Mathematische Modellierung: Einführung

F. Kappel

Institut für Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen

Universität Graz

Inhalt

Inhalt

I. Grundsätzliches über Modellierung

Inhalt

I. Grundsätzliches über Modellierung

II. Konkrete Modelle

Inhalt

I. Grundsätzliches über Modellierung

II. Konkrete Modelle

1. Der Brom-Sulfalein-Test

Inhalt

Modellierung

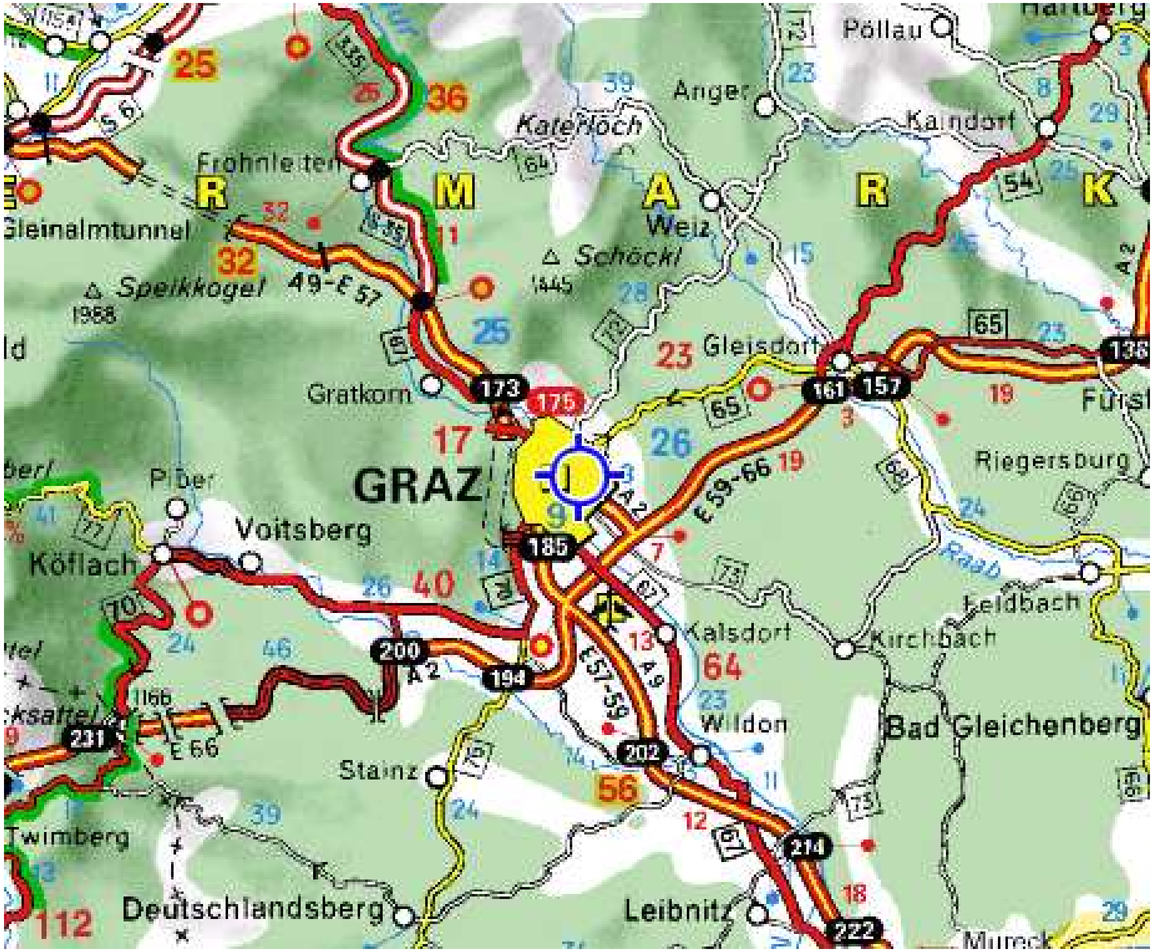
MODELL . . . Abbild eines Ausschnittes der Wirklichkeit zur Erreichung eines bestimmten ZIELES bzw. zur Beantwortung einer FRAGE

Grundsatz: Bewahrung der für die Fragestellung wesentlichen Strukturen und Vernachlässigung der unnötigen Details

Ein Modell soll so einfach wie möglich und nur so kompliziert wie notwendig sein!

Beispiele 1

Landkarten:



Beispiele 2

Beispiele 3

- Verbale Beschreibungen (Nachrichten, Zeugenaussagen etc.)
- Liste von Messdaten: 94 – 58 – 92

Beispiele 3

- Verbale Beschreibungen (Nachrichten, Zeugenaussagen etc.)
- Liste von Messdaten: 94 – 58 – 92

Beispiele 4

- “Reale” Modelle, z.B. Windkanalmodell eines Flugzeuges
- Mathematische Modelle
- Beschreibende Modelle
- Erklärende Modelle (Wiedergabe von Ursache–Wirkungs–Mechanismen)

Grundsätze

- Ziel des Modellierungsprozesses muss klar sein.

Grundsätze

- Ziel des Modellierungsprozesses muss klar sein.
- Unter Beachtung der Ziele soll das Model so einfach wie möglich und nur so komplex wie notwendig sein.

Grundsätze

- Ziel des Modellierungsprozesses muss klar sein.
- Unter Beachtung der Ziele soll das Model so einfach wie möglich und nur so komplex wie notwendig sein.
- Variable und Parameter sollten Entsprechungen in der Wirklichkeit haben (insbesondere bei erklärenden Modellen).

Grundsätze

- Ziel des Modellierungsprozesses muss klar sein.
- Unter Beachtung der Ziele soll das Model so einfach wie möglich und nur so komplex wie notwendig sein.
- Variable und Parameter sollten Entsprechungen in der Wirklichkeit haben (insbesondere bei erklärenden Modellen).
- Erreicht ein Modell die gesetzten Ziele nicht, so ist es zu modifizieren oder durch ein neues zu ersetzen.

Grundsätze

- Ziel des Modellierungsprozesses muss klar sein.
- Unter Beachtung der Ziele soll das Model so einfach wie möglich und nur so komplex wie notwendig sein.
- Variable und Parameter sollten Entsprechungen in der Wirklichkeit haben (insbesondere bei erklärenden Modellen).
- Erreicht ein Modell die gesetzten Ziele nicht, so ist es zu modifizieren oder durch ein neues zu ersetzen.

Never fall in love with your model !!!

Gültigkeitsbereich

Gültigkeitsbereich eines Modelles: Jener Bereich der Wirklichkeit, der durch das Model mit hinreichender Genauigkeit beschrieben wird.

Dieser ist durch simplifizierende Annahmen während des Modellierungsprozesses charakterisiert und steht daher mit der Zielsetzung für den Modellierungsprozess in direktem Zusammenhang.

Ziele

Ziele von Modellierungsprozessen:

Ziele

Ziele von Modellierungsprozessen:

a) Simulation (statt Experiment)

Ziele

Ziele von Modellierungsprozessen:

a) Simulation (statt Experiment)

b) Bestimmung von Grössen, die nicht direkt
messbar sind.

Ziele

Ziele von Modellierungsprozessen:

a) Simulation (statt Experiment)

b) Bestimmung von Grössen, die nicht direkt messbar sind.

c) Steuerung und optimale Steuerung

Ziele

Ziele von Modellierungsprozessen:

a) Simulation (statt Experiment)

b) Bestimmung von Grössen, die nicht direkt messbar sind.

c) Steuerung und optimale Steuerung

d) Erkenntnisgewinn

Rahmenbedingungen

a) Entwicklung und Einsatz neuer mathematischer Methoden.

Mathematik $\Longleftrightarrow$ Anwendungen

Rahmenbedingungen

a) Entwicklung und Einsatz neuer mathematischer Methoden.

$$\text{Mathematik} \quad \Longleftrightarrow \quad \text{Anwendungen}$$

b) Verfügbarkeit hoher Rechenleistung (komplexe Modelle, Visualisierung).

Rahmenbedingungen

a) Entwicklung und Einsatz neuer mathematischer Methoden.

Mathematik $\Longleftrightarrow$ Anwendungen

b) Verfügbarkeit hoher Rechenleistung (komplexe Modelle, Visualisierung).

c) Neue Technologien für Messgeräte.

Brom–Sulfalein–Test 1

Brom–Sulfalein–Test: Leberfunktionstest; Abbaurate von Brom–Sulfalein in der Leber erlaubt Aussagen über die Leberfunktion.

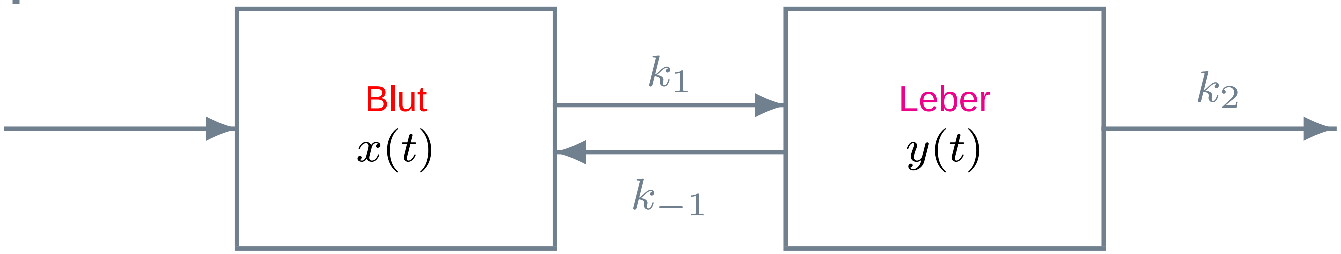
Durchführung:

a) Intravenöse Verabreichung einer Dosis d an Brom–Sulfalein zum Zeitpunkt $t = 0$.

b) Blutentnahme $\sim$ alle 10 min. und Feststellung der Brom–Sulfalein–Konzentration im Blut.

Brom–Sulfalein–Test 2

Kompartmentmodell:



$x(t)$ ... Masse an BS im Blut zum Zeitpunkt t

$y(t)$ ... Masse an BS in der Leber zum Zeitpunkt t

k_1, k_{-1}, k_2 ... Übergangsraten

Masse-Bilanz:

$$\dot{x}(t) = -k_1 x(t) + k_{-1} y(t), \tag{1}$$

$$\dot{y}(t) = k_1 x(t) - (k_{-1} + k_2) y(t) \tag{2}$$

Anfangsbedingungen: $x(0) = d$, $y(0) = 0$.

Brom–Sulfalein–Test 3

(2) $\Longrightarrow \ddot{y}(t) = k_1\big(-k_1 x(t) + k_{-1} y(t)\big) - (k_{-1} + k_2)\dot{y}(t)$

(2) $\Longrightarrow x(t) = \frac{1}{k_1}\big(\dot{y}(t) + (k_{-1} + k_2) y(t)\big)$

$\Longrightarrow$

$$\ddot{y}(t) + \big(k_1 + k_{-1} + k_2\big)\dot{y}(t) + k_1 k_2 y(t) = 0. \qquad (3)$$

Ansatz: $y(t) = e^{\lambda t}$

$\Longrightarrow \quad \lambda^2 + \big(k_1 + k_{-1} + k_2\big)\lambda + k_1 k_2 = 0.$

$\Longrightarrow$

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}\left(k_1 + k_{-1} + k_2 \pm \sqrt{(k_1 + k_{-1} + k_2)^2 - 4k_1k_2}\right)$$

Brom–Sulfalein–Test 4

$$
\begin{aligned}
(k_1 + k_{-1} + k_2)^2 - 4k_1k_2 \\
&= k_1^2 + k_{-1}^2 + k_2^2 + 2k_1k_{-1} + 2k_{-1}k_2 - 2k_1k_2 \\
&> k_1^2 + k_{-1}^2 + k_2^2 + 2k_1k_{-1} - 2k_{-1}k_2 - 2k_1k_2 \\
&= (k_1 + k_{-1} - k_2)^2 \geq 0.
\end{aligned}
$$

$\Longrightarrow$

$$\lambda_1 < \lambda_2 < 0$$

Brom–Sulfalein–Test 5

Ansatz $\Longrightarrow$ $y(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 e^{\lambda_2 t}$.

$x(t) = c_1 \frac{\lambda_1 + k_{-1} + k_2}{k_1} e^{\lambda_1 t} + c_2 \frac{\lambda_2 + k_{-1} + k_2}{k_1} e^{\lambda_2 t}$.

Anfangsbedingung $\Longrightarrow$

$$
\begin{aligned}
c_1 + c_2 &= 0, \\
c_1 \lambda_1 + c_2 \lambda_2 + (k_{-1} + k_2)(c_1 + c_2) &= k_1 d.
\end{aligned}
$$

$$
\Longrightarrow \quad c_1 = \frac{k_1 d}{\lambda_1 - \lambda_2}, \quad c_2 = -\frac{k_1 d}{\lambda_1 - \lambda_2}.
$$

Brom–Sulfalein–Test 6

$$\boldsymbol{x(t) = x(t; k_1, k_{-1}, k_2),}$$
$$\boldsymbol{y(t) = y(t; k_1, k_{-1}, k_2)}$$

Bestimmung von k_2 (und k_1, k_{-1}):

Messdaten: ξ_i, $i = 1, \ldots, N$, Konzentration von Brom-Sulfalein im Blut zu den Zeitpunkten $t_1 < \cdots < t_N$.

$$\boldsymbol{\xi_i = \frac{x(t_i)}{\delta V},}$$

δ . . . spezifische Dichte, V . . . Blutvolumen

Brom–Sulfalein–Test 7

Vergleich von Modell-Output und Messdaten:

$$J(k_1, k_{-1}, k_2, V) = \sum_{i=1}^{N} \Big(\xi_i - \frac{1}{\delta V} x(t_i; k_1, k_{-1}, k_2)\Big)^2$$

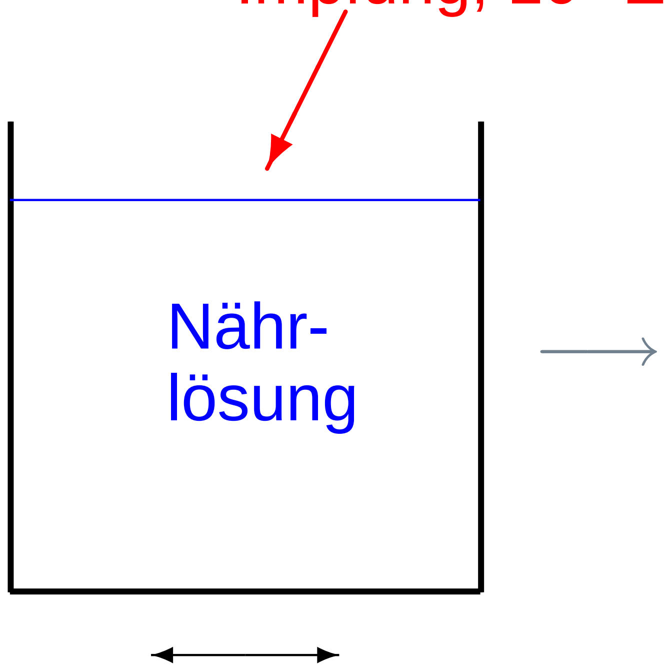
$$\longrightarrow \text{ Min}$$

$$\Longrightarrow \quad \hat{k}_1,\ \hat{k}_{-1},\ \hat{k}_2,\ \hat{V}$$

Populationswachstum 1

Wachstum einer Bakterienkultur

Impfung, 10^8 Zellen/ml



1 Stunde im Inkubator
Messungen jede volle Stunde

Populationswachstum 2

Euler 1760, Malthus 1798:

B_n ... # Zellen zur Stunde n

$$B_n = rB_{n-1}, \quad B_0 = 10^8$$

r ... Wachstumsrate

$\Longrightarrow B_n = r^n B_0$ ... geometrisches Wachstum

Populationswachstum 3

Bestimmung von r:

Daten: $(1, \beta_1),\ (2, \beta_2), \ldots, (N, \beta_N)$

$\ln \boldsymbol{B_n} = \boldsymbol{n} \ln \boldsymbol{r} + \ln \boldsymbol{B_0}$, d.h.

$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{a}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}$ mit

$\boldsymbol{y} = \ln \boldsymbol{B_n},\ \boldsymbol{x} = \boldsymbol{n},\ \boldsymbol{a} = \ln \boldsymbol{r},\ \boldsymbol{b} = \ln \boldsymbol{B_0}$

Messdaten $\longrightarrow (x_i, y_i) = (i, \ln \beta_i),\ i = 1, \ldots, N$

$\boldsymbol{L(a,b)} = \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{N}} \left(\boldsymbol{y_i} - \boldsymbol{a}\boldsymbol{x_i} - \boldsymbol{b}\right)^{\boldsymbol{2}} \quad \longrightarrow \quad$ Min

$\Longrightarrow \hat{\boldsymbol{a}} = \ln \hat{\boldsymbol{r}}$, d.h. $\hat{\boldsymbol{r}} = \ln \hat{\boldsymbol{a}}$

Populationswachstum 4

Ein Model mit Altersstruktur (Euler 1760):

Zensus alle x Jahre (x Zensusperiode, z.B. $x = 5$) beginnend im Jahr X. Es werden nur Frauen gezählt.

$\boldsymbol{B_n}$ . . . # Frauen, die während der $\boldsymbol{n}$-ten Zensusperiode geboren werden.

Einteilung in Altersklassen: Frauen der Klasse $\boldsymbol{k}$ (k-te Zensusaltersklasse) . . . Frauen, die vor $\boldsymbol{k}$ Zensusperioden geboren wurden, und noch am Leben sind.

Populationswachstum 5

B_{n-k} ... Frauen, die in der Zensusperiode $n-k$ geboren wurden, und in der n-ten Zensusperiode das Zensusalter k haben.

λ_k ... Wahrscheinlichkeit k Zensusperioden nach Geburt zu überleben.

b_k ... Fertilität der Frauen in der k-ten (Zensus)Altersklasse.

Populationswachstum 6

$b_k \lambda_k B_{n-k}$ ... # Töchter geboren während der n-ten Zensusperiode von Frauen, die selbst k Zensusperioden vorher geboren wurden.

h_n ... # Töchter, die von Frauen während der n-ten Zensusperiode geboren werden, die vor Beginn der Volkszählungen geboren wurden und bis zur n-ten Zensusperiode überlebten.

Populationswachstum 7

$$B_n = h_n + b_1\lambda_1 B_{n-1} + \cdots + b_n\lambda_n B_0$$

Erneuerungsgleichung (Renewal Equation)

$b_k = 0$ für $k > M$ (z.B. $M = 11$)

$\Longrightarrow h_n = 0$ für $n > M$.

Ansatz: $B_n = r^n$

$\Longrightarrow$

$r^n = b_1\lambda_1 r^{n-1} + \cdots + b_M\lambda_M r^{n-M}$ für $n > M$.

$\Longrightarrow$

$$r^M - b_1\lambda_1 r^{M-1} - \cdots - b_M\lambda_M = 0.$$

Populationswachstum 8

$\boldsymbol{r_1, \ldots, r_M}$ Wurzeln $\Longrightarrow$

$$\boldsymbol{B_n = \alpha_1 r_1^n + \cdots + \alpha_M r_M^n.}$$

Bestimmung der α_j: Einsetzen in die Gleichungen für $n = 1, \ldots, M$.