



HECTOR SEMINAR



Wie Muscheln sich in Schale werfen

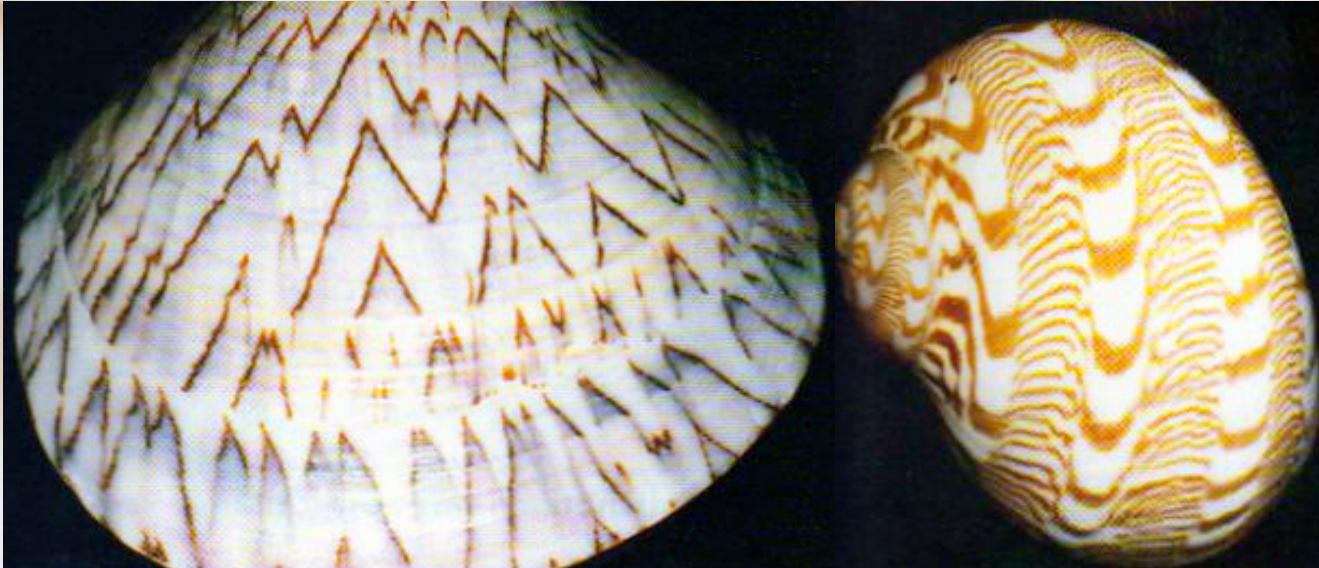
Ein Vortrag von Jannis Schnitzer und
Nico Ritschel

Mannheim, 25. 11. 2009

Gliederung

- Einführung in das Thema
- Mathematische Überlegungen
- Unsere Vorgehensweise
- Muschelmuster im Detail
- Weitere Anwendungsmöglichkeiten

Einführung in das Thema



- Fragestellung: Sind Muster auf Muschelschalen mathematisch berechenbar?
- Vorlage: Gleichnamiges Buch von Hans Meinhardt

Einführung in das Thema

- Wie entstehen überhaupt Muster auf Muscheln?
 - Muschelschalen wachsen an einer Kante
 - Aktivator-Substanz löst Pigment-Bildung aus
 - Je höher die Aktivator-Konzentration, desto dunkler die Schale
 - Inhibitor-Substanz sorgt für verlangsamten Aufbau oder Abbau des Aktivators
 - Schale wird wieder heller
 - Durch langsamen, natürlichen Abbau beider Substanzen entsteht ein zyklischer Farbwechsel

Mathematische Überlegungen

- Wachstum von Aktivator und Inhibitor kann durch Differenzialgleichungen ausgedrückt werden
- Gleichungen können nicht analytisch gelöst werden
- Ergebnis kann schrittweise ermittelt werden
 - Hierzu ist das Euler-Verfahren die einfachste Methode

Mathematische Überlegungen

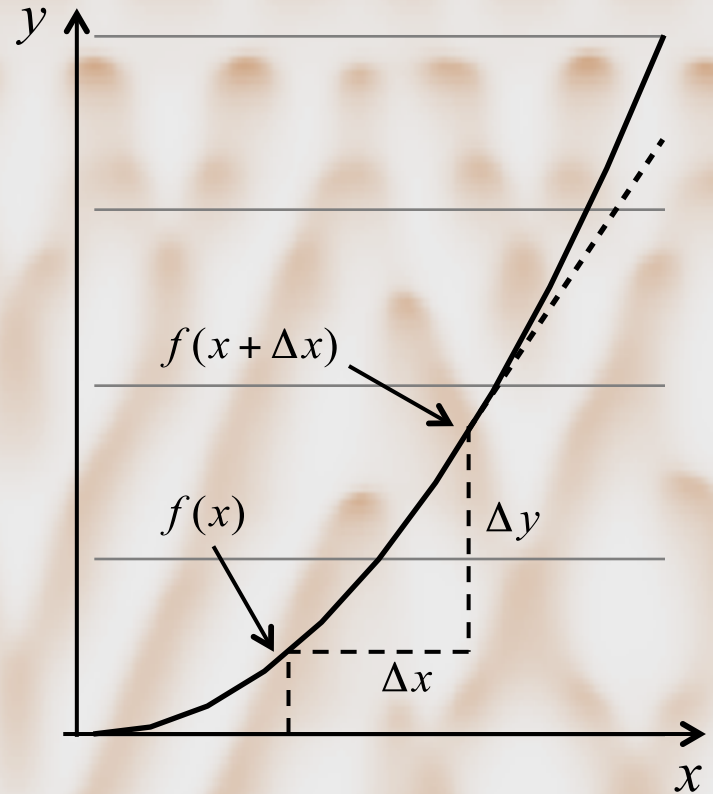
Das Euler-Verfahren:

- Grundlage:

$$f(x + \Delta x) \approx f(x) + \Delta x \cdot f'(x)$$

- Ableitung nach der Zeit:

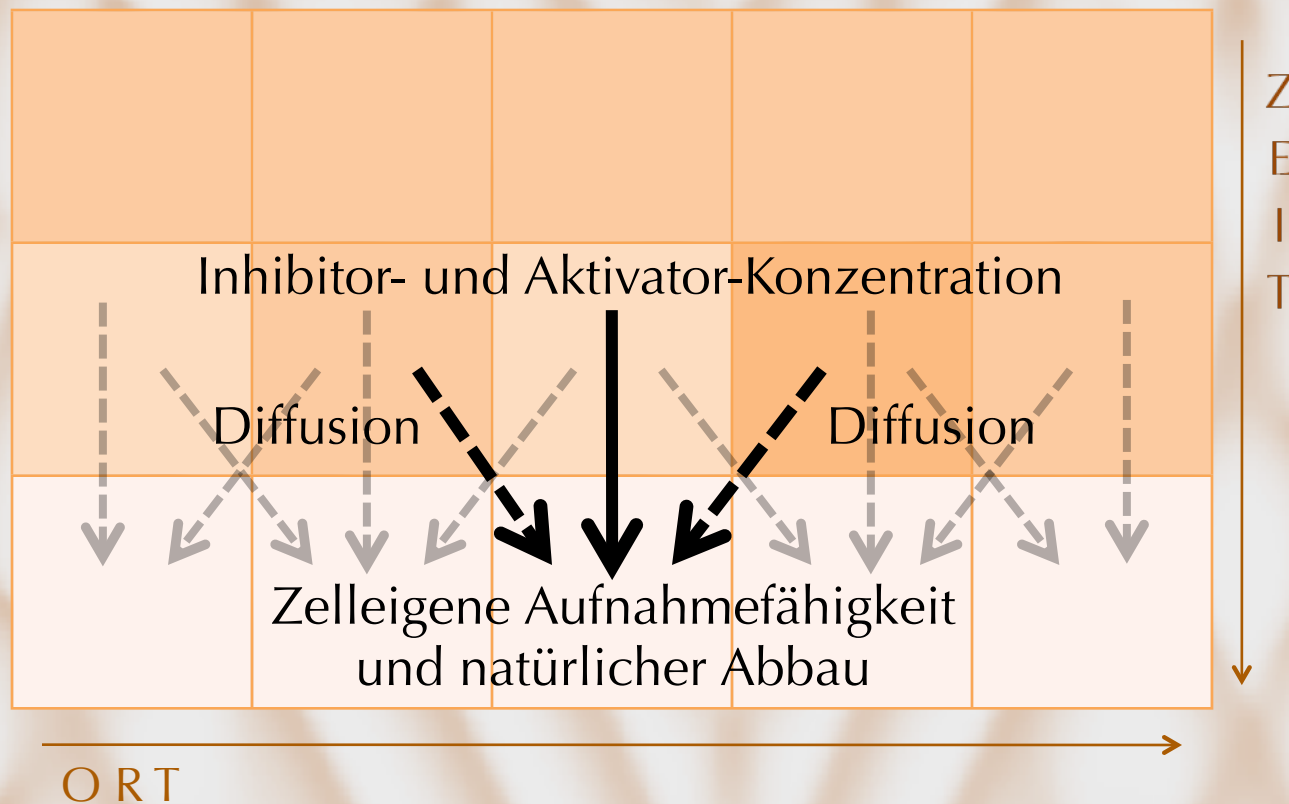
$$a_{t+\Delta t} \approx a_t + \Delta t \frac{\partial a_t}{\partial t}$$



- Große Schrittweite führt zu Ungenauigkeit

Mathematische Überlegungen

- Wie errechnet sich die Aktivator-Konzentration?



Mathematische Überlegungen

- Beispielrechnung ohne Diffusion ($\Delta t = 1$):
 - Aktivator:

$$a_0 = 1 \quad b_0 = 1 \quad r_a = 0,5 \quad b_a = 0,1 \quad s = 0,9$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_0}{\partial t} &= s \cdot \left(\frac{a_0^2}{b_0} + b_a \right) - r_a a_0 \\ &= 0,9 \cdot (1 + 0,1) - 0,5 \\ &= 0,49 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_1 &= a_0 + \frac{\partial a_0}{\partial t} \\ &= 1 + 0,49 \\ &= 1,49 \end{aligned}$$

Mathematische Überlegungen

– Inhibitor:

$$a_0 = 1 \quad b_0 = 1 \quad r_b = 0,5 \quad b_b = 0,1 \quad s = 0,9$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial b_0}{\partial t} &= sa_0^2 + b_b - r_b b_0 \\ &= 0,9 + 0,1 - 0,5 \\ &= 0,5 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_1 &= b_0 + \frac{\partial b_0}{\partial t} \\ &= 1 + 0,5 \\ &= 1,5 \end{aligned}$$

Mathematische Überlegungen

- Ergebnisse lassen sich in je eine Tabelle eintragen

- Aktivator:

Z	0	1,0
E	1	1,5
I	2	1,8
T	3	1,3
	4	0,9

- Inhibitor:

Z	0	1,0
E	1	1,2
I	2	1,5
T	3	2,0
	4	1,1

Mathematische Überlegungen

- Bisherige Rechnungen berücksichtigen nur die Zeit
- Muschelschalen haben auch eine Ortsdimension
- Die Werte lassen sich in einer Tabelle darstellen

		O R T			
		1	2	3	4
Z E I T	0	1,0	1,0	1,0	1,0
	1	1,4	1,2	1,3	1,2
	2	1,8	1,6	1,8	1,5
	3	0,9	1,0	0,8	1,9

Mathematische Überlegungen

- Die Tabelle stellt eine zweidimensionale Matrix dar
- Jeder Wert besitzt eine Zeit- und eine Ortskoordinate
 - Schreibweise: $a_{t,x}$
- Eine gleiche Matrix wird auch für den Inhibitor benötigt

Mathematische Überlegungen

Die Diffusion:

$$D_a \frac{\partial^2 a_t}{\partial x^2}$$

- Konzentrationsausgleich benachbarter Zellen
- Diskretisiert:

$$D_a \cdot \frac{a_{t,x-\Delta x} + a_{t,x+\Delta x} - 2a_{t,x}}{\Delta x^2}$$

Mathematische Überlegungen

- In je einer Formel:

$$a_{t,x} = a_{t-\Delta t,x} + \Delta t \cdot \left(s \cdot \left(\frac{a_{t-\Delta t,x}^2}{b_{t-\Delta t,x}} + b_a \right) - r_a a_{t-\Delta t,x} + D \right)$$

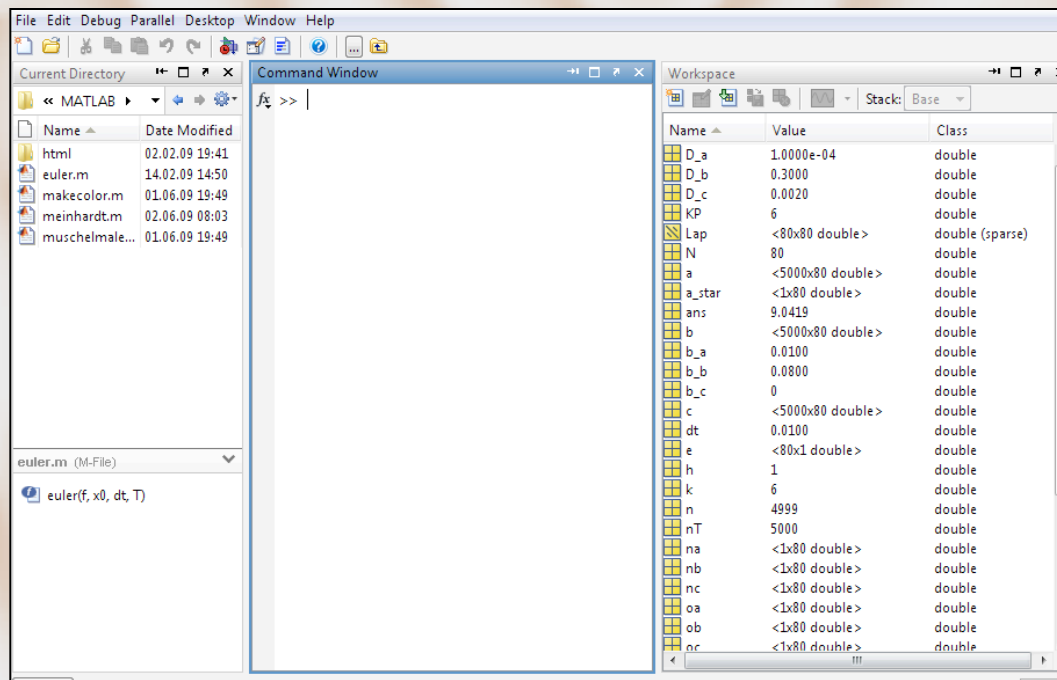
$$b_{t,x} = b_{t-\Delta t,x} + \Delta t \cdot \left(s a_{t-\Delta t,x}^2 + b_b - r_b b_{t-\Delta t,x} + D \right)$$

Mathematische Überlegungen

- Problem:
 - Aufwändige Rechnungen
 - Für genaue Ergebnisse sind viele kleine Zeitschritte notwendig
 - Risiko von Flüchtigkeitsfehlern steigt enorm
- Lösung:
 - Einen Computer die Arbeit machen lassen

Unsere Vorgehensweise

- Zunächst Einführung in die mathematischen Grundlagen durch Herrn Potschka
- Verwendung der Mathematik-Software „MATLAB“



Unsere Vorgehensweise

- Simulation anderer physikalischer Probleme mit Hilfe von MATLAB
- Verwendung von Vektor-Matrix-Multiplikation
- Optimierung der Geschwindigkeit durch Verwendung nativ in MATLAB integrierter Lösungsverfahren statt dem Euler-Verfahren

Unsere Vorgehensweise

- Umschreibung der Formeln in MATLAB-Syntax

Muschelmuster im Detail

$$\frac{\partial a_t}{\partial t} = s \cdot \left(\frac{a_t^2}{b_t} + b_a \right) - r_a a_t + D_a \frac{\partial^2 a_t}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial b_t}{\partial t} = s a_t^2 + b_b - r_b b_t + D_b \frac{\partial^2 b_t}{\partial x^2}$$

Muschelmuster im Detail

$$\frac{\partial a}{\partial t} = s \cdot \frac{b_a + ba^2}{1 + s_a a^2 + s_c c} - r_a a + D_a \frac{\partial^2 a}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = b_b - s \cdot \frac{b_a + ba^2}{1 + s_a a^2 + s_c c} + D_b \frac{\partial^2 b}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = r_c a - r_c c + D_c \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

Muschelmuster im Detail

$$\frac{\partial a}{\partial t} = s \cdot \frac{b_a + ba^2}{1 + s_a a^2 + s_c c} - r_a a + D_a \frac{\partial^2 a}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = b_b - s \cdot \frac{b_a + ba^2}{1 + s_a a^2 + s_c c} + D_b \frac{\partial^2 b}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = r_c a - r_c c + D_c \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

Gleiche Formel, aber andere Parameter

Weitere Anwendungsmöglichkeiten

- Untersuchung des Stoffaustauschs zwischen beliebigen benachbarten Objekten
 - Zweidimensional
 - Dreidimensional
 - In Blättern
 - Vierdimensional
 - In Gewebe
 - N-Dimensional
 - Theoretische Mathematik

Dank an...

- das Hector-Seminar,
insbesondere Vera Körkel
für die Ermöglichung der Kooperationsphase
- Andreas Potschka
für die fachliche Betreuung
- Dr. Hans Meinhardt
für die Idee und das Buch „Wie Schnecken sich
in Schale werfen“

Vielen Dank für Ihre
Aufmerksamkeit!

Fragen?

Quellen

- Erläuterungen durch Andreas Potschka.
- Hans Meinhardt: „Wie Schnecken sich in Schale werfen“, Springer-Verlag, Tübingen 1995.
- Wikipedia-Artikel: „Explizites Euler-Verfahren“, „Differentialrechnung“, „Partielle Differentialgleichung“, „Diffusion“, „Matrix (Mathematik)“; alle Stand: 22.06.2009.

Unsere Vorgehensweise

Vektor-Matrix-Multiplikation:

- Erinnerung: Tabelle mit Konzentrationswerten stellt eine Matrix dar

		O R T			
		1	2	3	4
Z E I T	1	1,0	1,0	1,0	1,0
	2	1,4	1,2	1,3	1,2
	3	1,8	1,6	1,8	1,5
	4	0,9	1,0	0,8	1,9

$$= \begin{bmatrix} 1,0 & 1,0 & 1,0 & 1,0 \\ 1,4 & 1,2 & 1,3 & 1,2 \\ 1,8 & 1,6 & 1,8 & 1,5 \\ 0,9 & 1,0 & 0,8 & 1,9 \end{bmatrix}$$

Unsere Vorgehensweise

- Der Vektor wird spaltenweise mit der Matrix multipliziert:

$$[1 \ 2 \ 3] \cdot \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 5 \\ 3 & 6 \end{bmatrix} = [1 \cdot 1 + 2 \cdot 2 + 3 \cdot 3 \quad 1 \cdot 4 + 2 \cdot 5 + 3 \cdot 6] = [14 \ 32]$$

- Es gilt kein Kommutativgesetz

$$A \cdot B \neq B \cdot A$$

Unsere Vorgehensweise

- Die Diffusion kann durch Multiplikation eines gesamten Zeitschrittes mit einer dünnbesetzten „Laplace“-Matrix simuliert werden

$$\frac{D_a}{h_2} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

- Alle weiteren Rechnungen können dann mit allen Zellen eines Zeitschrittes auf einmal durchgeführt werden

Unsere Vorgehensweise

- Beispielrechnung mit $\frac{D_a}{h^2} = 0,1$:

$$0,1 \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$
$$= 0,1 \cdot \begin{bmatrix} -1 + 1 & 1 - 2 + 2 & 1 - 4 + 1 & 2 - 2 + 1 & 1 - 1 \end{bmatrix}$$
$$= 0,1 \cdot \begin{bmatrix} 0 & 0,1 & -0,2 & 0,1 & 0 \end{bmatrix}$$