

# Simulation und Modellierung - Fragen

18. Februar 2016

## 1 Spieltheorie

### Was ist eine strategische Normalform?

Mit der strategischen Normalform kann ich ein Spiel mathematisch darstellen. Dazu die Strategiemenge, also alle Strategien von allen Spielern und die Auszahlungsfunktion angegeben.

### Nutzenmatrix, Auszahlungsfkt, Zeilen/ und Spaltenspieler erklären können

Die Auszahlungsfkt beschreibt den Nutzen eines Strategiepaares für einen Spieler. Der Nutzen ist dabei eine reelle Zahl und beschreibt, wie sehr sich das Strategiepaar für den Spieler lohnt. Das Strategiepaar ist ein Paar aus einer Strategie von Spieler A und Spieler B.

Die Nutzenmatrix hat im  $ij$ -ten Eintrag den Nutzen der Strategien von Spieler A und B zu dem Strategiepaar  $ij$ .

Der Zeilenspieler ist der Spieler A und der Spaltenspieler der Spieler B?

### zu einem gegebenen Bsp Nutzenmatrix aufstellen können

Betrachten wir das Gefangenendilemma. Dabei werden Bankräuber A und B verhaftet. Falls beide nicht gestehen bekommen sie beide 7 Jahre Gefängnis. Falls beide gestehen je 3 Jahre. Falls einer Kronzeuge wird, dieser 1 Jahr und der andere 9.

Die daraus resultierende Nutzenmatrix lautet:

$$\begin{pmatrix} (-7, -7) & (-1, -9) \\ (-9, -1) & (-3, -3) \end{pmatrix}$$

### Was ist eine Reaktionsabb?

Bei der Reaktionsabbildung schaut ein Spieler sich jede Strategie vom Gegner an und wählt seine optimalen Antworten aus. Dieses ist das Bild der Reaktions-

abbildung. Mathematisch:

$$r_X : S_{-X} \rightarrow P(S)$$

$$y \mapsto \{\hat{x} \in S_X | U_X(\hat{x}, y) = \max_{x \in S_X} U_X(x, y)\}$$

### Anhand einer gegebenen Bsp-Nutzenmatrix die Begriffe dominante Strategie, gemischte Strategie und Nashgleichgewicht erklären

Bei dem Gefangenendilemma ist gestehen die dominante Strategie, da gestehen immer die beste Antwort ist, egal, was der Gegner tut.

Die Dominante Strategie kann man auch gut bei dem Spiel Stein-Schere-Papier-Brunnen erklären. Die Nutzenmatrix hat folgende Form

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Die Zeile bzw Spalte 1 ist strikt kleiner als die letzte Zeile/Spalte. Deswegen dominiert der Brunnen den Stein.

Ein Nashgleichgewicht liegt vor, wenn sowohl die Strategie a die optimale Antwort auf Strategie b ist, als auch b die optimale Antwort auf die Strategie a ist. Bei dem Gefangen Dilemma ist dies, wenn beide Spieler gestehen. Falls Der Spieler A gesteht, dann möchte der Spieler B ebenfalls gestehen (andernfalls würde er 9 Jahre bekommen) und andersrum genauso.

Gemischte Strategien hat man, wenn man mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit eine Strategie wählt z.B. bei Stein-Schere Papier wäre eine gemischte Strategie gleichverteilt zu spielen.

## 2 Gruppenentscheidungen

### Welche Eigenschaften für Relationen haben wir kennengelernt?

Wir haben folgende Eigenschaften kennengelernt:

Reflexiv: jedes Element steht in relation zu sich selbst.

Transitiv:  $xRy \wedge yRz \rightarrow xRz$

symmetrisch: Falls  $xRy$  dann gilt auch  $yRx$

asymmetrisch: Falls  $xRy$  so gilt nicht  $yRx$

konvex: Je zwei Elemente müssen in Relation zueinander stehen. Also  $xRy$  oder  $yRx$

## Was ist eine Rangabbildung?

Eine Rangabbildung spiegelt die Meinung eines Wählers wieder. Eine Kandidatenmenge wird auf einen Abschnitt aus den natürlichen Zahlen abgebildet. Eine Rangabbildung muss surjektiv sein, also jeder Rang muss vergeben werden. Dabei gilt: je kleiner der Rang von einem Kandidaten, desto bevorzugter ist der Kandidat.

## Begriffe, wie z.B. externer/ interner Diktator / Einstimmigkeit erklären können

### externer Diktator

Ein Mensch, der kein Wähler ist, bestimmt den Ausgang der Wahl. Mathematisch hat die kollektive Auswahl fkt egal bei welcher Eingabe, die Ausgabe, die der Diktator möchte.  $K(\rho_1, \dots, \rho_n) = \rho_E$

### interner Diktator

Hier bestimmt ein Wähler, welches Ergebnis bei der Wahl rauskommt. Also Der Ausgang ist immer durch den i-ten Wähler genau festgelegt, egal, was die anderen wählen.  $K(\rho_1, \dots, \rho_n) = \rho_i$

### Einstimmigkeit

Ein Kandidat x wird nur vor y gesetzt, falls alle Wähler x besser finden als y. d.h.  $x\rho y \Leftrightarrow \forall i \in \{1, \dots, n\} : x\rho_i y$

Dieses Verfahren ist kaum anwendbar, da sowas eig nie passiert. Außerdem muss das Einstimmigkeitsprinzip keine Relation liefern, da manche Kandidaten keinem Rang zugeordnet werden.

## Was ist das Cordocct Verfahren? Am geg. Bsp erklären

In diesem Verfahren vergleicht man immer zwei Kandidaten miteinander. Man nehme zwei Kandidaten und alle Präferenzrelationen der n Wähler und zählt die Vergleiche, die Kandidat A und die Kandidat B gewinnt. Gewinnt A mehr Vergleiche, so ist Kandidat A vor Kandidat B. Dies tut man nun für alle Kandidaten.

Die Formale Definition lautet:  $x\rho y \Leftrightarrow |\{i \in J | x\rho_i y\}| > |\{i \in J | y\rho_i x\}|$

Das Problem bei dieser Wahl ist, dass Zykel entstehen können. Es kann passieren, dass Kandidat A von B vor C vor A ist. Das wollen wir natürlich nicht.

Ein Beispiel ist die demokratische Familie.

## Was ist die Pareto bedingung? Unabhängig von irrelevanten Alternativen

### Pareto bedingung

Die Pareto bedingung besagt, dass falls sich alle Wähler einig sind, jedes mögliche Wahlergebnis erreichbar sein muss.

Formaler: Die kollektive Auswahl fkt  $K : P_A^n \rightarrow P_A$  erfüllt die Pareto bedingung, wenn für alle  $\rho_i \in P_A, i = 1, \dots, n$  mit  $\rho = K(\rho_1, \dots, \rho_n)$  und für alle  $x, y \in A$  gilt:

$$(\forall i \in \{1, \dots, n\} : x \rho_i y) \Rightarrow x \rho y$$

### Unabhängigkeit von irrelevanten Alternativen

Die unabhängigkeit von irrelevanten Alternativen sagt, dass die Reihenfolge von zwei Kandidaten sollte nicht dadurch geändert werden können, dass Wähler ihre Präferenz bzgl eines dritten Kandidaten verändern.

Formal:

Eine kollektive Auswahl funktion  $K : P_A^n \rightarrow P_A$  erfüllt die **Unabhängigkeit von irrelevanten Alternativen**, wenn  $\forall \rho_i, \rho'_i \in P_A \quad i = 1, \dots, n$  mit  $\rho = K(\rho_1, \dots, \rho_n), \rho' = K(\rho'_1, \dots, \rho'_n)$  und für alle  $x, y \in A$  gilt:

$$(\forall i \in \{1, \dots, n\} x \rho_i y) \Rightarrow (x \rho y \Leftrightarrow x \rho' y)$$

## Satz von Arrow (Satz III.4), Aussage + Beweis können, also auch Lemma III.5

### Satz von Arrow

Es zeigt sich im Satz von Arrow, dass kein Verfahren, außer der Interne Diktator alle Bedingungen an ein Verfahren erfüllt.

Formal:

Es sei  $A$  mit  $|A| > 2$  eine Kantenmenge und  $K : P_A^n \rightarrow P_A$  eine kollektive Auswahl funktion, die die Pareto-Bedingung sowie Unabhängigkeit von irrelevanten Alternativen erfüllt, dann gibt es immer einen (internen) Diktator, das heißt es existiert ein  $d \in \{1, \dots, n\}$  sodass für alle  $(\rho_1, \dots, \rho_n) \in P_A^n$  gilt

$$\forall (x, y) \in A \times A : x \rho_d y \Rightarrow x \rho y \text{ mit } \rho = K(\rho_1, \dots, \rho_n)$$

*Proof.* Der Beweis gliedert sich in drei Teile:

1. Extremallemma: Falls alle Wähler einen Kandidaten auf Top oder Flop setzen, so ist dieser in der kollektiven Auswahl fkt ebenfalls dort.
2. Identifikation eines potentiellen Diktators: Es gibt ein Individuum, das die Auswahl fkt kontrolliert
3. Dieses Individuum ist der Diktator

□

### Extremallemma

Es gelten die Annahmen aus dem Satz von Arrow. Dann gilt für jede Alternative  $y$ :

Wenn jeder Wähler die Alternative  $y$  als beste („Top“) oder als letzte („Flop“) Alternative wählt, dann muss die kollektive Auswahlfunktion die Alternative  $y$  ebenfalls „Top“ oder „Flop“ setzen.

*Proof.* Angenommen die Aussage sei falsch, dann würde die kollektive Auswahlfunktion  $K$  die Alternative  $y$  nicht an eine Extremalstelle setzen. Es gäbe dann also Alternativen  $x, z$ , sodass  $x\rho y\rho z$ .

Für jedes individuelle Ranking bei dem  $x$  vor  $z$  ist, setze  $z$  nach vorne. Also:

Bei jedem individuellen Ranking  $\rho_i$  bei dem  $y$  „Top“ ist, setzen wir  $z$  an zweite Stelle.

Bei jedem individuellen Ranking  $\rho_i$  bei dem  $y$  „Flop“ ist, setzen wir  $z$  auf „Top“.

Aufgrund der Unabhängigkeit irrelevanter Alternativen gilt immer noch  $x\rho y\rho z$ . Es ist jedoch bei jeder individuellen Präferenz  $i$   $z$  vor  $x$ .

Aufgrund der Pareto-Bedingung muss dann auch  $z\rho x$  gelten. Dies führt dann jedoch zu  $x\rho y\rho z\rho x$ . Dies ist ein Widerspruch zur Transitivität von  $\rho$  Widerspruch.  $\square$

### Was ist eine strategische Manipulation, Top Menge, Diktator einer Entscheidungsfkt

Zunächst braucht man die Definition der sozialen Entscheidungsfkt:

Die soziale Entscheidungsfkt bildet die Menge der Präferenzen von den Wählern auf die Menge der Kandidaten ab. Also wird jede Präferenz aller Wähler genau ein Kandidat zugeordnet. Dieser Kandidat ist der Sieger der Wahl. Formale Definition:

Eine Funktion  $e : P_A^n \rightarrow A$  heißt **soziale Entscheidungsfunktion**

### Strategische Manipulation

Die soziale Entscheidungsfkt heißt strategisch manipulierbar, falls ein Wähler der den Kandidaten B vor den Kandidaten A präferiert, statt seiner Präferenz eine andere angeben kann und damit den Kandidaten B erzwingen kann.

Die soziale Entscheidungsfkt heißt Anreizkompatibel, falls sie nicht manipulierbar ist.

Die formale Definition von strategisch Manipulierbar lautet:

Eine soziale Entscheidungsfunktion  $e : P_A^n \rightarrow A$  kann durch den Wähler  $i$  **strategisch manipuliert** werden, falls es Präferenzen  $\rho_1, \dots, \rho_n, \rho'_i \in P_A$  gibt

mit  $\rho_i \neq \rho'_i$ , sodass

$$b\rho_i a \text{ gilt für } a = e(\rho_1, \dots, \rho_i, \dots, \rho_n) \text{ und } b = e(\rho_1, \dots, \rho'_i, \dots, \rho_n)$$

### Top Menge

Eine Topmenge ist nicht, wie der Name scheint, durch eine Eigenschaft der Menge definiert, sondern durch die Relation, die auf einer Menge von Kandidaten gebildet wird. Die ursprüngliche Relation wird geändert, falls ein Element aus der Top-Menge ist und eines nicht: Dann gilt dass das Element aus der Topmenge immer in Relation zu dem aus der nicht Topmenge steht und nicht andersherum.

Formaler:

Sei  $S \subseteq A$  und  $\rho \in P_A$ . Wir führen eine weitere Präferenzrelation  $\rho^S$  folgendermaßen ein:

- für  $a, b \in S$ :  $a\rho^S b \Leftrightarrow apb$
- für  $a, b \notin S$ :  $a\rho^S b \Leftrightarrow apb$
- für  $a \in S, b \notin S$ :  $a\rho^S b$

Man kann zeigen, dass  $\rho^S$  dadurch eindeutig bestimmt ist.

### Diktator einer Entscheidungsfkt

Auch hier ist der Diktator, wie schon vorher definiert. Falls es einen Wähler gibt, dessen Wahl immer das Gesamtergebnis ist, dann ist dieser Wähler der Diktator.

Formal:

Wähler  $i$  heißt **Diktator in einer sozialen Entscheidungsfunktion**, falls für alle  $\rho_1, \dots, \rho_n \in P_A$  gilt, dass

$$e(\rho_1, \dots, \rho_n) = a$$

wobei  $a$  der eindeutig bestimmte Kandidat  $a\rho_i b$  für alle  $b \neq a$  ist. Die Funktion  $e$  heißt **diktatorisch**, falls  $e$  einen Diktator besitzt.

### Satz III.8/ Satz III.10/ Satz III.12/ Satz III.13 und Satz III.14 erklären und beweisen können

**Theorem 1.** *Eine soziale Entscheidungsfunktion ist genau dann monoton, wenn sie anreizkompatibel ist.*

*Proof.* Sei  $e$  monoton. Wann immer  $e(\rho_1, \dots, \rho_i, \dots, \rho_n) = a$  und  $e(\rho_1, \dots, \rho'_i, \dots, \rho_n) = b$  gilt, dann ist aufgrund der Monotonie  $a\rho_i b$  und  $b\rho'_i a$ . Dann kann es aber auch keine  $\rho_1, \dots, \rho_n, \rho'_i \in P_A$ , sodass  $e(\rho_1, \dots, \rho_i, \dots, \rho_n) = a$  und  $e(\rho_1, \dots, \rho'_i, \dots, \rho_n) = b$  und  $b\rho_i a$  gilt. Also ist keine Manipulation durch  $i$  möglich.

Umgekehrt kann man analog zeigen, dass jede Manipulationsmöglichkeit die Monotonie verletzt.  $\square$

**Theorem 2** (Top-Präferenz). *Sei  $e$  eine anreizkompatible und surjektive Entscheidungsfunktion. Dann gilt für alle  $\rho_1, \dots, \rho_n \in P_A$  und für alle  $\emptyset \neq S \subseteq A$ :*

$$e(\rho_1^S, \dots, \rho_n^S) \in S$$

*Proof.* Sei  $a \in S$ . Da  $e$  surjektiv ist, existieren  $\rho'_1, \dots, \rho'_n \in P_A$ , sodass  $e(\rho'_1, \dots, \rho'_n) = a$ . Nun ändere schrittweise für  $i = 1, \dots, n$  die Relation  $\rho'_i$  zu  $\rho_i^S$ . Zu keinem Zeitpunkt kann dabei  $b \notin S$  als Ergebnis von  $e$  entstehen, da  $e$  monoton ist.  $\square$

**Theorem 3.** *Falls  $e$  eine anreizkompatible und surjektive soziale Entscheidungsfunktion ist, dann ist ihre Erweiterung  $\mathcal{E}$  eine kollektiven Auswahlfunktion.*

*Proof.* zu zeigen ist:  $\rho \in P_A$

*Asymmetrie:* Wegen Lemma 2 gilt mit  $e(\rho_1^{\{a,b\}}, \dots, \rho_n^{\{a,b\}}) \in \{a, b\}$  entweder  $apb$  oder  $bpa$ .

*Transitivität:* Angenommen,  $\rho$  wäre nicht transitiv, das heißt es gelte  $apb$  und  $bpc$  aber nicht  $apc$ . Wegen der Asymmetrie gilt somit  $cpa$ . Betrachte die Menge  $S := \{a, b, c\}$ . Dann sei o.b.d.A.:

$$e(\rho_1^{\{a,b,c\}}, \dots, \rho_n^{\{a,b,c\}}) = c$$

Aufgrund der Monotonie gilt

$$e(\rho_1^{\{b,c\}}, \dots, \rho_n^{\{b,c\}}) = c$$

durch schrittweise Änderung von  $\rho_i^{\{a,b,c\}}$  auf  $\rho_i^{\{b,c\}}$ . Also haben wir dann  $cpb$  Widerspruch.

$\square$

**Theorem 4** (Erweiterungslemma). *Falls  $e$  eine anreizkompatible, surjektive und nicht-diktatorische Entscheidungsfunktion ist, so ist ihre Erweiterung  $\mathcal{E}$  eine kollektive Auswahlfunktion, die Einstimmigkeit, Unabhängigkeit irrelevanter Alternativen und nicht-diktatorische Entscheidungen erfüllt.*

*Proof.*

*Einstimmigkeit:* Sei  $a\rho_i b$  für alle  $i = 1, \dots, n$ . Dann ist wegen Lemma 2

$$e(\rho_1^{\{a,b\}}, \dots, \rho_n^{\{a,b\}}) = a$$

und somit  $apb$ .

Abhängigkeit irrelevanter Ereignisse: Falls für alle  $i = 1, \dots, n$  gilt

$$a\rho_i b \Leftrightarrow a\rho'_i b$$

dann muss

$$e\left(\rho_1^{\{a,b\}}, \dots, \rho_n^{\{a,b\}}\right) = e\left(\rho_1'^{\{a,b\}}, \dots, \rho_n'^{\{a,b\}}\right)$$

gelten, da sich das Ergebnis wegen der Monotonie von  $e$  nicht ändert, wenn man  $S_i^{\{a,b\}}$  schrittweise zu  $S_i'^{\{a,b\}}$  verändert.

Diktator: Übung.

□

**Theorem 5** (Satz von Gibbard-Satterthwaite). *Falls  $e$  eine surjektive, anreizkompatible Entscheidungsfunktion ist, so dass drei oder mehr Alternativen wählbar sind, dann ist  $e$  diktatorisch.*

### 3 Informationssuche im Netz

**Was ist ein Page Rank Vektor, ein Webgraph und eine Hyperlinkmatrix? (auch am geg. Bsp erklären können)**

#### Page Rank Vektor

Der Page Rank Vektor soll die Wichtigkeit aller Webseiten bzgl. einer Suchanfrage beschreiben. Jeder Eintrag im Vektor gehört zu einer Webseite. Je höher der Wert, desto wichtiger die Seite. Er beschreibt also die Reihenfolge der Webseiten, wie sie ein Nutzer sieht, wenn er eine Suchanfrage stellt. Man kann den Page Rank Vektor auf unterschiedliche Arten berechnen. Die Grundlegende Idee ist es, dass eine Webseite wichtiger ist, je mehr Links auf sie zeigen. Wenn man den Page Rank aus einer anderen Perspektive betrachtet, gibt er die Wkeit an, mit der sich ein Nutzer auf einer Webseite befindet.

#### Webgraph

Ein Webgraph  $G = (S, E)$  beschreibt, die Verlinkung unter allen Webseiten. Dabei ist  $S$  die Knotenmenge, also die Menge der Webseiten und  $E$  Kantenmenge, also die Menge aller Links. Dabei bedeutet  $A \rightarrow B$ , dass Webseite A einen Link hat, der auf die Webseite B verweist.

#### Hyperlinkmatrix

Die Hyperlinkmatrix beschreibt die Verlinkung der Webseiten untereinander.

$$H \in \mathbb{R}^{n \times m} \quad h_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{|S_i|} & S_i \text{ besitzt einen Link auf } S_j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$



$|S_i|$  ist die Anzahl der Hyperlinks, die von der Website  $S_i$  auf andere Webseiten verweisen.

Am besten kann man dies an einem Bsp erklären:

Grafik aus dem Script.

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

## Was ist ein Zufallssurfer?

Ein Zufallssurfer ist ein Websurfer, der zufällig auf eine Seite gelangt und sich von dort aus zufällig mit einem bestimmten Schema weiterbewegt z.b. könnte das Schema sein, dass er immer zufällig einen Link auf der Seite wählt.

## Was ist eine Markovkette/ Markovprozess?

Markov Kette = Markov Prozess

Wir gehen davon aus, dass wir zum  $k$ -ten Zeitpunkt einen bestimmten Zustand erreicht haben. Nun wollen wir die Wkeit für ein bestimmtes Ereignis zum nächsten Zeitpkt bestimmen. Falls diese Wkeit nicht davon abhängig ist, welche Ereignisse vor dem  $k$ -ten Zeitpunkt eingetreten sind, dann nennen wir den stochastischen Prozess einen Markowprozess. Formal: Sei  $t_1 < t_2 < \dots < t_{k+1} \in \mathcal{T}$  eine Folge von Zeitpunkten, dann ist  $X(t)$  ein Markovprozess, falls  $\mathbb{P}[X_{t_{k+1}} = x_{k+1} | X_{t_k} = x_k, \dots, X_{t_1} = x_1] = \mathbb{P}[X_{t_{k+1}} = x_{k+1} | X_{t_k} = x_k]$

Wenn wir die Webseiten als Ereignisse und die diskreten Zeitpunkte betrachten ist das wechseln von einer Webseite zu einer anderen ein Markowprozess, da er nicht davon abhängt, welche Seiten der Nutzer vorher besucht hat. Die Links auf einer Seite verändern sich dadurch nicht

## Was ist eine Übergangsmatrix/ Markoveigenschaft?

### Übergangsmatrix

Die Übergangsmatrix beschreibt, ähnlich wie die Hyperlinkmatrix, die Verlinkung der Webseiten untereinander. Nur kommt hier ein Term hinzu, der in Kraft tritt, sobald eine Webseite überhaupt keinen Link hat. Dann springt der Zufallssurfer gleichverteilt auf eine beliebige Webseite.

Formal: Sei  $\mathbb{P}[X_{k+1} = S_j | X_k = S_i]$  die Wahrscheinlichkeit im  $k$ -ten Zeitschritt von einer Seite  $S_i \in E$  auf  $S_j \in E$  zu wechseln. Dieses ist, dadurch dass wir eine Markowkette haben, Unabhängig vom Zeitpunkt  $k$ . Definiere nun

$$\mathbb{P}[X_1 = S_j | X_0 = S_i] = \begin{cases} \frac{1}{|S_i|} & S_i \text{ besitzt einen Link zu } S_j \\ \frac{1}{n} & S_i \text{ besitzt überhaupt keinen Link} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Damit können wir die **Übergangsmatrix der Markov-Kette** aufstellen:

$$U \in \mathbb{R}^{n,m} \quad u_{ij} := \mathbb{P}[X_1 = S_j | X_0 = S_i]$$

Die Matrix  $U$  ist eine **stochastische Matrix**, das heißt

$$u_{ij} \geq 0 \text{ und } \sum_{j=1}^n u_{ij} = 1$$

### Markov Eigenschaft

Die Markov Eigenschaft, ist die Eigenschaft einer Markov Kette, dass  $\mathbb{P}[X_{t_{k+1}} = x_{k+1} | X_{t_k} = x_k, \dots, X_{t_1} = x_1] = \mathbb{P}[X_{t_{k+1}} = x_{k+1} | X_{t_k} = x_{t_k}]$

### Wie kann man eine Markov Kette für das Google-Problem benutzen?

Markov Ketten kann man für das Google Problem nutzen, da die Modellierung mit der Übergangsmatrix die Markov Eigenschaft erfüllt.

Dabei ist nun  $\pi_j^{(k)} = \mathbb{P}[X_k = S_j]$  die Wahrscheinlichkeit, dass der Zufallssurfer im  $k$ -ten Schritt auf  $S_j$  ist. Mit der Markov Eigenschaft gilt, dass  $\mathbb{P}[X_n = j] = \sum_{i \in I} \mathbb{P}[X_0 = i] \mathbb{P}[X_n = j | x_0 = i]$ . Dies kann man benutzen, um zu zeigen, dass

$$\left(\pi^{(k)}\right)^T = \left(\pi^{(k-1)}\right)^T U = \dots = \left(\pi^{(0)}\right)^T U^k$$

gilt, wobei  $U$  wie vorhin die Übergangsmatrix ist.

### Perron Frobenius Theorie erklären können und die entsprechenden Definitionen beherrschen, sowie Satz IV.1, Satz IV.2, Lemma IV.4, Satz IV.5 erklären und beweisen können

Die Perron Frobenius Theorie beschäftigt sich mit der Frage, ob  $A^T x = x$  eine eindeutige Lösung besitzt.

hie am besten erst später eine genaue erklärung einfügen.

### einfacher, strikt dominanter Eigenwert

$|\lambda_1| = 1$  ist der betragsmäßig größte EW und ist eindeutig.

### diagonalisierbar

Die Matrix  $A$  heißt diagonalisierbar, falls es eine invertierbare Matrix  $S$  gibt, sodass  $D = S^{-1}AS$  und  $D$  eine Diagonalmatrix ist.

Die Diagonaleinträge auf  $D$  sind die Eigenwerte von  $A$ .

### Theorem IV.1

Sei  $\lambda_1$  ein einfacher und strikt dominanter Eigenwert der Matrix  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  mit dem zugehörigen (Rechts-)Eigenvektor  $v_1$  und Linkeigenvektor  $w_1$  mit  $w_1^T v_1 = 1$ . Dann gilt für jede Lösung von

$$x^{k+1} = Ax^k \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

dass

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x^k}{\lambda_1^k} = (w_1^T x^0) v_1$$

*Proof.* Wir führen den Beweis für diagonalisierbare Matrizen  $A$  durch (der allgemeine Beweis ist möglich mit Hilfe der Jordan-Normalform).

Sei also  $A$  diagonalisierbar mit Eigenwerten  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  und  $|\lambda_1| > |\lambda_i|$ ,  $i = 2, \dots, n$ .

Sei nun  $A$  diagonalisierbar, dann existiert eine Basis aus Eigenvektoren  $v_1, \dots, v_n$  mit zugehörigen EW  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ . Also lässt sich jeder beliebige Anfangszustand darstellen als  $x_0 = \beta_1 v_1 + \dots + \beta_n v_n$ ,  $\beta_i \in \mathbb{C}$ . Die Lösung ist dann gegeben durch

$$x^k = \lambda_1^k \beta_1 v_1 + \dots + \lambda_n^k \beta_n v_n$$

Setzen wir dies ein, erhalten wir:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x^k}{\lambda_1^k} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\lambda_1^k \beta_1 v_1 + \dots + \lambda_n^k \beta_n v_n}{\lambda_1^k} = \beta_1 v_1$$

da  $|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}| < 1$ .

Wir wollen zeigen, dass  $\beta_1 = w_1^T x^0$  gilt. Da  $\beta_1 = w_1^T \beta_1 v_1$  muss nur noch gezeigt werden, dass  $w_1^T \beta_1 v_1 = w_1^T x^0$  gilt. Betrachten wir  $w_1^T A v_i$ , so gilt:

$$w_1^T \lambda_i v_i = w_1^T A v_i = \lambda_1 w_1^T v_i \Rightarrow (\lambda_i - \lambda_1) w_1^T v_i = 0 \forall i$$

Daraus folgt für  $\lambda_i - \lambda_1 \neq 0$ , dass  $w_1^T v_2 = \dots = w_1^T v_n = 0$  und damit

$$w_1^T x^0 = \beta_1 w_1^T v_1 = \beta_1$$

□

### Positive Matrizen

Eine Matrix  $A$  heißt **positiv**, falls alle Einträge in  $A$  positiv sind.

$\sigma(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} | \text{Ker}(A - \lambda I) \neq 0\}$  heißt **Spektrum** der Matrix  $A$ .

$\rho(A) = \max\{|\lambda| | \lambda \in \sigma(A)\}$  heißt **Spektralradius** von  $A$ .

### Satz von Perron (Satz IV.2)

Sei  $A > 0$  mit Spektralradius  $\rho(A) = 1$ , dann gilt

1. Der Spektralradius  $\rho(A) = 1$  ist Eigenwert
2. Der Eigenwert  $\lambda = 1$  ist der einzige auf dem Einheitskreis
3. Zu  $\lambda = 1$  existieren positive Rechts- und Linkseigenvektoren
4. Der Eigenwert  $\lambda = 1$  hat algebraische Vielfachheit 1
5. Außer dem Rechtseigenvektor  $v_1$  gibt es keine weiteren nicht negativen Eigenvektoren von  $A$  (bis auf skalare Vielfache)

*Proof.*

1. Betrachte zunächst mögliche Eigenvektoren  $x$  zum Eigenwert  $\lambda$  auf dem Einheitskreis  $|\lambda| = 1$ . Für diese gilt

$$|x| = |\lambda||x| = |\lambda x| = |Ax| \leq |A||x| = A|x| \quad (3)$$

Falls solche Eigenvektoren  $x \neq 0$  existieren, so gilt

$$z := A|x| > 0$$

Definiere  $y := z - |x|$ , dann kann man (3) zu  $y \geq 0$  umformulieren.

Nehmen wir nun an, dass  $y \neq 0$  gelten würde, so folgt

$$Ay > 0$$

Dann existiert auch  $\tau > 0$ , sodass  $Ay > \tau z$  womit folgt

$$Ay = Az - A|x| = Az - z > \tau z \Leftrightarrow Az > (1 + \tau)z$$

Setze  $B := \frac{1}{1+\tau}A$ , dann gilt

$$Bz > z$$

Wiederholtes Anwenden ergibt schließlich  $B^k z > z$  und mit  $\rho(B) = \frac{1}{1+\tau} < 1$  folgt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} B^k z = 0 > z$$

Dies steht im Widerspruch zu  $z > 0$  bzw.  $y \neq 0$  . Widerspruch  
Also ist

$$y = A|x| - |x| = 0$$

und damit existiert ein Eigenwert  $\lambda = 1$

2. Die Widerspruchsannahme  $y \neq 0$  ( $A|x| - |x| \neq 0$ ) schloss  $\lambda = 1$  mit ein. Somit ist  $\lambda = 1 \in \mathbb{R}$  einziger Eigenwert auf dem Einheitskreis.
3. Wegen  $|x| = A|x| > 0$  sind alle Komponenten positiv. Dies gilt auch für Links- Rechtseigenvektoren gleichermaßen, da auch  $A^T$  positiv ist
4. zu lang
5. zu lang

□

## Perron-Eigenwert

Der EW  $\lambda = \rho(A)$  wird Perron Eigenwert genannt

## irreduzibel

Sei  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ .

Eine Matrix  $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$  heißt **Permutationsmatrix**, falls  $p_{ij} \in \{0, 1\}$  und jede Spalte und Zeile genau eine Eins enthält.

$A$  heißt **reduzibel**, falls es eine Permutationsmatrix  $P$  gibt, sodass

$$P^T A P = \begin{pmatrix} C & D \\ 0 & F \end{pmatrix}$$

wobei die Blockmatrizen  $C$  und  $F$  quadratisch sein müssen.

Falls kein solcher *Nullblock* existiert, so ist die Matrix **irreduzibel**.

Im gerichtete Graphen ist eine Permutation nur eine Umnummerierung der Kanten. Ein Graph ist irreduzibel (oder auch stark zusammenhängend), falls von jedem Knoten zu jedem anderen Knoten ein zusammenhängender Pfad existiert.

## Charakterisierung der Irreduzibilität: Lemma IV.4

Falls  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $A \geq 0$  irreduzibel ist, dann gilt

$$(I + A)^{n-1} > 0$$

*Proof.* Seien  $A^k = (a_{ij}^{(k)})_{i,j=1,\dots,k}$  die Potenzen der nicht-negativen Matrix  $A$ . Elementweise gilt dann

$$a_{ij}^{(k)} = \sum_{l_1, \dots, l_k} a_{il_1} a_{l_1 l_2} \dots a_{l_{k-1} j}$$

Diese Elemente verschwinden, falls mindestens einer der Faktoren verschwindet, also falls beim zugehörigen Graphen kein Pfad vom Knoten  $i$  zu  $j$  existiert.

Falls jedoch dieser Graph existiert, so ergibt es mindestens eine Indexfolge  $a_{il_1^*} > 0, \dots, a_{l_{k-1}^* j} > 0$ . Bei einer irreduziblen Matrix tritt dieser Fall spätestens nach durchlaufen aller Knoten auf, also  $n-1$ :

$$[(I + A)^{n-1}]_{ij} = \left[ \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n-1}{k} A^k \right]_{ij} = \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n-1}{k} a_{ij}^{(k)} > 0$$

□

## Satz von Perron Frobenius. Satz IV.5

Es sei  $A \geq 0$  eine irreduzible stochastische Matrix. Dann gilt:

1. Der Perron-Eigenwert  $\lambda = 1$  ist einfach

2. Zu  $\lambda = 1$  existiert ein Linkseigenvektor  $\pi^T > 0$

*Proof.* 1. Sei  $A$  stochastisch, also  $Ae = e$  mit  $e^T = (1, \dots, 1)^T$  Rechtseigenvektor zum Eigenwert  $\lambda = 1$  ist. Es gilt

$$|\lambda(A)| \leq \rho(A) \leq \|A\|_\infty \leq 1$$

wobei  $\|\cdot\|_\infty$  die Maximumsnorm ist.

Zeige nun: Der Eigenwert ist einfach. Betrachte dazu

$$B := (I + A)^{n-1} > 0$$

Seien nun  $\lambda$  die Eigenwerte von  $A$  zum EV  $v$ , dann sind die Eigenwerte von  $B$  gerade  $(1 + \lambda)^{n-1}$  zum EV  $v^{n-1}$

$$\mu = \rho(B) = \max_{|\lambda| < 1} |1 + \lambda|^{n-1} = 2^{n-1} \quad (4)$$

Dieser Eigenwert ist einfach und liegt auf dem Kreis mit Radius  $\mu$ . Das Maximum in (4) wird für  $\lambda = 1$  angenommen. Also sind Multiplizität des Eigenwertes  $\mu$  von  $B$  und des Eigenwertes  $\lambda$  von  $A$  gleich.

2. Jeder Eigenvektor zum Eigenwert  $\lambda$  von  $A$  ist auch zugleich Eigenvektor zum Eigenwert  $(1 + \lambda)^{n-1}$  von  $B$ .

Sei  $x$  Eigenvektor zu  $\mu$  von  $B$  und zugleich  $\lambda = 1$  zu  $A$ , dann ist  $x = |x| > 0$  (aufgrund des Satzes ??). Durch Anwendung auf den Links-Eigenvektor erhält man mit Satz ??c) die Behauptung.

□

## Erklären können, wie der Page Rank Vektor mittels Vektoriteration berechnet wird

Wir haben das Problem gegeben: Finde eine Lösung des Eigenwert Problems  $G^T \pi = \pi$  mit  $\pi^T e = 1$ , Wobei  $G$  die Google Matrix mit  $G = \alpha(H + \frac{1}{n}ae^T) + (1 - \alpha)\frac{1}{n}ee^T$  ist.

Bei der Vektoriteration berechnen wir eine Lösung, indem wir  $\pi^{(k+1)} = G^T \pi^{(k)}$  berechnen. Da  $G$  aber voll besetzt und sehr groß ist, berechnen wir lieber  $\pi^{(k+1)} = \alpha H^T \pi^{(k)} + \frac{e(\alpha a^T \pi^{(k)} + (1 - \alpha))}{n}$

- $H$  - Hyperlink Matrix - dünn besetzt
- $U$  - Übergangsmatrix - dünn besetzt, stochastisch
- $G$  - Google Matrix - voll besetzt, primitiv, stochastisch
- $E = \frac{1}{n}ee^T$  - Teleportationsmatrix
- $n$  - Anzahl der Webseiten
- $\alpha$  Skalierungsparameter
- $\pi^T$  - stationäre Verteilung als Zeilenvektor
- $a$  - binäre hängende Knoten Vektor

**Konvergenzgeschwindigkeit/ Sensitivitätsanalyse (Satz IV.8 erklären und beweisen können), Satz IV.9/ Satz IV.10 erklären und grobe Beweisskizze**

**Theorem IV.8**

Sei das Spektrum der stochastischen Matrix  $U$  gegeben durch  $\{1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ . Dann ist zu beliebigem Wahrscheinlichkeitsvektor  $\nu$  das Spektrum der Google Matrix  $G = \alpha U + (1 - \alpha)e\nu^T$  gegeben durch

$$\{1, \alpha\lambda_2, \dots, \alpha\lambda_n\}$$

*Proof.* Da  $U$  stochastisch ist, ist  $(1, e)$  ein Eigenpaar von  $U$  (d.h.  $Ue = e$ ). Sei

$$Q = (e, X)$$

eine nicht-singuläre Matrix, die den Eigenvektor  $e$  in der ersten Spalte hat. Des weiteren

$$Q^{-1} = \begin{pmatrix} y^T \\ Y^T \end{pmatrix}$$

Dann ist

$$Q^{-1} \cdot Q = \begin{pmatrix} y^T e & y^T X \\ Y^T e & Y^T X \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0^T & I \end{pmatrix}$$

Das gibt uns die Identitäten  $y^T e = 1, Y^T e = 0$ . Somit gilt für die Ähnlichkeitstransformation

$$Q^{-1} U Q = \begin{pmatrix} y^T e & y^T U X \\ Y^T e & Y^T U X \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & y^T U X \\ 0^T & Y^T U X \end{pmatrix}$$

Somit enthält  $Y^T U X$  die übrigen Eigenwerte  $\lambda_2, \dots, \lambda_n$  von  $U$ .

Wenden wir nun diese Ähnlichkeitstransformation auch auf  $G$  an, so erhalten wir

$$\begin{aligned} Q^{-1} (\alpha U + (1 - \alpha)e\nu^T) Q &= \alpha Q^{-1} U Q + (1 - \alpha) Q^{-1} e \nu^T Q \\ &= \begin{pmatrix} \alpha & \alpha y^T U X \\ 0 & \alpha Y^T U X \end{pmatrix} + (1 - \alpha) \begin{pmatrix} y^T e \\ Y^T e \end{pmatrix} (\nu^T e & \nu^T X) \\ &= \begin{pmatrix} \alpha & \alpha y^T U X \\ 0 & \alpha Y^T U X \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 - \alpha & (1 - \alpha) \nu^T X \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & \alpha y^T U X + (1 - \alpha) \nu^T X \\ 0 & \alpha Y^T U X \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Da  $Y^T U X$  die übrigen Eigenwerte von  $U$  enthält sind die Eigenwerte von  $G$  gegeben durch  $\{1, \alpha\lambda_2, \dots, \alpha\lambda_n\}$ .  $\square$

### Theorem IV.9

Sei  $\pi^T(\alpha)$  der Page Rank Vektor der Google-Matrix. Dann gilt

1.  $\left| \frac{d\pi_j(\alpha)}{d\alpha} \right| \leq \frac{1}{1-\alpha}$  für jedes  $j = 1, \dots, n$
2.  $\left\| \frac{d\pi^T(\alpha)}{d\alpha} \right\|_1 \leq \frac{2}{1-\alpha}$

*Proof.* 1. Leite  $\pi^T(\alpha) = \pi^T(\alpha) (\alpha U + (1-\alpha)e\nu^T)$  ab mit dem Wissen, dass  $\frac{d\pi^T(\alpha)}{d\alpha} e = 0$  (da  $\pi^T e = 1$ )

2. Es gilt:  $\frac{d\pi^T(\alpha)}{d\alpha} = \pi^T(\alpha)(U - e\nu^T)(I - \alpha U)^{-1}$
3. schätze nun die einzelnen Terme von  $\frac{d\pi_j^T(\alpha)}{d\alpha}$  ab.
4. es ergibt sich:  $\left| \frac{d\pi_j(\alpha)}{d\alpha} \right| \leq \left\| \pi^T(\alpha)(U - e\nu^T) \right\| \left( \frac{y_{\max} - y_{\min}}{2} \right)$  mit  $y = (I - \alpha U)^{-1} e_j$
5. dabei gilt:  $\left\| \pi^T(\alpha)(U - e\nu^T) \right\|_1 \leq 2$
6. außerdem gilt:  $y_{\min} \leq 0$  und  $y_{\max} \leq \frac{1}{1-\alpha}$

□

### Satz IV.10

Es sei  $G = \alpha U + (1-\alpha)e\nu^T$  die Google Matrix mit Page-Rank-Vektor  $\pi^T$  und  $\tilde{G} = \alpha \tilde{U} + (1-\alpha)e\nu^T$  ein Update der Google-Matrix mit Page-Rank Vektor  $\tilde{\pi}^T$ . Dann gilt

$$\|\pi - \tilde{\pi}\|_1 \leq \frac{2\alpha}{1-\alpha} \sum_{i \in U} \pi_i \quad (5)$$

wobei  $U$  die Menge aller Seiten ist, die aktualisiert wurden.

*Proof.* 1. Da  $G^T \pi = \pi$ , gilt  $\pi^T - \tilde{\pi}^T = \alpha \pi^T F + \alpha(\pi^T - \tilde{\pi}^T) \tilde{U}$  mit  $F = U - \tilde{U}$

2. Umstellen ergibt  $\pi^T - \tilde{\pi}^T = \alpha \pi^T F (I - \alpha \tilde{U})^{-1}$
3. Anwendung der 1-Norm ergibt  $\|\pi^T - \tilde{\pi}^T\|_1 \leq \frac{\alpha}{1-\alpha} \|\pi^T F\|_1$
4. Nun ordnen wir  $F$  (und  $\pi^T$ ) so, dass die Webseiten mit einem Update in den obersten Zeilen sind, also  $\pi^T F = \begin{pmatrix} \pi_1^T & \pi_2^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \pi_1^T F_1$
5. somit gilt:  $\|\pi^T F\|_1 = \|\pi_1^T F_1\|_1 \leq \|\pi^T\|_1 \|F_1\|_\infty$
6. Berechnungen ergeben:  $\|F_1\|_1 \leq 2$
7. also gilt:  $\|\pi^T F\|_1 \leq 2 \sum_{i \in U} \pi_i \Rightarrow \|\pi^T - \tilde{\pi}^T\|_1 \leq \frac{2\alpha}{1-\alpha} \sum_{i \in U} \pi_i$

□



## Satz IV.11 und Satz IV.12 erklären und beweisen können

### Satz IV.11

Auflösen des linearen Gleichungssystems

$$x^T(I - \alpha H) = \nu^T \quad (6)$$

ergibt  $\pi^T = \frac{x^T}{x^T e}$ , wobei  $\pi^T$  der Page Rank Vektor ist.

*Proof.*  $\pi^T$  ist Page Rank Vektor und erfüllt  $\pi^T G = \pi^T$  und  $\pi^T e = 1$ . Somit gilt

$$\pi^T G = \pi^T \Leftrightarrow \pi^T(I - G) = 0$$

und damit

$$\begin{aligned} x^T(I - G) &= x^T(I - \alpha H - \alpha \nu^T - (1 - \alpha)e\nu^T) \\ &= x^T(I - \alpha H) - x^T(\alpha e + (1 - \alpha)e)\nu^T \\ &= \nu^T - \nu^T = 0 \end{aligned}$$

wobei wir verwendet haben, dass  $x^T(\alpha e + (1 - \alpha)e) = 1$  ist, denn

$$\begin{aligned} 1 &= \nu^T e = x^T(I - \alpha H)e \\ &= x^T e - \alpha x^T H e \\ &\stackrel{(*)}{=} x^T e - \alpha x^T(e - a) \\ &= (1 - \alpha)x^T + \alpha x^T a \end{aligned}$$

Dabei wurde im Schritt  $(*)$  verwendet, dass hängende Knoten Nullzeilen in  $H$  sind.  $\square$

### Satz IV.12

Gegeben sei die stochastische Matrix  $U$  mit dem Spektrum  $\{1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n\}$ , dann ist das Spektrum von

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \alpha U & (1 - \alpha)e \\ \nu^T & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (n+1)}$$

gegeben durch  $\{1, \alpha\lambda_2, \dots, \alpha\lambda_n, \alpha - 1\}$ .

*Proof.* Sei  $Q = \begin{pmatrix} I & e \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ ,  $Q^{-1} = \begin{pmatrix} I & -e \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ .

Eine Ähnlichkeitstransformation bringt uns

$$Q^{-1}\hat{U}Q = \begin{pmatrix} \alpha U - e\nu^T & 0 \\ \nu^T & 1 \end{pmatrix}$$

und somit ist das Spektrum  $\sigma(Q^{-1}\hat{U}Q) = \{1\} \cup \sigma(\alpha U - e\nu^T) = \{1, \alpha - 1, \alpha\lambda_2, \dots, \alpha\lambda_n\}$ . Für das Spektrum  $\sigma(\alpha U - e\nu^T)$  verwendet man den gleichen Trick wie in Satz IV.8  $\square$

## 4 Verkehrssimulation

### Grundidee der makroskopischen Verkehrssimulation

Die Grundidee der makroskopischen Verkehrsmodellierung ist es, dass nicht einzelne Fahrzeuge, sondern der Fluss bzw die Dichte betrachtet wird. Wir modellieren hier wie das Verhalten von Gas oder einer Flüssigkeit. Dies ist sinnvoll, falls eine mikroskopische Modellierung zu schwer wäre oder mikroskopische Größen irrelevant sind.

### Begriffe: Fluss, Dichte und Fundamentaldiagramm erklären können

#### Fluss, Dichte und deren Zusammenhang.

Der Fluss  $q$  ist die Anzahl der Autos pro Stunde an einem festen Ort. Die Dichte  $\rho$  ist die Anzahl der Autos pro Kilometer. Um den Zusammenhang zu erklären, nehmen wir an, dass die Fahrzeuge mit konstanter Geschwindigkeit fahren und die Dichte konstant ist.

Der Fluss muss von der Dichte abhängen, da es einen Unterschied bei Fluss macht, ob sich viele Fahrzeuge auf der Strecke befinden, oder wenig. Allerdings kann ein kleiner Fluss bedeuten, dass sehr viele Autos auf der Strecke sind (Stau) oder sehr wenig (kein Auto). Deshalb spielt die Geschwindigkeit der Fahrzeuge noch eine große Rolle. Nun kann man sagen, dass wenn eine große Dichte da ist und die Autos eine hohe Geschwindigkeit haben, auch ein großer Fluss vorhanden sein muss.

#### Fundamentaldiagramm

Das Fundamentaldiagramm stellt diesen Zusammenhang zwischen Fluss und Dichte dar. Genauer: Es stellt die Abhängigkeit vom Fluss von der Dichte dar. Diagramm auf Karte malen.

### Erhaltungssätze herleiten können (Anzahl der Autos)

#### Herleitung Integraler Erhaltungssatz

1. Die Anzahl der Autos zwischen zwei Orten  $a$  und  $b$  ist:  $N(t) = \int_a^b \rho(x, t) dx$
2. Die Anzahl der Autos auf dieser Strecke verändert sich nur über den Rand:  
 $\frac{dN(t)}{dt} := q(a, t) - q(b, t)$
3. zusammen ergibt das:  $\frac{d}{dt} \int_a^b \rho(x, t) dx = q(a, t) - q(b, t)$

#### Herleitung des differentiellen Erhaltungssatzes

1. Mit anderen Integrationsgrenzen folgt aus dem Integralen Erhaltungssatz:  
 $-\int_x^{x+\Delta x} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\xi, t) d\xi = q(x + \Delta x, t) - q(x, t)$

2. Division mit  $\Delta x$  und  $\Delta x \rightarrow 0$  ergibt:  $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} -\frac{1}{\Delta x} \int_x^{x+\Delta x} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\xi, t) d\xi = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{q(x+\Delta x, t) - q(x, t)}{\Delta x}$
3. es gilt:  $\int_x^{x+\Delta x} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\xi, t) d\xi \approx \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) \Delta x$
4. daraus folgt:  $\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial t} q(x, t) = 0$

## Modellierung der Geschwindigkeit (über Relativgeschwindigkeit)

1. Wir stellen uns zwei Fahrzeuge vor die hintereinander fahren. Dabei ist  $A_n$  das hintere und  $A_{n-1}$  das vordere Fahrzeug. Die Beschleunigung vom hinteren Fahrzeug hängt von dem Unterschied der Geschwindigkeiten zwischen den beiden Fahrzeugen ab. Führt so  $A_{n-1}$  schneller, so kann  $A_n$  beschleunigen. Führt  $A_{n-1}$  langsamer, so muss  $A_n$  bremsen. Sies lässt sich in Formeln ausdrücken:  $\frac{d^2 x_n(t)}{dt^2} = -\lambda \left( \frac{dx_n(t)}{dt} - \frac{dx_{n-1}(t)}{dt} \right)$ , wobei  $\lambda > 0$  die Sensitivität ist, also die Reaktionszeit/ Bereitschaft sich dem anderen Fahrzeug anzupassen. Fürs erste nehmen wir an, dass  $\lambda$  konstant ist.
2. Integration liefert  $\frac{dx_n(t)}{dt} = -\lambda (x_n(t) - x_{n-1}(t)) + d_n$  mit Integrationskonstante  $d_n$
3. bestimmung der Werte
  - (a) Die Verkehrsdichte braucht ein Maß. Hier nehmen wir den Kehrwert von  $(x_{n-1}(t) - x_n(t))$ .
  - (b) wir wissen, dass die Geschwindigkeit die Veränderung des Ortes in der Zeit ist, also  $v(x, t) = \frac{dx_n(t)}{dt}$
  - (c) Bestimmen der Integrationskonstante: Für  $v = 0$  gilt  $\rho = \rho_{\max}$ , also  $d_n = -\frac{\lambda}{\rho_{\max}}$
4. es ergibt sich insgesamt:  $v(x, t) = \lambda \left( \frac{1}{\rho(x, t)} - \frac{1}{\rho_{\max}} \right)$
5. Da bis zu einer kritischen Dichte immer die maximale Geschwindigkeit gefahren werden kann, gilt:  $v(t, x) = \begin{cases} v_{\max} & \rho \leq \rho_{crit} \\ \lambda \left( \frac{1}{\rho(x, t)} - \frac{1}{\rho_{\max}} \right) & \rho > \rho_{crit} \end{cases}$

## lineare DGL erklären (Gleichung für Störung)

1. wir können durch die Rechnung gerade annehmen, dass  $v = v(\rho)$  gilt
2. Daraus ergibt sich der Erhaltungssatz  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} q(\rho) = 0$
3. Kettenregel führt zu:  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + q'(\rho) \cdot \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0$
4. betrachten wir eine Konstante Dichte  $\rho_0$ , die nur von kleinen Störungen überlagert wird, also  $\rho(x, t) = \rho_0 + \epsilon \rho_1(x, t)$  mit  $\epsilon > 0$ .

5. Einsetzen in 3. und Division durch  $\epsilon$  ergibt:  $\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + q'(\rho_0 + \epsilon \rho_1(x, t)) \cdot \frac{\partial \rho_1}{\partial x} = 0$
6. Taylorn von  $q'$  in  $\rho_0$  bis zur 1. Ordnung liefert:  $\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + q'(\rho_0) \cdot \frac{\partial \rho_1}{\partial x} = 0$ .  
Dieses ist eine lineare DGL, da  $q'(\rho_0)$  konstant ist.

## Charakteristik erklären können und an einem geg. Bsp berechnen und skizzieren können

Mithilfe von Charakteristiken können lineare DGL gelöst werden. Charakteristiken sind die Kurven, an denen die Lösung der DGL konstant ist. Charakteristiken kann man leicht berechnen und anhand dieser eine Lsg der DGL bestimmen.

Kochrezept zum berechnen der Charakteristiken. Sei das Problem gegeben durch  $u_t + cu_x = 0$  mit  $u(x(0), 0) = f(x)$  mit  $x(0) = x_0$

1. Bestimme die charakteristische Kurve:  $x(t) = x_0 + ct$
2. Da die Lsg  $u$  entlang der charakteristischen kurve konstant ist, gilt:  $u(x, t) = u(x_0, 0) = f(x_0) = f(x - ct)$

## Numerische Approximation und CFL Bedingung erklären können

### Numerische Berechnung der DGL

Hier ist das Ziel die DGL  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + c \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0$  numerisch zu lösen. Dies kann mit Vorwärtsdifferenzenquotient für  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$  und Rückwärts Differenzenquotient für  $\frac{\partial \rho}{\partial x}$  getan werden. Wir setzen ein und lösen das nach  $R_{i,j+1} = \rho(x, t+k)$  auf, wobei  $k$  die Zeitschrittweite ist und erhalten:  $R_{i,j+1} = (1 - \frac{c \cdot k}{h}) R_{i,j} + \frac{c \cdot k}{h} R_{i-1,j}$

### CFL Bedingung

Der Bereich in der  $(x, t)$  Ebene, der durch die Anfangswertfkt auf I bestimmt wird, nennt man (numerischen) Bestimmtheitsbereich.

Der Wert von  $\rho$  bei einem Punkt ist über die charakteristik bestimmt. Der Fußpunkt dieser Charakteristik ist der (analytischer) Abhängigkeitsbereich.

Wenn der Bestimmtheitsbereich und der analytische Abhängigkeitsbereich nicht übereinstimmt, ist unsere Approximation bestimmt nicht korrekt, da der Punkt, von dem der zu approximierende Pkt wirklich abhängt, nicht in der Approximation betrachtet wurde.

Also wollen wir, dass der analytische Abhängigkeitsbereich im Bestimmtheitsbereich liegt. Diese Bedingung nennt sich Courant-Friedrich Lewis Bedingung und lässt sich als eine Bedingung an der Zeitschrittweite formulieren:  $k \leq \frac{h}{c}$ , wobei  $k$  die Zeitschrittweite,  $h$  die Raumschrittweite und  $c$  die Steigung der Charakteristik ist.

## Ungleichförmiger Verkehr/Anfahrvorgang an grüner Ampel/ Anhalten an roter Ampel und unstetige Verkehrsdichte erklären

### ungleichförmiger Verkehr

Bei ungleichförmigen Verkehr haben wir keine konstante Dichte mehr, sondern die Dichte kann sich ändern. Modellieren wir dieses Konzept. In Formeln: Betrachten wir die PDE  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{dq(\rho)}{d\rho} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0$  und einen mitfahrenden Beobachter, der sich entlang der Charakteristik bewegt, so gilt:  $\frac{d}{dt}\rho(x(t), t) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial x}$  also ist die Verkehrsdichte für den Beobachter konstant, falls  $\frac{d}{dt}\rho(x(t), t) = 0$  oder  $\frac{dx}{dt} = \frac{dq(s)}{d\rho} =: q'(\rho)$  gilt.

Daraus können wir schlussfolgern, dass die Dichte entlang der Charakteristik konstant die Anfangsdichte ist. Außerdem ist  $q'(\rho)$  eine monoton fallende Funktion. Also: Je dichter der Verkehr ist, desto kleiner wird die Wellengeschwindigkeit.

Desweiteren gilt, dass  $q'(\rho) = \rho v'(\rho) + v(\rho)$

Da Autos langsamer werden, wenn die Dichte wächst, gilt  $v'(\rho) \leq 0$ , also gilt, dass  $q'(\rho) \leq v$ . D.h. Dichtewellen bewegen sich langsamer als die Fahrzeuge.

### Anfahrvorgang an einer grünen Ampel

Die Ampel steht bei  $x = 0$  auf „rot“ und springt zur Zeit  $t = 0$  auf „grün“:

$$\rho(x, 0) = \begin{cases} \rho_{\max} & x \leq 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases} \quad (7)$$

Wir suchen Lösungen von  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + q'(\rho) \cdot \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0$ .

Wir wissen, dass  $\frac{dx}{dt} = q'(\rho) = \rho \cdot v'(\rho) + v$

Für  $x > 0$  und  $x < 0$  sind die Dichten konstant und somit haben die Charakteristiken die Gestalt  $x = q'(\rho) \cdot t + k$

Fall  $x > 0$  ( $\rho(x, 0) = 0$ )

Fall  $x < 0$  ( $\rho(x, 0) = \rho_{\max}$ )

$$\frac{dx}{dt} = q'(0) = v = v_{\max} \geq 0$$

$$\frac{dx}{dt} = q'(\rho_{\max}) = \rho_{\max} \cdot v'(\rho_{\max}) \leq 0 \quad (\text{da } v'(\rho_{\max}) \leq 0)$$

Was passiert bei  $x = 0$ ? Betrachte:

Es gilt für die Charakteristiken

$$\frac{dx}{dt} = \frac{dq}{d\rho} \quad \text{mit } x = \frac{dq}{d\rho} \cdot t + k = \frac{dq}{d\rho} \cdot t + x_0$$

wobei der Punkt  $x_0$  auf der  $x$ -Achse nahe bei 0 ist. Wenn nun  $\Delta x \rightarrow 0$  läuft, dann

$$x = \frac{dq}{d\rho} \cdot t \Leftrightarrow \frac{dq}{d\rho} = \frac{x}{t}$$

Also: Sogar unstetige Anfangsdaten produzieren glatte Lösungen.

## unstetige Verkehrsdichte

Herleitung der Rankine-Hugoniot Bedingung, falls zeit. Sie Besagt: Falls wir eine Verkehrsdichte haben, bei der eine Unstetigkeitsstelle ist und diese sich bewegt, dann kann die Geschwindigkeit des Stoßes berechnet werden durch:

$$\frac{dx_s}{dt} = \frac{q(x_s^-, t) - q(x_s^+, t)}{\rho(x_s^-, t) - \rho(x_s^+, t)} = \frac{\rho_2 v(\rho_2) - \rho_1 v(\rho_1)}{\rho_2 - \rho_1} =: \frac{[q]}{[\rho]}$$

Herleitung mit integralem Erhaltungssatz.

Bedeutung im Straßenverkehr: Betrachten wir leichten Verkehr, der auf schwerem Verkehr trifft. Dann ist die Änderung der Anzahl der Autos genau die Sprunghöhe mal der unterschied der Dichten auf beiden Seiten, also  $N(\Delta t + t) - N(t) = -\Delta x_s(\rho_2 - \rho_1)$  Die Anzahl der Autos auf dem betrachteten Intervall ändert sich nur über die Anzahl der Autos, die im betrachteten Zeitintervall hereinfahren und die die herausfahren. Daher gilt:  $\Delta t q_1 - \Delta t q_2 = -\Delta x_s(\rho_2 - \rho_1)$ . Also haben wir die Sprungbedingung wieder erfüllt.

## Anhalten an einer roten Ampel

Betrachte den gleichförmigen Verkehr  $\rho = \rho_0 < \rho_{\max}$ , der vor einer roten Ampel bei  $x = 0$  zur Zeit  $t = 0$  angehalten wird. Der Stopp soll verzögerungsfrei und uns interessiert der Verkehr *vor* der Ampel.

**rote Ampel:** Randbedingung bei  $x = 0$ , also  $\rho = \rho_{\max}$  bei  $x = 0$  für alle  $t > 0$ . Dann haben wir

*schwerer Verkehr*

$$q'(\rho_0) < 0 \quad q'(\rho_{\max}) < q'(\rho_0)$$

Steigung der Charakteristik:

$$\frac{1}{q'(\rho_{\max})} > \frac{1}{q'(\rho_0)}$$

*leichter Verkehr*

$$q'(\rho_0) > 0 \quad q'(\rho_{\max}) < q'(\rho_0)$$

Steigung der Charakteristik:

$$\frac{1}{q'(\rho_{\max})} < \frac{1}{q'(\rho_0)}$$

In beiden Fällen überschneiden sich die Charakteristiken:

Um mehrdeutige Lösungen zu verhindern fügen wir eine Sprungstetigkeit ein:

$$\frac{dx_s}{dt} = \frac{[q]}{[\rho]} = \frac{\rho_{\max} v(\rho_{\max}) - \rho_0 v(\rho_0)}{\rho_{\max} - \rho_0}$$

Da  $v(\rho_{\max}) = 0$  ist, gilt

$$\frac{dx_s}{dt} = -\frac{\rho_0 v(\rho_0)}{\rho_{\max} - \rho_0} < 0 \quad (8)$$

Die Steigung des Stoßes ist konstant. Damit ist der Stoß eine Gerade mit der negativen Steigung  $-\frac{\rho_0 v(\rho_0)}{\rho_{\max} - \rho_0}$ . Integrieren wir nun (8), so erhalten wir

$$x_s(t) = -\frac{\rho_0 v(\rho_0)}{\rho_{\max} - \rho_0} \cdot t + c$$

Da der Stoß zur Zeit  $t = 0$  durch  $x = 0$  geht, gilt  $c = 0$ . Somit

$$x_s(t) = -\frac{\rho_0 v(\rho_0)}{\rho_{\max} - \rho_0} \cdot t$$

## Grundidee Godunov Methode

Mit der Godunovmethode wollen wir den ungleichförmigen Verkehr numerisch approximieren. Dazu betrachten wir nun den Ort und die Zeit in Zellen auf und approximieren die Dichte/ den Fluss in diesen Zellen. Durch viel rumgerechne kommt man auf eine numerische Formel, die den ungleichförmigen Verkehr approximiert. Hier muss aber noch das Integral in einer Zelle von dem Fluss berechnet werden. Dazu nehmen wir an, dass in einer Zelle die Dichte konstant ist. Dann müssen wir irgendwie den mittleren Fluss als AWP betrachten und können ihn dadurch berechnen.

## Grundidee der Mikroskopischen Modellierung mittels Zellularer Automaten

Wir betrachten nun nicht mehr den gesamten Verkehr, sondern einzelne Fahrzeuge. Die Idee ist es, dass wir nun nur noch ganzzahlige Variablen haben. Jedes Auto befindet sich in einer Zelle und diese kann nun besetzt ( $\rho_i(t) = 1$ ) oder leer ( $\rho_i(t) = 0$ ) sein. Diese Zelle ist nun die Ortsschrittweite und die Zeitschrittweite ist  $\Delta t$ . Auch die Geschwindigkeit kann so modelliert werden. Die Geschwindigkeit wird einer Zelle zugeordnet. Bsp: Falls ein Auto  $50 \text{ km/h}$  fährt, diskretisieren wir die Geschwindigkeit mit  $10 \text{ km/h}$  Schritten. Also kann ein Auto 5 Zellen pro Schrittweite passieren. Wir nehmen für dieses Modell an, dass Kollisionsfreiheit herrscht, also in jeder Zelle nur ein Auto ist (problem: wie lang ist die Zelle?) und die Erhaltung der Fahrzeuge muss gelten. Probleme tauchen später im Detail bei z.B. der Wahl der Diskretisierung auf.

## Stochastische Verkehrssimulation: Wartesystem, exponentielle Verteilung, Poisson Prozess, Ausfallrate erklären und Satz V.1 beweisen können

### Wartesysteme

Typische Wartesysteme haben einen Eingang, ein oder mehrere Schlangen und Schalter. Dabei kommen Aufträge zum Zeitpunkt  $t_i$  an.  $T_i$  sind die Zwischenankunftszeiten, also die Zeit, die verstreicht, bis der nächste Auftrag ankommt. Da die  $T_i$  nicht gleichlang, aber einer bestimmten Verteilung gehorchen, kann man sie als Zufallsvariable interpretieren.

### Ausfallrate

Die Ausfallrate beschreibt die momentane Rate, mit der zu einem Zeitpunkt  $t$  ein Ereignis eintritt, wenn dieses bis zum Zeitpunkt  $t$  noch nicht der Fall war.

Sie wird berechnet durch  $h_T(t) = \frac{f_T(t)}{1-F_T(t)}$

### exponentielle Verteilung

Falls das Ereignisrisiko immer gleich hoch ist, also unabhängig davon, wie lange wir schon warten, dann ist die Ausfallrate konstant und deswegen die Zufallsvariable exponentialverteilt:

$$f_T(t) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda t} & t \geq 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases} \quad F_T(t) = \begin{cases} 1 - e^{-\lambda t} & t \geq 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$$

Dann ist der Erwartungswert  $\mathbb{E}[T] = \frac{1}{\lambda}$  wobei  $\lambda$  die Ausfallrate ist. Außerdem ist die Exponentialverteilung gedächtnislos.

### Satz V.1 Beweisen können

Eine (positive) kontinuierliche Zufallsvariable  $T$  mit Wertebereich  $\mathbb{R}^+$  ist genau dann exponentialverteilt, wenn für alle  $s, t > 0$  gilt

$$\mathbb{P}[T > t + s | T > s] = \mathbb{P}[T > t] \quad (9)$$

*Proof.*

$\Rightarrow$ : Übung.

$\Leftarrow$ : Sei  $T$  eine kontinuierliche Zufallsvariable, die die Gleichung (9) erfüllt. Wir definieren  $g(t) = \mathbb{P}[T > t]$  für  $s, t > 0$  gilt dann:

$$\begin{aligned} g(t+s) &= \mathbb{P}[T > t+s] = \mathbb{P}[T > s+t | T > s] \cdot \mathbb{P}[T > s] \\ &\stackrel{(9)}{=} \mathbb{P}[T > t] \cdot \mathbb{P}[T > s] = g(t) \cdot g(s) \end{aligned}$$

Durch wiederholtes Anwenden erhalten wir

$$g(1) = g\left(\frac{1}{n} + \dots + \frac{1}{n}\right) = \left(g\left(\frac{1}{n}\right)\right)^n \quad \forall n \in \mathbb{N}$$



und somit insbesondere  $g\left(\frac{1}{n}\right) = (g(1))^{\frac{1}{n}}$ .

Da  $T$  nur positive Werte annimmt, muss es ein  $n \in \mathbb{N}$  geben mit  $g\left(\frac{1}{n}\right) > 0$ .

Wegen  $0 < g(1) \leq 1$  muss es ein  $\lambda > 0$  geben, mit  $g(1) = e^{-\lambda}$ .

Nun gilt für beliebige  $p, q \in \mathbb{N}, q \neq 0$

$$g\left(\frac{p}{q}\right) = g\left(\frac{1}{q}\right)^p = g(1)^{\frac{p}{q}}$$

und somit gilt:  $g(r) = e^{-\lambda r}$  für  $r \in \mathbb{Q}^+$ .

Aufgrund der Stetigkeit folgt

$$g(x) = e^{-\lambda x} \quad \forall x \in \mathbb{R}$$

□

### Poisson Prozess

Seien die Zwischenankunftszeiten unabhängig exponentialverteilt mit Parameter  $\lambda$ . Dann ist die Anzahl der Ankünfte im Intervall  $[0, t]$  poissonverteilt mit Parameter  $\vartheta = \lambda t$ .

Eine Zufallsvariable  $N$  heißt **poissonverteilt** mit Parameter  $\vartheta = \lambda t$ , falls gilt

$$\mathbb{P}[N(t) = i] = \frac{e^{-\vartheta} \vartheta^i}{i!}$$

Der Erwartungswert ist  $\vartheta$

## 5 Molekulare Simulation

### Reduktion Schrödingergleichung auf klassische Moleküldynamik skizzieren können

Als Ausgangspunkt für die Modellierung von Molekülen dient uns die aus der Quantenphysik bekannte **zeitabhängige Schrödingergleichung**:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi \tag{10}$$

Die Gleichung beschreibt die Dynamik des quantenmechanischen Zustands eines Systems, solange an diesem keine Messung vorgenommen wird [?]. Dabei ist

- $i$  die imaginäre Einheit
- $\hbar$  eine Konstante, das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum<sup>1</sup>
- $H$  der sogenannte Hamilton-Operator, der die Dynamik des Systems beschreibt und grundsätzlich die Summe aus kinetischer und potentieller Energie ist

---

<sup>1</sup>Es gilt:  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ , wobei  $h$  das Plancksche Wirkungsquantum ist mit  $h \approx 6,626\,070\,040 \cdot 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$

- $\psi$  die gesuchte Lösung: eine komplexwertige Wellenfunktion (abhängig von der Zeit  $t$ ), die dem Zustand des Systems entspricht

Gleichung (10) besagt also, dass die Veränderung des Systems über die Zeit bestimmt ist durch den Hamilton-Operator angewandt auf den aktuellen Zustand.

Ist der Hamilton-Operator zeitunabhängig, so gibt es stationäre Zustände des Systems, nämlich gerade die Eigenzustände des Operators  $H$ , also alle  $\psi$  mit

$$H\psi = E\psi \quad (11)$$

Diese Gleichung heißt auch **zeitunabhängige Schrödingergleichung**. Dabei können wir den Eigenwert  $E$  als Energie des Systems im stationären Zustand  $\psi$  interpretieren.

### Born Oppenheimer Approximation (Molekulare Reduktion der Schrödingergleichung)

Da die Größe und Masseverhältnis zwischen Elektron und Kern so unterschiedlich sind, kann der Hamiltonoperator aufgeteilt werden:  $H = K_N(R) + K_e(r) + V_{eN}(r, R) + V_{NN}(R) + V_{ee}(r)$  wobei  $K$  die Kinetische Energie und  $V$  die potentielle Energie, die durch Abstoßung/ Anziehung der Kerne/Elektronen entsteht ist.  $e$  steht für Elektronen,  $N$  für Kerne.

Der Zustand des Kernes, den wir mit  $\chi(R)$  beschreiben ist aufgrund der großen Trägheit gegenüber den Elektronen, von diesen unabhängig. Der Zustand der Elektronen  $\phi(r, R)$  ist weiterhin von Kern und Elektronen abhängig. Der Gesamtzustand lässt sich nun als Produkt dieser Zustände beschreiben  $\psi(r, R) = \chi(R)\phi(r, R)$

Aus sicht der Elektronen kann die Kernposition als Konstant angesehen werden, also vereinfacht sich die zeitunabhängige Schrödingergleichung zu:

$$\underbrace{K_N(R) + V_{NN}(R)}_{=: E_N(R)} + K_e(r) + V_{eN}(r, R) + V_{ee}(r)]\phi(r, R) = E\phi(r, R)$$

Sei  $E_{el}(R) := E - E_N(R)$ . Dann ist die Schrödingergleichung für die Elektronen gegeben durch:

$$[K_e(r) + V_{eN}(r, R) + V_{ee}(r)]\phi(r, R) = E_{el}(R)\phi(r, R)$$

Außerdem kann man die Schrödingergleichung für die Kerne herleiten:

$$[K_N(R) + \underbrace{V_{NN}(R) + E_{el}(R)}_{=: U^{BO}}]\chi(R) = E\chi(R)$$

$U^{BO}$  heißt Born-Oppenheimer Potential.

## Potential/ Kraftfeld: gebundene Wechselwirkungen (Bindungslängen, - Winkel, Torsionswinkel)

Wir wollen die Potentielle Energie  $U^{BO}$  als Summe aus einigen Termen darstellen. Welche Terme sind vorhanden? Die Bindungslänge, der Bindungswinkel, die Verdrillung der Bindung, und Wechselwirkungen zwischen nicht miteinander verbundenen Teilchen des Systems spielen eine Rolle.

### Bindungslänge

Wie weit sind die Atomkerne voneinander entfernt?

$$E_{\text{bind}} = \sum_{\text{Bindungen}} \frac{k_{l,i}}{2} (l_i - l_{i,\text{eq}})^2$$

Dabei ist  $k_{l,i}$  die Federkonstante und  $l_i - l_{i,\text{eq}}$  der Abstand von der momentanen Länge in der Bindung und der Ruhelage.

### Bindungswinkel

Für den Winkel  $\vartheta_{ABC}$  gilt

$$\vartheta_{ABC} = \arccos \left( \frac{(q_A - q_B)(q_B - q_C)}{r_{AB}r_{BC}} \right)$$

wobei  $r_{AB} = |q_A - q_B|$ .

$$E_{\text{bwink}} = \sum_{\text{Winkel}} \frac{k_{w,i}}{2} (\vartheta_i - \vartheta_{i,\text{eq}})^2$$

### Torsionswinkel

$$\cos \alpha = \frac{\langle n_{E_{ABC}}, n_{E_{BCD}} \rangle}{\|n_{E_{ABC}}\| \cdot \|n_{E_{BCD}}\|}$$
$$E_{\text{tor}} = \sum_{\text{Torsionswinkel}} \frac{V_n}{2} (1 + \cos(n\alpha - \alpha_{\text{eq}}))$$

wobei üblicherweise  $n = 4$  oder  $n = 5$

## Coulombpotential und Lennard Jones Potential beschreiben können

$$U_{\text{LJ}}(r_{ij}) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right)$$

Das Lennard Jones Potential beschreibt die anziehende bzw abstoßende Kraft zwischen Atomen, die mindestens durch drei Bindungen getrennt sind. Die Anziehende Kraft kommt daher, dass die Elektronenwolken um ein Atom nicht

immer gleichmäßig verteilt sind. Dadurch liegt der Kern frei und zieht die Elektronen von einem anderen Atom an. (zweiter Term). Der erste Term beschreibt abstoßende Kräfte. Diese werden umso größer, je näher die Atome beieinander sind. Dann überlappen sich die Elektronenwolken und stoßen sich ab.

Das Coulomb Potenzial beschreibt, dass Elektrische Ladungen zu anziehenden (ungleichnamig) und abstoßenden Kräften (gleichnamig) führen. Die Dabei entstehende Kraft wird elektromagnetische bzw. elektrostatische Kraft genannt.

Die Ableitung des Potentials ist die Kraft

## Abschneidemethoden und periodische Randbedingungen

Das Ziel ist es, die Rechenzeit bei der Berechnung von dem Born Oppenheimer Potential zu verkürzen. Dazu kann man Abschneidemethoden nehmen: Da die Summanden gegen 0 streben, kann man die Funktion einfach nur bis zu einem gewissen Term berechnen. Das Problem dabei ist, dass die Energie nicht erhalten bleibt. Eine mögliche Idee ist es, eine Übergangszone zu schaffen, damit die Unstetigkeitsstelle herausgenommen wird. Diese wird durch ein Polynom geschaffen. Eine andere Idee ist es, die gesamte Funktion zu Shiften, also das gesamte Potential vor der Stelle, die abgeschnitten wird, zu modifizieren.

Bei den periodischen Nebenbedingungen betrachtet man das System als eine Einheitszelle mit unendlich vielen Spiegeln drumherum. Dann kann man das Potential umschreiben und mittels einer Taylorreihe entwickeln.

## Linked Cell Methode erklären und Aufwand $O(N)$

Wir nehmen an, dass die Partikel gleichverteilt sind. Dann können wir jedem Partikel eine Zelle der Länge  $r_{cut}$  zuordnen. Dadurch gibt es nur Wechselwirkungen in den 26 Nachbarzellen. Dadurch lässt sich der Aufwand von eigentlich  $O(N^2)$ , da es bei  $N$  Partikeln  $N$  über 2 mögliche Kombinationen gibt, auf  $= (N)$  verkleinern. Denn: Haben wir  $n$  Partikel in einer Zelle. Dann müssen wir  $n(26n + n - 1) = n(27n - 1)$  vergleiche pro Zelle machen. Da wir  $N/n$  Zellen haben, müssen wir  $\frac{N}{n}n(27n - 1) = N(27n - 1)$  vergleiche machen, was ein Aufwand von  $O(N)$  ist, da  $n$  sehr klein ist.

## Hamiltonsche DGL: Lagrange Fkt, Satz VI.1 mit Beweis

### Lagrangefunktion

Definition der Lagrangefunktion:

$$L(q, \dot{q}) = K(q, \dot{q}) - U(q)$$

wobei  $q(t)$  eine Kurve ist und

$q$  die Konfiguration

$\dot{q}$  die Geschwindigkeit des Systems

$K(q, \dot{q})$  die Kinetische Energie

$U(\dot{q})$  die potentielle Energie

beschreibt.

### Wirkung

Wir definieren die **Wirkung** durch

$$S[q] = \int_{t_0}^{t_1} L(q(t), \dot{q}(t)) dt$$

zu einer Bewegungskurve  $q : [t_0, t_1] \rightarrow Q \subseteq \mathbb{R}^3$ .

### Theorem Euler Lagrange Gleichung

Es sei  $L : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  zweimal stetig differenzierbar. Eine Kurve  $q$  erfüllt genau dann die Gleichung

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} S[q + \epsilon \Delta q] \right|_{\epsilon=0} = 0$$

für alle Kurven  $\Delta q \in C^2([t_0, t_1], Q)$  mit  $\Delta q(t_0) = \Delta q(t_1) = 0$ , wenn

$$\frac{d}{dt} \frac{d}{d\dot{q}} L(q, \dot{q}) - \frac{\partial L}{\partial q}(q, \dot{q}) = 0 \quad (12)$$

*Proof.* Setze  $q_\epsilon = q + \epsilon \Delta q$ . Es ist

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\epsilon} S[q_\epsilon] &= \frac{d}{d\epsilon} \int_{t_0}^{t_1} L(q_\epsilon(t), \dot{q}_\epsilon(t)) dt \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial}{\partial q} L(q_\epsilon(t), \dot{q}_\epsilon(t)) \cdot \Delta q dt + \frac{\partial}{\partial \dot{q}} L(q_\epsilon(t), \dot{q}_\epsilon(t)) \cdot \Delta \dot{q} dt \end{aligned}$$

nach Kettenregel. Mit partieller Integration erhalten wir für den zweiten Summanden

$$\int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial}{\partial \dot{q}} L(q_\epsilon(t), \dot{q}_\epsilon(t)) \cdot \Delta \dot{q} dt = - \int_{t_0}^{t_1} \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}} L(q_\epsilon(t), \dot{q}_\epsilon(t)) \cdot \Delta q dt$$

Insgesamt erhalten wir

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} S[q_\epsilon] \right|_{\epsilon=0} = \int_{t_0}^{t_1} \left( \frac{\partial}{\partial q} L(q_\epsilon(t), \dot{q}_\epsilon(t)) - \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}} L(q_\epsilon(t), \dot{q}_\epsilon(t)) \right) \cdot \Delta q dt$$

Da  $L \in C^2$ , gilt

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} S[q + \epsilon \Delta q] \right|_{\epsilon=0} = 0$$

für alle Kurven  $\Delta q \in C^2([t_0, t_1], Q)$  mit  $\Delta q(t_0) = \Delta q(t_1) = 0$  genau dann, wenn (12) gilt.  $\square$

## Hamiltonsche Bewegungsgleichungen herleiten können

Betrachte die verallgemeinerten oder konjugierten Impulse

$$p_i = \frac{\partial L(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}_i}, i = 1, \dots, d \text{ zu } q = (q_1, \dots, q_d) \in Q \subseteq \mathbb{R}^d$$

Wir nehmen an, dass die durch  $q$  definierte Abbildung  $q \mapsto p$  (Legendre-Transformation) für jedes  $q$  invertierbar ist.

Wir definieren nun die **Hamiltonfunktion**

$$H(p, q) = p^T \dot{q} - L(q, \dot{q}) \text{ wobei } \dot{q} = \dot{q}(p, q) \quad (13)$$

dann gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial p} &= \dot{q} + p^T \cdot \frac{\partial q}{\partial p} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \cdot \frac{\partial q}{\partial p} \stackrel{(*)}{=} \dot{q} \\ \frac{\partial H}{\partial q} &= p \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} - \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} = -\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = -\dot{p} \end{aligned} \quad (14)$$

Wobei in  $(*)$  benutzt wurde, dass  $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p^T$ . Also haben wir insgesamt mit

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial p} &= \dot{q} \\ \frac{\partial H}{\partial q} &= -\dot{p} \end{aligned}$$

die Hamiltonischen Bewegungsgleichung.

## Begriffe: Zeitreversibilität, Volumenerhalt, Symplektizität erklären können

### Volumenerhalt

Betrachte eine Menge von Punkten  $S(t)$  im Phasenraum mit Fluss  $\varphi^t$ , das heißt

$$\varphi^t(S(0)) = S(t)$$

zu der gewöhnlichen Differentialgleichung  $\dot{z} = f(z)$ . Das Theorem von Lionville besagt nun, dass das Volumen eines solchen Systems konstant bleibt, falls  $\text{div } f = 0$  ist. Man kann zeigen, dass dies für die Hamilton-Bewegungsgleichungen gilt.

### Zeitreversibilität

### Symplektizität

Eine lineare Abbildung  $A : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$  heißt **symplektisch**, falls

$$JAJ = A$$

Eine nichtlineare, differenzierbare Abbildung  $g : U \rightarrow \mathbb{R}^{2d}, U \subseteq \mathbb{R}^{2d}$  heißt **symplektisch**, falls  $Dg(x)$  symplektisch für alle  $x \in U$  ist.

### Satz VI.4 beweisen können

$\varphi(y_0)^t := \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$  und es gilt:  $\frac{\partial}{\partial t} \varphi^t(y_0) = J^{-1} \nabla H(p, q)$

Sei  $H : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$  eine zweimal stetig differenzierbare Hamiltonfunktion. Dann ist der Fluss des zugehörigen Hamiltonoperators

$$H(p, q) = p^T \dot{q} - L(q, \dot{q}) \text{ wobei } \dot{q} = \dot{q}(p, q)$$

symplektisch für alle  $t$ .

*Proof.* Wir haben

$$\dot{x} = J^{-1} \nabla H(x)$$

mit  $x = (p, q)$ ,  $\nabla H = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial p} & \frac{\partial H}{\partial q} \end{pmatrix}^T$ . Die Abbildung  $D\varphi^t$  ist dann die Lösung von

$$\dot{A} = J^{-1} \nabla^2 H(\varphi^t(x)) A$$

wobei  $\nabla^2 H$  die Hessematrix ist. Dann haben wir

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} ((D\varphi^t)^T J D\varphi^t) &= \left( \frac{d}{dt} D\varphi^t \right)^T \cdot J D\varphi^t + (D\varphi^t)^T J \left( \frac{d}{dt} D\varphi^t \right) \\ &= (D\varphi^t)^T \nabla^2 H \underbrace{(-J)^T J}_{=-J} D\varphi^t + (D\varphi^t)^T \underbrace{J J^{-1}}_{=J} \nabla^2 H D\varphi^t \\ &= 0 \end{aligned}$$

Also ist  $D\varphi^t$  symplektisch und somit nach Definition die Flussabbildung  $\varphi^t$  ebenfalls.  $\square$

### Herleitung: Verlet/ Leap-Frog/ Geschwindigkeits Verlet

Ziel ist es, die Newtonsche Bewegungsgleichung  $m_i \ddot{q}_i = F_i$  numerisch zu approximieren. Dazu gibt es unterschiedliche Verfahren:

#### Störmer- Verlet

Zunächst taylorern wir: Mit einer Taylorapproximation für  $q$  erhalten wir zunächst

$$q(t + \Delta t) = q(t) + \Delta t \cdot \dot{q}(t) + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \ddot{q}(t) + \frac{1}{3!} (\Delta t)^3 \frac{\partial^3 q(t)}{\partial t^3} + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \quad (15)$$

$$q(t - \Delta t) = q(t) - \Delta t \cdot \dot{q}(t) + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \ddot{q}(t) - \frac{1}{3!} (\Delta t)^3 \frac{\partial^3 q(t)}{\partial t^3} + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \quad (16)$$

Durch Differenz- beziehungsweise Summenbildung von (15) und (16) ergibt sich

$$\begin{aligned} \dot{q}(t) &= \frac{q(t + \Delta t) - q(t - \Delta t)}{2\Delta t} \\ \ddot{q}(t) &= \frac{q(t + \Delta t) - 2q(t) + q(t - \Delta t)}{(\Delta t)^2} + \mathcal{O}((\Delta t)^2) \end{aligned}$$

Ersetze nun die zweite Ableitung gemäß der Newtonschen Bewegungsgleichung. Dann erhalten wir

$$q_i(t + \Delta t) = -q_i(t - \Delta t) + 2q_i(t) + \frac{(\Delta t)^2}{m_i} F_i(t) + \mathcal{O}((\Delta t)^4)$$

Man kann zeigen, dass  $q_i$  zeitreversibel ist (Delambre 1791, Verlet um 1960).

Analog kann man dies für die Geschwindigkeiten  $v_i$  zeigen:

$$v_i(t) = \dot{q}_i(t) \approx \frac{q_i(t + \Delta t) - q_i(t - \Delta t)}{2\Delta t}$$

Wozu braucht man die Geschwindigkeit? Wie berechnet man  $F$ ?

### Leap Frog

Da  $v_i(t) = \dot{q}_i(t)$  gilt:

$$v_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = v_i\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\Delta t}{m_i} F_i(t)$$

außerdem gilt:

$$q_i(t + \Delta t) = q_i(t) + \Delta t \cdot v_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) \quad (17)$$

Diese Berechnung ist das Leap Frog Verfahren.

### Geschwindigkeitsverlet

Durch Mittelwertbildung:

$$v_i(t) = \frac{v_i\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) + v_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)}{2}$$

Löse die Gleichung  $v_i(t) = \frac{q_i(t+\Delta t) - q_i(t-\Delta t)}{2\Delta t}$  nach  $-q_0(t - \Delta t)$  auf:

$$-q_i(t - \Delta t) = 2\Delta t v_i(t) - q_i(t + \Delta t)$$

setze dies in  $q_i(t + \Delta t) = -q_i(t - \Delta t) + 2q_i(t) + \frac{(\Delta t)^2}{m_i} F_i(t)$  ein:

$$q_i(t + \Delta t) = \Delta t v_i(t) + q_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2m_i} F_i(t) \quad (18)$$

Für die Geschwindigkeiten ergibt sich analog

$$\begin{aligned} v_i(t) &= \frac{q_i(t + \Delta t) - q_i(t - \Delta t)}{2\Delta t} = \dots = \frac{q_i(t)}{\Delta t} - \frac{q_i(t - \Delta t)}{\Delta t} + \frac{F_i(t)}{2m_i} \Delta t \\ v_i(t + \Delta t) &= \frac{q_i(t + \Delta t)}{\Delta t} - \frac{q_i(t)}{\Delta t} + \frac{F_i(t + \Delta t)}{2m_i} \Delta t \\ v_i(t) + v_i(t + \Delta t) &= \frac{q_i(t + \Delta t) - q_i(t - \Delta t)}{\Delta t} + \frac{F_i(t) + F_i(t + \Delta t)}{2} \\ v_i(t + \Delta t) &= v_i(t) + \frac{F_i(t) + F_i(t + \Delta t)}{2m_i} \Delta t \end{aligned} \quad (19)$$

Dieses Verfahren nennt sich Geschwindigkeitsstörmer Verlet.



## Thermostat und Äquipartitionstheorem

Grundsätzlich gibt es drei Arten von thermodynamischen Konzepten

1. **offenes System**

System, welches mit dem Umfeld Energie und Partikel austauscht.

*Beispiel: Tasse mit heißem Tee (Energie = Wärme, Partikel = Dampf)*

2. **abgeschlossenes System**

System tauscht weder Energie noch Partikel mit der Umgebung aus.

*Beispiel: Perfekt funktionierende Thermosflasche*

3. **geschlossenes System**

System tauscht mit der Umgebung nur Energie und keine Masse aus.

*Beispiel: geschlossene Wasserflasche in der Sonne*

### Wärmebad mikroskopisch:

Wärmeaustausch durch Kollisionen an der Trennwand zwischen  $S_W$  und  $S_B$ . Im Schnitt ändert sich die kinetische Energie dieser Partikel, die mit der Trennwand kollidieren. Dies wirkt sich auf die kinetische Energie von  $S_B$  aus.

Das *Äquipartitionstheorem* sagt

$$K(q) = \frac{3N}{2} k_B T$$

Dabei ist

$N$  die Anzahl der Partikel

$T$  die Temperatur

$k_B$  die sogenannte Boltzmannkonstante

Also ist

$$T = \frac{2}{3Nk_B} \cdot K(q) = \frac{2}{3Nk_B} \cdot \sum_i \frac{m_i}{2} v_i^2$$

Es gibt also einen direkten Zusammenhang zwischen Temperatur und den Geschwindigkeiten.

## Unterschied mikrokanonisches Ensemble und kanonisches Ensemble erklären können

Wir betrachten ein Dynamisches System in einem Phasenraum. Ein Phasenraum ist ein Raum, der alle Möglichen Zustände des Dynamischen Systems beschreibt. Eine Trajektorie ist die Zeitliche Veränderung eines Zustandes (betrachte ein Pendel und alle möglichen Zustände in einem Energieniveau nachdem wir es ausgelenkt haben). Diese sind die NVE Trajektorien bzw ein mikrokanonisches Ensemble. Ein NVT ensemble kann jedoch diese Energieniveaus durch äußere Einflüsse verlassen z.B. durch Energiezufuhr in einem Wärmebad.

## Boltzman Verteilung herleiten können (Lagrange Multiplikator)

Die Wahrscheinlichkeit einen Zustand  $i$  zu finden ist nach Ludwig Boltzmann

$$P_i \sim \exp\left(\frac{-E_i}{k_B T}\right)$$

Dabei ist

$E_i$  die Energie des Zustands  $i$

$k_B$  die Boltzmannkonstante

$T$  die Temperatur

Dieser Zusammenhang soll nun hergeleitet werden.

Die Grundlage dafür bildet die **Shannon-Entropie**

$$S = - \sum_{i=1}^N P_i \ln P_i$$

Dabei sei  $P_i$  Wahrscheinlichkeit für Zustand  $i$ . Die Entropie misst die Unsicherheit. Die Shannon Entropie wird Maximal falls  $P_i = \frac{1}{N}$ .

Betrachte zunächst die Energie. Diese ist nicht konstant in allen Bereichen, sondern unterschiedlich in verschiedenen Untersystemen. Also kann nur ein Mittelwert  $\bar{E}$  bilden. Die Energie  $\bar{E}$  kann man auf unterschiedliche Arten verteilen. Es soll gelten

$$\sum_{i=1}^N E_i P_i = \bar{E} \text{ und } \sum_{i=1}^N P_i = 1 \quad (20)$$

Zur Maximierung der Entropie unter den Nebenbedingungen (20) stellen wir die Lagrange-Funktion

$$\frac{S}{k_B} = - \sum_{i=1}^N P_i \ln P_i + \lambda \left( \sum_{i=1}^N P_i - 1 \right) + \beta \left( \bar{E} - \sum_{i=1}^N E_i P_i \right)$$

auf. Aus den Lagrange-Multiplikatoren erhalten wir aus den partiellen Ableitungen nach  $\lambda$  bzw.  $\beta$  direkt die Nebenbedingungen. Die partielle Ableitung nach  $P_i$  bringt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial P_i} S &= -\ln P_i - 1 + \lambda - \beta E_i = 0 \\ \Leftrightarrow & \quad -\ln P_i + (\lambda - 1) - \beta E_i = 0 \\ \Leftrightarrow & \quad P_i = e^{\lambda-1} e^{-\beta E_i} = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \end{aligned} \quad (21)$$

wobei  $Z = \sum_{i=1}^N e^{-\beta E_i}$ .  
 Einsetzen von  $P_i$  bringt dann

$$\frac{S}{k_B} = - \sum_{i=1}^N P_i (-\beta E_i - \ln Z) = \beta \bar{E} + \ln Z$$

Daraus erhalten wir

$$\underbrace{-\frac{1}{\beta} \ln Z}_{=: F} = \bar{E} - \frac{1}{k_B \beta} \cdot S$$

Mit  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  erhalten wir schließlich

$$F = \bar{E} - TS$$

Wir nennen  $F$  die **freie Energie**.

Nähert sich die Energie dem absoluten Nullpunkt an, verschwindet der Term  $TS$ , also ist tatsächlich nur der Energieterm interessant. Bei normalen Temperaturen ( $\approx 300K$ ), dann sind die temperaturbedingten Einflüsse wesentlich.