Mathematik für BiologInnen
WS 2005

6. Block

A.o. Univ.-Prof. DI Dr. Michael Hintermüller

michael.hintermueller@uni-graz.at

Karl-Franzens Univeristät Graz

Institut für Mathematik und Wissenschaftl. Rechnen

Begrenzte Prozesse

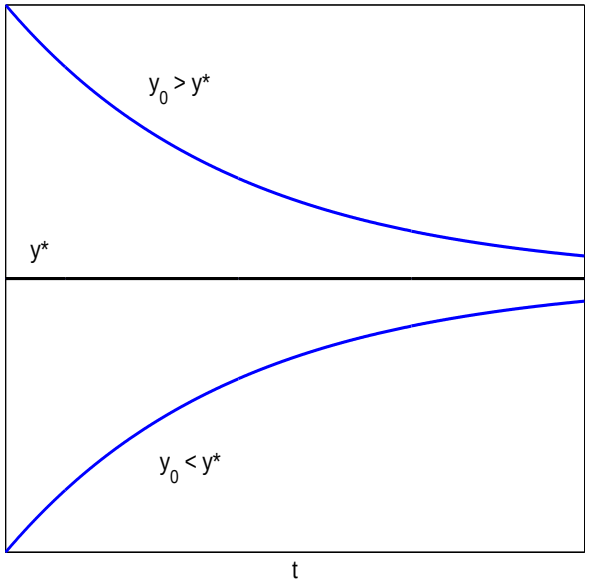
Exponentielle Annäherung an einen Gleichgewichtswert.

- Stationärer Zustand (Gleichgewicht): y^*.
- Stimmt die Zustandvariable y nicht mit y^* überein, so setzt eine ”Rückbewegung” zum Gleichgewicht ein.
- Häufig erfolgt die Rückbewegung mit einer Geschwindigkeit, welche proportional zu $y - y^*$ ist. Ein Annäherung dieses Verhaltens ist durch

$$y = y^* + (y_0 - y^*)e^{-k\,t}, \quad k > 0 \text{ gegeben,}$$

definiert.

- $y_0 > y^*$: Abnahmeprozess.
- $y_0 < y^*$: Wachstumsprozess.

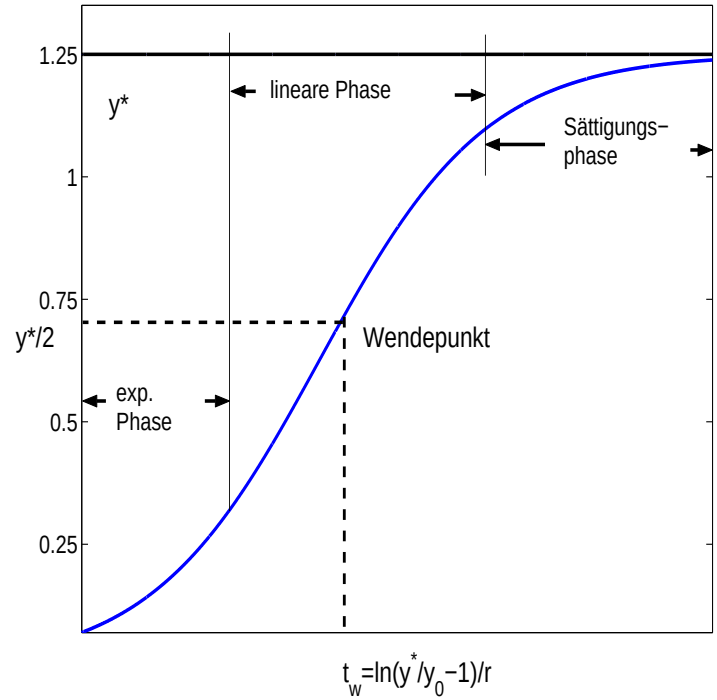


Begrenztes Wachstum

Logistisches Wachstum

- Wachstum entspricht einer ”S”-förmigen Kurve.
- y nimmt anfänglich exponentiell zu und strebt dann einem Sättigungswert y^* zu.
- Modell: **Logistische Funktion.**

$$y = \frac{1}{1 + \left(\frac{y^*}{y_o} - 1\right) e^{-r\,t}}, \quad r > 0$$



- Anpassung der logistischen Kurve anhand von Daten $\Rightarrow$ nichtlineare Regression.

Begrenztes Wachstum

Bei bekanntem y^* kann die nichtlineare Regression wieder in eine lineare Regression überführt werden.

- Multiplikation mit dem Nenner liefert

$$\frac{y^*}{y} - 1 = (\frac{y^*}{y_0} - 1)e^{-r\,t}.$$

- Logarithmieren:

$$\ln\left(\frac{y^*}{y} - 1\right) = \ln\left(\frac{y^*}{y_0} - 1\right) - r\,t.$$

- Setze $y' = \ln(y^*/y - 1)$. Dann gilt:

$$y' = k\,t + d \quad \text{mit } k = -r, \quad d = \ln\left(\frac{y^*}{y_0} - 1\right).$$

  - Lineare Regression in der (y', t)-Ebene liefert $\hat{y}' = \hat{k}\,t + \hat{d}$.
  - Daraus ergibt sich:

$$\hat{r} = -\hat{k}, \quad \hat{y}_0 = \frac{y^*}{e^{\hat{d}} + 1}.$$

Matrizen

- Häufig liegt folgendes Datenmaterial vor: An n Untersuchungseinheiten wurden je p Merkmale $A_1(n), A_2(n), \ldots, A_p(n)$ beobachtet.
- Unter Einführung einer Doppelindizierung erhalten wir in kompakter Notation:

$$a_{ij} = A_j(i), \quad i = 1, \ldots, n, \quad j = 1, \ldots, p.$$

Die **Elemente** a_{ij} fassen wir zu einer $\mathbf{n} \times \mathbf{p}$**-Matrix** $A \in \mathbb{R}^{n \times p}$ zusammen:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1p} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2p} \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{np} \end{pmatrix}.$$

- Gilt $n = p$, so nennen wir die Matrix A **quadratisch**.
- Allgemein kann man A als Sammlung von Zeilenvektoren (mit je p Elementen) oder Spaltenvektoren (mit je n Elementen) ansehen.
- Man schreibt auch $(a_{ij})_{n \times p}$.

Matrizenoperationen

- **Addition.** Seien $A = (a_{ij})_{n\times p}$ und $B = (b_{ij})_{n\times p}$. Dann gilt:

$$A + B = (a_{ij} + b_{ij})_{n\times p},$$

  d.h., die Addition erfolgt elementweise.

- **Multiplikation mit einer reellen Zahl.** Seien $A = (a_{ij})_{n\times p}$ und $\alpha \in \mathbb{R}$. Dann gilt:

$$\alpha\, A = (\alpha\, a_{ij})_{n\times p},$$

  d.h., die skalare Multiplikation erfolgt elementweise.

- **Multiplikation**. Seien $A = (a_{ij})_{n\times p}$ und $B = (b_{ij})_{p\times m}$. Dann gilt mit $C = A \cdot B$

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{p} a_{ik} b_{kj}, \quad i = 1, \ldots, n, \quad j = 1, \ldots, m.$$

  Es gilt also $C = (c_{ij})_{n\times m}$. Die Matrixmultiplikation ist nicht kommutativ.

- **transponierte Matrix $\mathbf{A^T}$.** Sei $A = (a_{ij})_{n\times p}$. Dann gilt: $A^T = (a_{ji})_{p\times n}$.

- **symmetrische Matrix**. Gilt $A^T = A$, so nennt man A **symmetrisch**.

Gauß'sches Eliminationsverf.

Das Gauß'sche Eliminationsverfahren ist ein Algorithmus zur Lösung von linearen Gleichungssystemen. Wir werden hier eine einfache Variante an einem Beispiel studieren.

Gesucht sei die Lösung $\vec{x} = (x, y, z)^T$ von

$$\begin{aligned} 3x + 4y + 5z &= 1 \\ -x - y + 2z &= 2 \\ 2x + y - z &= -1 \end{aligned} \quad \Leftrightarrow \quad A\vec{x} = b, \quad \text{mit} \quad A = \begin{pmatrix} 3 & 4 & 5 \\ -1 & -1 & 2 \\ 2 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \; b = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Zusammen mit der rechten Seite b erstellen wir das Tableau

$$A|b \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{array}{ccc|c} 3 & 4 & 5 & 1 \\ -1 & -1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & -1 & -1 \end{array}$$

Der Algorithmus erzeugt nun ein modifiziertes Tableau $A'|b'$, welches unterhalb des ersten Diagonalelements (a_{11}) nur Null-Einträge besitzt. Das modifizierte Tableau wird nun so transformiert, dass unter dem zweiten Diagonalelement (a'_{22}) nur Null-Einträge stehen.

Gauß'sches Eliminationsverf.

Man fährt mit diesem Schema so lange fort, bis man beim letzten Diagonalelement angelangt ist. Dann kann man die Lösung durch "Rückwärtseinsetzen" gewinnen.

$$\begin{array}{rrr|r} 3 & 4 & 5 & 1 \\ -1 & -1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & -1 & -1 \end{array} \rightarrow \begin{array}{rrr|r} 3 & 4 & 5 & 1 \\ 0 & 1 & 11 & 7 \\ 0 & 5 & 13 & 5 \end{array} \rightarrow \begin{array}{rrr|r} 3 & 4 & 5 & 1 \\ 0 & 1 & 11 & 7 \\ 0 & 0 & -42 & -30 \end{array}$$

Aus dem letzten Tableau erhalten wir durch Rückwärtslösen

$$z = \frac{5}{7}, \quad y = 7 - 11\,z = -\frac{6}{7}, \quad x = \frac{1}{3} - \frac{4}{3}y - \frac{5}{3}z = \frac{2}{7}.$$

Aus den (modifizierten) Tableaus kann man auch ablesen, ob das System überflüssige Gleichungen beinhaltet oder unlösbar ist.

- Überflüssige Gleichungen. Es entsteht eine vollständige Nullzeile im Tableau. Etwa

$$\begin{array}{rrr|r} 3 & 4 & 5 & 1 \\ 0 & 1 & 11 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}$$

Gauß'sches Eliminationsverf.

Diese wird aus dem System gestrichen, und die Rechnung wird fortgesetzt.

- Unlösbares System. Es entsteht eine Zeile etwa der Gestalt

$$\begin{array}{ccc|c} 3 & 4 & 5 & 1 \\ 0 & 1 & 11 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}$$

Der Algorithmus bricht ab.

Weitere Aspekte:

- Zeilen darf man im Laufe des Algorithmus vertauschen. Spalten auch, aber dann ändert sich die Reihenfolge der Variablen.
- Der Gauß'sche Algorithmus kann auch mehrere rechte Seiten simultan verarbeiten.
- Die letzte Bemerkung erlaubt nun, den Gauß'schen Algorithmus zur Bestimmung der Inversen einer Matrix zu verwenden.

Berechnung der Inversen

- Die Inverse einer $n \times n$-Matrix A wird mit A^{-1} notiert. Sie erfüllt

$$A^{-1} \cdot A = A \cdot A^{-1} = E \quad \text{mit} \quad E = (e_{ij})_{n \times n}, \quad e_{ij} = \begin{cases} 1 \text{ wenn } i = j, \\ 0 \text{ sonst.} \end{cases}$$

  E nennt man **Einheitsmatrix**.
  Die Matrix A ist nur dann invertierbar, wenn für beliebiges $b \in \mathbb{R}^n$ das System $A\vec{x} = b$ eine eindeutige Lösung besitzt. Dann gilt: Erfüllt $\vec{x}^*$ nun $A\vec{x}^* = b$, dann folgt: $\vec{x}^* = A^{-1}b$.

- In unserem Beispiel kann der Gauß'sche Algorithmus wie folgt angewandt werden:

$$\begin{array}{rrr|rrr} 3 & 4 & 5 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 \end{array} \quad \rightarrow \quad \begin{array}{rrr|rrr} 3 & 4 & 5 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 11 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 5 & 13 & 2 & 0 & -3 \end{array}$$

Berechnung der Inversen

$$\begin{array}{ccc|ccc} 3 & 4 & 5 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 11 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 5 & 13 & 2 & 0 & -3 \end{array} \rightarrow \begin{array}{ccc|ccc} 3 & 0 & -39 & -3 & -12 & 0 \\ 0 & 1 & 11 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -42 & -3 & -15 & -3 \end{array}$$

$$\Leftrightarrow \begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & -13 & -1 & -4 & 0 \\ 0 & 1 & 11 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -14 & -1 & -5 & -1 \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & -13 & -1 & -4 & 0 \\ 0 & 1 & 11 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -14 & -1 & -5 & -1 \end{array} \rightarrow \begin{array}{ccc|ccc} 14 & 0 & 0 & -1 & 9 & 13 \\ 0 & 14 & 0 & 3 & -13 & 11 \\ 0 & 0 & -14 & -1 & -5 & -1 \end{array}$$

$$\Leftrightarrow \begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & \frac{-1}{14} & \frac{9}{14} & \frac{13}{14} \\ 0 & 1 & 0 & \frac{3}{14} & \frac{-13}{14} & \frac{11}{14} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{14} & \frac{5}{14} & \frac{1}{14} \end{array} = A^{-1}.$$