
Praktikum Mathematische Modellierung

für die Studiengänge Mathematik, Wirtschaftsmathematik, Informatik und Physik im Wintersemester 2011/2012

Aufgabenblatt 3

Nutzpflanzen (z.B. Getreide, Kartoffeln, ...) stehen im Wettbewerb mit Wildpflanzen/Wildkräutern (ugs. Unkraut) um Wasser, Nährstoffe und Licht. Ein dichter Unkrautbewuchs kann die Ernte sehr erschweren und deutlich vermindern. Der Einsatz von Herbiziden auf landwirtschaftlichen Nutzflächen hat deshalb zum Ziel, unerwünschte Wildpflanzen oder Teile davon zu vernichten, ihr Wachstum deutlich zu hemmen oder dem Wachstum solcher Pflanzen vorzubeugen. Dabei sollte stets die kleinste Menge eines Herbizids auf ein Feld gebracht werden, mit der einerseits der gewünschte Effekt erzielt werden kann, andererseits der Nutzpflanze keine Schäden zugefügt werden. Wird ein Herbizid in zu hoher Dosierung verwendet, dann kann dies durch Nutzpflanzen auch in größeren Mengen resorbiert werden und so in die Nahrungskette des Menschen gelangen, wo es dann ebenfalls zu unerwünschten Folgen kommen kann.

Um eine exakte Dosierung für eine Gruppe von neu entwickelten Herbiziden angeben zu können, mit der ein Großteil von Wildpflanzen vernichtet werden kann, aber die Nutzpflanze nicht geschädigt wird und nur vernachlässigbar kleine Mengen selbst aufnimmt, muss ein Pflanzenschutzmittelproduzent verschiedene Tests durchführen. Viele dieser Testverfahren sind sehr kostenintensiv, weshalb Alternativen entwickelt werden sollen. Eine Alternative für eine erste grobe Bewertung der Wirksamkeit eines Herbizids könnte zum Beispiel ein sehr einfacher Laborversuch sein, bei denen unter geeigneten Laborbedingungen Nutzpflanzen und Wildkräuter gezüchtet und verschiedenen hohen Konzentrationen eines Herbizids ausgesetzt werden. Die gleichmäßig auf der Versuchsfläche verteilte Konzentration (gemessen in mg pro Quadratmeter) wird dabei durch die Verdünnungsreihe $c_k := k_0 \cdot 2^{-k}$ für $k = 0, 1, \dots, n$ beschrieben, wobei $k_0 > 0$ allgemein eine mit Sicherheit für Wildpflanzen tödliche (herbizide) Anfangskonzentration ist und $n \in \mathbb{N}$. In ersten Versuchen wurden dabei $k_0 = 20480$, $k_0 = 10240$ sowie $n = 18$ oder $n = 19$ verwendet.

Die Wirkung der Konzentration c_k wird durch Zählung der Wildpflanzen vor und nach der Behandlung bestimmt und durch Quotienten $f_0, f_1, \dots, f_n$ ausgedrückt. Diese Quotienten geben Auskunft über das Verhältnis zwischen Anzahl der Wildpflanzen vor und Anzahl der (überlebenden) Wildpflanzen nach der Behandlung mit dem Herbizid.

Untersuchungen vieler Versuchsreihen legen den Schluss nahe, dass die herbizide Wirkung f_k eine Funktion der Konzentration c_k ist. Deshalb können aus den Messdaten Aussagen über zwei spezielle Konzentrationen gewonnen werden: Zum einen ist dies die sogenannte *minimale herbizide Konzentration* (kurz: MHK). Grob gesprochen ist die MHK die eingangs erwähnte kleinste Konzentration, die herbizide Wirkung zeigt, die Wildpflanzen also in größerer Zahl abtötet. Die zweite Konzentration ist die *minimale inhibitorische Konzentration* (kurz: MIK). Dies ist die kleinste Konzentration, ab der das Wachstum und die Vermehrung der Wildpflanzen behindert wird. MHK und MIK unterscheiden sich allgemein nur wenig voneinander, wobei $MIK < MHK$ gilt. Diese geringfügige Änderung hat zur Folge, dass die Anzahl der überlebenden Bakterien zwischen MIK und MHK sprunghaft abfällt. In der Anlage finden Sie einige Tabellen mit Messergebnissen.

Modellieren Sie die Zusammenhänge mit unterschiedlichen mathematischen Ansätzen, formulieren Sie die sich daraus ergebenden mathematischen Aufgaben, Probleme und Algorithmen. Ein Algorithmus, der

mathematisch beweisbar immer funktioniert, ist nur mit größerem Aufwand zu entwickeln und implementieren. Entwickeln Sie einen **einfachen, robusten** Algorithmus zur Bestimmung von MHK und MIK, der vielleicht nicht immer funktioniert, aber „in der Regel“ brauchbare Ergebnisse liefert. Stellen Sie sicher, dass nur brauchbare / gesicherte Aussagen vom Algorithmus ausgegeben werden. Programmieren Sie Ihren Algorithmus vorzugsweise mit Matlab und testen Sie diesen an den bereitgestellten Messdaten.

Anlagen: Hinweise zur Bestimmung von MHK und MIK
Tabellen / Messwerte

Anlage 1

Hinweise zur Bestimmung von MHK und MIK aus Messwerten

Die MIK eines Herbizids ist die geringste Konzentration, die das Wachstum der Wildpflanzen auf der behandelten Fläche behindert. Die MHK ist die minimale Konzentration des Herbizids, die die Wildpflanzenkulturen zuverlässig tötet. Ein Wirkstoff wird als herbizid bezeichnet, wenn die MHK nicht mehr als das vierfache von MIK ist.

Diese Regeln könnten zwar zum Teil aus den Messdaten mehr oder weniger leicht abgelesen werden, hilfreicher ist es aber, die Daten graphisch auszuwerten. Dazu werden allgemein nicht die Datenabszissen $c_0 > c_1 > \dots > c_n$ betrachtet, sondern zum Beispiel werden dazu unter Ausnutzung der Beziehung

$$k = -\frac{\log(c_k) - \log(k_0)}{\log(2)}$$

für $k = 0, 1, \dots, n$ die Wertepaare

$$(0, f_0) , (1, f_1) , \dots , (n, f_n) \quad (1)$$

herangezogen, die sich zur visuellen Auswertung besser eignen.

Dazu sei folgendes Beispiel betrachtet, an dem obige Regeln demonstriert werden sollen: Gegeben seien folgende Messwerte für $n = 19$ zur Ausgangskonzentration $k_0 = 20480 = 5 \cdot 2^{12}$:

k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
c_k	20480	10240	5120	2560	1280	640	320	160	80	40	20	10
f_k	3.6273	3.381	3.0339	2.8414	2.7507	2.9006	2.941	2.9986	3.2127	3.8381	8.2629	37.7363
k	12	13	14	15	16	17	18	19				
c_k	5	2.5	1.25	0.625	0.3125	0.1563	0.07813	0.03906				
f_k	84.0146	94.7914	98.7679	97.0424	98.0432	95.5602	99.0313	100				

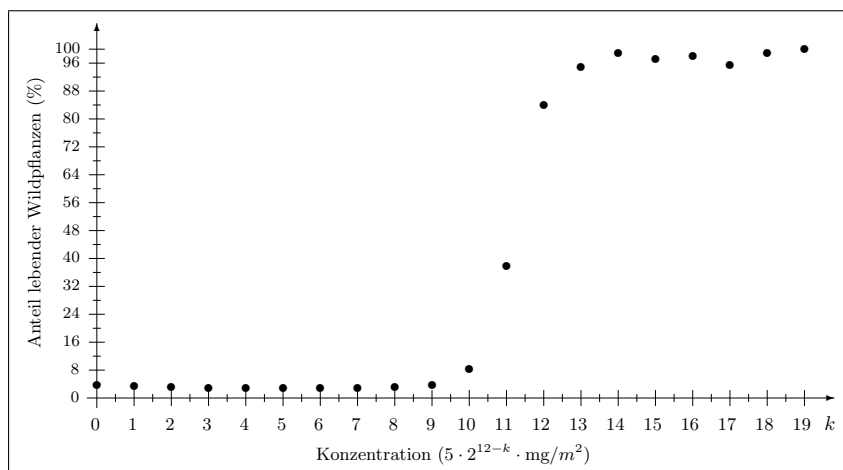


Abbildung 1

In Abbildung 1 sind die Beispieldaten nach Darstellung (1) zu sehen. Wegen $c_0 > c_1 > \dots > c_n$ müssen wir uns in der Grafik von „rechts nach links“ durcharbeiten und stellen fest, dass für $k \leq 13$ das Wachstum der Wildpflanzen nachhaltig behindert wird, d.h. hier ist $\text{MIK} := c_{13} = 5 \cdot 2^{-1} = 2.5$. Für $k \leq 10$ stellen wir fest, dass der größte Anteil der Wildpflanzen abgetötet wird, d.h. wir setzen $\text{MHK} := c_{10} = 5 \cdot 2^2 = 20$.

Diese Methode zur MHK- und MIK-Bestimmung hängt natürlich stark „vom Auge des Betrachters“ ab, d.h. bei den Beispieldaten hätten wir genauso gut auch $\text{MIK} := c_{12} = 5$ und/oder auch $\text{MHK} := c_9 = 30$ wählen können, was im Sinne obiger Definition offenbar immer noch ausreicht. Dies bedeutet, dass die auf diese Art und Weise erhaltenen Aussagen eher qualitativ sind. Daher wäre es auch nicht verkehrt, für MIK

und MHK ein Intervall anzugeben, d.h. für obige Daten zum Beispiel $MIK \in [c_{13}, c_{12}]$ und $MHK \in [c_{10}, c_9]$ oder auch $MIK \in [c_{13}, c_{11})$ und $MHK \in (c_{11}, c_9]$.

Mit Hilfe eines Verfahrens, das mathematisch beweisbar immer funktioniert, aber nur mit größerem Aufwand zu entwickeln ist, kann aus den Daten ein exakter Wert bestimmt werden, der innerhalb der genannten Intervalle liegt. Für die Beispieldaten erhält man so $MIK = 4.2009$ und $MHK = 16.36$. Gemessen an diesen Werten, kann der Wirkstoff sogar als herbizid eingestuft werden, was bezüglich der obigen qualitativen Aussagen oft nicht zuverlässig möglich ist.

Zur Lösung der Aufgabenstellung können Sie deshalb entscheiden, ob Sie aus den Daten

- je einen MHK und MIK-Wert wie oben qualitativ bestimmen oder
- ein wie oben angedeutet ein Intervall bestimmen, in dem MIK bzw. MHK tatsächlich liegen oder
- einen einfachen, zuverlässigen, aber nicht notwendig immer funktionierenden Algorithmus herleiten, der einen möglichst exakten MHK- und MIK-Wert aus den Daten ermittelt.

Achten Sie in jedem Fall darauf, dass die berechneten Werte nur dann als Ergebnis ausgegeben werden, wenn dies für die Messdaten auch sinnvoll ist. Sonst soll Ihr Programm einen entsprechenden Hinweis geben. Ist die Berechnung sinnvoll, so soll das Programm natürlich auch entscheiden, ob der Wirkstoff herbizid ist. In den Abbildung 2 und 3 sind zwei Messreihen dargestellt, für die die Berechnung nicht sinnvoll ist.

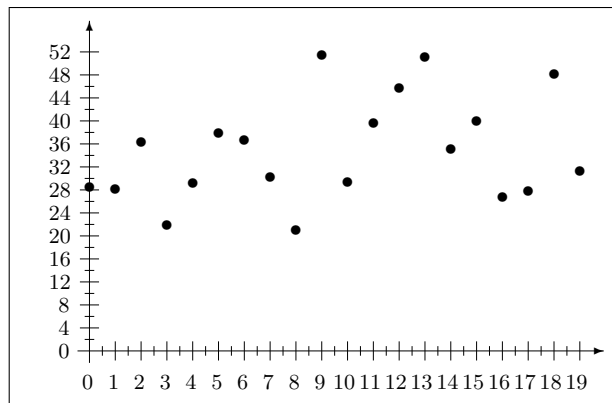


Abbildung 2

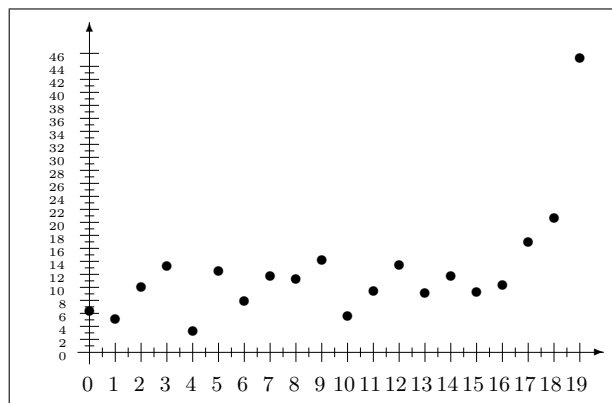


Abbildung 3

Anlage 2

Messdaten

Es stehen insgesamt 25 verschiedene Messdatenreihen (siehe Tabelle 2) zur Verfügung, die Sie zu diesem Aufgabenblatt in elektronischer Form als `csv`-Dateien zur Verfügung gestellt bekommen. Dabei wurde jeder Datensatz in einer einzelnen Datei mit dem Namen `testdatenX.csv` gespeichert, wobei das `X` im Dateinamen durch die Nummer des Datensatzes zu ersetzen ist. Die Daten können in Matlab mit der Funktion `csvread` eingelesen werden.

In jeder `csv`-Datei wurde eine $2 \times (n + 1)$ -Matrix gespeichert; in der zweiten Zeile befinden sich die Werte $f_0, f_1, \dots, f_n$, in der ersten Zeile die zugehörigen Indizes $0, 1, 2, \dots, n$. Von links gesehen steht also in jeder Datei (Matrix) links das Messergebnis zur Konzentration k_0 und nach rechts fortlaufend wird die Konzentration schrittweise halbiert. Die zugehörige Ausgangskonzentration k_0 ist den folgenden Tabellen 1 und 2 zu entnehmen. In Tabelle 1 finden Sie außerdem die Werte MHK und MIK, die mit Hilfe eines mathematisch beweisbaren Verfahrens berechnet worden sind. Vergleichen Sie kritisch mit Ihren Ergebnissen!

lfd. Nr.	Dateiname	n	k_0	MHK	MIK	Berechnung sinnvoll
1	testdaten1.csv	19	10240	12.28	0.139	ja
2	testdaten2.csv	19	20480	27.7122	3.7501	ja
3	testdaten3.csv	19	10240	56.1549	19.2214	ja
4	testdaten4.csv	19	10240	227.251	9.7553	nein
5	testdaten5.csv	19	20480	40.542	20	ja
6	testdaten6.csv	19	10240	71.019	0.625	nein
7	testdaten7.csv	19	10240	5.7423	1.6304	ja
8	testdaten8.csv	19	10240	0.1628	0.02755	nein
9	testdaten9.csv	19	10240	12.3201	2.0209	ja
10	testdaten10.csv	19	10240	8.3769	0.1179	ja
11	testdaten11.csv	19	20480	10.4987	3.7227	ja
12	testdaten12.csv	19	10240	25.6175	2.0409	ja
13	testdaten13.csv	19	10240	640	40.2019	nein
14	testdaten14.csv	19	10240	10.4248	0.7561	ja
15	testdaten15.csv	19	10240	20.4735	2.9318	ja
16	testdaten16.csv	19	10240	1.3113	0.625	ja
17	testdaten17.csv	19	20480	10.4987	3.7224	ja
18	testdaten18.csv	18	20480	89.3893	5.6474	ja
19	testdaten19.csv	18	10240	0.7991	0.03906	nein
20	testdaten20.csv	18	10240	2.5	0.2058	nein
21	testdaten21.csv	18	20480	7.6889	0.2352	ja
22	testdaten22.csv	18	20480	12.8408	1.3881	ja
23	testdaten23.csv	19	20480	1.7734	0.5431	nein
24	testdaten24.csv	19	10240	1.3819	0.06569	ja
25	testdaten25.csv	19	10240	30.5242	1.1393	ja

Tabelle 1