4.7.2. Beispiel (zum Nullstellensatz)

$$I = \langle y^2(x+2), (x-1)^2(x+1)^2 \rangle \subseteq \mathbb{Q}[x,y].$$

Man hat $V(I) = \{-1, 1\} \times \{0\}$

Sei $f = y - x^2 + 1$.

f ist 0 auf $V(I)$, aber $f \notin V(I)$.

$$I(x,0) = \langle (x-1)^2(x+1)^2 \rangle \subseteq \mathbb{Q}[x].$$

Wenn f in I wäre, dann wäre $f(x,0) \in I(x,0)$.

Aber: $f(x,0) = -x^2+1 = (1-x)(1+x)$, hat -1 und 1 als einfache Nullstellen

Polynome aus $I(X,0)$ haben aber 1 und -1 als mindestens zweifache Nullstellen.
Um f gleich 0 auf $V(I)$ als ebenfalls zu testen, verifizieren wir, dass $f \in \sqrt{I}$ gilt.

Nach 4.7.1 reicht es aus

$$f \in \langle y^2(x+2), (x-1)^2(x+1)^2, 1-z(y-x^2+1) \rangle$$

zu testen.

4.7.3. Aufgabe. Wodurch kann das Radikal

$$\sqrt{\langle x^2, xy, y^2 \rangle} \subseteq \mathbb{Q}[x,y]$$

erzeugt werden?

$$\sqrt{\langle x^2, xy, y^2\rangle} = \langle x, y\rangle$$

Argumentation im Fall $\sqrt{\langle x^2, xy, y^2\rangle} \subseteq \mathbb{C}[x,y]$ über den Nullstellensatz:

$$\sqrt{\langle x^2, xy, y^2\rangle} = I\big(\underbrace{V(x^2, xy, y^2)}_{}\big)$$

$$\underbrace{V(x^2, xy, y^2)}_{} = \{(a,b) \in \mathbb{C}^2 : a^2 = 0,\ ab = 0,\ b^2 = 0\}$$

$$= \{(0,0)\}.$$

$$\sqrt{\langle x^2, xy, y^2\rangle} = I(\{(0,0)\}).$$

$f \in I(\{(0,0)\}) \iff f(0,0) = 0 \iff$ jeder Term von f ist durch x oder y teilbar $\iff f \in \langle x, y\rangle$.

Argumentation ohne Nullstellensatz

$$\sqrt{\langle x^2, xy, y^2\rangle} = \langle x, y\rangle$$

"$\supseteq$": $x \in \sqrt{\langle x^2, xy, y^2\rangle}$ wegen $x^2 \in \langle x^2, xy, y^2\rangle$

$y \in \sqrt{\langle x^2, xy, y^2\rangle}$ wegen $y^2 \in \langle x^2, xy, y^2\rangle$

$\Downarrow$

$\langle x, y\rangle \subseteq \sqrt{\langle x^2, xy, y^2\rangle}$.

"$\subseteq$": Ist $f \notin \langle x, y\rangle$, dann hat f einen konstanten Term, der ungleich Null ist. $\Rightarrow f(0,0) \neq 0$, aber jedes Polynom aus $\sqrt{\langle x^2, xy, y^2\rangle}$ ist gleich 0 auf $(0,0)$.

4.7.4) Bemerkung:

Erzeugung des Radikals eines Ideals I in Sagemath: I.radical().

→ Ringe, Ideale

→ der Hilbertsche Basissatz

→ Groebnerbasen und der Buchberger Algorithmus

→ Projektionen von Varietäten, Elimination (auch mit Resultanten!).

→ der Hilbertsche Nullstellensatz

Algebraische Strukturen (Ringe, Ideale)
Algebraische Mengen (Varietäten)
Algorithmen (Gröbnerbasen)
Anwendungen.

Anhang B: Chemische Reaktionsnetzwerke.

B.1 Autonome dynamische Systeme und ihre Gleichgewichte.

Autonome Systeme der Differentialgleichungen sind Systeme der Form

$$x'(t) = F(x(t))$$

mit der rechten Seite $F: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ (stetige Funktion) mit einer unbekannten vektorwertigen Funktion $x: \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$.

Oder mit anderen Worten:

die Komponenten $x_1(t), \dots, x_n(t)$ von $x(t)$ sind n unbekannten Funktionen.

Autonom heißt: Die Dynamik $x'(t)$ des

Systems ist eindeutig durch den aktuellen Zustand $x(t)$ bestimmt. Bei nicht Autonomen hat man die Form $x'(t) = G(x(t), t)$

Die Konstanten von $x'(t) = F(x(t))$ nennt man Gleichgewichte.

Das heißt: $x(t) = c$ für alle t.

Dann hat man $F(c) = 0$.

Die Gleichgewichte sind die Lösungen des Gleichungssystems $F(x) = 0$ für ein unbekanntes $x \in \mathbb{R}^n$.

B.1.1. Beispiel. Räuber-Beute-System.

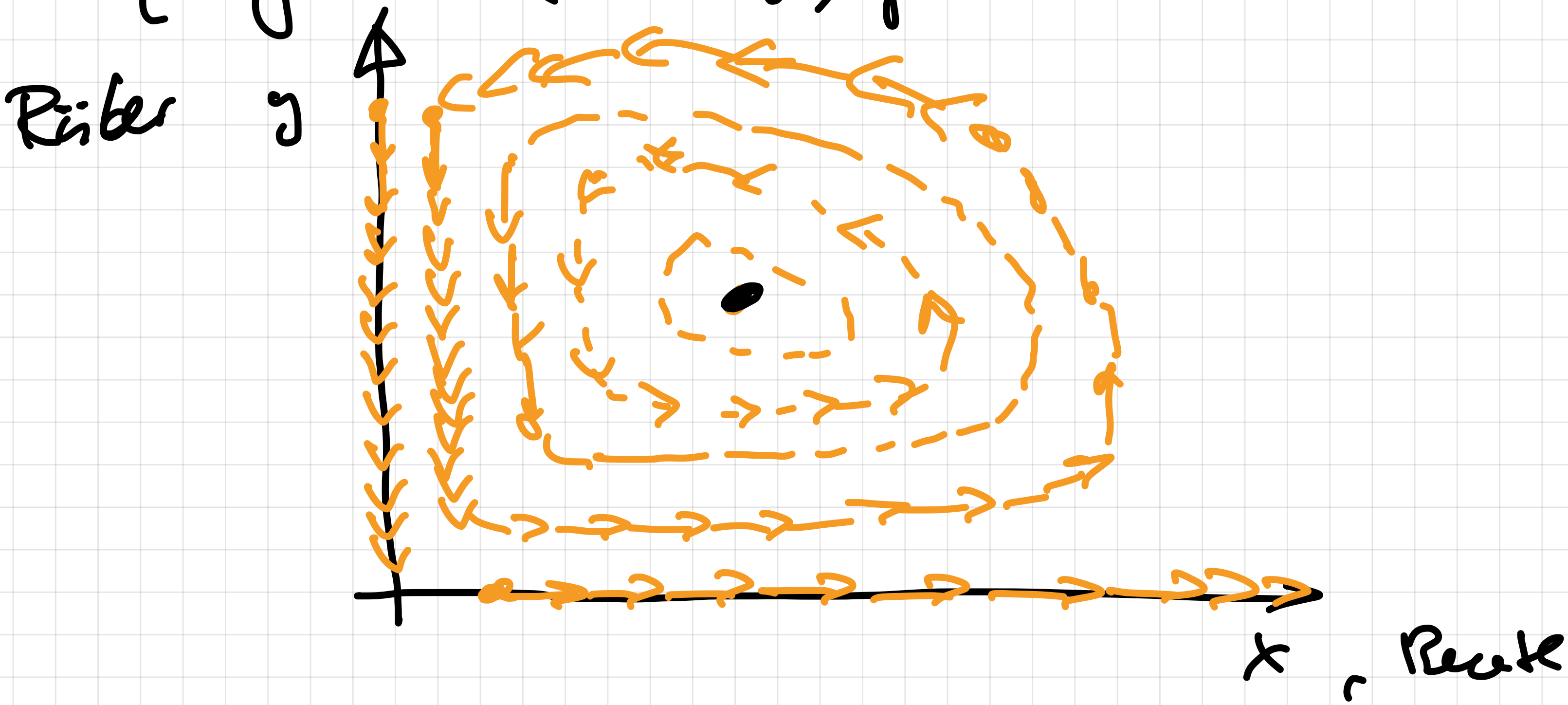
$$\boxed{x' = cx}$$

x Bestand der Beute

y Bestand der Räuber

$\boxed{\text{const}\, e^{cx}}$

$$\begin{cases} x' = (\alpha - \beta y)x \\ y' = (\delta x - \gamma)y \end{cases} \qquad \alpha, \beta, \delta, \gamma > 0.$$



Das interessante Gleichgewicht hat man aus

$$\begin{cases} \alpha - \beta y = 0 \\ \delta x - \gamma = 0 \end{cases} \iff \begin{cases} y = \frac{\alpha}{\beta} \\ x = \frac{\gamma}{\delta} \end{cases}$$

Uninteressantes Gleichgewicht: $x=0$, $y=0$.

Eines der wichtigen Punkte bei der Analyse von autonomen dynamischen Systemen: Gleichgewichte analysieren (wo sie sind, wie viele es sind usw.).

B2. Chemische Reaktionsnetzwerke.

Chemische Reaktionsnetzwerke (CRN) sind spezielle dynamische Systeme, die man in Chemie (insb. in der Biochemie) zur Modellierung von (bio)chemischen Prozessen benutzt.

Eine Reaktion in einem CRN mit $n \in \mathbb{N}$ Spezies kodieren wir als ein Paar (α, β) mit $\alpha, \beta \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^n$.

Die Vektoren α und β kodieren, wie viele Einheit von jeder der n Spezies man vor bzw. nach der Reaktion (α, β) hat.

Ein CRN mit n Spezies ist ein gewichteter Digraph (C, R, k) dessen Knotenmenge eine endliche Teilmenge von $\mathbb{Z}_{\geq 0}^n$ ist. Die Elemente von C nennt man Komplexe.

Die Bögen $(\alpha, \beta) \in R$ nennt man Reaktionen. Das Gewicht $k(\alpha, \beta) > 0$

nennt man die Ratenkonstante der Reaktion $(\alpha,\beta) \in R$.

Das dynamische System eines CRN (C, R, k) ist das System

$$x' = \sum_{(\alpha,\beta)\in R} k(\alpha,\beta)\, x^{\alpha} (\beta-\alpha)$$

$x(t)$ ist der unbekannte Bestand der Species $1,\dots,n$ zum Zeitpunkt t.

Das Gleichungssystem für die Gleichgewichte dieses dynamischen Systems ist polynomielle:

$$\sum_{(\alpha,\beta)\in R} k(\alpha,\beta)\, x^{\alpha}(\beta-\alpha) = 0.$$

In Chemie ist man an den Lösungen aus $\mathbb{R}^n_{\geq 0}$ (oder aus $\mathbb{R}^n_{>0}$) dieses Systems interessiert.

B.2.1. Beispiel. (Rezeptor-Dimer-Ligand-Modell). Vorhanden sind 2 gleiche Rezeptoren (2 Kopien von A) und ein Ligand (C).
Die beiden Rezeptoren können sich zu einem sogenannte Dimer verbinden (B).
Der Ligand C kann sich an ein Rezeptor A binden; es entsteht eine Spezies, die wir als D bezeichnen. Des Weiteren können sich A und D sowie B und C zu einer Spezies E verbinden.

All diese Reaktionen sind umkehrbar.

$$\begin{tikzcd}
2A + C \arrow[r, shift left] \arrow[d, shift right] & A + D \arrow[l, shift left] \arrow[d, shift right] \\
B + C \arrow[u, shift right] \arrow[r, shift left] & E \arrow[l, shift left] \arrow[u, shift right]
\end{tikzcd}$$

(1) $2A + C$, (2) $A + D$, (3) E, (4) $B + C$

$A, B, C, D, E = e_1, e_2, e_3, e_4, e_5$ (Vektoren aus $\mathbb{R}^5$).

Man hat hier vier Komplexe:

$$\alpha(1) = 2A + C = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{Z}^5_{\geq 0}$$

$\alpha(2) = A + D$

$\alpha(3) = E$

$\alpha(4) = B + C$

Reaktionen:

$(\alpha(1), \alpha(2))$ $(\alpha(2), \alpha(1))$

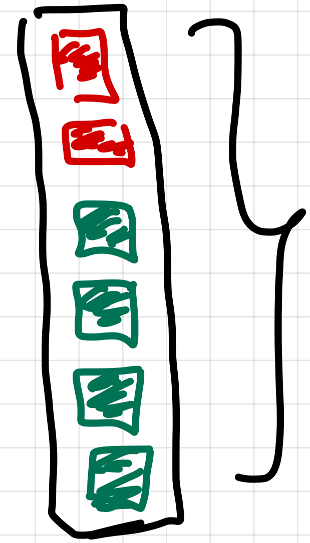
$(\alpha(2), \alpha(3))$ $(\alpha(3), \alpha(2))$

$(\alpha(3), \alpha(4))$ $(\alpha(4), \alpha(1))$

$(\alpha(4), \alpha(1))$ $(\alpha(1), \alpha(4))$

Wir bezeichnen $k(\alpha(i), \alpha(j))$ als k_{ij}.

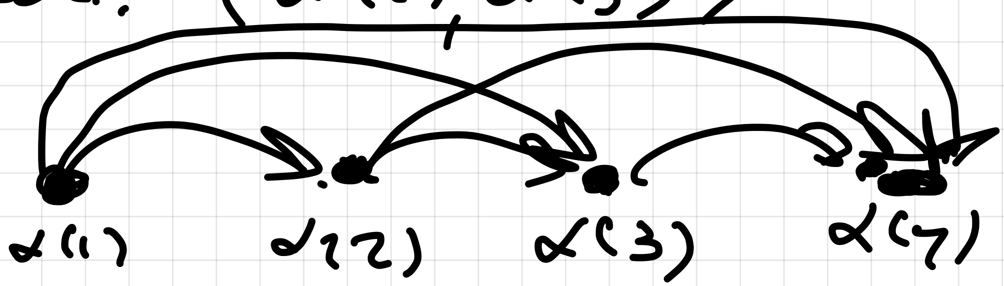
4 Komplexe
8 Reaktionen
5 Spezies.



B.2.2. Beispiel (Cell-Death model)

$\alpha(i) = (m-i, i)$ mit
$i = 1, \dots, m$

Reaktionen: $(\alpha(i), \alpha(j))$ mit $1 \le i < j \le m$



Das autonome System: $$x' = \sum_{1 \le i < j \le m} k_{ij}\, x^{\alpha(i)} (\alpha(j) - \alpha(i))$$

oder komponentenweise.

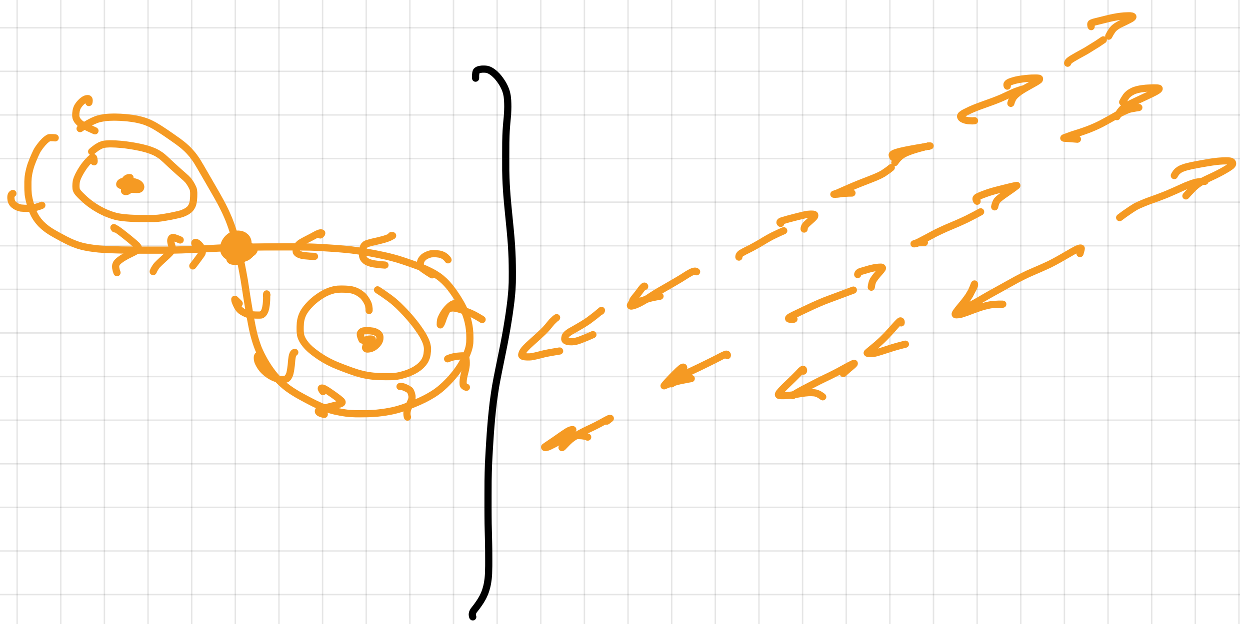
$$x_1' = \sum_{1 \le i < j \le m} k_{ij}\, x_1^{m-i} x_2^{i} (i-j)$$

$$x_2' = \sum_{1 \le i < j \le m} k_{ij}\, x_1^{m-i} x_2^{i} (j-i)$$

Man sieht $x_1' = -x_2'$. $\iff (x_1 + x_2)' = 0$.

$\iff$ $x_1 + x_2$ bleibt konstant.

B.3. Erhaltungsgleichungen für ein CRN.



Für ein gegebenes CRN (C, R, k) heißt

$$L = \mathrm{lin}_{\mathbb{R}} \{\beta - \alpha : (\alpha, \beta) \in R\}$$ der

stöchiometrische Unterraum von (C, R, k).

B.3.1 Proposition Sei (C, R, k) ein CRN mit dem stöchiometrischen Raum L.

Dann gilt für jede Lösung $x : I \to \mathbb{R}$ des Anfangswertproblems

$$x' = \sum_{(\alpha,\beta) \in R} k(\alpha,\beta)\, x^{\alpha} (\beta - \alpha)$$

$$x(0) = x_0$$

mit $x_0 \in \mathbb{R}^n$ (I Intervall in $\mathbb{R}$)

$$x(t) - x_0 \in L \quad \text{für alle } t \in I.$$

Beweis: Nach dem Fundamentalsatz der Differential- und Integralrechnung gilt:

$$x(t) - x_0 = x(t) - x(0) = \int_0^t x'(s)\,ds$$

$$= \int_0^t \left(\sum_{(\alpha,\beta)\in R} k(\alpha,\beta)\, x(s)^\alpha (\beta - \alpha) \right) ds$$

$$= \sum_{(\alpha,\beta)\in R} \underbrace{k(\alpha,\beta) \left(\int_0^t x(s)^\alpha\, ds \right)}_{\in \mathbb{R}} (\beta - \alpha)$$

$$\in \operatorname{lin}_{\mathbb{R}} \{\beta - \alpha : (\alpha,\beta) \in R\} = L. \qquad \square$$

Man kann den stöchiometrischen Raum L als die Lösungsmenge eines homogenen linearen Gleichungssystems $Ex=0$ darstellen.

Man nennt die Gleichungen des Systems $E(x-x_0)=0$ die Erhaltungsgleichungen

$$\boxed{x - x_0 \in L \iff E(x-x_0)=0.}$$

Sei $m = \dim(L)$. Für den Vektor $x \in L$ hat man lineare Abhängigkeiten.

Man kann die Variablen $x_i \quad i=1,\dots,n$ in zwei Gruppen zerlegen:

$x_B = (x_i)_{i\in B}$ und $x_N=(x_i)_{i\in N}$ so dass

$x \in L \iff x_B = M x_N$

für alle x erfüllt ist (für ein gewisses

$M \in \mathbb{R}^{B \times N}$ (vgl. Lineare Algebra - Gaußverfahren

oder lineare Optimierung).

Dann gilt:

$$x_B' = \sum_{(\alpha,\beta)\in R} k(\alpha,\beta)\, x^\alpha (\beta-\alpha)_B$$

$$= \sum_{(\alpha,\beta)\in R} k(\alpha,\beta)\, x^\alpha M \cdot (\beta-\alpha)_N$$

$$= M \sum_{(\alpha,\beta)\in R} k(\alpha,\beta)\, x^\alpha (\beta-\alpha)_N$$

$$= M x_N'$$

Die Dynamik von x_B' ist eindeutig durch die Dynamik von x_N' bestimmt.

Insbesondere: $x_N' = 0 \implies x_B' = 0$.

Das heißt, bei der Analyse der Gleichgewichte können die Gleichung $x_i' = 0$ $(i \in B)$ ~~weg~~gelassen werden.

Man legt ~~aber~~ aber als eine Zusatzbedingung $x - x_0 \in L$ hinzu (in der Form eines linearen Gleichungssystems).

Das ergibt:

$$\boxed{\begin{gathered}\sum_{(\alpha,\beta)\in R} k(\alpha,\beta)\, x^{\alpha} (\beta-\alpha)_N = 0 \\ x_B - M x_N = (x_0)_B - M (x_0)_N\end{gathered}}$$

Das System zur Analyse der Gleichgewichte.

Die Unbekannten sind $x_1, \dots, x_n$

Die Parameter:

$k(\alpha,\beta) \quad (\alpha,\beta)\in R$ (Reaktionsraten).

$(x_0)_1, \dots, (x_0)_n$ (Startwerte)

Man kann konkrete Parameter fixieren und dann in $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ arbeiten.

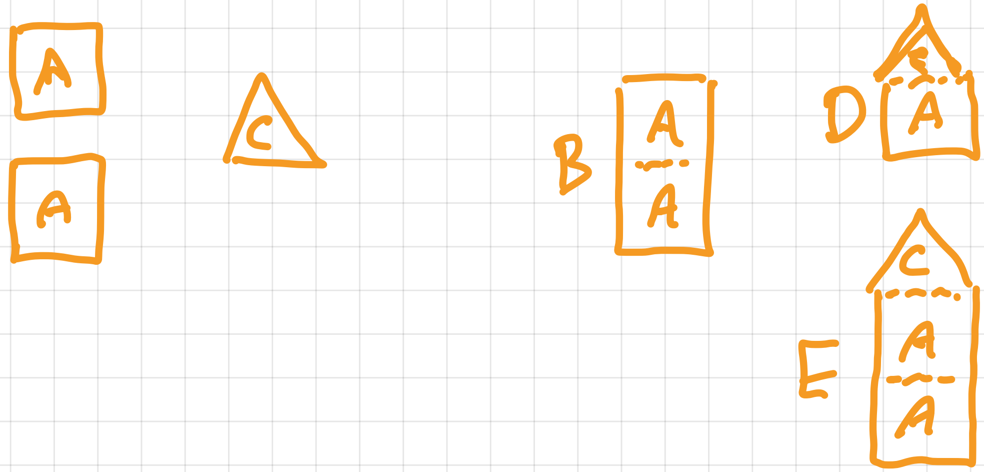
Oder man kann auch in

$$\mathbb{Q}\left((k(\alpha,\beta))_{(\alpha,\beta)\in R}, (x_0)_1, \dots, (x_0)_n \right)[x_1, \dots, x_n]$$

arbeiten.

B3.2. Beispiel (Rezeptor-Dimer-Ligand, Fortsetzung).

A	1	$x_1(0)$	x_1
B	2	$x_2(0)$	x_2
C	3	$x_3(0)$	x_3
D	4	$x_4(0)$	x_4
E	5	$x_5(0)$	x_5



Der Bestand von A in gebundener und ungebundener Form bleibt konstant:

$$x_1 + 2x_2 + 0\cdot x_3 + x_4 + 2x_4$$

$$= \underbrace{x_1(0) + 2x_2(0) + 0\cdot x_3(0) + x_4(0) + 2x_4}_{=:s}$$

Genauso für C:

$$0\cdot x_1 + 0\cdot x_2 + 1\cdot x_3 + 1\cdot x_4 + 1\cdot x_5 =$$

$$\underbrace{0\cdot x_1(0) + 0\cdot x_2(0) + 1\cdot x_3(0) + 1\cdot x_4(0) + 1\cdot x_5(0)}_{=:t}$$

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_4 + 2x_5 = s \\ x_3 + x_4 + x_5 = t \end{cases}$$

$$x_1 = s - 2x_2 - x_4 - 2x_5$$

$$x_3 = t - x_4 - x_5.$$