Mathematik III

Herbst 2013

Gesundheitswissenschaften und Technologie Bachelor Mathematik DZ und Mathematik Lehrdiplom

Prof. Dr. Erich Walter Farkas

Kapitel 2: Mathematische Modelle
14. Oktober 2013

Allgemeine Hinweise

Die verwendete Folien basieren auf die im Herbst 2012 verwendete Fassung von Herrn Dr. A. Caspar und Herrn Prof. Dr. N. Hungerbühler

Literatur

- Systemanalyse (D. Imboden, S. Koch)
- Elementary Differential Equations (W. E. Boyce, R. C. DiPrima)
- Einführung in partielle Differentialgleichungen (N. Hungerbühler)

Modellbildung

Grundfragen

- Was ist ein Modell?
- Wie erstellt man ein Modell?
- Was ist die Beziehung zwischen Modell und Realität?
- Was kann man mit einem Modell alles anstellen?

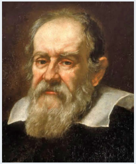
Was ist ein (mathematisches) Modell?

Antwortversuch

Ein mathematisches Modell ist die Beschreibung eines realen Phänomens in der Sprache der Mathematik.

Hmmm. . . ?

Galileo Galilei sagte 1623:

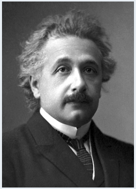


Das Buch der Natur ist in der Sprache der Mathematik geschrieben und ihre Buchstaben sind Dreiecke, Kreise und andere geometrische Figuren, ohne die es ganz unmöglich ist auch nur einen Satz zu verstehen, ohne die man sich in einem dunklen Labyrinth verliert. (Galileo Galilei: Il Saggiatore, 1623, Editione Nazionale, Bd. 6, Florenz 1896, S. 232)

Eugene Wigner ergänzte 1960:

The miracle of the appropriateness of the language of mathematics for the formulation of the laws of physics is a wonderful gift which we neither understand nor deserve. We should be grateful for it ... (aus: The Unreasonable Effectiveness of Mathematics in the Natural Sciences)

Albert Einstein war etwas kritischer eingestellt:



Wie ist es möglich, dass die Mathematik, die doch ein von aller Erfahrung unabhängiges Produkt des menschlichen Denkens ist, auf die Gegenstände der Wirklichkeit so vortrefflich passt? (. . .) Hierauf ist nach meiner Ansicht kurz zu antworten: Insofern sich die Sätze der Mathematik auf die Wirklichkeit beziehen, sind sie nicht sicher, und insofern sie sicher sind, beziehen sie sich nicht auf die Wirklichkeit. (Einstein, Geometrie und Erfahrung, 1921)

Aber wie sieht es mit Modellen ausserhalb der Physik aus?

Israel Gelfand (1913–2009) meinte einst:

There is only one thing which is more unreasonable than the unreasonable effectiveness of mathematics in physics, and this is the unreasonable ineffectiveness of mathematics in biology.

Avner Friedman hält dem 2010 entgegen:

The gulf between biology and mathematics is narrowing as each domain tackles the language, concepts, and methods of the other.

Erste Annäherung an den Begriff

- Typischerweise beschränken sich Modelle auf einen eng begrenzten Ausschnitt der Realität (Reduktionistischer Ansatz).
  Kritik: Was nicht ins Modell passt wird ausgeblendet und man verliert die grösseren Zusammenhänge aus dem Auge.
  Deshalb: Synthese von Modellen (holistischer Ansatz).
- Modelle sind eine vereinfachte Beschreibung der Realität.
- Von einem Phänomen sind verschiedene Modelle möglich.

Wie erstellt man ein Modell?

Die Modellbildung ist *keine* mathematische Disziplin: Es sind Kenntnisse aus der jeweiligen Disziplin über den zu modellierenden Vorgang erforderlich. Zu Beginn mache man sich klar:

- Welchen Ausschnitt aus der Realität will man modellieren? (Systemgrenzen festlegen)
- Welche Effekte sind vernachlässigbar, welche relevant?
- Welche mathematischen Strukturen sind geeignet? (ODE, PDE, Statistik, lineare Algebra, Geometrie, ...)

Folgende Überlegungen helfen typischerweise:

- Bilanzierung von Masse, Energie, Teilchenzahl, Individuen,...
- Aufstellen einer Reaktionsgleichung
- Betrachten von Wachstums-, Zerfalls- & Interaktionsprozessen
- Betrachtung von Transportprozessen (Austausch, Diffusion)
- Ausweichen auf statistische Methoden bei Systemen mit vielen Freiheitsgraden (bei subjektiver oder objektiver Unsicherheit)

Typische Etappen der Modellbildung

- Beobachten
- Daten sammeln: Messungen
- Daten ordnen: Suche nach mathematischen Mustern
- Verstehen: Erkennen der Grundprinzipien, Erstellen des mathematischen Modells
- Überprüfen (Validieren) des Modells: Vergleich mit der Realität
- Anpassen, Verfeinern oder Verallgemeinern

Wie hängen Modell und Realität zusammen?

Grundsatz

Modell $\neq$ Realität

Realität

System = Ausschnitt der Realität (Objekte, die untereinander in Beziehung stehen, feste Systemgrenzen)

Bei mangelnder Übereinstimmung Modell anpassen

Modellierung →

← überprüfen, validieren, falsifizieren

Theorie

Modell

↓ Analyse

Prognosen
Aussagen
Optimierung
...

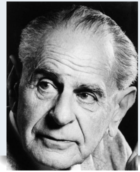
Beachten Sie, bitte

- Die (mathematische) Analyse liefert nur innerhalb der Theorie korrekte Resultate.
- Ist die mathematische Analyse zu schwierig, helfen numerische Simulationen/Berechnungen.
  Achtung: Diese gelten nur approximativ.

Beispiele von Theorien

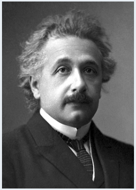
- Newtonsche Mechanik
- Einsteins Relativitätstheorie
- Quantenmechanik (Werner Heisenberg, Erwin Schrödinger, ...)
- Teilchenphysik (Vorhersage des Higgs Bosons)
- Statik (Festigkeit von Bauwerken)
- Mendelsche Gesetze (Vererbungslehre)
- Evolutionstheorie (Charles Darvin)
- Doppelhelixmodell der DNS (James Watson, Francis Crick)
- Zellbiologie (Anton van Leeuwenhoek, Robert Hooke)

Karl Popper über Theorien:



Eine Theorie kann nicht verifiziert werden, sondern nur falsifiziert. (Logik der Forschung, 1934)

Einstein über Theorien:



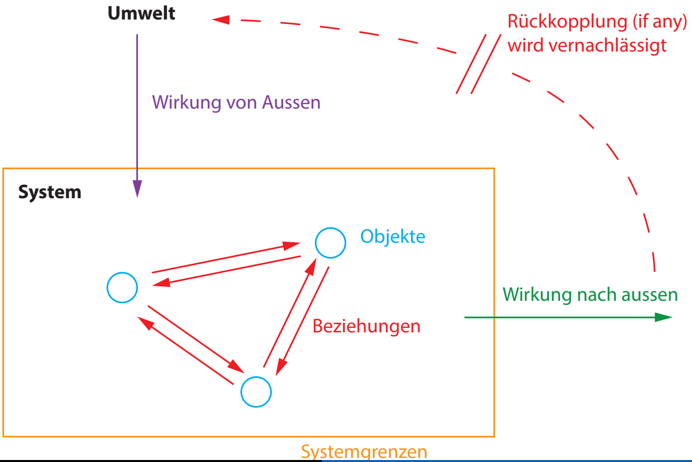
Neue Theorien entstehen zum einen, wenn neue Fakten nicht mit bestehenden Theorien erklärt werden können, zum anderen durch das Streben nach Vereinheitlichung und Vereinfachung zu einer Theorie als Ganzem.

Wozu sind Modelle gut?

- **Besseres Verständnis:** Welche Ursache hat welche Wirkung? Z.B. Welche Parameter beeinflussen die Ausbreitung einer Seuche?
- **Optimierung:** Z.B. zur Verringerung des Luftwiderstands bei Fahrzeugen, optimale Dosierung von Medikamenten
- **Simulation:** Wenn die theoretische oder formelmässige Analyse zu komplex ist. Z.B. Klimamodelle
- **Virtuelle Experimente:** Wenn reale Experimente zu teuer, zu gefährlich oder undurchführbar sind. Zum Beispiel: Welche Erhöhung des Treibhausgases CO_2 führt zu welchem globalen Temperaturanstieg?
- **Prognose:** Modelle erlauben Vorhersagen über die Zukunft, z.B. das Wetter morgen

Systemanalyse

Systemanalyse ist der erste Schritt der Modellbildung:



System

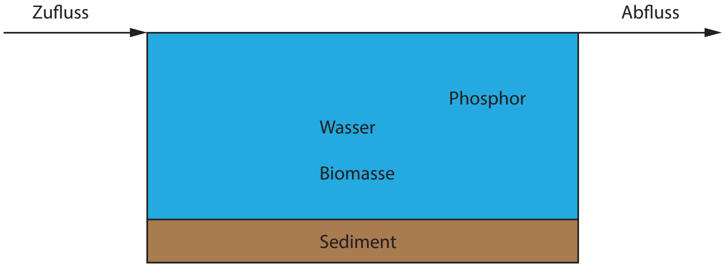
Ein **System** ist eine gedankliche Konstruktion, die einen durch festgelegte *Grenzen* definierten Teil der Umwelt abbildet und dabei die *Objekte* und deren *Beziehungen* identifiziert.

Mathematisches Modell

Ein **Mathematisches Modell** ist eine vereinfachte Beschreibung eines komplexen Systems mit Hilfe mathematischer Formeln und von *Systemvariablen* (z.B. Konzentration, Temperatur, Menge). Die Anzahl der Systemvariablen heisst *Dimension* des Modells.

Beispiel

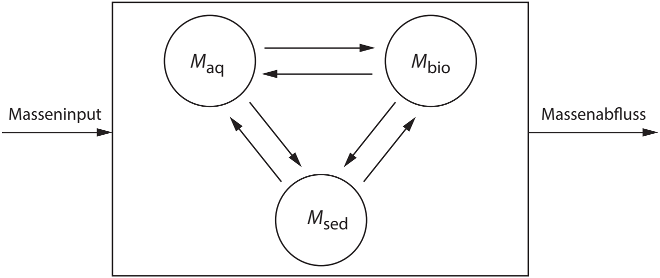
Phosphatkonzentration in einem See



Phosphatkonzentration in einem See (cont.)

- Festlegen der Systemgrenzen
- Definieren der Systemvariablen
- Definieren der inneren und äusseren Relationen (Empirie)

Wir betrachten die Komponenten des Systems vereinfacht als räumlich vollständig durchmischt (homogen). Man nennt dies dann ein **Boxmodell**. Hier erhält man ein Modell mit 3 Systemvariablen



Phosphatkonzentration in einem See (cont.)

Masseninput: Masse an Phosphor im Zufluss [kg $\sec^{-1}$]
Massenabfluss: Masse an Phosphor im Abfluss [kg $\sec^{-1}$]
M_{aq}: Masse an Phosphor im Wasser [kg]
M_{bio}: Masse an Phosphor in der Biomasse [kg]
M_{sed}: Masse an Phosphor im Sediment [kg]

Diese Grössen hängen im Allgemeinen von der Zeit t und den Anfangsbedingungen ab. Statt mit den Massen rechnet man gern mit den Konzentrationen. Über die Relationen (Pfeile) sind Modellannahmen zu treffen.

Beispiele von Modellen

Das Ohmsche Gesetz

$$U = RI$$

U: Spannung über einem Widerstand [Volt]
R: Widerstand [Ohm]
I: Stromstärke [Ampère]

Sonnensystem

Auf einfachen Beobachtung basierend (Phänomenologie)

- Aristarchos von Samos (3. Jh.v.Chr): Heliozentrisches Weltbild
- Ptolemäus (2. Jh.v.Chr): Geozentrisches Weltbild

Vereinfachung des komplizierten geozentrischen Weltbildes

- Nikolaus Kopernikus (Anfang 16. Jh.): Heliozentrisches Weltbild

Messungen

- Tycho Brahe (Ende 16. Jh): Präzise Messungen wecken Zweifel am heliozentrischen System

Datenbasiertes mathematisches Modell (beschreibend)

- Johannes Kepler (Anfang 17. Jh.): 3 Keplersche Gesetze

Sonnensystem (cont.)

Mathematisch-physikalisches Modell (erklärend)

- Isaac Newton (Ende 17. Jh.): Keplers Gesetze folgen mathematisch aus dem Gravitationsgesetz

Verfeinerung: Newtons Mechanik ist eine Näherung der relativistischen Mechanik

- Albert Einstein (Anfang 20. Jh.): Periheldrehung des Merkur wird durch die allgemeine Relativitätstheorie erklärt

Algenwachstum und Nitratkonzentration

$X(t)$ sei die Algenkonzentration einem einem See. Bei konstanter Nitratkonzentration wächst die Algenkonzentration gemäss

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

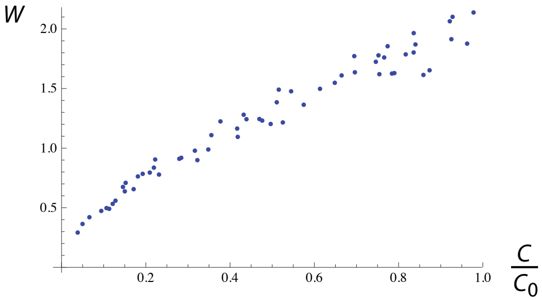
wobei der Wachstumskoeffizient $\lambda = \lambda(C)$ von der Nitratkonzentration C abhängt. D.h. es gilt

$$\lambda(C) = \frac{X'(t)}{X(t)} = (\ln X(t))' =: W$$

Über einen gewissen Zeitraum wurden nun gemessen:

- die Nitratkonzentration C in einem See
- das spezifische Wachstum W der Algenpopulation im See

Bezogen auf eine Referenzkonzentration C_0 ergab sich:



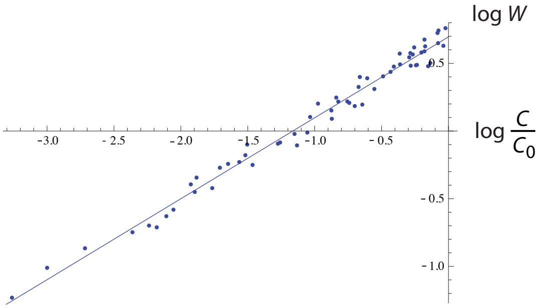
Man vermutet daher ein Potenzgesetz der Art

$$W = W_0 \left(\frac{C}{C_0} \right)^{\alpha} \qquad (*)$$

Durch Logarithmieren gelangt man auf

$$\log W = \color{red}{\log W_0} + \color{blue}{\alpha} \log \frac{C}{C_0}$$

Die logarithmierten Daten sehen so aus:



Die Regressionsgerade hat Achsenabschnitt $\log W_0 = 0.69$ und Steigung $\alpha = 0.59$. Wir haben also die Modellgleichung $(*)$ für das spezifische

Algenwachstum in Abhängigkeit der Nitratkonzentration erhalten!

Ein See als linearer Durchflussreaktor

Dieses Beispiel ist typisch für lineare Modelle mit einer Systemvariablen.

- V = Volumen des Sees (konstant)
- $Q = Q(t)$ = Zufluss = Abfluss (Wassermenge pro Zeiteinheit)
- $C_{\text{in}} = C_{\text{in}}(t)$ = Konzentration eines Stoffs im Zufluss
- $C = C(t)$ = Konzentration des Stoffs im See
- k = Abbaurate des Stoffs im See

Massenbilanz:

Änderung der Stoffmenge im See pro Zeit =

= Zufuhr des Stoffs − Abfuhr des Stoffs − Abbau des Stoffs

Zwischenschritte:

- Menge des Stoffs im See $= VC =: M$
- Zufuhr des Stoffs $= QC_{\text{in}}$
- Abfuhr des Stoffs $= QC$
- Abbau des Stoffs $= kM = kVC$

Also lautet die Systemgleichung

$$\frac{d(VC)}{dt} = QC_{\text{in}} - QC - kVC$$

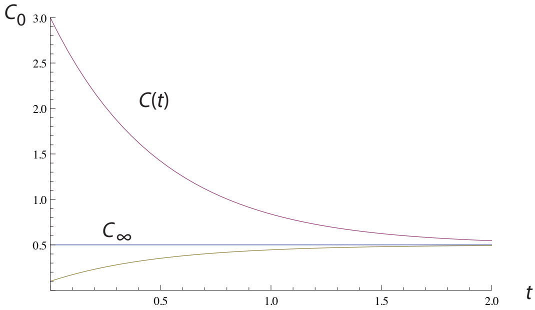
Division durch V liefert

$$C' = \frac{Q}{V} C_{\text{in}} - C(\frac{Q}{V} + k)$$

Diskussion (für konstante Koeffizienten)

- Stationäre Lösung ($C' \equiv 0$): $C \equiv \frac{QC_{\text{in}}}{Q+kV} =: C_\infty$
- Inhomogene lineare ODE $\Longrightarrow$ Lösung:

$$C(t) = C_\infty + (C_0 - C_\infty)e^{-t(k+Q/V)}$$



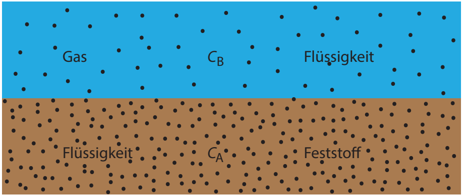
Beachte: $C_h(t) := C(t) - C_\infty$ löst die homogene ODE $C_h' = -(\frac{Q}{V} + k)C_h$, d.h. $C_h(t) = C_h(0)e^{-t(k+Q/V)}$. C_h klingt somit in der **Halbwertszeit**

$$T_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{k + Q/V}$$

jeweils um die Hälfte ab.
Statt Halbwertszeit wird oft die **Anpassungszeit** als Referenz gebraucht, also die Zeit, um auf 5%$= \frac{1}{20}$ abzuklingen.

Stoffaustausch an Grenzflächen

Im Gleichgewicht



Ein Stoff S sei in einem Zweiphasensystem A, B gelöst. Im Gleichgewicht, bei niedriger Konzentration gilt das Gesetz von Henry:

$$\frac{C_A}{C_B} = K_{A/B} \quad \text{(Henry-Koeffizient)}$$

Ausserhalb des Gleichgewichts

Ist das System nicht im Gleichgewicht, ist der Stoffaustausch an der Grenzfläche netto

$$K_{A/B} = v_{A/B}(C_A - C_A^{eq})$$

wobei

- $K_{A/B}$ = Massenfluss pro Fläche und Zeit von A nach B
- $v_{A/B}$ = Austauschgeschwindigkeit
- $C_A^{eq} = C_B K_{A/B}$ = Konzentration in A, die mit Konzentration C_B in Gleichgewicht wäre

Lineares Zweiboxmodell

Dieses Beispiel ist typisch für ein mehrdimensionales lineares System.

- V_1 = Volumen des Sees (konstant)
- V_2 = Volumen des Sediments (konstant)
- A = Fläche der Grenzschicht
- $Q = Q(t)$ = Zufluss = Abfluss (Wassermenge pro Zeiteinheit)
- $C_{\text{in}} = C_{\text{in}}(t)$ = Konzentration eines Stoffs im Zufluss
- $C_1 = C_1(t)$ = Konzentration des Stoffs im See
- $C_2 = C_2(t)$ = Konzentration des Stoffs im Sediment

Massenbilanz:

$$\begin{aligned}\frac{d(V_1 C_1)}{dt} &= QC_{\text{in}} - QC_1 - v_{1/2}(C_1 - C_1^{\text{eq}})A \\ \frac{d(V_2 C_2)}{dt} &= v_{1/2}(C_1 - C_1^{\text{eq}})A\end{aligned}$$

wobei $C_1^{\text{eq}} = C_2 K_{1/2}$.

Mit $C := \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$ lässt sich dies so schreiben

$$C' = AC + B$$

wobei

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{Q+Av_{1/2}}{V_1} & \frac{v_{1/2}K_{1/2}A}{V_1} \\ \frac{v_{1/2}A}{V_2} & -\frac{v_{1/2}K_{1/2}A}{V_2} \end{pmatrix} \text{ und } B = \begin{pmatrix} \frac{QC_{\text{in}}}{V_1} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Bei konstanten Koeffizienten gilt:

- Stationäre Lösung: $C_\infty = -A^{-1}B$
- Lösung $C(t) = e^{At}(C_0 - C_\infty) + C_\infty$, mit Anfangsbedingung $C(0) = C_0$.