

Simulation und Analyse von Diffusionsprozessen auf der Basis eines einfachen Konzeptmodells

Schriftliche Hausarbeit
im Rahmen der Ersten Staatsprüfung
für das Lehramt für Gymnasien und Gesamtschulen
dem
Staatlichen Prüfungsamt für Erste Staatsprüfungen
für Lehrämter an Schulen - Köln -
Außenstelle Aachen

vorgelegt von
Evamarie Storch
Aachen, den 24. Juli 2006

Gutachter: Professor Dr. A. Krieg

Lehrstuhl: Lehrstuhl A für Mathematik an der RWTH-Aachen

Anlage: CD-Rom

Inhaltsverzeichnis

0	Einleitung	2
1	Grundlagen	4
1.1	Grundlagen der Modellierung	4
1.2	Diffusion	5
2	Das Konzeptmodell	9
3	Simulation	12
3.1	Beschreibung der Simulationstools	12
3.2	Programmierung der Applets	16
3.3	Darstellung der Simulationsergebnisse	18
4	Analyse	32
4.1	Lineare Annäherung	32
4.2	Markov-Prozess	39
4.3	Differenzgleichungen	45
5	Umsetzung in der Schule	52
6	Fazit	56

Kapitel 0

Einleitung

Chemische, physikalische und biologische Prozesse, technische Abläufe, wirtschaftliche Strukturen sowie viele andere Vorgänge und Phänomene lassen sich mit dem Prinzip der Modellierung untersuchen und so besser verstehen. Hierbei geht man in der Weise vor, dass Prozesse, Verfahren, Abläufe etc. auf die wichtigsten Eigenschaften (ihre Leitparameter) reduziert und durch ein Modell dargestellt und veranschaulicht werden, d.h. diese Vorgänge werden modelliert.

Ein grundlegender biochemischer Prozess ist die Diffusion. Das ist ganz allgemein der Übergang von einer ungleichmäßigen Verteilung von Teilchen zu einer gleichmäßigen Verteilung in einem System, oder anders ausgedrückt der Ausgleich von Konzentrationsunterschieden, der durch die Bewegung von kleinsten Teilchen entsteht.

Ziel dieser Arbeit ist es, den Diffusionsprozess anhand eines entwickelten Modells darzustellen, zu simulieren und zu analysieren. Um den Diffusionsprozess untersuchen und modellieren zu können, wurde ein Konzeptmodell entwickelt, das den Vorgang auf seine elementaren Eigenschaften reduziert.

Zu diesem Zwecke wurden zwei Tools programmiert, mit deren Hilfe Diffusion simuliert wird. Das erste Tool dient der Simulation des zeitlichen Ablaufs, das zweite Tool bietet die Möglichkeit einer grafischen Veranschaulichung dieses Ablaufs. Zusammen erlauben die zwei Tools, das Langzeitverhalten sowie die einzelnen Schritte während des Diffusionsprozesses nachvollziehbar zu veranschaulichen. Des Weiteren lässt sich mit den zwei Tools eine Analyse der Simulationsergebnisse durchführen. Diffusionsprozesse können aber auch mit Hilfe eines mathematisch stochastischen Prozesses untersucht werden, was später in dieser Arbeit deutlich werden wird. Somit wird eine alternative Herangehensweise aufgezeigt.

Im ersten Teil der Arbeit wird das entwickelte Konzeptmodell zur Diffusion vorgestellt und es wird erörtert, inwiefern die Reduktion der Realität auf die elementaren Eigenschaften im Modell Inkongruenzen hervorruft, d.h. es wird diskutiert, inwieweit das Modell der Wirklichkeit entspricht.

In Kapitel 3 werden die Simulationstools vorgestellt und der Umgang mit diesen erläutert. Es wurde versucht, die Tools einfach und anwenderfreundlich zu gestalten, so dass sich bereits durch unangeleitetes Ausprobieren erste Beobachtungen und Erkenntnisse gewinnen lassen.

Im Anschluss an die Instruktion über den Umgang mit den Tools folgt in Kapitel 4 die detaillierte Analyse der Simulationsergebnisse, die den Hauptteil der Arbeit darstellt. Hier wird auch die mathematische Herangehensweise in Form von Markov-Prozessen behandelt und in einem weiteren Abschnitt mit den Simulationsergebnissen verglichen. Dabei wird sich herausstellen, dass beide Methoden zu sehr ähnlichen Resultaten führen.

Auch in der schulischen Praxis ist das Lösen von Problemen durch mathematische Modellierung von großer Bedeutung. Kapitel 5 zeigt darum die didaktische Relevanz von Modellierungsaufgaben und deren Realisation in Mathematikbüchern für den Schulgebrauch. Anhand solcher und ähnlicher Aufgaben entsteht eine Verbindung zur Lebenswirklichkeit der Schüler, d.h. man kann die praktische Anwendung und die Relevanz der Ergebnisse von mathematischen Simulationsprozessen auf eindrucksvolle Weise zeigen.

Kapitel 1

Grundlagen

1.1 Grundlagen der Modellierung

Um die Art des hier entwickelten Modells besser verstehen zu können, werden zu Beginn einige Grundlagen der Modellierung erläutert. Es werden in dem folgenden Abschnitt verschiedene Arten von Modellen vorgestellt (vgl. Gotzen 2006¹). Diese dienen der theoretischen Einordnung des hier entwickelten Modells.

Je nachdem was modelliert werden und welchem Zweck das Modell dienen soll hat es unterschiedliche Eigenschaften. Zwei verschiedene Arten von Modellen wären z. B. statisch oder dynamisch beschreibende Modelle.

„Als statisch beschreibende Modelle sollen Darstellungen der Realität verstanden werden, die einen statischen Zustand verdeutlichen. . . .

Unter dynamisch beschreibenden Modellen werden Abbilder von Ausschnitten der Realität verstanden, die in der Abbildung dynamische Prozesse im realen System beinhalten.“²

Als Beispiel für ein statisch beschreibendes Modell bringt Gotzen die Bauzeichnung eines Hauses und als dynamisch beschreibendes das sich bewegende Modell eines Verbrennungsmotors.

Da es sich bei dem später in dieser Arbeit entwickelten Modell um ein dynamisch beschreibendes Modell handelt, werden noch zwei Unterteilungen der dynamisch beschreibenden Modelle erläutert. Bei dieser Art von Modellen kann nämlich entweder die Nachahmung des Verhaltens oder die Nachbildung der Systemstruktur von Bedeutung sein. Ebenso möglich sind aber auch Mischformen.

¹B. Gotzen [7] S. 5-14

²B. Gotzen [7] S. 6

Bei der Nachahmung des Verhaltens

„wird versucht, ein Modellsystem zu entwickeln, das das Verhalten des realen Systems so gut wie möglich nachahmt. Die innere Struktur des Systems ist dabei unbekannt oder irrelevant („black box“). In der Regel basiert die Entwicklung dieser Modelle auf der Auswertung vorhandener Daten.“³

Bei der Nachbildung der Systemstruktur

„wird die innere Struktur des realen Systems genauer betrachtet. Zusammenhänge und Abhängigkeiten innerhalb des Systems werden (so gut es geht) nachgebildet, reale Daten aus Beobachtungen sind nicht unbedingt notwendig („glass-box“).“⁴

Der Prozess der Einteilung in spezielle Arten von Modellen könnte noch weiter verfeinert werden. Da dies aber für das hier entwickelte Modell nicht relevant wäre, soll nur noch kurz erläutert werden, welche Eigenschaften stochastische und zeitdiskrete Modelle haben, da das hier entwickelte Modell diese Eigenschaften besitzt.

Bei einem stochastischen Modell ist die Veränderung von einem zum nächsten Schritt zufällig. Die Veränderung ist jedes mal anders und kann nicht identisch wiederholt werden.

Bei zeitdiskreten Modellen sind die Übergänge in aufeinander folgende Zustände diskret und nicht kontinuierlich, wie dies bei vielen natürlichen Prozessen der Fall ist. Zeitdiskrete Modelle lassen sich oft einfacher simulieren, ohne dass darunter die Qualität des Modells leidet, d.h. dass sich die Realitätsdarstellung verschlechtert.

Wird beabsichtigt, ein Modell für eine Problemstellung zu entwickeln, so müssen zuerst die genauen Eigenschaften des zu modellierenden Problems geklärt werden. Erst dann kann das konkrete Modell erstellt werden. Im Anschluss daran kann eine Simulationsumgebung entwickelt werden und eine Analyse folgen.

In der folgenden Arbeit soll der Prozess der Diffusion durch eine Membran mittels eines Konzeptmodells modelliert und anschließend simuliert so wie analysiert werden. Zunächst ist jedoch zu klären, worum es sich bei Diffusion handelt.

1.2 Diffusion

Der schottische Botaniker Brown beobachtete 1827, dass winzige Pollenkörner in einem Wassertropfen nie zur Ruhe kommen, egal wie viel Zeit man ihnen gibt⁵.

³B. Gotzen [7] S. 6

⁴B. Gotzen [7] S. 6

⁵Bryson [2] S. 136

Ursache hierfür ist die nach Brown benannte Molekularbewegung (Brown'sche Molekularbewegung), die zustande kommt, weil jedes Molekül kinetische Energie (oder Wärmeenergie) besitzt. Gibt man Moleküle in eine Flüssigkeit (oder in ein Gas), bewegen sie sich aufgrund dieser Energie ständig hin und her und haben in der Gesamtheit das Bestreben, sich gleichmäßig in dem zur Verfügung stehenden Raum zu verteilen. Zwar bewegt sich dabei jedes einzelne Molekül zufällig und ungeordnet, doch kann die Bewegung in der Summe aller Teilchen gerichtet sein. Dieses Phänomen des Strebens nach gleichmäßiger Verteilung von Molekülen in einer Flüssigkeit (oder in einem Gas) nennt man Diffusion.

Nimmt man einen Wasserbehälter, in dem eine Membran Kompartiment 1 (Wasser mit darin gelöstem Farbstoff) von Kompartiment 2 (reines Wasser) trennt, die sowohl für Wasser als auch für den Farbstoff durchlässig (permeabel) ist, so fangen die Farbstoffmoleküle an, durch die Membran von Kompartiment 1 auf die andere Seite der Membran in Richtung Kompartiment 2 zu diffundieren (s. Abb. 1.1).

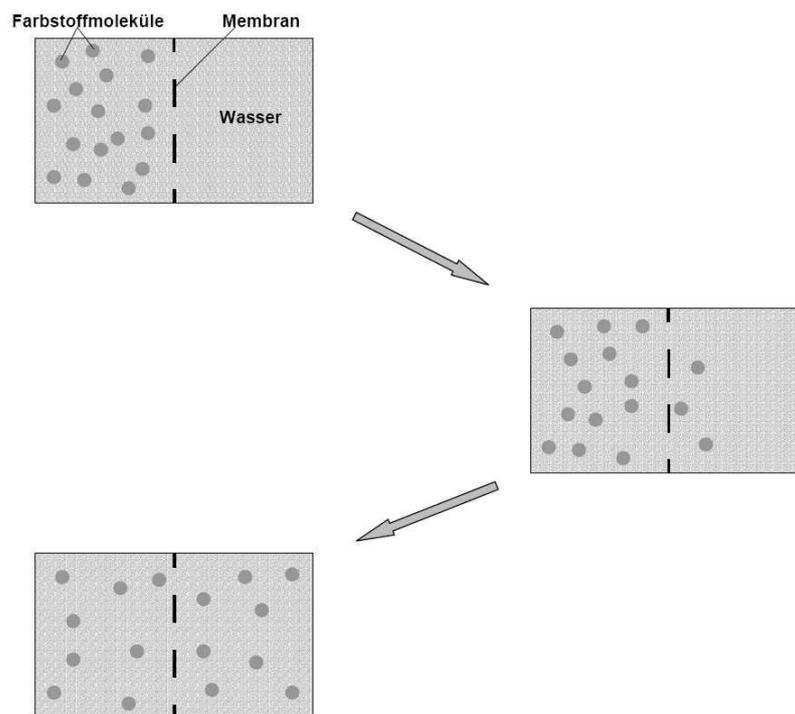


Abbildung 1.1: Diffusionsvorgang einer gelösten Substanz

Die Bewegung ist zwar bei jedem Molekül zufällig und ungerichtet; insgesamt kommt es aber trotzdem zu einem Konzentrationsausgleich, dessen Endzustand man Fließgleichgewicht nennt. Dabei wandern immer noch Moleküle von beiden Seiten durch

die Membran (Brutto-Diffusionsrate), die Konzentration auf beiden Seiten bleibt jedoch annähernd gleich: die Netto-Diffusionsrate geht also gegen null.

Der Diffusionsvorgang durch eine Membran wird durch das 1. Fick'sche Gesetz beschrieben. Hierbei ist die Diffusionsrate (oder Diffusionsflux) J direkt proportional zum Konzentrationsgradienten und der Membrandicke ($\Delta c/\Delta x$):

$$J = -D * A * (\Delta c/\Delta x)$$

wobei Δc der Konzentrationsgradient, Δx die Membrandicke, D die Diffusionskonstante (konstanter Wert für ein bestimmtes Molekül in einer bestimmten Flüssigkeit) und A die Membranfläche ist. Das negative Vorzeichen gibt die Richtung der Diffusion an, die immer von hoher zu niedriger Konzentration verläuft (vgl. 2. Hauptsatz der Thermodynamik).

Die praktische Bedeutung dieser Naturerscheinung soll nachfolgend noch an dem Beispiel der menschlichen Atmung aufgezeigt werden. Am Austausch der Atemgase (O_2 und CO_2) in der Lunge lässt sich veranschaulichen, welchen Einfluss die einzelnen Faktoren auf die Diffusionsrate haben. Da das Atemgas Sauerstoff vorgegeben ist und auch die Zusammensetzung des Blutes relativ konstant ist, spielt die Diffusionskonstante D beim Atemgaswechsel keine bedeutende Rolle. Anders sieht dies jedoch bei der Diffusionsfläche A aus. Da eine größere Oberfläche nach dem 1. Fick'schen Diffusionsgesetz auch eine erhöhte Diffusionsrate zur Folge hat, ist die Oberflächenvergrößerung in der Lunge durch die Lungenbläschen - ca. 300 Millionen Stück mit einer Gesamtoberfläche von ca. 100 m^2 ⁶ - unmittelbar verständlich, da möglichst viel Sauerstoff mit einem Atemzug aufgenommen werden soll.

Je größer der Konzentrationsunterschied Δc von Sauerstoff zwischen Einatemluft in der Lunge und Blut in den Kapillaren der Lungenbläschen ist, desto schneller läuft die Diffusion ab. Das Blut durchläuft den Körperkreislauf, gibt Sauerstoff im Gewebe ab und hat, wenn es wieder in der Lunge ankommt, einen geringeren Sauerstoffgehalt, was einen Austausch per Diffusion möglich macht. Bei dem Atemgas CO_2 verhält es sich mit den Konzentrationen genau umgekehrt.

Als letzter Faktor ist die Membrandicke Δx von Bedeutung. Um eine möglichst große Diffusionsrate zu erzielen, ist es wichtig, die Diffusionsstrecke durch die Membran kurz zu halten. Aus diesem Grunde sind die Wände der Blutkapillaren und die Wände der Lungebläschen sehr dünn. Würde einer der Faktoren verändert, hätte dies erhebliche Auswirkungen auf den menschlichen Organismus. Das Atemsystem

⁶Faller [5] S. 387

des Menschen ist auf seine Bedürfnisse spezialisiert und würde unter veränderten Bedingungen empfindlich gestört. So hätten zum Beispiel dickere Membranen der Lungenbläschen (Δx) zur Folge, dass die Diffusionsrate kleiner würde und dem Organismus weniger Sauerstoff pro Atemzug zur Verfügung stehen würde.

Bei einer konstanten Membranfläche ($A = \text{const.}$) und gleichbleibender Flüssigkeit sowie gleichbleibendem Farbstoff ($D = \text{const.}$) können diese Variablen aus der Gleichung herausgenommen werden, so dass sich

$$J = -\Delta c / \Delta x$$

ergibt.

Bei dem im Folgenden vorgestellten Konzeptmodell ist anfänglich die Anzahl der Teilchen festzulegen. Die Anfangskonzentration $\Delta c_{t=0}$ ist also vorgegeben, so dass die Diffusionsrate letztlich durch die Membrandicke Δx , die variabel eingestellt werden kann, betrachtet wird. Grundlage des Modells ist eine mit zunehmender Dicke der Membran abnehmende Durchlässigkeit (Permeabilität) für Teilchen. Mit anderen Worten heißt dies, dass mit Hilfe des Konzeptmodells der Einfluss der Membrandicke - und die dadurch veränderte Permeabilität - auf das Erreichen des Fließgleichgewichts (gleichmäßige Verteilung aller Teilchen, Netto-Diffusionsrate gegen null) veranschaulicht werden soll.

Kapitel 2

Das Konzeptmodell

Unter den genannten Voraussetzungen soll für den Diffusionsprozess durch eine Membran ein Modell entwickelt werden. Von zentraler Bedeutung bei der Diffusion ist die zufällige Teilchenbewegung. Der Teilchenbewegung durch eine Membran (Nettobewegung) gilt demnach das Hauptaugenmerk bei der Aufstellung des Modells. Die Diffusion wird in dem hier entwickelten Modell in einem begrenzten Raum (rechteckiger Kasten = Diffusionsraum) stattfinden (s. Abb. 2.1).

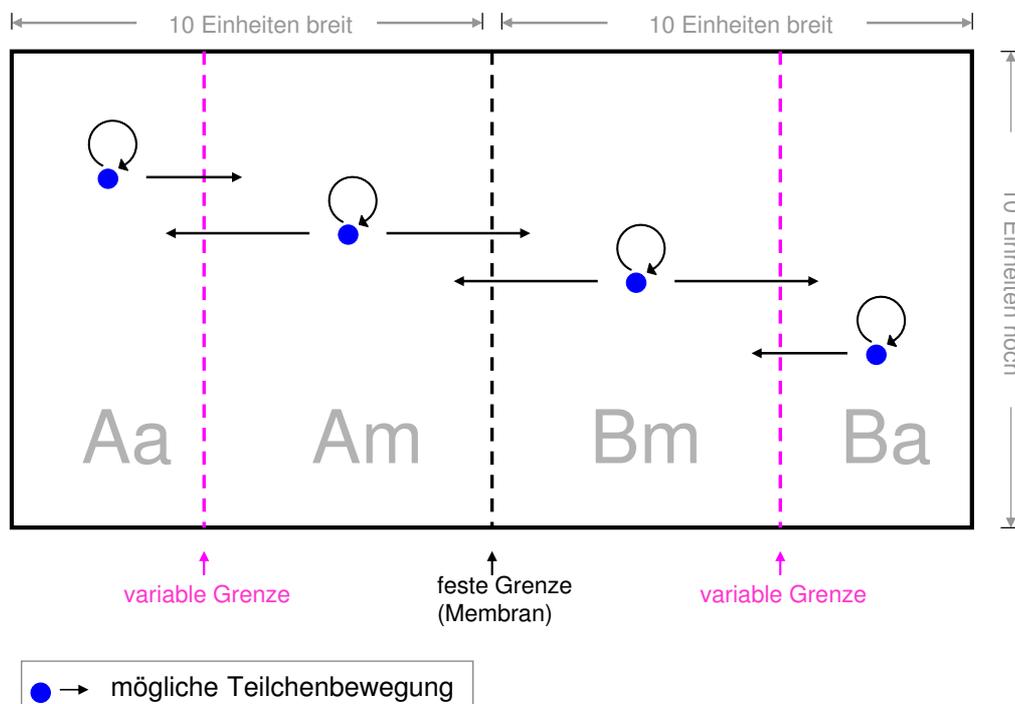


Abbildung 2.1: Konzeptmodell

Wie oben bereits angedeutet, spielt die Diffusionskonstante (D) eine untergeordnete Rolle. Folglich bedeutet es keine große Einschränkung, wenn von irgendeinem Teilchen die Rede ist und dieses nicht genauer bestimmt wird. Die Membranfläche A soll in dem Modell ebenfalls keine Rolle spielen. Diese wird immer gleich groß sein. Die Membranfläche ist in der Abbildung durch eine schwarze gestrichelte Linie gekennzeichnet und teilt den Diffusionsraum in zwei gleich große Bereiche auf. Der Bereich der links von der Membran liegt soll mit „A“ bezeichnet werden und der rechte mit „B“. Diese beiden Bereiche werden noch einmal jeweils von einer variablen Grenze (in der Abbildung rosa) unterteilt. Dadurch entstehen Felder mit den Bezeichnungen Aa(ussen), Am(itte), Bm(itte) und Ba(ussen). Die Startkonzentration kann durch die Wahl der Teilchenanzahl in dem Modell variiert werden. Diese Teilchen können zu Beginn entweder in das ganz linke Feld (Feld Aa) oder in das ganz rechte Feld (Feld Ba) plaziert werden. Innerhalb eines Simulationsprozesses bleibt die Teilchenanzahl im Diffusionsraum konstant. Die Konzentration verändert sich nur in den einzelnen Feldern. Die beiden variablen Grenzen, die oben bereits genannt wurden, simulieren die Dicke der Membran und somit ihre Durchlässigkeit (Permeabilität) in der Weise, dass durch verändert große Innenfelder (Am, Bm) sich die Wahrscheinlichkeit ändert, dass ein Teilchen von einem dieser mittleren Felder auf die andere Seite der Membran wandert. Wie genau diese Veränderung aussieht, wird später zu beobachten sein.

Das betrachtete System (der Diffusionsraum) ist 20 Einheiten breit und 10 Einheiten hoch. In der Mitte befindet sich die Membran, die nicht verschoben werden kann. Sie teilt den Diffusionsraum in zwei genau gleich große Bereiche (10×10 Einheiten). Die anderen beiden variablen Grenzen können diese Bereiche unterschiedlich einteilen. Diese Grenzen können so variiert werden, dass Feld Aa bzw. Ba zwischen 1 und 9 Einheiten breit ist. Diese beiden Grenzen können unabhängig voneinander eingestellt werden.

Die Teilchen, die sich in den vier Feldern Aa, Am, Bm und Ba zu einem bestimmten Zeitpunkt $t \geq 0$ befinden, verteilen sich zufällig im jeweiligen Feld. Obwohl es sich bei der Diffusion um einen Prozess handelt, der in der Natur kontinuierlich abläuft, wird der Verlauf im Modell diskretisiert, d.h. in einzelne Zeitschritte zerlegt. Dies erleichtert die spätere Simulation. Vom Zeitschritt t_n zu t_{n+1} können sich die Teilchen auf bestimmte Art und Weise bewegen. Ein Teilchen kann entweder in seinem bisherigen Feld bleiben oder in eines der angrenzenden Felder wandern (s. Abb. 2.1). Der Verbleib des Teilchens in seinem Feld oder das Wandern in eines der benach-

barten Felder unterliegt dem Zufall.

Das hier entwickelte Modell ist ein dynamisch beschreibendes Modell, da das Verhalten eines Prozess modelliert wird. Außerdem wird die Systemstruktur nachgebildet, um den Prozess zu untersuchen. Deshalb handelt es sich um ein „glass-box“-Modell. Und weil die Teilchenwanderung in die verschiedenen Bereiche zufällig und in diskreten Zeitschritten abläuft, handelt es sich zusätzlich um ein stochastisches und zeitdiskretes Modell.

Kapitel 3

Simulation

Der Diffusionsprozess soll nach dem oben entwickelten Konzeptmodell simuliert werden. Dazu wurden zwei Simulationstools als Java-Applets programmiert. Der Umgang mit ihnen und ihre Funktionsweise sowie erste Beobachtungen und Ergebnisse werden im Folgenden erläutert.

3.1 Beschreibung der Simulationstools

Die beiden entwickelten Simulationstools simulieren das oben dargestellte Modell zum Diffusionsprozess durch eine Membran; sie dienen aber unterschiedlichen Zwecken. Das erste Tool, das Kästchenmodell zur Diffusion, dient der Veranschaulichung des Ablaufs des Prozesses und ist in erster Linie dazu gedacht, das Verständnis mit Hilfe einer grafischen Oberfläche zu fördern. Das zweite Tool, das Simulationstool zum Langzeitverhalten, hilft bei der weiteren Analyse des Langzeitverhaltens des Diffusionsprozesses.

Zunächst wird die Funktionsweise und der Umgang mit dem ersten Tool, dem Kästchenmodell zur Diffusion, erläutert.

Kästchenmodell zur Diffusion

Dieses Tool spiegelt die Arbeitsweise des Konzeptmodells wieder und veranschaulicht, wie sich die Teilchen durch Diffusion verteilen. Auf der Benutzeroberfläche ist sowohl die Grafik des Konzeptmodells als auch das programmierte Applet, das eigentliche Simulationstool, zu sehen. Die Grafik soll bei der Nutzung des Simulationstool die Bezeichnungen und die mögliche Teilchenbewegung in Erinnerung rufen.

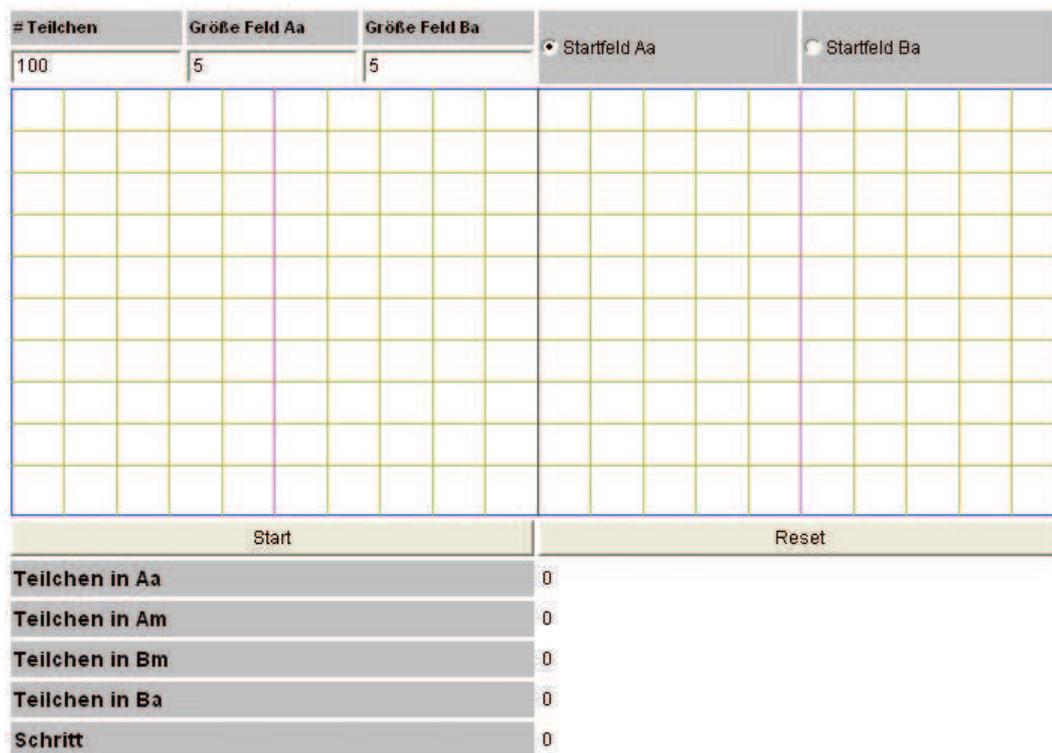


Abbildung 3.1: Screenshot des Kästchenmodells zur Diffusion

In Ergänzung zum Konzeptmodell ist hier der Diffusionsraum des Tools noch in weitere kleine quadratische Kästchen mit der Kantenlänge 1 unterteilt, weil die Teilchen sich auf den Diffusionsraum so aufteilen, dass sie in einem der Kästchen landen. Der Diffusionsraum ist auch hier 10 Einheiten/Kästchen hoch und 20 Einheiten/Kästchen breit. Die Größe des Diffusionsraums ist jedoch nicht von spezieller Bedeutung. Solange die Größenverhältnisse gleich bleiben, ändert sich das Diffusionsverhalten der Teilchen nicht. Die mittlere Grenze/Membran ist durch eine schwarze Linie gekennzeichnet. Die variablen Grenzen sind durch rosa Linien dargestellt und zu Beginn genau in der Mitte der Bereiche A und B zu sehen. Im oberen Bereich des Tools können verschiedene Parameter vom Benutzer selbst gewählt und eingegeben werden. Hierbei handelt es sich zum einen um die Anzahl der diffundierenden Teilchen, die zu Beginn auf eines der beiden Startfelder (Aa oder Ba) verteilt werden. Es ist eine Eingabe zwischen 1 und 999 Teilchen möglich. Höhere Werte machen keinen Sinn, weil sie den Rechenaufwand vergrößern, ohne das Simulationsergebnis zu verbessern.

Zum anderen kann man die variablen Grenzen festlegen, indem man die gewünschte Größe für die beiden äußeren Felder, also Feld Aa und Feld Ba, eingibt. Die beiden

anderen Feldgrößen für Am und Bm ergeben sich dann automatisch, müssen also nicht explizit eingegeben werden. Die jeweilige Breite der Felder Aa und Ba kann nur zwischen 1 - 9 Einheiten liegen, um zu gewährleisten, dass immer 4 Felder vorhanden sind. Da die Feldgröße zu Beginn jeweils bei 5 liegt, sind die Felder bei der Grundeinstellung des Applets alle gleich groß. Verändert man die Werte, verschieben sich auch die rosa farbigen Linien beim Start des Programms. Wird bei einer dieser Eingabefelder eine nicht gültige Eingabe gemacht, setzen sich die Werte, sobald das Programm gestartet wird, wieder auf ihre Startwerte zurück. Außerdem kann man als Startfeld zwischen Feld Aa und Feld Ba wählen, d.h. man beginnt da, wo die Teilchen im ersten Schritt (Schritt 0) verteilt werden - entweder in Feld Aa oder in Feld Ba.

Unterhalb der Kästchengrafik befinden sich zwei Schaltflächen „Start“ und „Reset“, mit denen das Programm gestartet bzw. wieder auf den Ursprungszustand zurückgesetzt werden kann. Darunter sind noch weitere Felder zu sehen, die nach jedem Zeitschritt die im jeweiligen Feld vorhandene Teilchenanzahl angeben sowie den Zeitschritt, den das Programm gerade ausgeführt hat.

Werden also alle Einstellungen vom Benutzer wie gewünscht gewählt, kann das Programm durch Betätigung des „Start“-Buttons gestartet werden. Bei einmaligem Betätigen des Startbuttons wird der erste Zeitschritt (Schritt 0) simuliert. Man sieht dann die Teilchen (in Form von schwarzen Punkten) im gewählten Startfeld zufällig auf die Kästchen verteilt. Sind zufällig mehr als 6 Teilchen in einem Kästchen gelandet, so werden trotzdem nur sechs Stück angezeigt. Diese werden dann jedoch in Blau dargestellt, um zu verdeutlichen, dass sich mehr als 6 Teilchen in dem Kästchen befinden. Das Programm selber beachtet die genaue Anzahl auch dann, wenn die Teilchen nicht alle in Form von Punkten angezeigt werden können.

Der Button, der zuvor mit „Start“ beschriftet war, lautet nun „nächster Schritt“. Drückt man erneut auf diesen Button, wird der Zustand nach dem nächsten Zeitschritt angezeigt, also nach der ersten Teilchenbewegung. Die Teilchen der einzelnen Felder verteilen sich neu in ihrem eigenen Feld wie auch in den angrenzenden Feldern. Zur Übersicht wird im unteren Teil des Applets die genaue Anzahl der Teilchen für die Felder und für den jeweiligen Zeitschritt angegeben, in dem sich das Programm gerade befindet.

Durch den „Reset“-Button kann das Programm zu jeder Zeit wieder auf seinen Ausgangspunkt zurückgesetzt werden. Alle Eingaben werden dann gelöscht und es kann eine neue Simulation mit anderen Parametern begonnen werden.

Interessant ist nun vor allem, wie sich die Teilchen langfristig gesehen im Diffusionsraum verteilen. Dies zu untersuchen und zu veranschaulichen ist die Aufgabe des zweiten Tools, welches im nächsten Abschnitt vorgestellt wird.

Simulationstool zum Langzeitverhalten

Dieses Tool veranschaulicht die zeitliche Entwicklung der Teilchenverteilung. Es werden Graphen für die Teilchenanzahl in den einzelnen Feldern und Bereichen in Abhängigkeit von den Zeitschritten dargestellt.

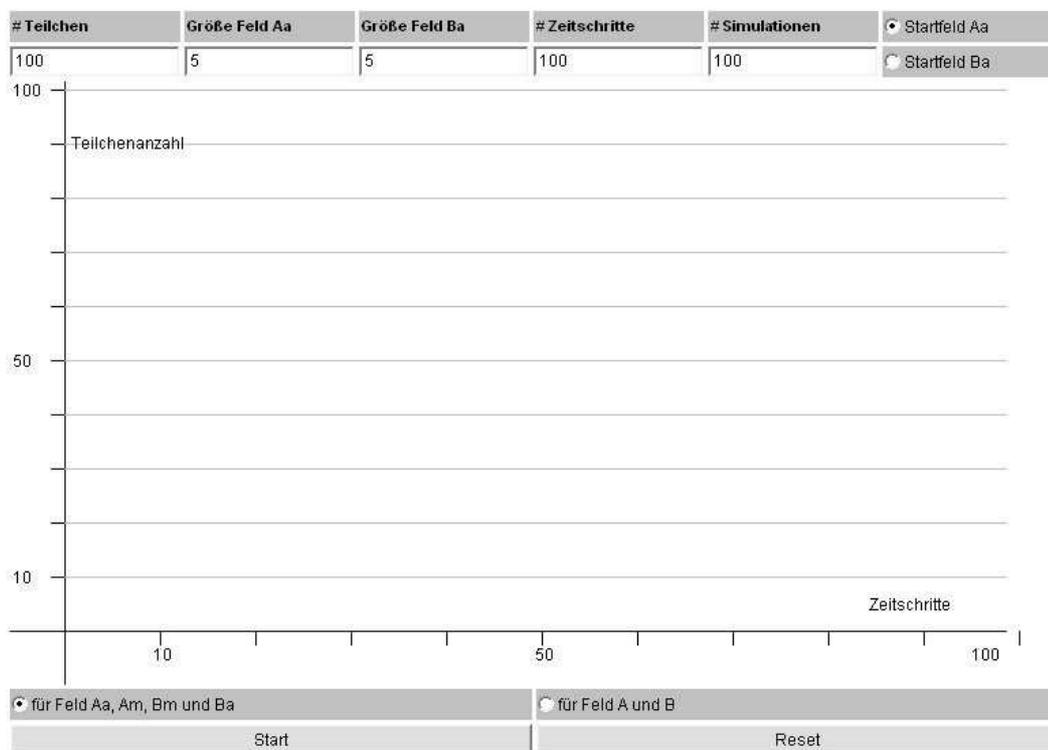


Abbildung 3.2: Screenshot des Simulationstools zum Langzeitverhalten

Im oberen Teil des Tools können verschiedene Parameter vom Benutzer gewählt werden. Neben den Parametern für die Anzahl der Teilchen, der Größe der Felder und der Auswahl des Startfelds können noch die Anzahl der Zeitschritte und der parallel durchgeführten Simulationen gewählt werden. Diese Parameter werden im Weiteren durch Variablen abgekürzt. Für die Teilchenanzahl wird N , für die Feldgröße Aa wird g_1 , für die Feldgröße Ba wird g_2 gesetzt. Die Zeitschritte werden mit t und die Anzahl der Simulationen mit s bezeichnet. Aus den durchgeführten Simu-

lationen wird je Zeitschritt der Mittelwert gebildet und als Ergebnis des jeweiligen Zeitschrittes im Graphen dargestellt. Durch eine Erhöhung von s erreicht man eine Glättung des Diffusionsverlaufs und damit eine bessere Interpretation. Auch in diesem Applet können die Parameter nicht beliebig gewählt werden. Für die Größe der Felder gilt wieder, dass sie zwischen 1 und 9 liegen müssen und die Teilchenanzahl 999 nicht überschreiten darf. Sowohl für die Anzahl der Zeitschritte als auch für die Anzahl der Simulationen gilt, dass sie zwischen 1 und 999 liegen müssen. Bei nicht zulässigen Eingaben werden wieder alle eingegebenen Werte gelöscht.

Es lassen sich nun zwei unterschiedliche Graphen ausgeben. Entweder werden für alle vier Felder (Aa, Am, Bm, Ba) die Graphen ausgegeben oder für die jeweiligen Bereiche A und B. „Start“- und „Reset“-Button haben wieder die Aufgabe, das Programm nach der Parametereingabe zu starten bzw. das Programm wieder auf seinen Ausgangszustand zurückzusetzen.

Die durch die Simulationen ermittelten Werte, die dieses Tool ausgibt, sind wieder in diskreten Zeitschritten ermittelt worden. Somit dürften eigentlich nur Ergebnispunkte in der Grafik ausgegeben werden. Eine solche Darstellung wäre aber schwerer lesbar. Deshalb wurden die Punkte durch Linien verbunden.

Um die Werte, die in der Grafik eingetragen sind, besser zur konkreten Analyse nutzen zu können, kann das Programm eine Tabelle erzeugen, in der die Teilchenzahlen zu der gerade durchgeführten Simulation in Abhängigkeit vom Zeitschritt stehen. Diese Tabelle erhält man, indem man die Tastenkombination Shift + t drückt. Dann können die Werte aus der Tabelle herauskopiert und für weitere Analyseprogramme genutzt werden.

3.2 Programmierung der Applets

Der Quellcode, der hinter diesen Simulationstools steckt, wird im Folgenden erläutert.

Das Simulationsprogramm zur Diffusion, das Kästchenmodell, beruht auf einem zweidimensionalen Array, vergleichbar mit den Datensätzen in einer Matrix. Jeder Arrayeintrag repräsentiert eines der Kästchen im Kästchenmodell. Da im vorliegenden Modell der Diffusionsraum eine Größe von 10×20 Einheiten hat, geht es hier um ein Array der Größe 10×20 . Die Einträge in diesem Array sind natürliche Zahlen, die die Anzahl der sich in diesem Kästchen befindenden Teilchen wiedergeben. Zu

beachten ist, dass sich dieser 10×20 große Diffusionsraum aus mehreren Feldern zusammensetzt. Im Konzeptmodell wurden diese Felder mit Aa, Am, Bm und Ba bezeichnet. Diese Bezeichnungen werden hier übernommen. Das bedeutet, dass sich das 10×20 große Array aus 4 Teilarrays zusammensetzt, deren Inhalte erst am Ende auf das vollständige Array übertragen werden. Die Teilarrays werden erzeugt, während das Programm ausgeführt wird, da sie je nach Wahl der Feldgrößen durch den Anwender unterschiedlich groß sind. Die Teilchen werden dann im ersten Schritt zufällig auf das Startfeld, in diesem Falle das Startarray, verteilt.

Die zufällige Verteilung auf das Startarray läuft folgendermaßen ab: Der Computer ermittelt zwei Zufallszahlen z_1 und z_2 , die zwischen 1 und der Höhe des Startfeldes (für z_1) sowie 1 und der Breite des Startfeldes (für z_2) liegen. Wurden diese beiden Zahlen ermittelt, wird in die Arrayposition $[z_1][z_2]$ ein Teilchen gelegt, d. h. die Zahl an dieser Arrayposition wird um eins erhöht. Dieser Prozess wird so oft wiederholt, bis alle Teilchen verteilt sind. Zum Schluss ist ein Array entstanden, dessen Einträge die Anzahl der in diesem Kästchen liegenden Teilchen repräsentiert.

In allen folgenden Zeitschritten, in denen die Teilchen ihre Position verändern können, läuft die Neuverteilung wie folgt ab: Zunächst werden in den Teilarrays alle Einträge in den Arraypositionen zusammengezählt, um die Anzahl der Teilchen in den jeweiligen Feldern zu ermitteln. Diese Werte werden vorübergehend gespeichert und die Arrayeinträge aller Arrays werden alle wieder auf null gesetzt. Dann folgt die Zufallsverteilung genauso wie oben bei der Startverteilung schon beschrieben. In diesem Fall wird die Anzahl der Teilchen von Array Aa auf ein neu erzeugtes Array A mit Breite und Länge 10 zufällig verteilt, da dies der Bereich ist, in den die Teilchen wandern können. Genauso werden die Teilchen, die zuvor in Array Am waren, nun auf ein neues Array verteilt, welches die Breite des Bereichs A zusammen mit Feld Bm hat. Die Teilchen können also in einem diskreten Zeitschritt, in dem sie nach dem Zufallsprinzip neu zugeordnet werden, nur in ihrem Feld bleiben oder in eines der benachbarten Felder wandern, nicht jedoch ein Feld überspringen. Genauso verhält es sich mit der Verteilung der Teilchen von Feld Bm und Ba. Diese neuen, mit Teilchen belegten Arrays werden dann noch auf den Diffusionsraum übertragen und summiert. Das am Ende belegte Array, das den Diffusionsraum darstellt, wird durch das Simulationstool grafisch ausgegeben. Dieser Prozess wird bei jedem weiteren Zeitschritt wiederholt.

Auf diese Art und Weise wird der Diffusionsprozess simuliert.

Das Tool zum Langzeitverhalten arbeitet in gleicher Weise. Es führt diesen Prozess

nur (je nach dem, wieviel Simulationen gewählt wurden) häufiger hintereinander durch, summiert die Werte für die einzelnen Zeitschritte in einem Array der Länge der Anzahl der Zeitschritte und teilt die Einträge dann wieder durch die Anzahl der Simulationen, um den Mittelwert zu erhalten. Diese Werte werden dann grafisch dargestellt.

3.3 Darstellung der Simulationsergebnisse

Das erste Tool dient mehr der Anschauung, um sich den Prozess der Diffusion, d.h. das Streben nach gleichmäßiger Verteilung vor Augen zu führen, als der gezielten Analyse des Konzeptmodells. Mit diesem Tool lässt sich aber sehr deutlich für die ersten vier Zeitschritte (Schritt 0 bis 3) zeigen, wie lange es dauert, bis sich in allen Feldern Teilchen befinden. Die folgenden Abbildungen des Kästchentools zeigen den Verteilungsverlauf zu Beginn einer Simulation.

In Schritt 0 ist nur das Startfeld mit Teilchen gefüllt (in diesem Fall Feld Aa mit 100 Teilchen, $g_1 = 5$, $g_2 = 5$, s. Abb. 3.3).

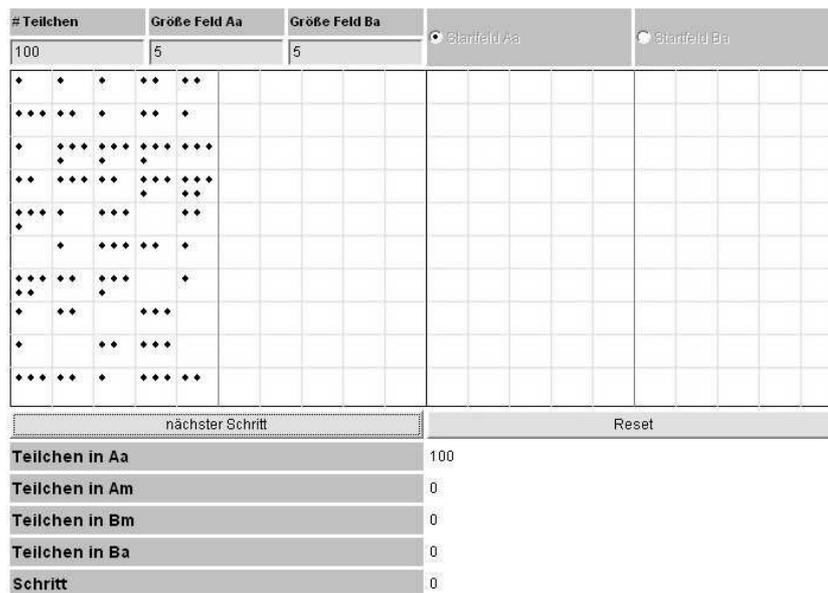


Abbildung 3.3: Schritt 0, Kästchentool mit Teilchen in Feld Aa

In Schritt 1 sind dann bereits ca. die Hälfte der Teilchen in das nächste Feld (in diesem Falle Feld Am) gewandert, da die Teilchen in diesem Schritt alle zufällig auf den Bereich A verteilt wurden und Aa/Am gleich groß sind (s. Abb. 3.4).

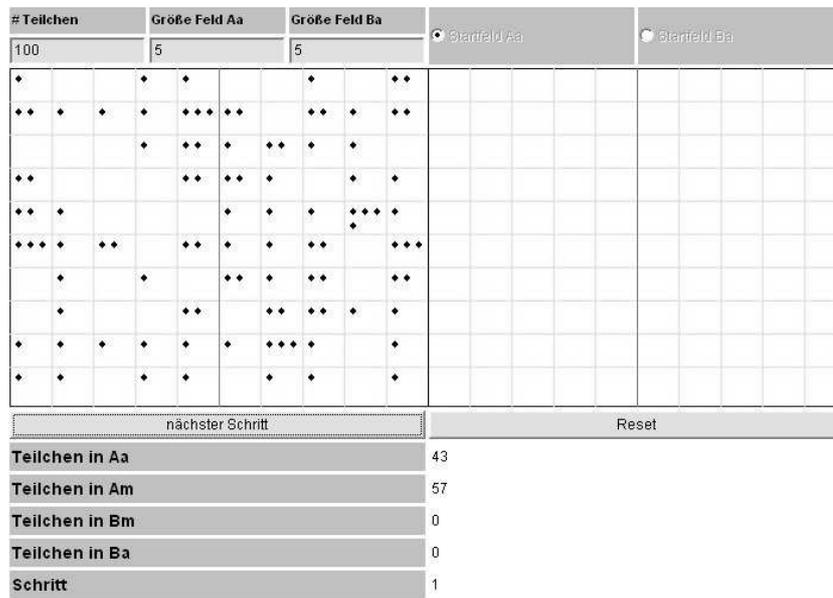


Abbildung 3.4: Schritt 1, Kästchentool mit Teilchen in Feld Aa und Am

Im darauf folgenden Schritt sind einige Teilchen schon in Feld Bm gewandert, da nun für die Teilchen die Möglichkeit besteht, von Feld Am in Feld Bm zu wandern (s. Abb. 3.5).

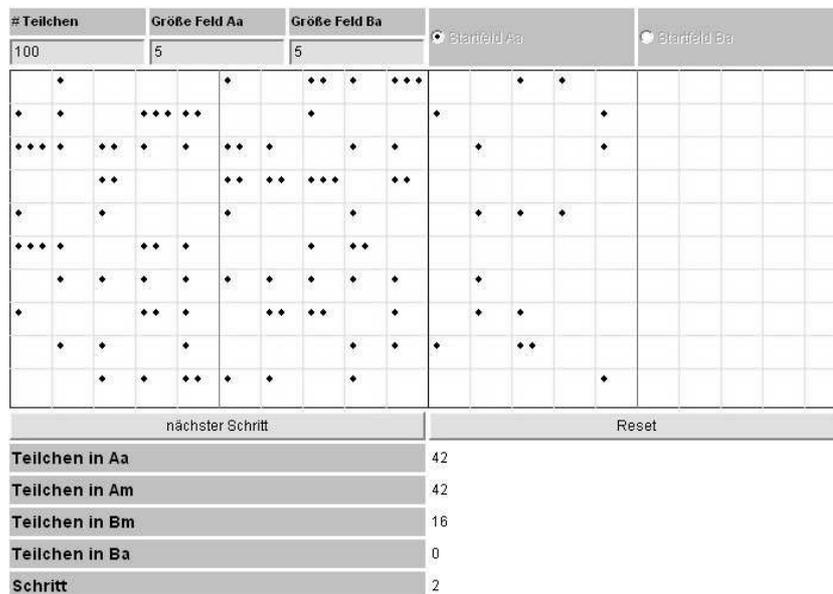


Abbildung 3.5: Schritt 2, Kästchentool mit Teilchen in Bereich A und Feld Bm

In Schritt 3 sind wenige Teilchen schon bis zu Feld Ba vorgedrungen (s. Abb. 3.6). Es ist aber eine verhältnismäßig geringe Anzahl, da nur die Teilchen aus Feld Bm die Möglichkeit hatten nach Ba zu wandern und sich in Bm nach dem vorausgegangenen Simulationsschritt erst wenige Teilchen befanden.

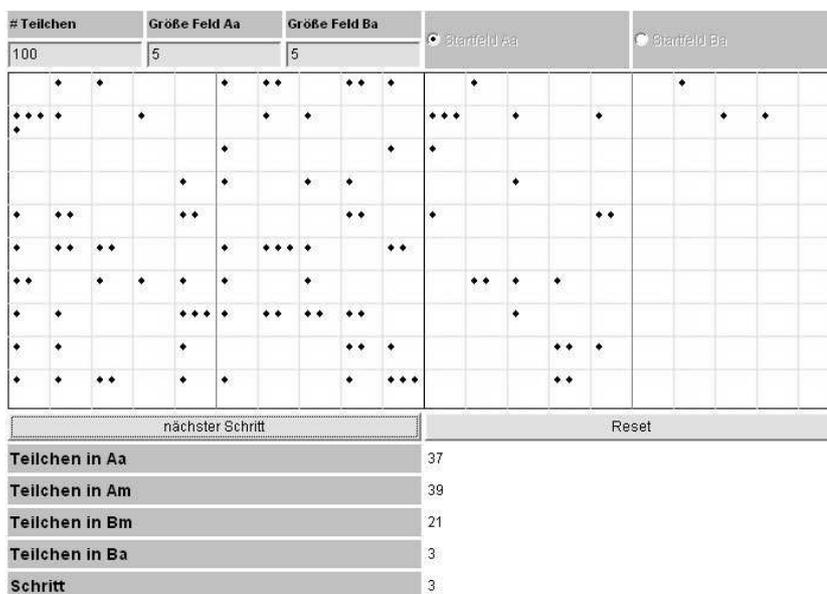


Abbildung 3.6: Schritt 3, Kästchentool mit Teilchen in allen Feldern

In den danach folgenden Schritten wird es von Schritt zu Schritt immer schwieriger, Verteilungsunterschiede in den einzelnen Feldern zu erkennen. Zwar hilft die Auflistung der Teilchenanzahlen pro Feld im unteren Teil des Applets, jedoch ist eine genauere Beobachtung und Analyse mit zunehmender Zahl von Zeitschritten kaum möglich.

Ebenfalls schwer zu beobachten sind die genauen Unterschiede der Teilchenverteilungen, wenn die Feldgrößen von Aa und Ba verändert werden. Hier hilft das Tool zum Langzeitverhalten.

Im Kästchentool lassen sich die Veränderungen bei unterschiedlichen Parametern nur eingeschränkt ablesen. Es kann vermutet werden, dass es (unabhängig von den Parametern) irgendwann zu einem Gleichgewicht kommt (Nettodiffusionsrate gegen 0). Wie schnell dies sich einstellen wird, ist allerdings schwer abzuschätzen, da hier alle Ergebnisausreißer die Interpretation des Verhaltens erschweren.

Eine wesentlich bessere Möglichkeit, diese Fragestellungen zu klären, bietet das Tool zum Langzeitverhalten.

Zunächst kann man sich die Unterschiede der einzelnen Graphen der Felder genauer ansehen.

Hierfür sollen die Beobachtungen an einem Beispiel (s. Abb. 3.7) herangezogen werden:

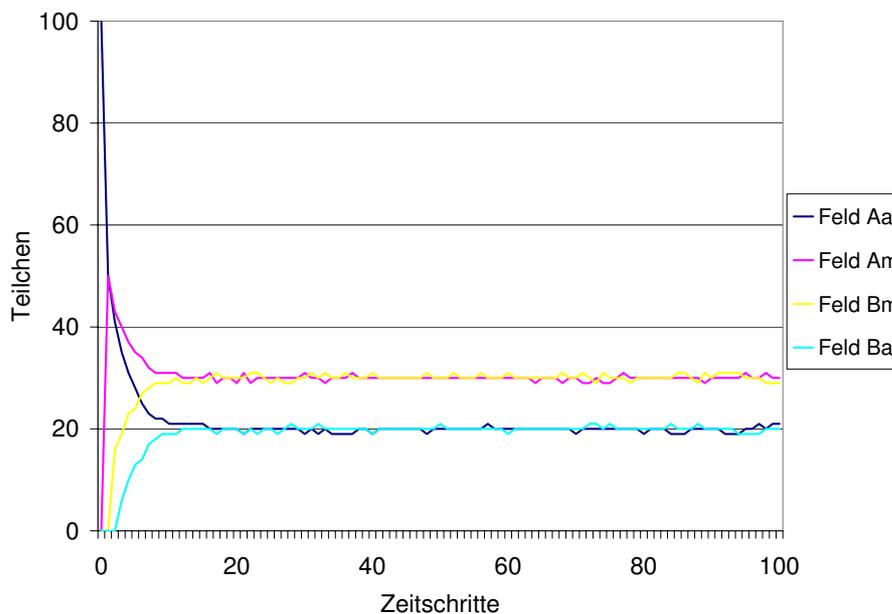


Abbildung 3.7: Tool zum Langzeitverhalten $N = 100$, $g_1 = 5$, $g_2 = 5$, $t = 100$, $s = 100$, Startfeld Aa

Es ist zu erkennen, dass der Graph für das Feld Aa bei der gewählten Teilchenzahl von 100 beginnt und dann relativ schnell auf den Wert 20 abfällt. In Feld Am kommen erst im zweiten Schritt Teilchen an, danach fällt diese Kurve ebenfalls auf einen konstanten Wert (hier 30) ab. Bei den Graphen für Feld Bm und Ba verläuft es so, dass diese beiden Kurven sich von unten an die Werte 30 bzw. 20 annähern; Sie beginnen erst richtig in Zeitschritt 3 bzw. 4. Auffällig bei dieser Grafik ist, dass sich die jeweiligen Werte für die Felder alle ca. im gleichen Zeitschritt auf ihrem Langzeitwert einpendeln, d.h. dass die Kurven gleich schnell bzw. langsam fallen bzw. steigen. Nun stellt sich die Frage, warum sich die Werte nicht alle auf den selben Wert einpendeln, was bedeuten würde, dass die Teilchen im Diffusionsraum gleichmäßig verteilt wären. Als Ursache hierfür muss gefolgert werden, dass in den mittleren beiden Feldern (also Am und Bm) die Teilchen von beiden Seiten einwandern können. Diese beiden Felder haben im Gegensatz zu den Feldern Aa und Ba zwei angrenzende Felder.

Lässt man jetzt die sonst gleiche Simulation noch einmal durchlaufen und wechselt nur das Startfeld, so dass Ba zum Startfeld wird, erscheint folgende Grafik (s. Abb. 3.8):

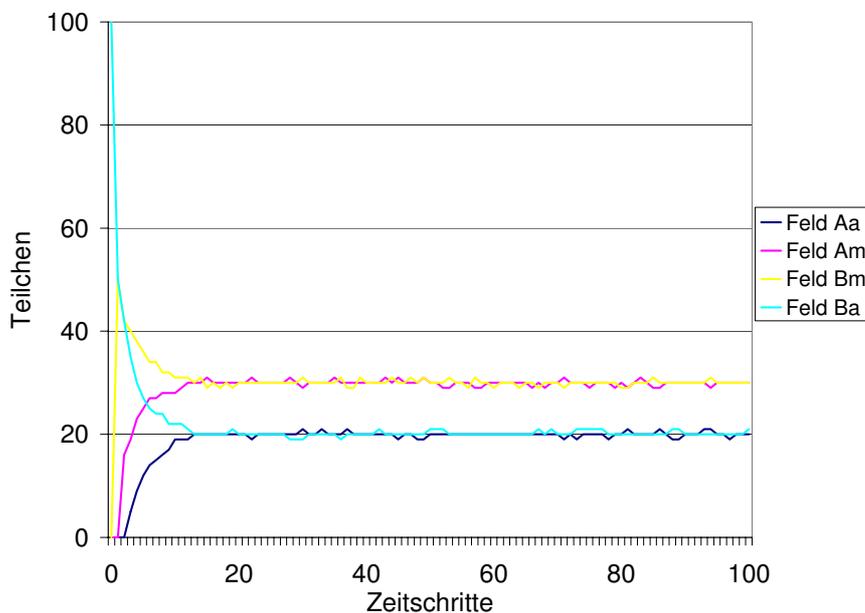


Abbildung 3.8: Tool zum Langzeitverhalten mit $N = 100$, $g_1 = 5$, $g_2 = 5$, $t = 100$, $s = 100$, Startfeld Ba

Der Unterschied zu Abbildung 3.7 lässt sich erst erkennen, wenn man die Beschriftungen und Farben der einzelnen Funktionen miteinander vergleicht. In Abbildung 3.8 verhält sich die Funktion für Ba wie die für Feld Aa in Abbildung 3.7. Genau das Gleiche gilt für Bm und Am, Aa wie Ba. Dies war zu erwarten, da die Eigenschaften der Felder Aa zu Ba, Am zu Bm und umgekehrt äquivalent sind und es deswegen kein Unterschied ist, ob man nun ganz links oder ganz rechts im Diffusionsraum beginnt, die Teilchen wandern zu lassen.

Dass es gleichgültig ist, wo man mit der Verteilung der Teilchen startet, ist auch an den folgenden Beispielen zu erkennen (Abbildung 3.9 und 3.10).

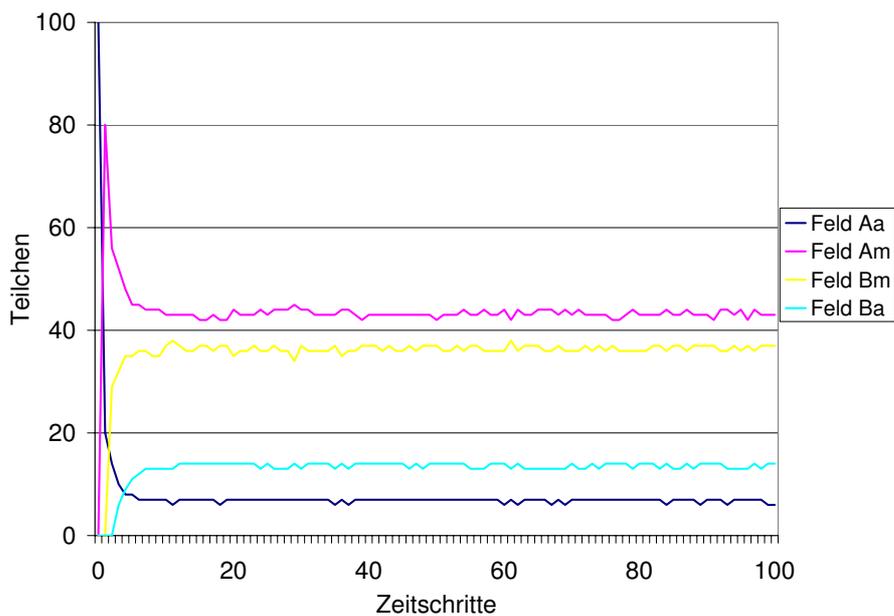


Abbildung 3.9: Graphen für die Felder, $N = 100$, $g_1 = 2$, $g_2 = 4$, $t = 100$, $s = 100$, Startfeld Aa

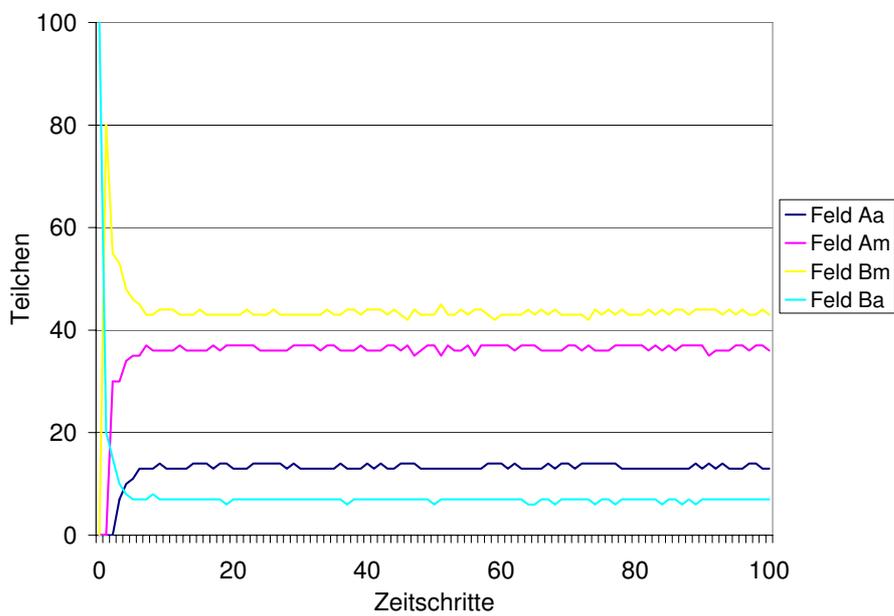


Abbildung 3.10: Graphen für die Felder, $N = 100$, $g_1 = 4$, $g_2 = 2$, $t = 100$, $s = 100$, Startfeld Ba

Verändert man die Startfelder, so muss man auch die Feldgrößen für Aa und Ba vertauschen. Es lässt sich feststellen, dass sich dann die Graphen für Aa, Ba; Am, Bm; Bm, Am; und Ba, Aa jeweils gleich verhalten.

Schaut man sich nun die Funktionen für Bereich A und Bereich B unter den oben gegebenen Parametern an, so ist zu erkennen, dass sich die beiden Graphen von oben und unten aneinander annähern und schließlich bei jeweils 50 Teilchen konstant bleiben (s. Abb. 3.11).

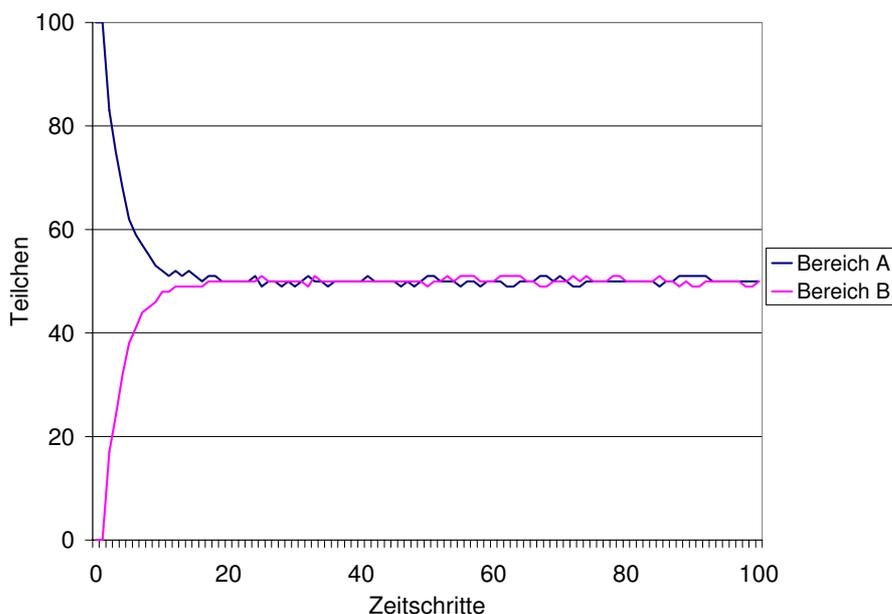


Abbildung 3.11: Graphen für Bereiche A und B, $N=100$, $g_1 = 5$, $g_2 = 5$, $t = 100$, $s = 100$, Startfeld Aa

Auch hier ist es wieder so, dass die beiden Graphen gleich schnell abfallen bzw. ansteigen. Man kann nun genauso wie bei den Graphen für die Felder Aa, Am, Bm und Ba die Bezeichnungen ändern, also die Feldgrößen vertauschen, damit sich bei Änderung des Startfeldes der Graph A wie B und umgekehrt verhält. Dies verdeutlichen die nachstehenden Grafiken (Abbildung 3.12 und 3.13):

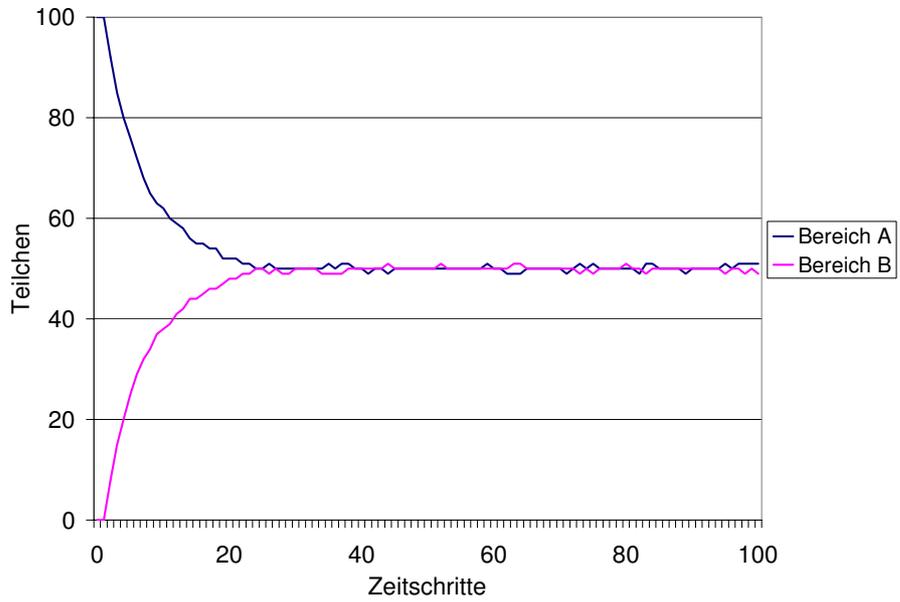


Abbildung 3.12: $N = 100$, $g_1 = 8$, $g_2 = 3$, $t = 100$, $s = 100$, Startfeld Aa

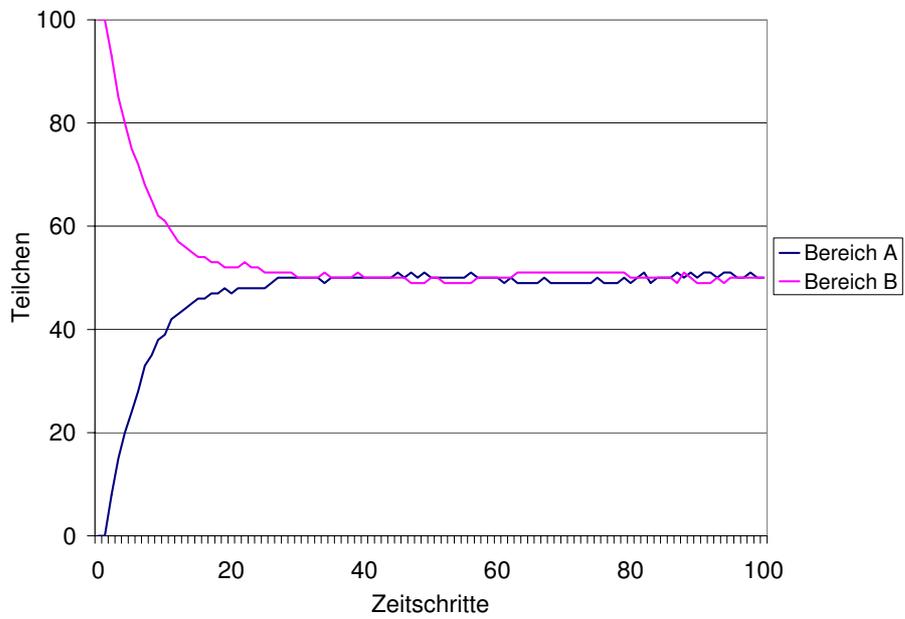


Abbildung 3.13: $N = 100$, $g_1 = 3$, $g_2 = 8$, $t = 100$, $s = 100$, Startfeld Ba

Die Symmetrie der Ergebnisse sind also unabhängig von den Parametern zu beobachten.

Da nun festgestellt wurde, dass das Verhalten, je nach dem welches Startfeld man wählt, analog zu dem Verhalten bei dem anderen Startfeld ist, werden im Folgenden alle Untersuchungen nur noch für das Startfeld Aa betrachtet.

Es treten auch Veränderungen auf, wenn andere Parameter verändert werden. Dies bestätigen die folgenden Abbildungen der Graphen für die Bereiche A und B beispielhaft.

Zunächst sollen die Auswirkungen bei Veränderung des Parameters s gezeigt werden:

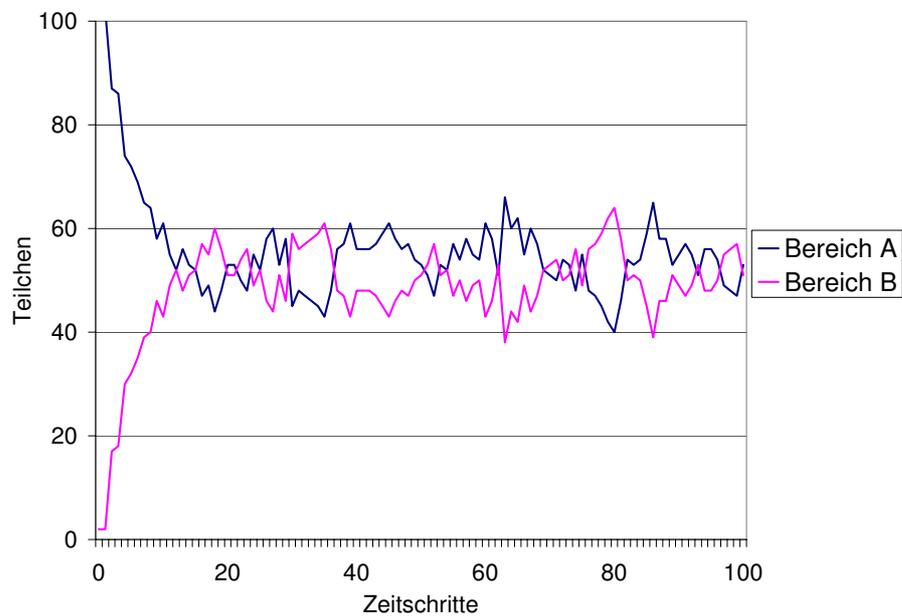


Abbildung 3.14: Änderung der Simulationsanzahl $N = 100$, $g_1 = 4$, $g_2 = 7$, $t = 100$, $s = 1$

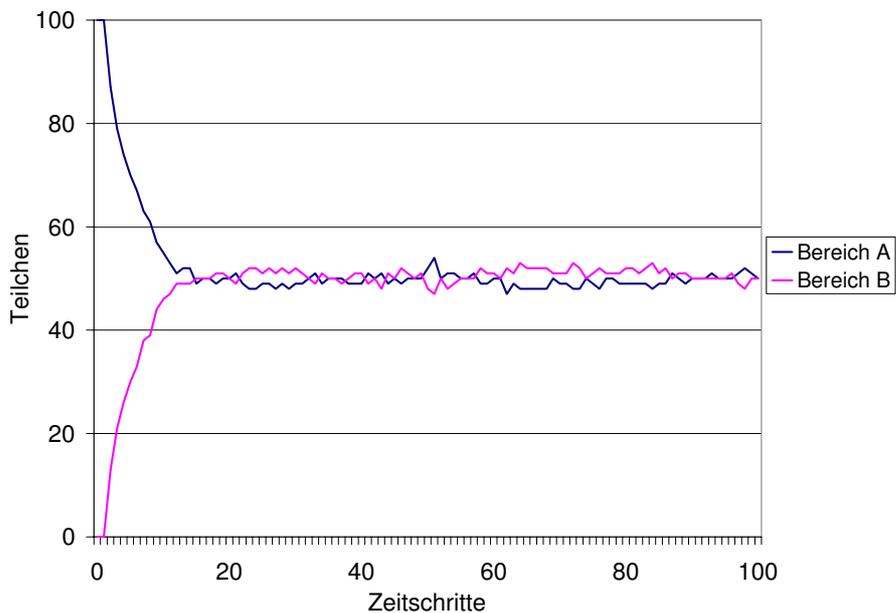


Abbildung 3.15: Änderung der Simulationsanzahl $N = 100$, $g_1 = 4$, $g_2 = 7$, $t = 100$, $s = 10$

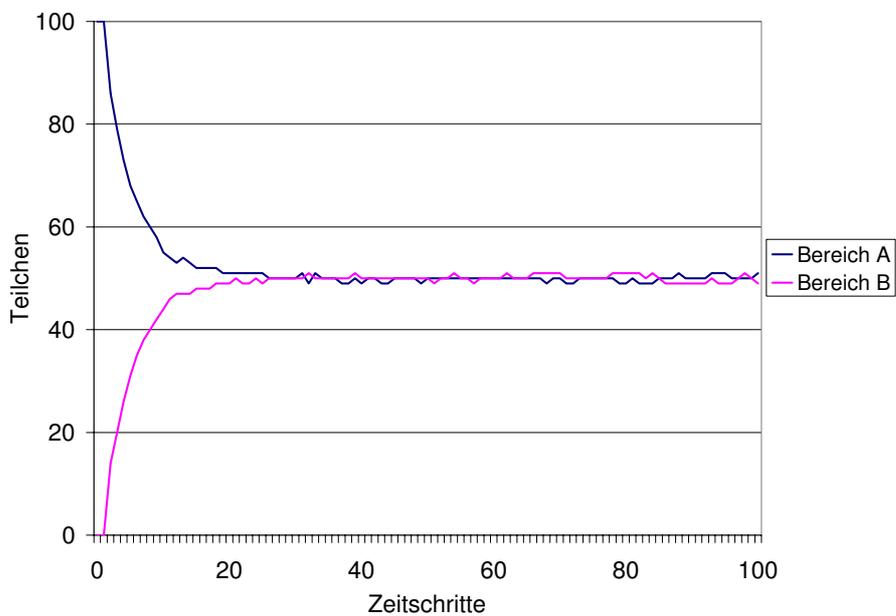


Abbildung 3.16: Änderung der Simulationsanzahl $N = 100$, $g_1 = 4$, $g_2 = 7$, $t = 100$, $s = 100$

Es ist zu sehen, dass die Kurven glatter verlaufen, je mehr Simulationen gleichzeitig durchgeführt werden und der Mittelwert aus den Simulationen das Ergebnis des Zeitschritts darstellt (s. Abb. 3.14, 3.15, 3.16). Genauso verhalten sich auch die Graphen für Aa, Am, Bm und Ba, wenn die Anzahl der Simulationen erhöht wird. Ausreißer wirken sich dann weniger aus. Von Interesse bei der Analyse ist der allgemeine Fall, wie sich die Teilchen bei Diffusion verteilen.

Fazit: Eine hohe Zahl an Simulationen ergibt durch Glättung eine adäquat deutbare Grafik.

Der Parameter t wirkt sich offensichtlich nicht auf das Verhalten der Diffusion aus. Beobachtet man den Diffusionsprozess allerdings nicht lange genug, so ist das Verhalten noch nicht deutbar und somit uninteressant. Die Anzahl der Zeitschritte sollte also nicht zu klein gewählt werden, da sonst kein Langzeitverhalten beobachtet werden kann.

Nun wird der Parameter N für die Teilchenanzahl verändert.

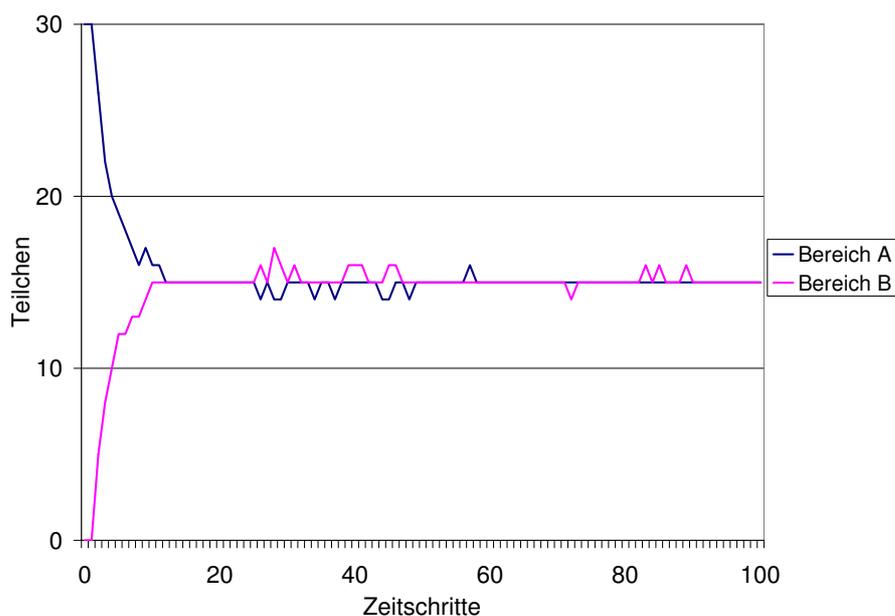


Abbildung 3.17: Änderung der Teilchenanzahl $N = 30$, $g_1 = 5$, $g_2 = 5$,
 $t = 100$, $s = 100$

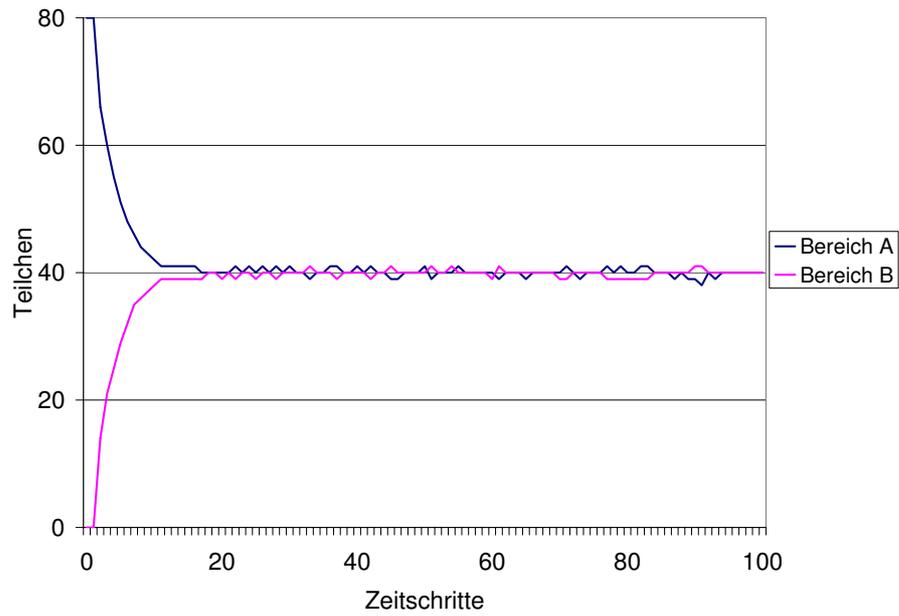


Abbildung 3.18: Änderung der Teilchenanzahl $N = 80$, $g_1 = 5$, $g_2 = 5$, $t = 100$, $s = 100$

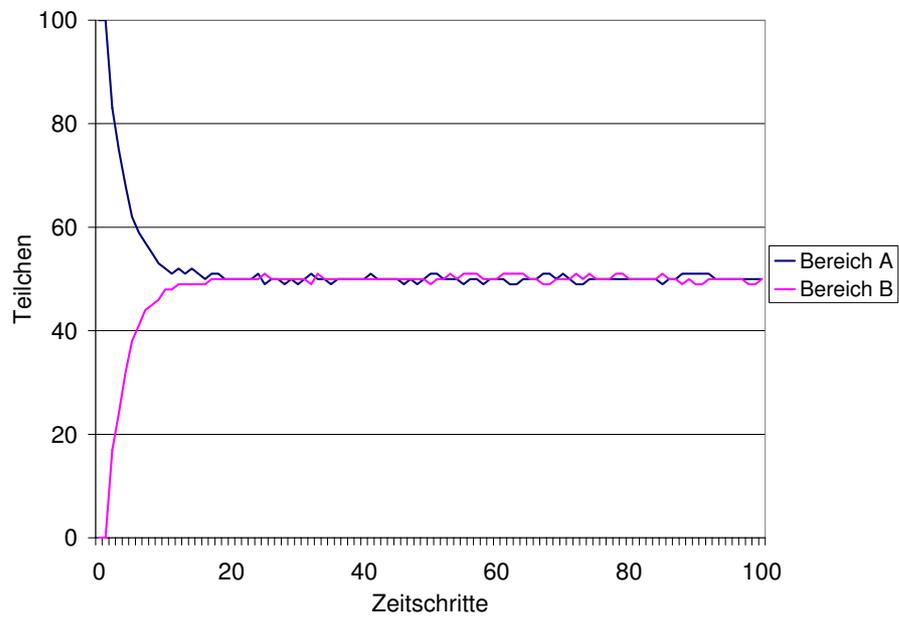


Abbildung 3.19: Änderung der Teilchenanzahl $N = 100$, $g_1 = 5$, $g_2 = 5$, $t = 100$, $s = 100$

An den Abbildungen (3.17, 3.18, 3.19) kann man ersehen, dass kaum Veränderungen bei einer anderen Teilchenanzahl zu beobachten sind. Zwar liegt das Gleichgewicht jeweils bei einem anderen Wert, dieser liegt aber immer bei $\frac{N}{2}$.

Ähnlich verhält es sich bei den Graphen für die Felder Aa, Am, Bm und Ba. Auch hier verändert sich der Wert des Gleichgewichtes, bleibt aber für alle vier Felder prozentual zur Teilchenzahl gleich.

Fazit: Es gibt nur geringe Veränderungen des Graphen bei Variation der Teilchenzahl N . Die Veränderung der Teilchenzahl hat keinen Einfluss auf das generelle Diffusionsverhalten.

Zum Schluss sollen die Einflüsse veränderter Feldgrößen beobachtet werden.

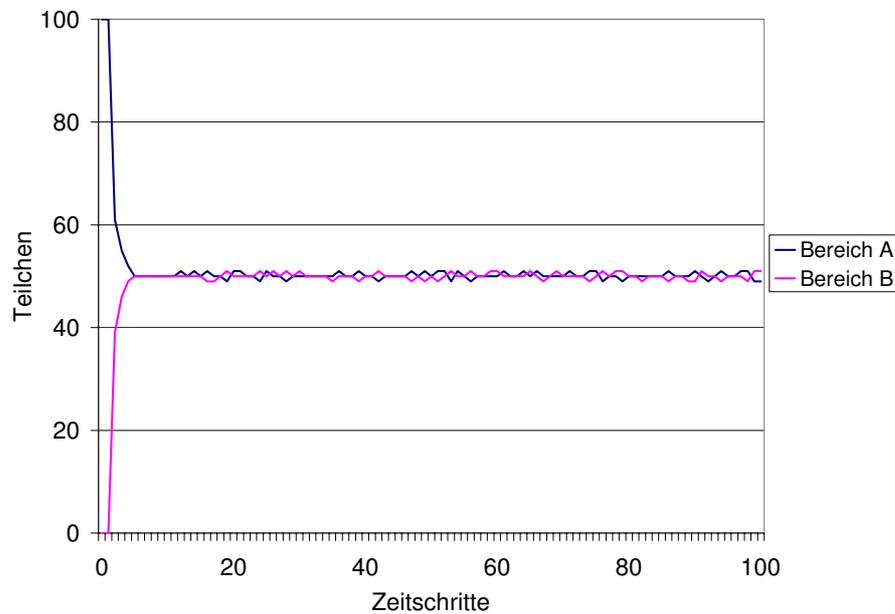


Abbildung 3.20: Änderung Teilfeldgrößen $N = 100$, $g_1 = 1$, $g_2 = 2$,
 $t = 100$, $s = 100$

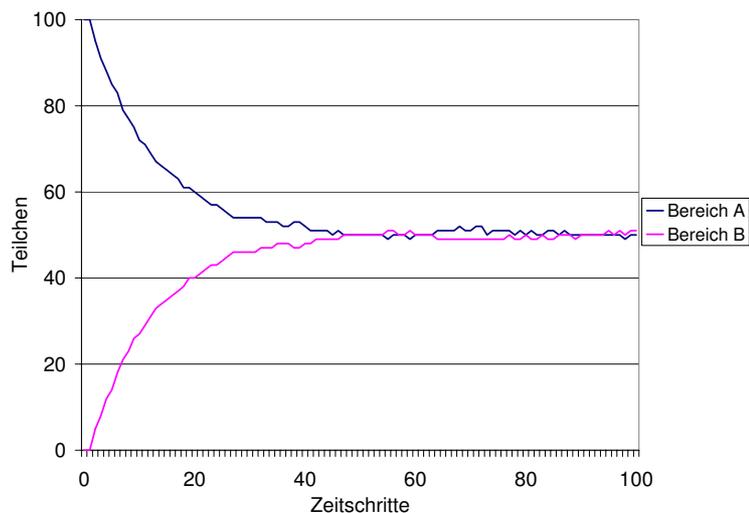


Abbildung 3.21: Änderung der Teilfeldgrößen $N = 100$, $g_1 = 7$, $g_2 = 8$, $t = 100$, $s = 100$

Hier ist zu sehen, dass sich bei veränderten Feldgrößen die Zeitspanne (= Zahl der Zeitschritte) bis zum Erreichen des Fließgleichgewichts ändert. Sind die äußeren Felder (Aa und Ba) relativ groß, so ist die Membran nicht so durchlässig und es dauert länger, bis der Gleichgewichtszustand erreicht ist. Genau für diesen Aspekt der Veränderung der Permeabilität der Membran durch die Feldgrößen wurde das Modell entwickelt. Die Beispiele (Abb. 3.20, 3.21) zeigen also, dass die Permeabilität durch Veränderung der Feldgrößen verändert werden kann. Beobachtet man auch noch die Graphen für die Felder, so verändert sich hier bei unterschiedlichen Feldgrößen nicht nur die Krümmung der Kurven sondern auch die Werte für das jeweilige Gleichgewicht. Da dies aber offensichtlich ist, werden hierzu keine expliziten Grafiken gezeigt.

Fazit: Die Veränderung der Feldgrößen verändert die Durchlässigkeit der Membran. Nachdem diese ersten Beobachtungen gemacht werden konnten, kann eine genauere Analyse unter mathematischen Gesichtspunkten den Beobachtungen folgen.

Kapitel 4

Analyse

4.1 Lineare Annäherung

Mit Hilfe der Simulationstools konnten schon ein paar Eigenschaften des Modells beobachtet werden. Um nun genauere Beobachtungen und eine fundierte Analyse folgen zu lassen, werden mathematische Mittel zu Hilfe genommen.

Es soll nun untersucht werden, ob die Graphen für die einzelnen Felder (Aa, Am, Bm, Ba) und Bereiche (A und B) durch eine Funktion approximiert werden können. Der Verlauf der Kurve lässt vermuten, dass dies durch e-Funktionen möglich ist. Die Graphen zeigen das typische Verhalten der kontinuierlichen Annäherung an einen konstanten Wert, gegen den sie dann konvergieren. Zunächst seien die Graphen für die Bereiche A und B betrachtet.

In Kapitel 3.3 wurden bereits erste Beobachtungen gemacht und beschrieben, die jetzt weiter ausgeführt werden. Bei genauerer Betrachtung sind folgende Merkmale der Graphen zu erkennen:

- Die Graphen liegen immer sowohl für den x-Wert, also die Zeitschritte, als auch für den y-Wert, die Teilchenanzahl, im positiven Bereich,
- die Graphen konvergieren beide für $t \rightarrow \infty$ gegen $\frac{N}{2}$,
- der Graph zu dem Bereich, der das Startfeld beinhaltet, konvergiert von oben an den Grenzwert und der Graph zu dem Bereich, der das Startfeld nicht beinhaltet, konvergiert immer von unten an den Grenzwert,
- der Graph zu dem Bereich, der das Startfeld beinhaltet, beginnt im ersten Schritt immer bei der Startteilchenanzahl N und der Bereich, der das Startfeld nicht beinhaltet, beginnt im ersten Schritt immer im Koordinatenursprung,

- in Schritt 0 und 1 bleiben beide Graphen unverändert,
- bei unterschiedlichen Einstellungen der Feldgrößen, verändert sich die Krümmung der Graphen, d.h. sie nähern sich in unterschiedlicher Geschwindigkeit dem Grenzwert.

Da die e-Funktion in ihrer einfachsten Form $y = e^x$ für $x \rightarrow -\infty$ gegen 0 konvergiert, muss die gesuchte Funktion auf jeden Fall einen negativen Koeffizienten für den Exponenten x haben. So wird sie an der y-Achse gespiegelt und muss von der Form e^{-bx} mit $b \geq 0$ sein. Diese Funktion bewegt sich jedoch nur zwischen den y-Werten 1 und 0. Um diesen Bereich zu vergrößern, muss die Funktion mit einer Variablen als Koeffizienten multipliziert werden. Diese Funktionen konvergieren alle gegen 0. Es muss also eine zusätzliche Variable addiert werden, um den Grenzwert (=Fließgleichgewicht) zu verschieben. Die bisher entwickelte Funktion für den Bereich A lautet demnach

$$f_A(t) = a \cdot e^{-bt} + c$$

bzw. für den Bereich B

$$f_B(t) = -a \cdot e^{-bt} + c,$$

da sich die Kurve von unten dem Grenzwert nähert. Aufgrund der Tatsache, dass die Funktionsbeschreibung erst für den Wert $t = 1$ beginnen kann, weil erst im zweiten Zeitschritt ein Übergang von A nach B (bzw. von B nach A bei Startfeld Ba) stattfindet, wird die Kurve um einen Schritt verschoben und man erhält dann die Funktionen

$$f_A(t) = a \cdot e^{-b(t-1)} + c$$

bzw.

$$f_B(t) = -a \cdot e^{-b(t-1)} + c.$$

Da beobachtet wurde, dass die Funktionen gegen den Wert $\frac{N}{2}$, also die Hälfte der Teilchenanzahl konvergieren, kann die Variable c durch $\frac{N}{2}$ ersetzt werden. Außerdem lässt sich beobachten, dass für $t = 1$ die Teilchenanzahl für A bei N bzw. für B bei 0 liegt. Daraus ist zu schließen, dass der Koeffizient a auch bei $\frac{N}{2}$ liegen muss. Dies ergibt sich, wenn man in f_A bzw. f_B $t = 1$ einsetzt.

In der nun entwickelten Funktionsvorschrift gibt es nur noch eine Variable, die offensichtlich für die Krümmung des Graphen zuständig ist. Nach den oben gemachten Beobachtungen ist die Krümmung, also die Variable b , abhängig von den Einstellungen der Feldgrößen. In welcher Art und Weise sich die Krümmung bei Veränderung

der Feldgrößen ändert, ist noch unklar. Die Variable b kann aber für konkrete Fälle durch mathematische Umformungen hergeleitet werden. Mit diesem Verfahren wird gleichzeitig überprüft, ob die oben aufgestellte Funktion korrekt ist. Zur leichteren Umformung der Funktion wird zuerst $t - 1$ durch t' ersetzt. Um weiterhin von der gleichen Funktion sprechen zu können, ändert sich der Definitionsbereich von $t \geq 1$ zu $t' \geq 0$.

Es wird also folgendermaßen vorgegangen (hier nur für Graph A, analog für B):

$$\begin{aligned}
 f_A(t) &= \frac{N}{2} \cdot e^{-b(t-1)} + \frac{N}{2} && | \text{ ersetze } t - 1 \text{ durch } t' \\
 f_A(t') &= \frac{N}{2} \cdot e^{-bt'} + \frac{N}{2} && | -\frac{N}{2} \\
 f_{A_1}(t') &= \frac{N}{2} \cdot e^{-bt'} && | /\frac{N}{2} \\
 f_{A_2}(t') &= e^{-bt'} && | \ln() \\
 f_{A_3}(t') &= -bt'
 \end{aligned}$$

Werden diese Umformungen auch mit den Funktionswerten des Graphen durchgeführt, so müssten die erhaltenen Werte eine Gerade bilden, da sie proportional zueinander sind (siehe f_{A_3}). Dies ist auch der Fall, wie in Abbildung 4.1 beispielhaft mit 100 Teilchen und Feldgröße $A_a = 6$ und $B_a = 7$ zu sehen ist.

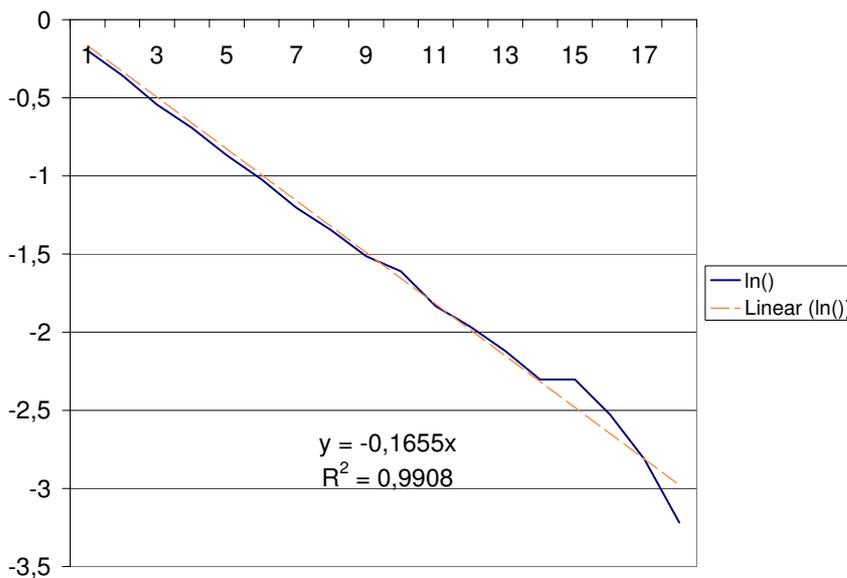


Abbildung 4.1: Linearisierung des Koeffizienten b der Funktion für f_A

Die errechneten Werte werden durch eine lineare Regressionsgerade angenähert, die der Funktionsvorschrift $y = -0,1655 \cdot x$ folgt. In dem genannten Beispiel ergibt also $b = -0,1655$ und somit den Wert für die Variable b an.

Wiederholt man diese Prozedur für alle möglichen Werte, die die Feldgrößen (für $Aa = g_1$; für $Ba = g_2$) haben können, so erhält man die zugehörigen Werte für die Variable b . Diese sind in der Tabelle 4.1 aufgeführt.

Tabelle 4.1: Variable b in Abhängigkeit von g_1 und g_2

g_1/g_2	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	1,33	1,042	1,017	0,764	0,629	0,3979	0,3417	0,1989	0,0966
2	1,0297	0,9765	0,7973	0,7086	0,5466	0,3841	0,3199	0,1912	0,0896
3	0,9631	0,7915	0,6929	0,5419	0,4751	0,3622	0,2721	0,17	0,0854
4	0,739	0,5802	0,5553	0,5003	0,4024	0,3353	0,2332	0,1628	0,078
5	0,5787	0,5363	0,5012	0,4225	0,3372	0,2739	0,2043	0,1371	0,067
6	0,4057	0,3838	0,3557	0,3296	0,258	0,2109	0,1655	0,1164	0,0549
7	0,2964	0,2939	0,2795	0,2303	0,1998	0,1722	0,1369	0,0907	0,0437
8	0,1935	0,1861	0,1701	0,151	0,1254	0,1075	0,0887	0,0605	0,0323
9	0,1003	0,0904	0,0872	0,0734	0,0683	0,0565	0,0433	0,0326	0,0172

Um nun eine allgemeine Funktionsvorschrift für die Variable b in Abhängigkeit von g_1 und g_2 zu finden, werden zuerst die Funktionsvorschriften für die Werte von b gesucht, bei der g_1 konstant bleibt. Dies bedeutet, dass die Werte pro Zeile (s. Tab. 4.1) betrachtet werden und dafür mit einer linearen Regression eine Funktion gefunden wird.

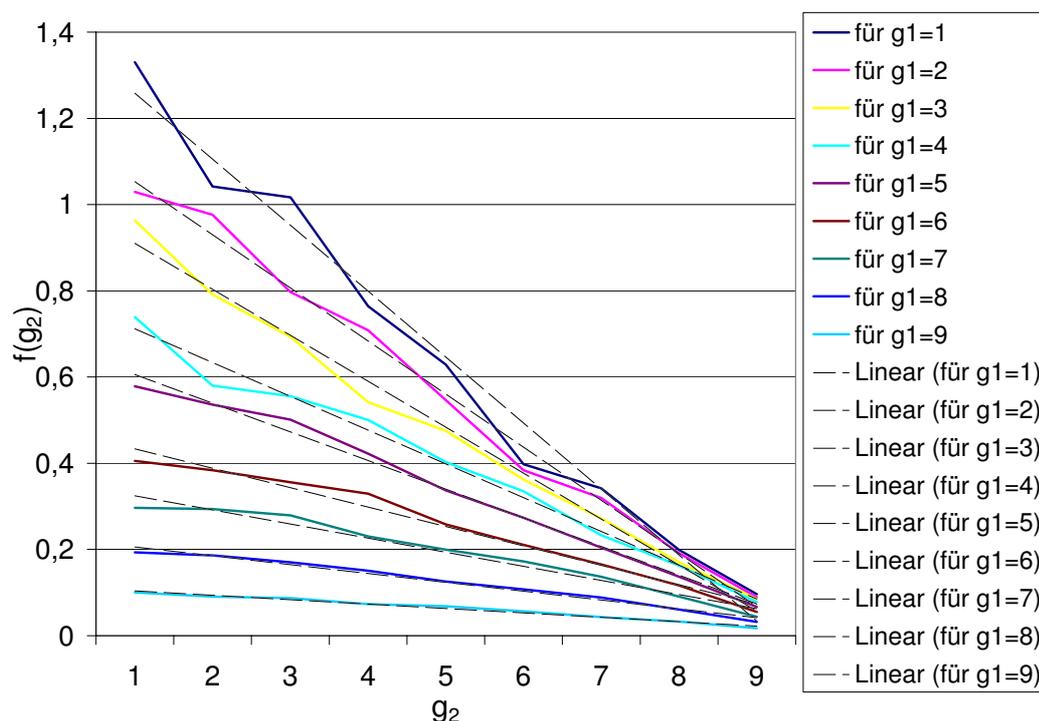


Abbildung 4.2: Funktionen mit Regressionsgeraden

Es ergeben sich folgende lineare Regressionsgeraden mit angegebenen Bestimmtheitsmaß R^2 . Das Bestimmtheitsmaß R^2 liegt zwischen 0 und 1 und ist ein Maß für die Annäherung der Geraden an den tatsächlichen Funktionsverlauf, wobei der Wert 1 die vollständige Übereinstimmung beschreibt. Die Regressionsgeraden sind in Abbildung 4.2 gestrichelt eingezeichnet.

$f_1(g_2) = -0,1530 \cdot g_2 + 1,4113$	und $R^2 = 0,9805$	für $g_1 = 1$
$f_2(g_2) = -0,1233 \cdot g_2 + 1,1767$	und $R^2 = 0,9924$	für $g_1 = 2$
$f_3(g_2) = -0,1066 \cdot g_2 + 1,0169$	und $R^2 = 0,9906$	für $g_1 = 3$
$f_4(g_2) = -0,0784 \cdot g_2 + 0,7906$	und $R^2 = 0,9880$	für $g_1 = 4$
$f_5(g_2) = -0,0664 \cdot g_2 + 0,6720$	und $R^2 = 0,9929$	für $g_1 = 5$
$f_6(g_2) = -0,0451 \cdot g_2 + 0,4788$	und $R^2 = 0,9816$	für $g_1 = 6$
$f_7(g_2) = -0,0322 \cdot g_2 + 0,3574$	und $R^2 = 0,9720$	für $g_1 = 7$
$f_8(g_2) = -0,0205 \cdot g_2 + 0,2262$	und $R^2 = 0,9854$	für $g_1 = 8$
$f_9(g_2) = -0,0102 \cdot g_2 + 0,1141$	und $R^2 = 0,9836$	für $g_1 = 9$

In allen 9 Fällen ist die Funktion von der Form $f_i(g_2) = z_1 \cdot g_2 + z_2$. Da die Variablen z_1 und z_2 in allen 9 Fällen unterschiedlich sind, scheinen diese von g_1 abhängig zu sein. Betrachtet man nun die Werte für z_1 und z_2 gesondert, so erhält man mit Hilfe von linearen Regressionsgeraden die folgenden Funktionen:

$$f_{z_1}(g_1) = 0,0177 \cdot g_1 - 0,1591 \quad \text{mit } R^2 = 0,9773$$

und

$$f_{z_2}(g_1) = -0,1612 \cdot g_1 + 1,4997 \quad \text{mit } R^2 = 0,9889$$

Diese beiden Geraden sind die Gleichungen der Regressionsgeraden, die in Abbildung 4.3 zu sehen sind.

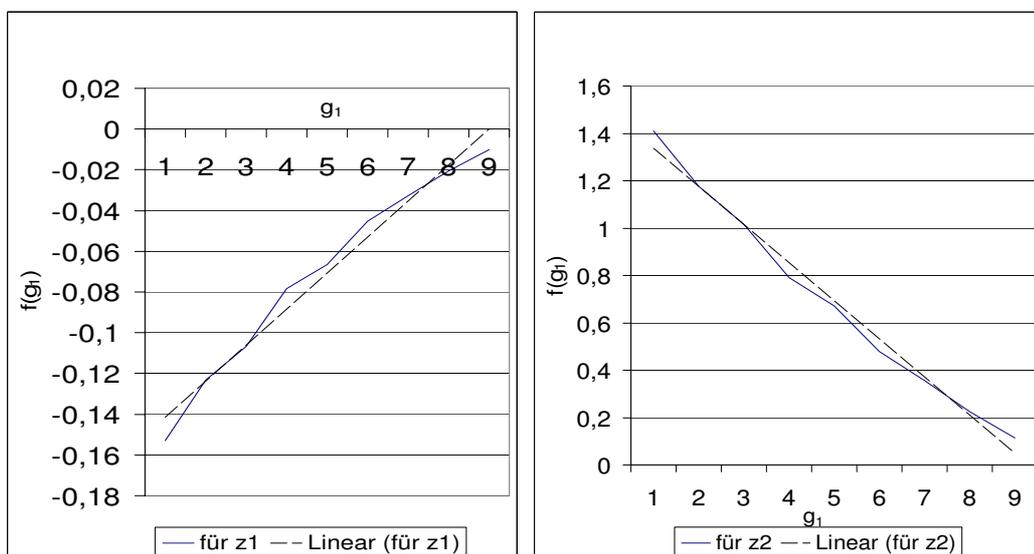


Abbildung 4.3: Werte und Regressionsgeraden für z_1 und z_2

Setzt man diese Ergebnisse zusammen, erhält man für die Variable b die Funktionsvorschrift

$$b = (0,0177 \cdot g_1 - 0,1591) \cdot g_2 + (-0,1612 \cdot g_1 + 1,4997)$$

mit

g_1 = Größe Feld Aa und

g_2 = Größe Feld Ba.

Es bleiben noch die Graphen für Feld Aa, Am, Bm und Ba. Diese sind zwar für die Deutung der Diffusion nicht relevant, jedoch wäre es interessant, auch diese Graphen

vollständigkeitshalber durch Funktionen beschreiben zu können. Das Augenmerk gilt darum nachfolgend den Funktionen für Aa, Am, Bm und Ba.

Auch hier lassen sich die Beobachtungen, die bereits in Kapitel 3.3 beschrieben wurden, interpretieren:

- Der Graph des Startfeldes startet immer bei der Startteilchenanzahl N ,
- alle anderen Graphen starten bei 0, wobei die Teilchenzahl für das Feld direkt neben dem Startfeld im ersten Schritt über den Konvergenzwert hochspringt,
- die Graphen konvergieren alle für $t \rightarrow \infty$ gegen meist unterschiedliche Werte, je nach Konfiguration,
- der Graph des Startfeldes und der Graph des direkt angrenzenden Feldes konvergieren von oben an ihre Grenzwerte, die anderen beiden Graphen von unten,
- der jeweilige Grenzwert wird von den Feldgrößen und der Startteilchenanzahl bestimmt,
- wie schnell der jeweilige Graph gegen seinen Grenzwert konvergiert, hängt von den Feldgrößen ab,
- die Graphen für die Felder Bm und Ba sind bis zu den Zeitschritten 2 bzw. 3 konstant.

Die Graphen für alle vier Felder folgen wieder e-Funktionen. Da die Funktion für Aa direkt im Schritt 0 beginnt, muss hier keine Verschiebung erfolgen. Anders verhält es sich bei den übrigen drei Graphen. Deren Verlauf lässt sich erst in späteren Schritten (für Am und Bm in Schritt 1 und für Ba in Schritt 2) als e-Funktion beschreiben, weil erst ab Schritt 1 bzw. 2 und 3 diffundierte Teilchen in den entsprechenden Feldern auftauchen. Die Teilchenanzahl bei den Funktionen Bm und Ba ist zu Beginn immer 0, damit kann festgelegt werden, dass der Koeffizient und die Konstante für den Grenzwert gleich sein müssen. Dies ergibt sich, wenn man in den zugehörigen Gleichungen für $t = 1$ bzw. $t = 2$ setzt. Im Gegensatz zu den Funktionen für A und B ist der Grenzwert nicht nur von der Teilchenanzahl abhängig. Die Funktionen

können also nur in sehr allgemeinen Form angegeben werden:

$$\begin{aligned} \text{Aa:} \quad & f_{Aa}(t) = a_1 \cdot e^{-bt} + a'_1 \\ \text{Am:} \quad & f_{Am}(t) = a_2 \cdot e^{-b(t-1)} + a'_2 \\ \text{Bm:} \quad & f_{Bm}(t) = -a_3 \cdot e^{-b(t-1)} + a_3 \\ \text{Ba:} \quad & f_{Ba}(t) = -a_4 \cdot e^{-b(t-2)} + a_4 \end{aligned}$$

Will man nun den Grenzwert bestimmen, dann lässt sich dies nicht in Abhängigkeit von Feldgröße und Teilchenanzahl in linearer Form darstellen. Ähnlich ist es bei der Variablen b . Hier scheint das Verfahren der linearen Annäherung nicht zu greifen.

4.2 Markov-Prozess

Es gibt nun eine Möglichkeiten, den Diffusionsprozess ohne Simulationen zu beschreiben, nämlich mit Hilfe von stochastischen Prozessen. Insbesondere soll hier von einem speziellen stochastischen Prozess Gebrauch gemacht werden, dem Markov-Prozess.

Definition (Markov-Prozess):

„Ein stochastischer Prozess $\{X(t), t \geq 0\}$ mit rechtsseitigen Realisationen und abzählbarem Zustandsraum I heißt **Markov-Prozess** (oder Markov-Kette in stetiger Zeit), falls

$$P(X(t) = j \mid X(t_1) = i_1, \dots, X(t_n) = i_n) = P(X(t) = j \mid X(t_n) = i_n) \quad (*)$$

für beliebige $t_1 < t_2 < \dots < t_n < t$ und $i_1, i_2, \dots, i_n, j \in I$ gilt. Sind zudem die Übergangswahrscheinlichkeiten $P(X(s+t) = j \mid X(s) = i)$ unabhängig von s , so ist der Markov-Prozess **homogen**.

Die **Markov-Eigenschaft** (*) besagt, dass die zukünftige Entwicklung des Prozesses nur von dem zuletzt beobachteten Zustand abhängt und von der sonstigen Vorgeschichte unabhängig ist. Die Homogenität bedeutet, dass ein Prozess, der sich zum Zeitpunkt s im Zustand i befindet, sich zukünftig genauso verhält wie ein Prozess, der im Zustand i neu startet.“¹

¹Waldmann [13] S. 157

Der Diffusionsprozess, der durch das Konzeptmodell und die Simulationstools simuliert wurde, kann auch durch einen homogenen Markov-Prozess dargestellt werden. In diesem Fall ist der Zustandsraum $I = \{Aa, Am, Bm, Ba\}$ die Menge der möglichen Felder, in die ein Teilchen wandern kann. Die Zufallsvariable $X(t)$ gibt an, in welchem Feld sich ein Teilchen zum Zeitpunkt t befindet.

Der Markov-Prozess lässt sich auch anschaulich grafisch darstellen, wie in Abbildung 4.4 gezeigt wird.

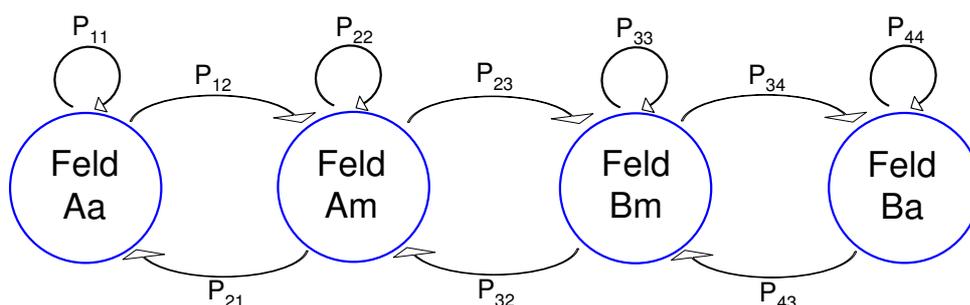


Abbildung 4.4: Grafische Darstellung des Markov-Prozesses

Die möglichen Zustände sind durch Kreise dargestellt, die mit Pfeilen verbunden sind, welche verdeutlichen, wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, dass ein Teilchen in einen anderen Zustand (hier Feld) wandert.

Die zugehörigen Wahrscheinlichkeiten P sind die folgenden (dabei wird Feld Aa durch die Ziffer 1 ersetzt, Feld Am durch 2, Feld Bm durch 3 und Feld Ba durch 4):

$$\begin{array}{cccc}
 P_{11} = \frac{g_1}{10} & P_{22} = \frac{10 - g_1}{20 - g_2} & P_{33} = \frac{10 - g_2}{20 - g_1} & P_{44} = \frac{g_2}{10} \\
 P_{12} = 1 - \frac{g_1}{10} & P_{21} = \frac{g_1}{20 - g_2} & P_{23} = \frac{10 - g_2}{20 - g_2} & P_{32} = \frac{10 - g_1}{20 - g_1} \\
 & P_{34} = \frac{g_2}{20 - g_1} & P_{43} = 1 - \frac{g_2}{10} &
 \end{array}$$

Dabei sind die einzelnen Wahrscheinlichkeiten der Quotient aus der Feldgröße des Zielfeldes und der Summe des aktuellen Felds plus der benachbarten Felder. Der Pfeil mit der Beschriftung „ P_{11} “ gibt z. B. an, wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, dass ein Teilchen, welches sich in Feld Aa befindet, im nächsten Schritt sich immer noch in diesem Feld befinden wird. Diese Wahrscheinlichkeiten lassen sich in eine Matrix (Übergangsmatrix) $A = (a_{ij})$ mit $i, j \in \{1, 2, 3, 4\}$ übertragen. Hierbei steht

der Eintrag a_{ij} für die Wahrscheinlichkeit des Übergangs eines Teilchens von Zustand i in den Zustand j . Folglich ist die Übergangsmatrix für diesen Markov-Prozess wie folgt aufzustellen:

$$M(g_1, g_2) := \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & 0 & 0 \\ P_{21} & P_{22} & P_{23} & 0 \\ 0 & P_{32} & P_{33} & P_{34} \\ 0 & 0 & P_{43} & P_{44} \end{pmatrix}$$

Es handelt sich hier sogar um eine stochastische Matrix, da die Summe der Zeileinträge 1 ergibt. Die Definition aus der Literatur lautet:

„Sei $A = (a_{ij})$ eine Matrix mit reellen Einträgen a_{ij} vom Typ (n, n) .

Gilt $a_{ij} \geq 0$ für alle i, j und

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} = 1 \quad \text{für} \quad i = 1, \dots, n,$$

so heißt A eine *stochastische Matrix*.“²

Solch eine Matrix wird Übergangsmatrix genannt, weil durch Multiplikation mit dieser Matrix der Übergang in einen neuen Zustand des Prozesses erzeugt wird. Die Multiplikation (**) eines 4-stelligen Vektors mit der Matrix M spiegelt also einen Zeitschritt in dem Diffusionsmodell wieder.

$$(c_1, c_2, c_3, c_4) * \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & 0 & 0 \\ P_{21} & P_{22} & P_{23} & 0 \\ 0 & P_{32} & P_{33} & P_{34} \\ 0 & 0 & P_{43} & P_{44} \end{pmatrix} = (erg_1, erg_2, erg_3, erg_4) \quad (**)$$

Die einzelnen Positionen c_1, c_2, c_3 und c_4 des Vektors sind die Ausgangszahlen der Teilchen in den Feldern. Also c_1 Teilchen in Feld Aa, c_2 Teilchen in Feld Am, c_3 Teilchen in Feld Bm und c_4 Teilchen in Feld Ba. Der Ergebnisvektor $(erg_1, erg_2, erg_3, erg_4)$ gibt an, dass im darauf folgenden Zeitschritt in Feld Aa erg_1 , in Feld Am erg_2 , in Feld Bm erg_3 und in Feld Ba erg_4 Teilchen sich befinden.

Um den zeitlichen Verlauf der Diffusion durch diesen Markov-Prozess analysieren zu können, werden die durch den Markov-Prozess ermittelten Teilchenzahlen pro Zeitschritt wieder grafisch dargestellt. Wichtig ist, dass durch den Startvektor $s = (s_1, s_2, s_3, s_4)$ das Startfeld und die Teilchenanzahl bestimmt werden. Wird als

²F.-J. Fritz, B. Huppert, W. Willems [6] S. 1

Startfeld Aa gewählt, so muss an Position s_1 die gewünschte Startteilchenanzahl stehen und alle anderen Einträge des Vektors s müssen 0 sein (analog für Startfeld Ba und Position s_4). Um nun die Teilchenzahlen zum jeweiligen Zeitschritt zu ermitteln, wird der Startvektor, wie oben beschrieben, mit der Matrix M multipliziert. Man erhält die Teilchenverteilung für den Zeitschritt 1. Dieser Ergebnisvektor muss wieder mit der Matrix multipliziert werden, um die Teilchenverteilung für den darauffolgenden Zeitschritt zu erhalten. Dieser Prozess muss so oft durchgeführt werden, wie Zeitschritte untersucht werden sollen.

Hierzu folgt ein Beispiel mit dem Startvektor $(100, 0, 0, 0)$; es werden 100 Zeitschritte betrachtet. Die Feldgrößen werden mit $g_1 = 4$ und $g_2 = 7$ gesetzt, womit sich folgende Übergangsmatrix ergibt:

$$M(4, 7) = \begin{pmatrix} \frac{2}{5} & \frac{3}{5} & 0 & 0 \\ \frac{4}{13} & \frac{6}{13} & \frac{3}{13} & 0 \\ 0 & \frac{6}{16} & \frac{3}{16} & \frac{7}{16} \\ 0 & 0 & \frac{3}{10} & \frac{7}{10} \end{pmatrix}$$

In den Abbildungen 4.5 und 4.6 sind die berechneten Werte einmal für die Felder Aa, Am, Bm und Ba abgebildet sowie für die Bereiche A und B. Letztere werden berechnet, indem jeweils die ersten und letzten beiden Positionen der Vektoren addiert werden. Im direkten Vergleich sind auch die Werte aus der dazugehörigen Simulation mit den Simulationstools in den Grafiken zu sehen.

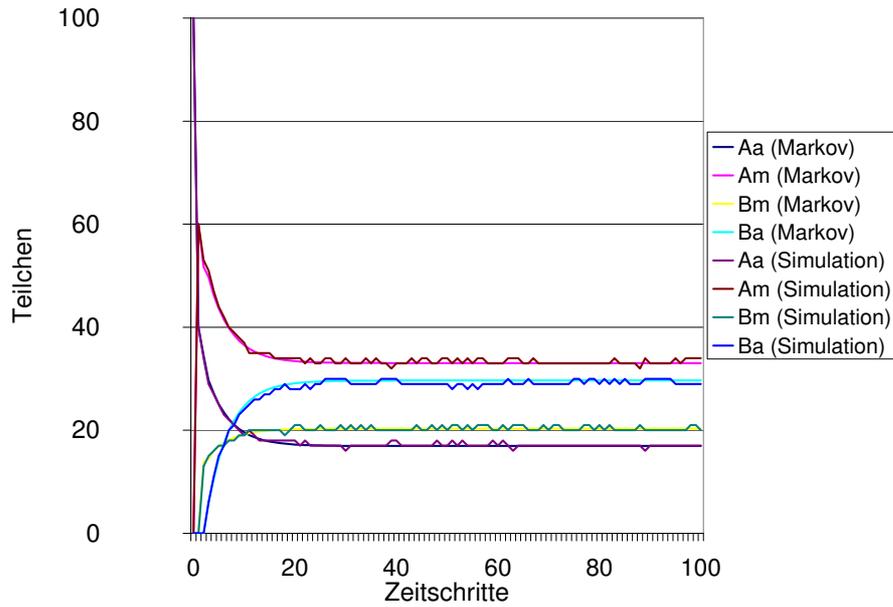


Abbildung 4.5: Ergebnis der Berechnung der Feldwerte mittels stochastischen Matrix und Simulationstool

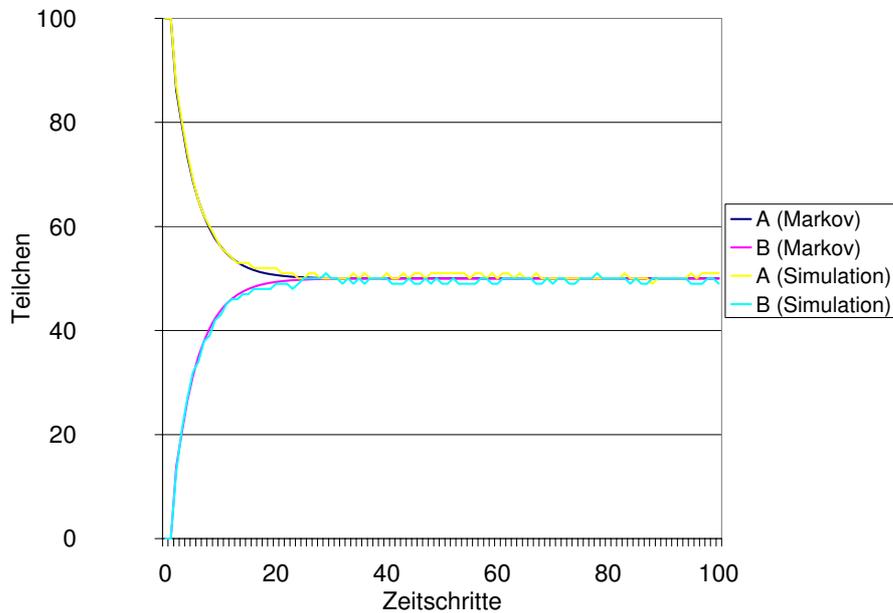


Abbildung 4.6: Ergebnis der Berechnung der Bereichswerte mittels stochastischen Matrix und Simulationstool

Die Unterschiede zwischen den berechneten Werten mit der stochastischen Matrix und den Simulationen sind in der Abbildung kaum erkennbar. Der Markov-Prozess zur Diffusion und das Simulationstool führen offensichtlich zu sehr ähnlichen Ergebnissen. Dies lässt vermuten, dass die Funktionsbeschreibungen für die Graphen der Bereich A und B wieder von der Form

$$f_A(t) = \frac{N}{2} \cdot e^{-b(t-1)} + \frac{N}{2}$$

bzw.

$$f_B(t) = -\frac{N}{2} \cdot e^{-b(t-1)} + \frac{N}{2}$$

sind. Es lässt sich jedoch nicht genau erkennen, ob die Variable b immer genau den gleichen Wert wie in der Tabelle 4.1 zum Simulationstool hat.

Es wird nun das gleiche Verfahren zur Bestimmung der Funktion für den Koeffizienten b wie oben (siehe S. 34/35) angewendet, und man erhält die folgende Tabelle der Werte für b :

Tabelle 4.2: Koeffizient b nach Markov

g_1/g_2	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	1,318	1,0586	0,8505	0,682	0,5394	0,4123	0,2993	0,1952	0,0964
2	1,0515	0,8913	0,7431	0,6099	0,4888	0,3798	0,2772	0,1818	0,0901
3	0,8442	0,7404	0,6361	0,5334	0,4352	0,3418	0,2523	0,1667	0,0829
4	0,6757	0,6061	0,5316	0,4537	0,3775	0,3005	0,2246	0,147	0,0751
5	0,534	0,4861	0,4334	0,3772	0,3176	0,2565	0,1941	0,1307	0,0661
6	0,409	0,3769	0,3399	0,2995	0,2561	0,2097	0,1608	0,1096	0,0561
7	0,2966	0,2751	0,2508	0,2236	0,1935	0,1606	0,1248	0,0862	0,0447
8	0,1952	0,1802	0,1654	0,1488	0,1301	0,1093	0,0861	0,0603	0,0317
9	0,0952	0,0891	0,0823	0,0745	0,0657	0,0558	0,0445	0,0317	0,0169

Anschließend ermittelt man wieder eine Funktionsvorschrift auf die gleiche Weise wie oben in Abhängigkeit von g_1 und g_2 . Man erhält:

$$b = (0,0168 \cdot g_1 - 0,1508) \cdot g_2 + (-0,1512 \cdot g_1 + 1,4105)$$

Zum Vergleich lautet die Funktionsvorschrift für b aus dem Simulationstool:

$$b = (0, 0177 \cdot g_1 - 0, 1591) \cdot g_2 + (-0, 1612 \cdot g_1 + 1, 4997)$$

Beide Funktionen sind sehr ähnlich.

4.3 Differenzgleichungen

Mit Hilfe der stochastischen Matrix M lassen sich jetzt Lösungen für eine geschlossene Darstellung der einzelnen Felder ermitteln.

Um eine Funktionsvorschrift in Abhängigkeit von t für die Graphen Aa, Am, Bm und Ba mit Variablen g_1, g_2 und N zu erhalten, gilt es, folgende Gleichung nach $x(t)$ zu lösen:

$$x(t+1) = M^t \cdot x(t) \text{ mit } x(0) = \text{Startvektor} \quad (1)$$

Es wurde bereits erläutert, dass die Multiplikation des Teilchenvektors mit der Matrix die Veränderung eines Zeitschrittes ausführt und der Ergebnisvektor die neue Teilchenverteilung angibt. Nun soll eine allgemeine Lösung der Gleichung (1) gefunden werden, also eine Lösung in Abhängigkeit von t . Die Matrix M wurde in der Gleichung (1) transponiert, um den Vektor $x(t)$ von rechts an die Matrix multiplizieren zu können. Diese Reihenfolge der Multiplikation ist die üblichere.

Die Gleichung (1) wird eine homogene lineare Differenzgleichung genannt. Hier eine allgemeine Definition:

„Vorab etwas Notation: Es sei $d \in \mathbb{Z}$. Dann setze

$$\mathbb{N}_d := \{k \in \mathbb{Z} : k \geq d\} = \{d, d+1, \dots\} \subseteq \mathbb{Z}$$

und zusätzlich $\mathbb{N}_{-\infty} = \mathbb{Z}$.“³

„...sei $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder \mathbb{C} . Für $t \in \mathbb{N}_d$ (d ganz oder $d = -\infty$) seien $A(t) \in \mathbb{K}^{n,n}$ und $b(t) \in \mathbb{K}^n$ gegeben. Wir betrachten im Folgenden die *lineare Differenzgleichung*

$$x(t+1) = A(t) \cdot x(t) + b(t) \quad \text{auf } \mathbb{K}^n. \quad (*)$$

Ist $b = 0$, so spricht man auch von einer homogenen linearen Differenzgleichung.“⁴

³S. Walcher [12] S. 3

⁴S. Walcher [12] S. 11

Ist die Matrix A nicht von t abhängig, so nennt man die Gleichung eine autonome Differenzgleichung.

Bei der Lösung einer solchen Differenzgleichung helfen die folgenden Propositionen.

Superpositionsprinzip:

- „(a) Es seien $b_1, b_2 : \mathbb{N}_d \rightarrow \mathbb{K}^n$ und $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{K}$. Weiter sei $t_0 \in \mathbb{N}_d$, und v_1 löse $x(t+1) = A(t)x(t) + b_1(t)$, v_2 löse $x(t+1) = A(t)x(t) + b_2(t)$ auf \mathbb{N}_{t_0} . Dann ist $\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 = (\alpha_1 v_1(t) + \alpha_2 v_2(t))_{t \geq t_0}$ eine Lösung der Differenzgleichung

$$x(t+1) = A(t)x(t) + (\alpha_1 b_1(t) + \alpha_2 b_2(t)).$$

- (b) Die Lösungen der homogenen Differenzgleichung $x(t+1) = A(t) \cdot x(t)$ auf \mathbb{N}_{t_0} bilden einen Vektorraum. Dieser Vektorraum hat Dimension n .“⁵

Proposition :

„Gegeben sei die autonome homogene Gleichung

$$x(t+1) = A \cdot x(t)$$

Der Ansatz $v(t) = c \cdot \lambda^{t-t_0}$ ($c \in \mathbb{K}^n \setminus \{0\}, \lambda \in \mathbb{K}$) liefert eine Lösung auf \mathbb{N}_{t_0} genau dann, wenn c Eigenvektor von A zum Eigenwert λ ist.

...

Hat also der \mathbb{K}^n eine Basis aus Eigenvektoren von A , so lässt sich auf diese Weise eine Basis für den Lösungsraum finden.“⁶

Die vorliegende Matrix M^t - unabhängig davon, wie die Grenzen gewählt wurden - besitzt immer 4 unterschiedliche Eigenwerte. Die zugehörigen Eigenvektoren bilden folglich eine Basis des \mathbb{K}^n .

Die allgemeine Lösung lautet dann für die verschiedenen Eigenwerte d_1, d_2, d_3 und d_4 mit Eigenvektoren $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ und λ_4

$$x(t) = \alpha_1 \cdot d_1 \cdot \lambda_1^t + \alpha_2 \cdot d_2 \cdot \lambda_2^t + \alpha_3 \cdot d_3 \cdot \lambda_3^t + \alpha_4 \cdot d_4 \cdot \lambda_4^t$$

⁵S. Walcher [12] S. 11

⁶S. Walcher [12] S. 11

mit Konstanten $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4 \in \mathbb{C}$ und $t_0 = 0$. Der Startvektor liefert die Konstanten $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ durch Einsetzen in die Gleichung.

Das folgende Beispiel zeigt den Lösungsweg noch einmal auf:

Die Felder Aa und Ba seien 5 Einheiten breit und es werden 100 Startteilchen auf Feld Aa verteilt; es ergibt sich die Differenzengleichung:

$$x(t+1) = B \cdot x(t) \quad \text{mit } B = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \text{und } x(0) = \begin{pmatrix} 100 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Sie ist folgendermaßen zu lösen.

Zuerst werden die Eigenwerte von B berechnet. Diese sind:

$$d_1 = 1,$$

$$d_2 = \frac{1}{6},$$

$$d_3 = \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{33}}{12},$$

$$d_4 = \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{33}}{12}$$

Es gibt mehrere mögliche Eigenvektoren zu diesen Eigenwerten, da die Eigenvektoren abhängig von einer Konstanten sind. Die Konstante wurde hier mit 1 belegt, wodurch folgende Eigenvektoren entstehen:

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{3}{2} \\ \frac{3}{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{3}{4} + \frac{3}{4}\sqrt{33} \\ \frac{3}{4} - \frac{3}{4}\sqrt{33} \\ -1 \end{pmatrix} \quad \lambda_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{3}{4} - \frac{3}{4}\sqrt{33} \\ \frac{3}{4} + \frac{3}{4}\sqrt{33} \\ -1 \end{pmatrix}$$

Die allgemeine Lösung lautet dann:

$$x(t) = \alpha_1 \cdot 1^t \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{3}{2} \\ \frac{3}{2} \\ 1 \end{pmatrix} + \alpha_2 \cdot \left(\frac{1}{6}\right)^t \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} + \alpha_3 \cdot \left(\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{33}}{12}\right)^t \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{3}{4} + \frac{3}{4}\sqrt{33} \\ \frac{3}{4} - \frac{3}{4}\sqrt{33} \\ -1 \end{pmatrix} \\ + \alpha_4 \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{33}}{12}\right)^t \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{3}{4} - \frac{3}{4}\sqrt{33} \\ \frac{3}{4} + \frac{3}{4}\sqrt{33} \\ -1 \end{pmatrix}$$

mit Konstanten $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4 \in \mathbb{C}$.

Die Anfangsbedingung liefert

$$\begin{aligned} x(0) &= \alpha_1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{3}{2} \\ \frac{3}{2} \\ 1 \end{pmatrix} + \alpha_2 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} + \alpha_3 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{3}{4} + \frac{3}{4}\sqrt{33} \\ \frac{3}{4} - \frac{3}{4}\sqrt{33} \\ -1 \end{pmatrix} + \alpha_4 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{3}{4} - \frac{3}{4}\sqrt{33} \\ \frac{3}{4} + \frac{3}{4}\sqrt{33} \\ -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 100 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \alpha_1 = 20, \alpha_2 = 30, \alpha_3 = -25 - \frac{25\sqrt{33}}{11}, \alpha_4 = -25 + \frac{25\sqrt{33}}{11}$$

Die erste Komponente der Lösung, die Funktionsvorschrift für den Graphen Aa, ist also:

$$f_{Aa}(t) = 20 + 30 \cdot \left(\frac{1}{6}\right)^t + \left(-25 - \frac{25\sqrt{33}}{11}\right) \cdot \left(\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{33}}{12}\right)^t + \left(-25 + \frac{25\sqrt{33}}{11}\right) \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{33}}{12}\right)^t$$

Genauso lassen sich auch die Funktionsvorschriften der Graphen für Feld Am, Bm und Ba ablesen.

$$\begin{aligned} f_{Am}(t) &= 20 \cdot \frac{3}{2} - 30 \cdot \left(\frac{1}{6}\right)^t + \left(-25 - \frac{25\sqrt{33}}{11}\right) \cdot \left(\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{33}}{12}\right)^t \cdot \left(-\frac{3}{4} + \frac{3}{4}\sqrt{33}\right) \\ &\quad + \left(-25 + \frac{25\sqrt{33}}{11}\right) \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{33}}{12}\right)^t \cdot \left(-\frac{3}{4} - \frac{3}{4}\sqrt{33}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_{Bm}(t) &= 20 \cdot \frac{3}{2} - 30 \cdot \left(\frac{1}{6}\right)^t + \left(-25 - \frac{25\sqrt{33}}{11}\right) \cdot \left(\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{33}}{12}\right)^t \cdot \left(\frac{3}{4} - \frac{3}{4}\sqrt{33}\right) \\ &\quad + \left(-25 + \frac{25\sqrt{33}}{11}\right) \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{33}}{12}\right)^t \cdot \left(\frac{3}{4} + \frac{3}{4}\sqrt{33}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_{Ba}(t) &= 20 + 30 \cdot \left(\frac{1}{6}\right)^t - \left(-25 - \frac{25\sqrt{33}}{11}\right) \cdot \left(\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{33}}{12}\right)^t \\ &\quad - \left(-25 + \frac{25\sqrt{33}}{11}\right) \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{33}}{12}\right)^t \end{aligned}$$

Als Graphen gezeichnet sehen diese Funktionen folgendermaßen aus:

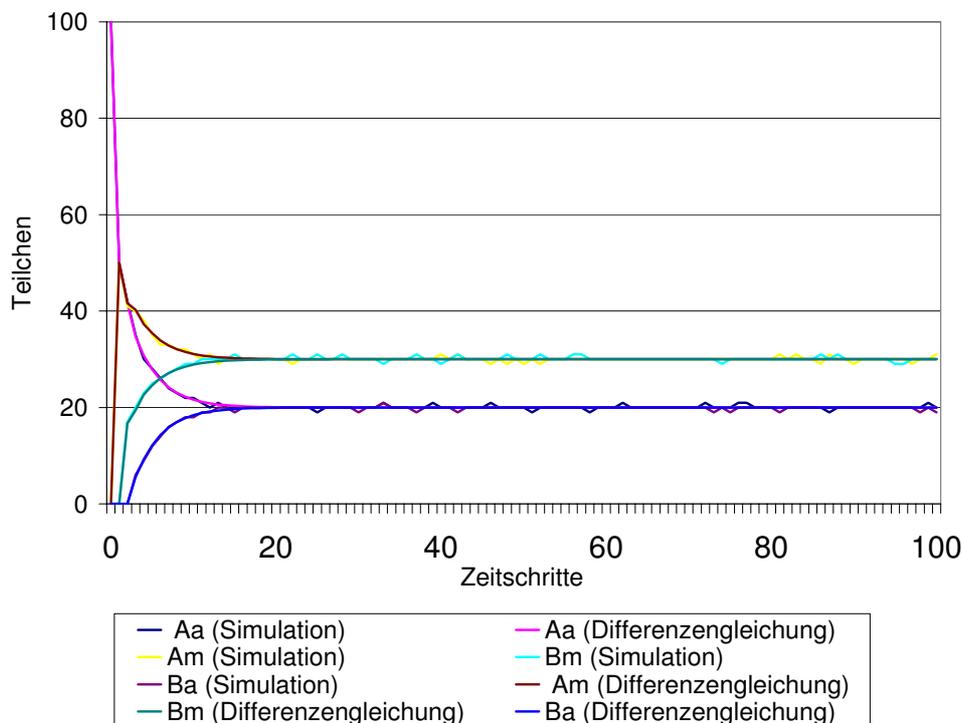


Abbildung 4.7: Graphen nach Differenzgleichungen und Simulationstool

Auch hier wurde wieder die entsprechende Simulation zum Vergleich mit in die Grafik eingefügt, um zu zeigen, wie ähnlich die Graphen sind.

Auf diese Weise lässt sich also auch eine Funktionsvorschrift für die Graphen Aa, Am, Bm und Ba finden.

Es lassen sich sowohl für die Graphen der Bereiche A und B als auch für die Felder Aa, Am, Bm und Ba Funktionsvorschriften finden, wenn auch durch unterschiedliche Herleitungen. Somit kann der zeitliche Verlauf des Diffusionsprozesses nach dem entwickelten Konzeptmodell auch durch eine rein mathematische Vorgehensweise ermittelt werden. Diffusion kann also durch die Werte aus den Simulationsergebnissen dargestellt werden, zu dessen Verlauf sogar Funktionen für A und B aus den Werten der Simulationen entwickelt wurden. Außerdem konnten mit Hilfe eines Markov-Prozesses sehr ähnliche Funktionen entwickelt werden. Anhand von Differenzgleichungen war es sogar möglich, Funktionsvorschriften für die Felder Aa, Am, Bm, Ba zu entwickeln.

Im Anschluss soll kurz an einem Beispielen gezeigt werden, dass bei sehr unterschiedlichen Feldgrößen Simulation und Funktionale Darstellung für die Bereiche A

und B erheblich voneinander abweichen können.

Vergleich für die Funktionen A und B:

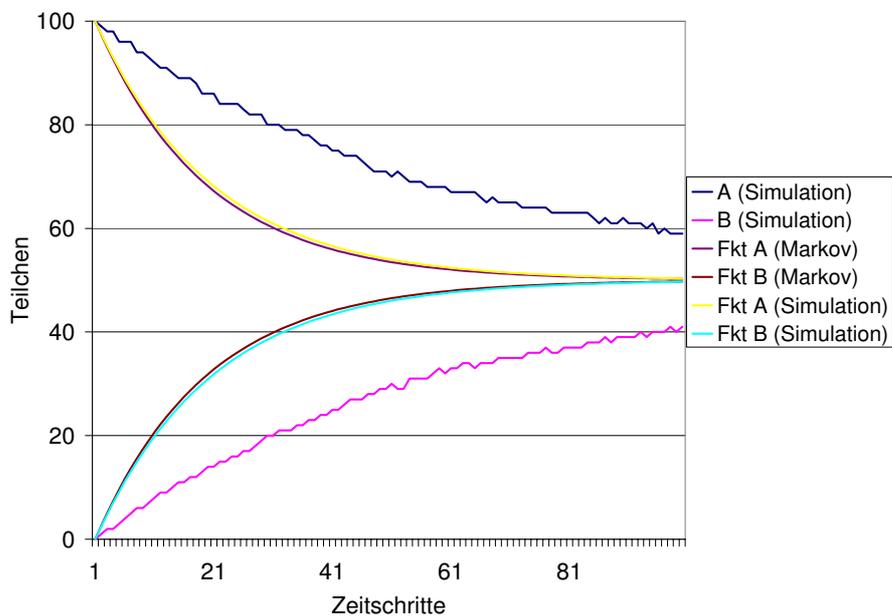
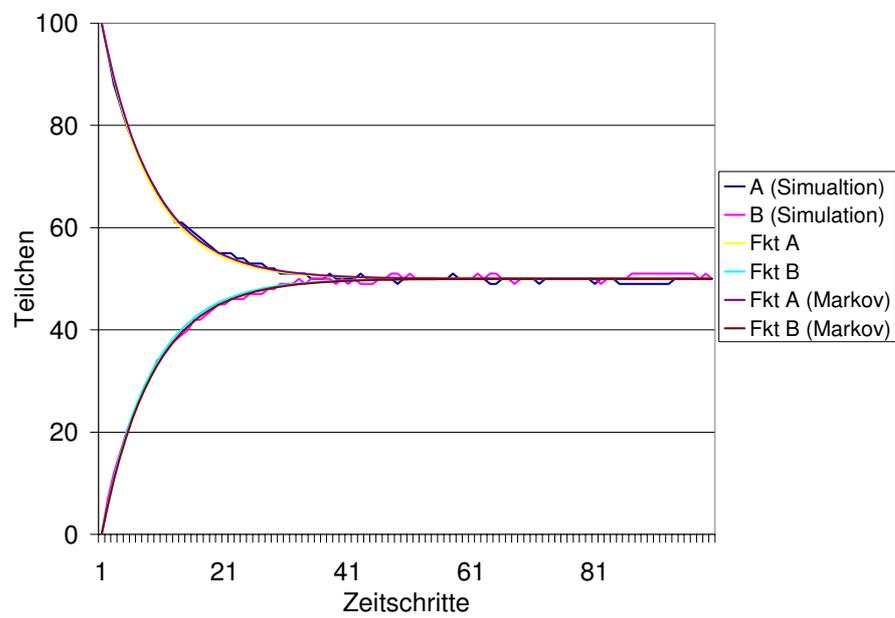


Abbildung 4.8: Vergleich für $g_1 = 9, g_2 = 9, N = 100$

Dies liegt daran, dass die ermittelten Funktionen nur Annäherungen durch lineare Regressionsgeraden waren. Diese Annäherungen waren zwar sehr gut, wie an den Bestimmtheitsmaßen R^2 zu sehen war, aber gerade bei extremen Werten für die Feldgrößen, ist die Abweichung zwischen Simulation und abgeleiteten Funktionen zu erkennen. Die entwickelten Funktionen beschreiben also den Verlauf der Simulation nur in einem bestimmten Bereich der Feldgrößen zuverlässig.

Bei nicht so extremen Werten geben die Funktionen aber eine realistische Beschreibung der Simulationsergebnisse (s. Abb. 4.9).

Abbildung 4.9: Vergleich für $g_1 = 7$, $g_2 = 7$, $N = 100$

Kapitel 5

Umsetzung in der Schule

Auch in der Schule hat die Vermittlung des Diffusionsprozesses als elementarer biochemischer Vorgang einen hohen Stellenwert in den Naturwissenschaften. Um ihn zu verstehen, bedarf es der Kombination der Fachgebiete der Physik, Chemie und Biologie. Die Gesetze der Thermodynamik, die Brown'sche Molekularbewegung und die Funktionsweise von Membranen bilden die Grundlage zum Verständnis der Diffusion. So wird der Diffusionsprozess in seinen Grundzügen bereits in der Mittelstufe im Biologieunterricht behandelt und später in der Oberstufe sowohl in Chemie als auch in Biologie (hier dann insbesondere Diffusion durch Membrane) vertieft¹.

Das Thema beschränkt sich jedoch nicht allein auf die klassischen Naturwissenschaften, sondern kann auch Grundlage mathematischer Aufgabenstellung sein (etwa als Anwendungsbeispiel für Stochastik). So bietet sich das Thema Diffusion besonders an, um stochastische Matrizen bzw. Übergangsmatrizen und somit auch Markov-Prozesse im Mathematikunterricht der Oberstufe einzuführen.

Nach den neuen Kernlehrplänen für das Fach Mathematik in NRW (Sekundarstufe I) sind sowohl Modellierung als auch das Themengebiet Stochastik Teil der fachbezogenen Kompetenzen, die zu den Aufgaben und Zielen des Mathematikunterrichts gehören. Wenn die Schüler dann in die Oberstufe kommen, sollten Grundkenntnisse über Modellierung und Stochastik vorhanden sein, die weiter vertieft werden könnten.

Nach oder während der Erarbeitung des Themas Diffusion im Biologie- oder Chemieunterricht der Oberstufe, ließe sich dieser Vorgang auch im Mathematikunterricht aus einer anderen Perspektive betrachten, nämlich durch mathematische Modellierung. Wichtige Voraussetzung für die mathematische Betrachtung des Problems ist

¹siehe Lehrpläne [10] und [9]

die spezifische Analogisierung zwischen dem Vorgang in der Natur und der mathematischen Entsprechung. Zu diesem Zwecke wurde das Konzeptmodell entwickelt, mit dem versucht wird, einen möglichst authentischen Zusammenhang zwischen Diffusionsprozess und mathematischer Beschreibung herzustellen. Wie eingangs erläutert, beschränkt sich die mathematische Betrachtung dieses Konzeptmodells auf die Abhängigkeit der Verteilung der Teilchen von der Membrandicke (s. Kap. 2).

Nach Festlegung der Rahmenbedingungen (Diffusionsraum, zu untersuchende Parameter, etc.) gilt es, eine mathematische Entsprechung für die Teilchenbewegung zu formulieren. Hierzu ist es hilfreich, zunächst eine grafische Formulierung des Prozesses der möglichen Teilchenbewegung zu erarbeiten (s. Abb. 4.4). An diesem Punkt bedient man sich erster stochastischer Mittel, da die Teilchenbewegung ungerichtet und zufällig ist und somit Wahrscheinlichkeiten für die Übergänge berechnet werden müssen. Durch die grafische Aufbereitung der Problemstellung lässt sich der Prozess immer weiter formalisieren. Die ausführliche Vorgehensweise zur Beschreibung der Teilchenbewegung wurde in Kapitel 4 dargelegt. Einzig das Aufstellen einer Übergangsmatrix bedarf weiterer Erklärung, da dies mit der Modellierung des Diffusionsprozesses erst erlernt werden soll. Sind die Einzelwahrscheinlichkeiten für die Bewegung eines Teilchens in einer Matrix zusammengefasst (s. Seite 41/42), kann der Begriff der Übergangsmatrix eingeführt werden. Durch die Multiplikation der Matrix mit einem Vektor, der einen Zustand angibt, wird ein neuer Zustand berechnet. Im vorliegenden Modell wird die Wahrscheinlichkeit der Teilchenbewegung (Übergangsmatrix) mit der aktuellen Teilchenverteilung (Ausgangsvektor) multipliziert und man erhält als Ergebnis die Teilchenverteilung nach einem Zeitschritt (Ergebnisvektor). Da die Anwendung einer Übergangsmatrix auch ein Markov-Prozess ist, lässt sich damit dieser Begriff auf verständliche und unkomplizierte Weise einführen. Durch diese Herangehensweise wird ein spezieller mathematischer Prozess anschaulich dargestellt, ohne dass abstrakte Erklärungen und komplizierte Formalismen benötigt werden. Am Ende einer solchen Unterrichtseinheit, in deren Kern die verständliche Modellierung eines Naturprozesses mit Hilfe mathematischer Instrumente steht, wird die häufig trockene Definition und Formalisierung eines mathematischen Prozesses in anwendbares Wissen integriert.

Sind Markov-Prozesse bereits bekannt, bieten Schulbücher die Möglichkeit, mit vorgegebenen Aufgaben die Diffusion als Anwendungsbeispiel für Markov-Prozesse zu verwenden.

Im Folgenden wird eine Aufgabe aus einem Mathematikbuch für den Grundkurs in

der Oberstufe vorgestellt ²:

„Zwei mit Wasser gefüllte Glaskammern sind durch ein trichterförmiges Loch verbunden und werden in Minutenabständen beobachtet. In die linke Kammer werden am Anfang 30000 Einzeller gesetzt, die danach in zufällig gewählten Richtungen umherschwimmen. Am Anfang ist jeder Einzeller mit der Wahrscheinlichkeit 1 in der linken und mit der Wahrscheinlichkeit 0 in der rechten Kammer zu finden.

In Fig. 3 ist für einen einzelnen Einzeller angegeben, mit welcher Wahrscheinlichkeit er von einer Minute zur nächsten aus seine jeweiligen Kammer in die andere wechselt.

- (a) Geben Sie die Übergangsmatrix P für einen Einzeller an und berechnen Sie seine Aufenthaltswahrscheinlichkeiten q_1 und q_2 in den Kammern (1) und (2) nach 1, 2 und 3 Minuten.
- (b) Bestimmen Sie eine Wahrscheinlichkeitsverteilung \vec{s} für q_1 und q_2 , die sich von Beobachtung zu Beobachtung reproduziert. Berechnen Sie damit, wie viele Einzeller nach langer Beobachtungszeit jeweils in (1) und (2) zu erwarten sind.“

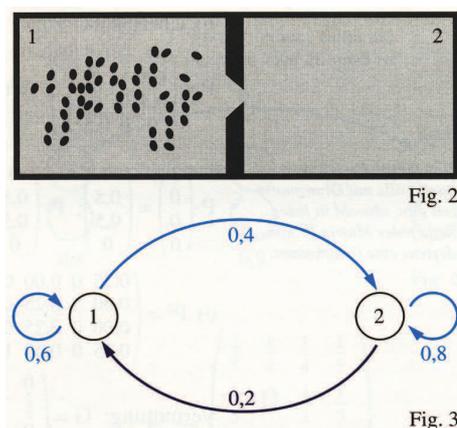


Abbildung 5.1: Abbildung zur Schulaufgabe aus dem Schulbuch

Für ein Schulcurriculum böte es sich auch an, das Thema Diffusion fächerverbindend so zu synchronisieren, dass zunächst im Biologie- und Chemieunterricht (evtl.

²siehe [1] S. 181

auch im Physikunterricht) die naturwissenschaftlichen Grundlagen einfacher Diffusion und der Diffusion durch Membrane erarbeitet werden. Ist dies erfolgt, könnten sich im Mathematikunterricht die Entwicklung eines Konzeptmodells sowie die mathematische Beschreibung der Diffusion mit Hilfe von stochastischen Matrizen bzw. Übergangsmatrizen anschließen. Durch einen solchen interdisziplinären Ansatz würde nicht nur ein Brückenschlag zwischen den Fächern erfolgen, sondern vielmehr auch das Verständnis der Schüler durch eine Betrachtung des Problems aus möglichst vielen verschiedenen Perspektiven gefördert.

Kapitel 6

Fazit

In der vorliegenden Arbeit wurde am Beispiel des Diffusionsprozesses ein Modell entwickelt, das anschließend simuliert und analysiert wurde. Nach Klärung der Grundlagen zur Modellierung und Diffusion konnte das Modell unter Berücksichtigung der notwendigen Reduktion bei gleichzeitiger Wahrung der Realitätsentsprechung erstellt werden. Im konkreten Fall galt es, die Permeabilität einer Membran auf dem Wege der mathematischen Modellierung zu untersuchen. Die hierzu entwickelten Simulationstools machten es möglich, den Prozess zu veranschaulichen. Darüber hinaus boten sie die Möglichkeit, das Langzeitverhalten grafisch darzustellen. Die vom Simulationstool zum Langzeitverhalten ausgegebenen Graphen ließen bereits erste Beobachtungen und Vermutungen zu und es war zu erkennen, dass mit steigender Permeabilität der Membran, also je größer die mittleren Felder (A_m , B_m) gewählt wurden, die Teilchenverteilung schneller den Gleichgewichtszustand erreichten. Das bedeutet, die Diffusionsrate nimmt mit steigender Permeabilität der Membran zu. Im weiteren Verlauf der Arbeit wurde gezeigt, dass die Graphen, die vom Simulationstool zum Langzeitverhalten ausgegeben wurden, durch Funktionen beschrieben werden können. Für die Bereiche A und B ließen sich die freien Parameter dieser Funktionen mit Hilfe von Regressionsgeraden ermitteln. Eine alternative Herangehensweise über Markov-Prozesse lieferte nahezu identische Resultate und bestätigte somit die Ergebnisse des Simulationstools. Für die Felder A_a , A_m , B_m und B_a musste eine alternative Funktionsbeschreibung gefunden werden, da die Annäherung mit Hilfe von Regressionsgeraden keine verwertbaren Ergebnisse lieferte. Darauf wurden Differenzgleichungen mit ihren Lösungsstrategien zu Hilfe genommen, die schließlich eine adäquate Funktionsvorschrift lieferten. Der durch das Konzeptmodell beschriebene Diffusionsprozess lässt sich also sowohl auf dem Weg der Simulation als

auch mit Hilfe eines Markov-Prozesses beschreiben.

Die Diffusion ist ein Vorgang, der in der Natur vielen Randbedingungen und Einflüssen unterliegt. Bei jeder Art der mathematischen Modellierung eines Vorgangs in der Natur muss berücksichtigt werden, dass ein gewisser Grad an Reduktion unausweichlich und notwendig ist, um das Problem „handhabbar“ zu machen. D.h. es müssen aus den im Prinzip unendlich vielen Einflüssen die Wesentlichen (die Leitparameter) herausgefiltert werden und in die mathematische Beschreibung einfließen. Dadurch wird ein Prozess, je nach dem, wie weit man ihn auf seine elementaren Strukturen reduziert, immer einfacher zu berechnen oder darzustellen sein. Im Umkehrschluss bedeutet dies jedoch meist, dass die Übertragbarkeit der mathematisch ermittelten Ergebnisse auf den eigentlichen Naturprozess schwieriger wird, da mit zunehmender Reduktion zugleich die Anwendungsgrenzen eingeschränkt werden.

Dies trifft auch für das vorliegende Modell zu. Zur Modellierung der Abhängigkeit der Diffusionsrate von der Permeabilität der Membran mussten eine Reihe von Parametern unberücksichtigt bleiben. Die erhaltenen Ergebnisse erheben daher nicht den Anspruch auf Kongruenz mit dem natürlichen Prozess, sondern wollen modellhaft die Auswirkung der Veränderung eines bestimmten Parameters der Diffusion (Permeabilität der Membran) verdeutlichen. Dennoch erlaubt das hier entwickelte Modell einen vertieften Einblick in die Teilchenbewegung in einem von einer permeablen Membran geteilten, flüssigkeitsgefüllten Diffusionsraum. Das der Diffusion zugrunde liegende Prinzip der Teilchenbewegung wird klar herausgearbeitet und lässt Rückschlüsse auf den natürlichen Prozess zu.

Bei der Verwendung eines solchen Modells in der Schule ist es von besonderer Bedeutung, die Eigenschaften eines Modells an sich und die damit verbundenen Vor- und Nachteile der Reduktion eines Prozesses auf seine elementaren Eigenschaften anzusprechen. Die Analogisierung zwischen Modell und der Wirklichkeit und der anschließende Abgleich der gefundenen Ergebnisse mit dem beobachteten Vorgang auf den eigentlichen Prozess sind unabdingbar für einen professionellen Umgang mit Modellen.

Bildquellen

- **Abbildung 5.1:**
aus **Baum, M.; Lind, D.; Schermuly, H.; Weidig, I.; Zimmermann, P.:**
Lineare Algebra mit analytischer Geometrie - Grundkurs. Ernst Klett Verlag:
Stuttgart 2000 , S. 181

Literaturverzeichnis

- [1] **Baum, M.; Lind, D.; Schermuly, H.; Weidig, I.; Zimmermann, P.:** *Lineare Algebra mit analytischer Geometrie - Grundkurs*. Ernst Klett Verlag: Stuttgart 2000
- [2] **Bryson, B.:** *Eine kurze Geschichte von fast allem*. Goldmann: München 2005
- [3] **Eckert, R.:** *Tierphysiologie*. 4., durchgesehene Auflage. Thieme: Stuttgart 2002
- [4] **Elaydi, S. N.:** *An Introduction to difference Equations*. Springer-Verlag: New York 1996
- [5] **Faller, A.; Schünke, S.** *Der Körper des Menschen*. 14. aktualisierte Auflage. Thieme: Stuttgart 2004
- [6] **Fritz, F.-J.; Huppert, B.; Willems, W.:** *Stochastische Matrizen*: Springer-Verlag 1979
- [7] **Gotzen, B.:** *Elementare Wege zur mathematischen Modellierung: Fallbeispiele aus Biowissenschaften und Chemie*. Dissertation: RWTH-Aachen 2006
- [8] **Ministerium für Schule, Jugend und Kinder des Landes Nordrhein-Westfalen** *Kernlehrplan für das Gymnasium- Sekundarstufe I, Mathematik*. Ritterbach Verlag: Frechen 2004
- [9] **Ministerium für Schule und Weiterbildung, Wissenschaft und Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen** *Richtlinien und Lehrpläne für die Sekundarstufe II - Gymnasium/Gesamtschule in NRW, Biologie*. Ritterbach Verlag: Frechen 1999
- [10] **Ministerium für Schule und Weiterbildung, Wissenschaft und Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen** *Richtlinien und Lehrpläne für die*

Sekundarstufe I - Gesamtschule in NRW, Naturwissenschaften Physik, Chemie, Biologie. Ritterbach Verlag: Frechen, 1999

- [11] **Taiz, L.; Zeiger, E.** *Physiologie der Pflanzen.* Spektrum: Heidelberg 2000
- [12] **Walcher, S.** *Dynamische Systeme und Modellierung.* Skript: RWTH-Aachen 2003
- [13] **Waldmann, K.-H.**: *Simulation I,II.* Skript: Universität Karlsruhe 2004

Abbildungsverzeichnis

1.1	Diffusionsvorgang einer gelösten Substanz	6
2.1	Konzeptmodell	9
3.1	Screenshot des Kästchenmodells zur Diffusion	13
3.2	Screenshot des Simulationstools zum Langzeitverhalten	15
3.3	Schritt 0, Kästchentool mit Teilchen in Feld Aa	18
3.4	Schritt 1, Kästchentool mit Teilchen in Feld Aa und Am	19
3.5	Schritt 2, Kästchentool mit Teilchen in Bereich A und Feld Bm	19
3.6	Schritt 3, Kästchentool mit Teilchen in allen Feldern	20
3.7	Tool zum Langzeitverhalten $N = 100, g_1 = 5, g_2 = 5, t = 100,$ $s = 100$, Startfeld Aa	21
3.8	Tool zum Langzeitverhalten mit $N = 100, g_1 = 5, g_2 = 5, t = 100,$ $s = 100$, Startfeld Ba	22
3.9	Graphen für die Felder, $N = 100, g_1 = 2, g_2 = 4, t = 100,$ $s = 100$, Startfeld Aa	23
3.10	Graphen für die Felder, $N = 100, g_1 = 4, g_2 = 2, t = 100,$ $s = 100$, Startfeld Ba	23
3.11	Graphen für Bereiche A und B, $N=100, g_1 = 5, g_2 = 5, t = 100, s =$ 100 , Startfeld Aa	24
3.12	$N = 100, g_1 = 8, g_2 = 3, t = 100, s = 100$, Startfeld Aa	25
3.13	$N = 100, g_1 = 3, g_2 = 8, t = 100, s = 100$, Startfeld Ba	25
3.14	Änderung der Simulationsanzahl $N = 100, g_1 = 4, g_2 = 7, t = 100, s$ $= 1$	26
3.15	Änderung der Simulationsanzahl $N = 100, g_1 = 4, g_2 = 7, t = 100, s$ $= 10$	27
3.16	Änderung der Simulationsanzahl $N = 100, g_1 = 4, g_2 = 7, t = 100, s$ $= 100$	27

3.17 Änderung der Teilchenanzahl $N = 30$, $g_1 = 5$, $g_2 = 5$,
 $t = 100$, $s = 100$ 28

3.18 Änderung der Teilchenanzahl $N = 80$, $g_1 = 5$, $g_2 = 5$,
 $t = 100$, $s = 100$ 29

3.19 Änderung der Teilchenanzahl $N = 100$, $g_1 = 5$, $g_2 = 5$,
 $t = 100$, $s = 100$ 29

3.20 Änderung Teilfeldgrößen $N = 100$, $g_1 = 1$, $g_2 = 2$,
 $t = 100$, $s = 100$ 30

3.21 Änderung der Teilfeldgrößen $N = 100$, $g_1 = 7$, $g_2 = 8$,
 $t = 100$, $s = 100$ 31

4.1 Linearisierung des Koeffizienten b der Funktion für f_A 34

4.2 Funktionen mit Regressionsgeraden 36

4.3 Werte und Regressionsgeraden für z_1 und z_2 37

4.4 Grafische Darstellung des Markov-Prozesses 40

4.5 Ergebnis der Berechnung der Feldwerte mittels stochastischen Matrix
 und Simulationstool 43

4.6 Ergebnis der Berechnung der Bereichswerte mittels stochastischen
 Matrix und Simulationstool 43

4.7 Graphen nach Differenzgleichungen und Simulationstool 49

4.8 Vergleich für $g_1 = 9$, $g_2 = 9$, $N = 100$ 50

4.9 Vergleich für $g_1 = 7$, $g_2 = 7$, $N = 100$ 51

5.1 Abbildung zur Schulaufgabe aus dem Schulbuch 54

Tabellenverzeichnis

4.1	Variable b in Abhängigkeit von g_1 und g_2	35
4.2	Koeffizient b nach Markov	44

Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere, dass ich die schriftliche Hausarbeit - einschließlich beigefügter Zeichnungen, Kartenskizzen und Darstellungen - selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe. Alle Stellen der Arbeit, die dem Wortlaut oder dem Sinne nach anderen Werken entnommen sind, habe ich in jedem einzelnen Fall unter Angabe der Quelle deutlich als Entlehnung kenntlich gemacht.

Aachen, den 24. Juli 2006