtete DGL sind von der Form

$$x'(t) = f(x(t))$$

'Skalare Differentialgleichungen erster Ordnung'

Differentialgleichung zweiter Ordnung

Beispiel Federpendel mit einer Kugel der Masse m



- *Newtonsches Gesetz*: Die Beschleuniging $x''(t)$ ist proportional zur Rückstellkraft der Feder
$$mx''(t) = F$$
- *Hookesches Gesetz*: F ist proportional zur Auslenkung $x(t)$ von der Ruhelage
$$mx''(t) = -kx(t), \qquad k > 0$$
- Differentialgleichung 2. Ordnung

Ordnung einer Differentialgleichung: Maximal auftretende Ableitungsordnung (hier 2)

Beispiel Epidemiologie

Einfachstes Modell zur Beschreibung der Ausbreitung einer Epidemiologie: **SIR-Modell**

- s(t) (*susceptible*): Anteil der Population, der anfällig ist
- i(t) (*infectious*): Anteil der Population, der infektiös/ansteckend sind
- r(t) (*recovered*): Anteil der Population, der immun (genesen) sind (r(t)=1-s(t)-i(t))

Differentialgleichungen für s und i

$$\begin{aligned} s'(t) &= -\beta i(t)s(t) \\ i'(t) &= \beta i(t)s(t) - t_{\text{inf}}^{-1} i(t). \end{aligned}$$

mit den **Parametern**

- Kontaktrate β: Anzahl Personen, mit der ein Infizierter pro Tag so engen Kontakt hat, dass er sie infizieren würde
- t_{inf} Zeitspanne, in der ein Infizierter infektiös ist (z.B. 6,5 Tage)

Vereinfachung

$$s'(t) = -\beta i(t)s(t) \tag{1}$$
$$i'(t) = \beta i(t)s(t) - t_{\text{inf}}^{-1} i(t). \tag{2}$$

- **Annahme**: Zahl der Infizierten und Genesenen relativ klein $i(t), r(t) < 1\%$
- $s(t) \in [0.98, 1]$ kann kurzfristig als konstant angenommen werden $s(t) \approx s_0 \approx 1$
- Damit vereinfacht sich (2) zu
$$i'(t) = \beta s_0 i(t) - t_{\text{inf}}^{-1} i(t) = t_{\text{inf}}^{-1} \big(\underbrace{\beta s_0 t_{\text{inf}}}_{=:\mathbf{R}_0} - 1 \big) i(t)$$
- Reproduktionsrate $R_0 = \beta s_0 t_{\text{inf}}$: Anzahl der Personen, die ein Infektiöser durchschnittlich infiziert

Kurzfristiges epidemiologisches Modell

Differentialgleichung

$$i'(t) = \underbrace{t_{\text{inf}}^{-1}\big(R_0 - 1\big)}_{\widehat{=}\lambda}\, i(t)$$

- **Lösung** (wie oben)

$$i(t) = c \exp\Big(t_{\text{inf}}^{-1}\big(R_0 - 1\big)\, t\Big)$$

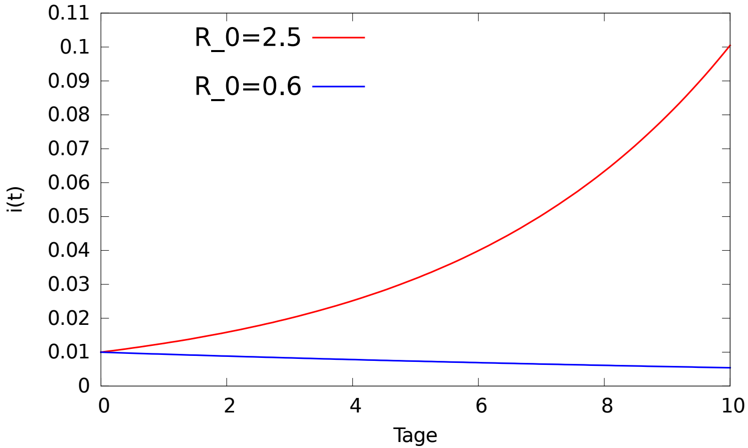
- Mit Anfangswert $i(0) = i_0$

$$i(t) = i_0 \exp\Big(t_{\text{inf}}^{-1}\big(R_0 - 1\big)\, t\Big)$$

- Reproduktionsrate $R_0 = \beta s_0 t_{inf}$ entscheidend

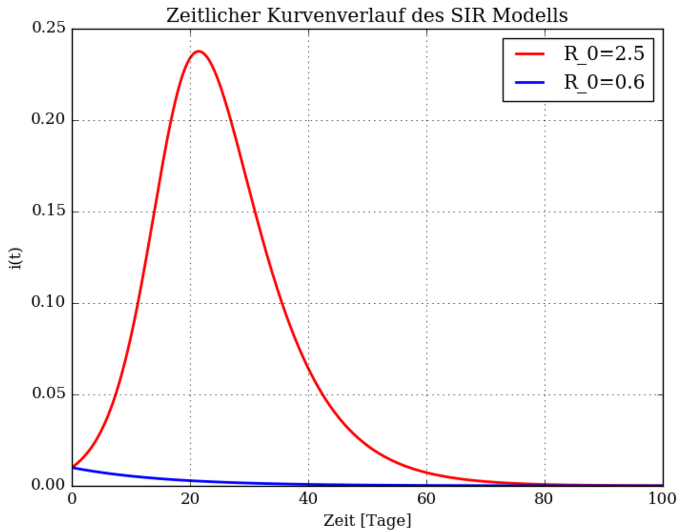
$$R_0 > 1 \;\mapsto\; i(t) \text{ exponentiell wachsend}$$
$$R_0 < 1 \;\mapsto\; i(t) \text{ streng monoton fallend}$$

Kurven



Vereinfachtes Modell (10 Tage)

$$i(t) = i_0 \exp\left(t_{\text{inf}}^{-1}(R_0 - 1)\,t\right),$$
$$R_0 = \beta s_0 t_{inf}$$



Ergebnis des Systems aus 2 Differentialgleichungen (100 Tage)

- Langfristig auch Dynamik von s relevant
- Maximum erreicht, wenn nur noch ca. 40% anfällig