

# Modellierung und Netzwerkanalyse komplexer Systeme sozialen und polymeren Ursprungs

## Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades  
*doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)*

vorgelegt der

Naturwissenschaftlichen Fakultät II - Chemie und Physik  
der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg



von

**Diplom-Mathematiker Marian Brandau**

geboren am 24. 12. 1972 in Halle (Saale)

1. Gutachter: Prof. Dr. Steffen Trimper
2. Gutachter: Prof. Dr. Jens-Uwe Sommer
3. Gutachter: Prof. Dr. Wolfgang Paul

Halle (Saale), den 1. November 2010



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Motivation . . . . .	1
1.2	Netzwerke . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Methoden</b>	<b>7</b>
2.1	Analytische Methoden . . . . .	7
2.2	Numerische Methoden . . . . .	17
<b>3</b>	<b>Modellklassen</b>	<b>21</b>
3.1	Soziale Netzwerke . . . . .	21
3.1.1	Das Small-World-Phänomen . . . . .	21
3.1.2	Das SIR-Modell . . . . .	27
3.1.3	Ein Meinungsbildungsmodell . . . . .	31
3.2	Polymersysteme . . . . .	33
3.2.1	Polymermodelle . . . . .	34
3.2.2	Monte-Carlo-Simulationen . . . . .	37
3.2.3	Polymernetzwerke . . . . .	41
<b>4</b>	<b>Meinungsbildungsprozesse</b>	<b>49</b>
4.1	Die Entscheidungsfunktion . . . . .	49
4.2	Simulationsergebnisse . . . . .	51
<b>5</b>	<b>Epidemien</b>	<b>59</b>
5.1	Untersuchungen am SIR-Modell . . . . .	59
5.1.1	Ein analytischer Ansatz . . . . .	59
5.1.2	Die numerische Lösung . . . . .	60
5.2	Das stochastischen SIR-Modells . . . . .	61
5.2.1	Die exakte Lösung des stochastischen SIR-Modells . . . . .	61
5.2.2	Einige Simulationsergebnisse . . . . .	62
5.3	Das SIR-Modell auf einem hierarchischen Netzwerk . . . . .	64
5.3.1	Modifikation des hierarchischen SIR-Modells . . . . .	66
<b>6</b>	<b>Dynamik von Polymerketten</b>	<b>73</b>
6.1	Anmerkungen zu einem Simulationsalgorithmus . . . . .	73
<b>7</b>	<b>Adsorption und Mustererkennung mit Multiblock-Copolymeren</b>	<b>79</b>
7.1	Multiblock-Copolymere . . . . .	80
7.2	Gittersimulation mit Multiblock-Copolymeren . . . . .	80

<b>8 Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>97</b>
8.1 Zusammenfassung . . . . .	97
8.2 Ausblick . . . . .	102

# 1 Einleitung

## 1.1 Motivation

Komplexe Systeme sind durch das Zusammenspiel einer großen Anzahl von wechselwirkenden Einheiten charakterisiert. Die im Allgemeinen nichtlinearen Wechselwirkungen führen auf neue Verhaltensweisen, die den einzelnen Bestandteilen nicht zugeordnet werden können. Ein solches als emergentes Verhalten bezeichnetes Phänomen steht im Zentrum der Statistischen Physik. Aus dem Zusammenspiel der Freiheitsgrade der einzelnen Atome bzw. Moleküle ergeben sich neue Eigenschaften wie das Auftreten unterschiedlicher Phasen. Eines der Hauptprobleme bei der Beschreibung von komplexen Systemen in der Physik besteht darin, die für das jeweilige System relevanten Freiheitsgrade herauszufinden, diese mit den Methoden unterschiedlicher Vielteilchentheorien zu bearbeiten und die Ergebnisse mit experimentellen Untersuchungen zu vergleichen. Ein solches überschaubares Vorgehen ist aber nur schwer im Detail durchführbar. Dies betrifft bereits die Auswahl der relevanten Freiheitsgrade, die man natürlich schon wegen der technischen Umsetzung innerhalb der verwendeten physikalischen Methoden einschränken wird. Hierbei bedient man sich oft einer iterativen Prozedur, indem man einen Satz von relevanten Freiheitsgraden auswählt und diese sukzessive erweitert. Ein weiteres Problem besteht in der Fixierung der Umgebung des Systems. In der statistischen Physik wird die Umgebung erfolgreich durch ein Wärme- bzw. Teilchenbad charakterisiert. Bei Quanten-Vielteilchensystemen kann man meist gar auf die Umgebung verzichten, insbesondere wenn man an Grundzustandseigenschaften bzw. schwachen Anregungen aus dem Grundzustand interessiert ist. Neben diesen konzeptionellen Problemen bei der Charakterisierung komplexer Systeme, die bislang häufig durch „physikalische Intuition“ gelöst werden konnten, entstehen zahlreiche technische Fragen bei der Auswertung der entsprechenden Ausdrücke. So kann man beispielsweise in der Gleichgewichtsstatistik die Zustandssumme nur näherungsweise berechnen. Darüber hinaus besteht für Vielteilchensysteme im Nichtgleichgewicht kein allgemeiner Konsens über deren Behandlung, insbesondere dann, wenn sich das System weit weg von einem Gleichgewichtszustand befindet bzw. gar keinen solchen aufweist oder anstrebt. Überdies sind derartige Systeme besonders stark von Fluktuationen betroffen, deren Einbindung in die theoretische Beschreibung zusätzliche Probleme mit sich bringt. Noch problematischer wird es, wenn man versucht, die vom Prinzip her erfolgreichen Methoden der Vielteilchenphysik, auf Systeme übertragen will, in denen nicht elementare physikalische Objekte wie Atome oder Moleküle die Grundbausteine sind. Dazu zählen beispielsweise Daten von Börsenkursen, die in einer riesigen Anzahl täglich anfallen und auf dem ersten Blick als ziemlich zufällig und unkorreliert erscheinen. Noch komplizierter gestaltet sich die Analyse von Meinungsbildungsprozessen. Neben der Vielfalt an Einflussgrößen spielen subjektive Wahr-

## 1 Einleitung

nehmungsdifferenzen eine wichtige Rolle, die sich wahrscheinlich einer physikalischen Beschreibung entziehen. In den letzten Jahren ist dennoch eine verstärkte Tendenz in diese Richtung zu beobachten. Methoden der Vielteilchenphysik werden auf außerphysikalische Problemfelder wie Prozesse an Finanzmärkten, die Ausbreitung von Krankheiten, das Internet (WWW) oder Meinungsbildungsvorgänge angewendet. Dies ist der Tatsache geschuldet, dass auch die „nichtphysikalischen“ Prozesse durch universelle Eigenschaften charakterisiert werden und somit auch mittels universeller Methoden zu behandeln sind. Dazu zählen das bereits erwähnte emergente Verhalten aus dem Zusammenspiel einer sehr großen Vielzahl wechselwirkender Objekte bzw. Subjekte, die Nichtlinearität der Kopplung, die die Anwendung des erfolgreichen Superpositionsprinzips verbieten und die Spezifizierung der Umgebungs- bzw. Randbedingungen erfordern. Gemeinsam ist den beiden Untersuchungsgruppen, dass die Evolution der Systeme eine wichtige Rolle spielt, die durch fluktuierende und stochastische Kräfte gekennzeichnet ist.

Wenn in der vorliegenden Arbeit versucht wird, die Brücke zwischen rein physikalischen Prozessen und solchen nichtphysikalischen Ursprungs zu schlagen, dann vor allem deshalb, um die beiden Systemen innewohnenden universellen Eigenschaften aufzuspüren und darzulegen. Dazu zählt die Möglichkeit, dass sich die Systeme selbst verändern können. Dieser als Selbstorganisation bezeichnete Prozess tritt eigentlich nur in Vielteilchensystemen auf. Außerdem können derartige Systeme stark auf Umwelteinflüsse reagieren, was auch häufig bedeutet, dass die Umgebung nicht einfach in einer solch globalen Form wie in der Statistischen Physik durch ein Wärmebad zu charakterisieren ist. Besagte Systeme weisen auch häufig Gedächtniseffekte auf, d. h. der momentane Zustand hängt stark von den Ereignissen in der Vergangenheit ab. Solche Vorgänge sind für die Mustererkennung relevant. Diese als Nichtmarkoffsche Systeme bezeichneten Modelle bilden eine zusätzliche Herausforderung für die theoretische Beschreibung.

Als ein universelles Charakteristikum für komplexe Systeme mit emergentem Verhalten stehen in der vorliegenden Arbeit Netzwerke im Zentrum der Aufmerksamkeit. So sind in reinen Festkörpern die einzelnen Bestandteile durch ein Gitter verbunden, welches die einfachste Form eines regulären Netzwerkes ist. Wenngleich die Eigenschaften von Festkörpern in erster Linie von der Wechselwirkung der Konstituenten dominiert werden, spielt doch das Gitter beispielsweise bei der Herausbildung von unterschiedlichen Phasen eines Magneten oder eines multiferroischen Materials eine wichtige Rolle. Über das Gitter können zusätzliche Anregungen (Phononen) entstehen, die mit anderen, z. B. elektronischen Freiheitsgraden wechselwirken. Nicht zuletzt wird die Supraleitung durch den Austausch von Phononen verstanden, die zu einem stabilen Cooper-Paar bestehend aus zwei Elektronen mit unterschiedlicher Spinorientierung führen. Eine besonders große Rolle spielen Netzwerke bei der Beschreibung von weicher Materie. Hierbei gewinnt das Netzwerk eine noch größere Eigenständigkeit, hat doch dessen Dynamik gerade in Polymerketten eine sehr wichtige Funktion. Über die eher stochastische Verbindung der das Polymer bestimmenden Monomere ist der Schritt zu zufälligen sozialen Netzwerken ein denkbarer Übergang zu Phänomenen nichtphysikalischer Natur. Der Terminus „nichtphysikalisch“ bedeutet, dass die zugrunde liegenden Wechselwirkungen nicht durch die bekannten physikalischen Kräfte hervorgerufen wird, sondern eher über die Kopplung an ein Netzwerk verstanden wird.

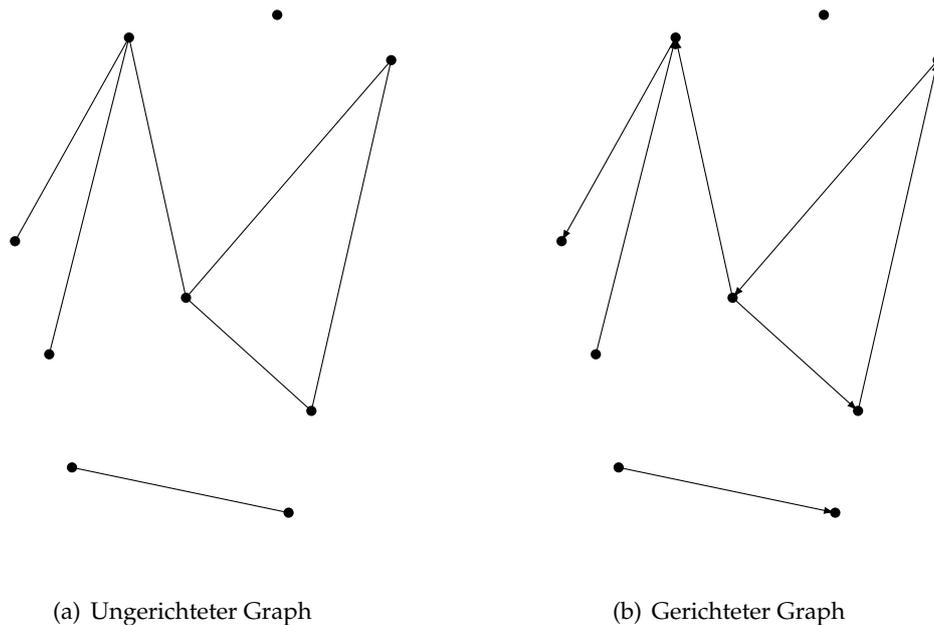


Abbildung 1.1: Grobe Einteilung von Netzwerken nach der Gerichtetheit der Verbindungen

Ziel der Arbeit ist es, komplexe Systeme mittels Netzwerken zu charakterisieren und ein möglichst universelles emergentes Verhalten auf unterschiedlichen Feldern aus der Physik der Polymere wie auch sozialer Systeme herauszuarbeiten. Die Arbeit enthält neben der Anwendung numerischer Methoden auch analytische Zugänge, die im Abschnitt 2 genauer vorgestellt werden. Im Abschnitt 3 geht es um soziale Netzwerke, die insbesondere für ein Modell zur Meinungsbildung bzw. für die Ausbreitung von Krankheiten herangezogen werden. Der Meinungsbildungsprozess wird im Abschnitt 4 an einem Beispiel aus dem sozialen Leben verdeutlicht. Abschnitt 5 stellt die Ausbreitung von Epidemien ins Zentrum der Betrachtung. Hierbei ist die Relevanz von Netzwerkstrukturen offensichtlich. Die beiden nächsten Abschnitte der Arbeit betreffen die Dynamik von Polymerketten (Abschnitt 6) sowie die Absorption und Mustererkennung mit Multiblock-Copolymeren (Abschnitt 7). Die Arbeit endet mit einer Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse (Abschnitt 8).

Da sich – wie bereits mehrfach betont - Netzwerke als ein wichtiges Instrument der Untersuchung und Beschreibung unterschiedlicher Systemklassen anbieten, sollen sie im nächsten Abschnitt genauer betrachtet werden.

## 1.2 Netzwerke

Ursprünglich war das Interesse an Netzwerken zunächst rein mathematischer Natur und es wurde hauptsächlich im Bereich Graphentheorie verfolgt. Eine bedeutende Arbeit auf dem Gebiet ist [28]. In der Physik traten Netzwerke zunächst vorwiegend in Bereichen wie der Perkolationstheorie (vgl. [80]) auf.

## 1 Einleitung

Unabhängig davon ist eine mehr oder weniger klare Vorstellung von Netzwerken weit verbreitet. Bei einer ersten naiven Näherung bestehen Netzwerke zunächst aus *Knoten* (*Eckpunkte, Vertices, Nodes*)  $V$  und *Kanten*  $E$  (*Edges, Links, Verbindungen*). Die Kanten sind die Verbindungen zwischen den Knoten  $E \subseteq V \times V$ . Das Netzwerk oder der Graph ist dann  $(V, E)$ . Unterschieden werden grundsätzlich gerichtete (Abbildung 1.1(b)) und ungerichtete Graphen (Abbildung 1.1(a)). Es gibt eine Reihe weiterer Kenngrößen von Netzwerken. Von grundsätzlicher Bedeutung sind dabei solche, die die Vernetzung in Netzwerken charakterisieren. Jeder Knoten hat eine bestimmte Anzahl von Verbindungen  $k$ , womit dessen *Grad* (oder *degree*) bezeichnet wird. Bei gerichteten Graphen unterscheidet man noch zwischen einlaufenden  $k_i$  und abgehenden Verbindungen  $k_o$ . Der Grad des Knotens ist dann  $k = k_i + k_o$ . Jedes Netzwerk hat  $N$  Knoten, die von  $L$  Kanten verbunden sind. Bei schleifenlosen Netzwerken ist dann  $N = L + 1$ . Bei ungerichteten Graphen mit  $I$  Schleifen gilt  $I = L + 1 - N$ . Betrachtet man ein zufälliges Ensemble von Netzwerken, so spricht man von Zufallsgraphen oder zufälligen Netzwerken. Die Vernetzung der Knoten solcher Graphen durch Kanten ist statistisch verteilt. Man unterscheidet Netzwerke im Gleichgewicht und Netzwerke im Ungleichgewicht. Netzwerke im Gleichgewicht können gemäß folgender Vorschrift realisiert werden:

1. Eine feste Anzahl von zufälligen Knoten  $N$  besteht.
2. Zufällig gewählte Paare von Knoten werden durch eine Kante verbunden.
3. Punkt 2 wird wiederholt, bis die gewünschte Vernetzung erreicht ist.

Im Gegensatz dazu gibt es zufällige Netzwerke im Ungleichgewicht, die mit einer abgewandelten Vorschrift realisiert werden können.

1. In jedem Schritt wird ein Knoten hinzugefügt.
2. Gleichzeitig wird ein Paar zufällig gewählter Knoten verbunden.
3. Sprung zu Punkt 1, bis das Netzwerk ausreichend vernetzt ist.

Die Verteilung für die Wahrscheinlichkeit (Dichte), dass ein Knoten  $s$  in einem ungerichteten Netzwerk mit  $N$  Knoten  $k$  Verknüpfungen hat ( $k$  nächste Nachbarn), ist gegeben durch  $p(k, s, N)$ . In klassischen zufälligen Netzwerken ist  $p(k, s, N)$  für jeden Knoten gleich. Angenommen, diese ist für jeden Knoten im Netzwerk bekannt, so ist die *totale Wahrscheinlichkeitsverteilung*

$$\mathbf{P}(k, N) = \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N p(k, s, N)$$

Aus dieser Wahrscheinlichkeit lassen sich diverse weitere Größen ableiten, die bei der Beurteilung der Vernetzung von Gewicht sind. Unter den Momenten der Vernetzungsgradverteilung

$$M_m = \sum_{k=0}^{\infty} k^m \mathbf{P}(k)$$

hat das erste Moment  $\bar{k}$ , der Hauptvernetzungsgrad des Netzwerkes

$$\bar{k} = \sum_k kP(k)$$

die größte Bedeutung. In gerichteten Netzwerken sind solche Betrachtungen auch möglich. Bei  $\bar{k}$  und  $P(k)$  handelt es sich bei sehr großen Netzwerken, die fast immer statistischer Natur sind, meist um empirische Daten, die nur aus der Beobachtung gewonnen werden können. Oft werden in der Realität auftretende Netzwerke nach dem vorgefundenen  $P(k)$  charakterisiert. Als die am häufigsten auftretenden Arten wären da zu nennen:

1. die *Poissonverteilung* des Vernetzungsgrades

$$P(k) = \frac{e^{-\bar{k}} \bar{k}^k}{k!}$$

2. die *Exponentialverteilung* des Vernetzungsgrades

$$P(k) \propto e^{-k/\bar{k}}$$

3. und die *Power-Law Verteilung* des Vernetzungsgrades, die im asymptotischen Fall durch

$$P(k) \propto k^{-\gamma}, \quad k \neq 0$$

beschrieben wird.

Hervorzuheben bleibt die besondere Bedeutung von Netzwerken des Typs 3. Netzwerke mit einer solchen Vernetzungsgradverteilung nennt man auch *skalenfreie Netzwerke*, da ihr Vernetzungsgrad mit keiner Skala vergleichbar ist. Es gibt keine typische Vernetzung der einzelnen Knoten, es ist aber festzustellen, dass es auch Vernetzungsgrade gibt, die weit ab vom Durchschnitt sind. Die  $m$ -ten Momente der Vernetzungsgradverteilung  $M_m$  divergieren in unendlichen Netzwerken für  $m \geq \gamma - 1$ . Der dimensionslose Exponent  $\gamma$  nimmt in skalenfreien Netzen verschiedene Werte an. Ist  $\gamma \geq 1$ , so ist die *Normalisierbarkeit* des Netzwerkes gegeben. Das 1. Moment ist endlich, d. h.  $\bar{k} < \infty$ , wenn  $2 < \gamma \leq \infty$  erfüllt ist. Alle betrachteten realen Netzwerke, die soziale Phänomene beschreiben oder dem technischen Bereich entspringen sind relativ klein im Vergleich zu statistischen Systemen. So hat z. B. das Internet (WWW) „nur“ schätzungsweise  $10^9$  Knoten während man es bei der Betrachtung eines realen Gases mit der Größenordnung  $10^{23}$  zu tun hat.

Eine weitere Größe, die Aussagen über die Vernetzung eines Netzwerkes liefert ist der so genannte *Clusterkoeffizient*. Er stammt ursprünglich aus der Graphentheorie und ist für jeden einzelnen Knoten ein Maß für die „Dichte“ der Verbindungen in der Umgebung des Knotens. Der Clusterkoeffizient  $C$  eines Knotens mit  $z$  nächsten Nachbarn ist das Verhältnis zwischen der Anzahl der Verbindungen der  $z$  nächsten Nachbarn  $y$  und der Zahl aller möglicher Verbindungen zwischen den Nachbarn  $z(z-1)/2$

$$C = \frac{2y}{z(z-1)}.$$

Im Netzwerk betrachtet man dann den Mittelwert über alle Knoten  $\bar{C}$ , den Clusterkoeffizient des Netzwerkes.

## 1 Einleitung

Natürlich ist es auch wichtig, in Netzwerken über einen geeigneten Abstandsbegriff zu verfügen. Zunächst haben die Knoten in physischen Netzwerken unabhängig vom Netzwerk einen räumlichen Abstand zueinander. Dieser sagt aber u. U. nichts über die netzwerkvermittelten Beziehungen der Knoten untereinander aus. Bezieht man das Netzwerk in die Abstandsbestimmung mit ein, so gelangt man im einfachsten Fall zum Begriff der *geodätischen Distanz*. In einem ungerichteten Netzwerk mit einer einheitlichen Kantenlänge von Eins ist sie der „kürzeste Pfad“ über die Kanten zwischen zwei Knoten und wird bezeichnet mit  $\ell$ . In zufälligen Netzwerken ist  $\ell$  statistisch verteilt mit  $\mathbf{P}(\ell)$ , der Wahrscheinlichkeit, dass der „kürzeste Pfad“ zwischen zwei Knoten gleich  $\ell$  ist. Sie ist auch eine Strukturcharakteristik des Netzwerkes mit dem ersten Moment  $\bar{\ell} = \sum_{\ell} \ell \mathbf{P}(\ell)$ . Der Wert von  $\bar{\ell}$  ist dabei von der Größe des Netzwerkes abhängig.

## 2 Methoden

In diesem Abschnitt soll das prinzipielle Vorgehen bei der Modellbildung und dessen Untersuchung vorgestellt werden. Dieses Vorhaben soll am Beispiel eines selbst untersuchten Modells durchgeführt werden. Wie bereits mehrfach betont handelt es sich um Vielteilchensysteme, dessen große Zahl an Freiheitsgraden nicht im Detail betrachtet werden können. Stattdessen muss man sich auf eine Klasse relevanter Freiheitsgrade beschränken. Zur Anwendung kommen Methoden der Statistischen Physik die genuin für physikalische Systeme mit kollektiven Wechselwirkungen der Größenordnung  $10^{23}$ . Die hier untersuchten Systeme mit einem viel geringeren Umfang zeigen ebenfalls komplexes Verhalten, das nicht aus der Größe des Systems resultiert. Ursache ist eine ebenfalls große Zahl von Freiheitsgraden nichtphysikalischen Ursprungs.

### 2.1 Analytische Methoden

Konkret steht die Untersuchung eines im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Mehrzustandemodells im Mittelpunkt. Das Modell beschreibt die Entwicklung der Verteilung von mehreren unterschiedlichen Zuständen die die einzelnen Elemente eines Systems annehmen können. Das hier betrachtete Modell ist ein Dreizustandemodell. Es wird Bezug auf das in Abschnitt refsirmod vorgestellte SIR-Modell genommen, welches zur Beschreibung der Ausbreitung von Krankheiten genutzt werden kann. Erstmals wurde das SIR-Modell in [45] vorgestellt. Hierbei steht  $S$  für (susceptible/empfindlich),  $I$  für (infected/infiziert) und  $R$  steht für (recovered/immun bzw. tot). Das hier entwickelte Dreizustandemodell ist eine spezielle Realisierung des SIR-Modells. Die Besonderheit hierbei ist die Beschreibung des Modells auf einem linearen Graphen. Das Mehrzustandemodell liefert eine Möglichkeit, die Entwicklung der Gruppenstärken zu beschreiben. Betrachtet werden die Dichten der Zustände  $n_X = X(t)/N$ , wenn die verschiedenen Gruppen jeweils durch  $X$  repräsentiert werden, wobei  $X$  für die drei in Anlehnung an das SIR-Modell (vgl. Abschnitt 3.1.2) benannten Klassen  $S$ ,  $I$  und  $R$  steht. Es gilt außerdem  $n_S(t) + n_I(t) + n_R(t) = 1$ . Dieses Modell beinhaltet die Definition einer stochastischen Dynamik, die die Entwicklung der einzelnen Zustände beschreibt. Diese Art der Herangehensweise erlaubt auch die Einbeziehung der Zufälligkeit und Fluktuationen in der Übergängen der Zustände ineinander. Im Gegensatz zu klassischen Modellen, die durch gekoppelte Differentialgleichungssysteme beschrieben werden (vgl. 3.1.2), ist dieser Ansatz individuenbasiert, d. h. jeder Knoten des Graphen steht für ein Individuum und hat somit einen Zustand, und dieser entwickelt sich entsprechend der dem Modell innewohnenden Dynamik. Dazu wird für jeden Zustand eine Statusvariable definiert, die den Zustand eines Knotens  $i$  zum Zeitpunkt  $t$  festlegt. Bei diesen Statusvariablen handelt es sich um Besetzungsvariablen mit den Werten 0 und 1 in der folgenden Form:

## 2 Methoden

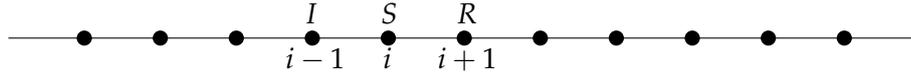


Abbildung 2.1: Eindimensionales Netzwerk mit den folgenden Besetzungsvariablen

$$\begin{array}{lll} n_S(i-1, t) = 0 & n_S(i, t) = 1 & n_S(i+1, t) = 0 \\ n_I(i-1, t) = 1 & n_I(i, t) = 0 & n_I(i+1, t) = 0 \\ n_R(i-1, t) = 0 & n_R(i, t) = 0 & n_R(i+1, t) = 1 \end{array}$$

- Ist der Knoten  $i$  zum Zeitpunkt  $t$  im Zustand  $S$ , so ist  $n_S(i, t) = 1$ ,
- ist er hingegen im Zustand  $I$  oder  $R$ , so gilt  $n_S(i, t) = 0$ .
- Gleiches gilt für die Statusvariablen  $n_I(i, t)$  und  $n_R(i, t)$ .
- Wichtig ist es noch zu erwähnen, dass für jeden Platz  $i$  auf dem Graphen  $n_S(i, t) + n_I(i, t) + n_R(i, t) = 1$  gilt (Erhaltungssatz).

Mit Hilfe dieser Werte ist es möglich, die zufällige Größe der einzelnen Gruppen von Individuen eines Status zu beschreiben:

$$\hat{X}(t) = \sum_i n_X(i, t),$$

wobei über alle Knoten des Graphen summiert wird. Es bleibt zu erwähnen, dass  $\hat{S} + \hat{I} + \hat{R} = N$  zu jedem Zeitpunkt  $t$  gilt. Der Graph definiert die Nachbarschaftsbeziehungen zwischen den einzelnen Knoten und somit die Kontakte, d. h. nur zwischen direkten Nachbarn finden Wechselwirkungen statt.

Die *stochastische Dynamik* des Modells wird durch folgenden *Markoff-Prozess* hervorgerufen. Ein  $S$ -Knoten am Ort  $i$  wechselt seinen Zustand in  $I$  nach einer exponentiell verteilten zufälligen Zeit mit der Rate  $\beta I(i, t)$ . Hierbei ist  $I(i, t) = \sum_{j(i)} n_I(j, t)$  die Anzahl der  $I$ -Knoten, die zum Zeitpunkt  $t$  in Kontakt waren mit dem Knoten  $i$ . Diese Größe hat einen ganzzahligen Wert und ist abhängig vom gegenwärtigen Zustand des Systems. Da die Knoten bei diesem Modell *im eindimensionalen Fall* in einer festen Reihenfolge auf einem Graphen angeordnet sind, hat jeder Knoten nur Kontakt mit zwei Nachbarn, wobei keiner, einer oder beide im Zustand  $I$  sein können, so dass  $I(i, t)$  nur die Werte 0, 1 oder 2 annehmen kann. Auf der anderen Seite werden die  $I$ -Knoten nach einer ebenfalls exponentiell verteilten Zufallszeit mit der Rate  $\gamma$  in den inaktiven  $R$ -Zustand überführt. Dieser Vorgang ist für jeden  $I$ -Knoten unabhängig vom umgebenden System.

Der hier vorgestellte *individuenbasierte* Ansatz steht im Gegensatz zur Herangehensweise beim klassischen Modell, die mit Übergangsraten  $\beta$  und  $\gamma$  arbeitet, welche rein deterministisch sind. Ein Beispiel dafür ist das SIR-Modell (3.4) mit einer Infektionsrate proportional zur Anzahl aller infizierten Individuen. Als Netzwerk betrachtet entspricht

dies einem *vollständigen Graphen* von  $N$  Knoten, d. h. jeder ist mit jedem verbunden. Betrachtet man den Grenzwert  $N \rightarrow \infty$ , so erwartet man durchaus Fluktuationen nach dem Gesetz der großen Zahlen. Das übliche SIR-Modell kann somit als deterministischer Grenzwert der Entwicklung obiger stochastischer Prozesse auf einem vollständigen Graphen im thermodynamischen Grenzwert einer unendlich großen Population betrachtet werden.

Hier hingegen wird eine abzählbare Menge von  $N$  Knoten auf einem *nicht vollständigen Graphen* untersucht, so wie es in Abbildung 2.1 skizziert ist. In [8] werden Fluktuationen in einem stochastischen Modell auf einem endlichen vollständigen Graph untersucht. Im Vordergrund stehen Betrachtungen zur Ausbreitung von Epidemien ausgehend von wenigen Infizierten. Es wird die mittlere Größe der Epidemien nahe am Umschlagpunkt, wo die Ausbreitung der Infektion als endemisch bezeichnet wird, untersucht. Interessante Abhängigkeiten von der Anzahl der Individuen werden beobachtet. Im hier betrachteten Modell ist die hauptsächlich interessierende Größe der Erwartungswert  $\langle n_X(i, t) \rangle$  eines Knotens  $i$  zur Zeit  $t$  bei gegebener Anfangskonfiguration auf dem Graphen, wobei das Hauptaugenmerk hierbei auf unkorrelierten, zufälligen Anfangszuständen liegt. Dabei ist die Größe und die mengenmäßige Zusammensetzung der Population zum Zeitpunkt  $t = 0$  bekannt. Damit ist der betrachtete Erwartungswert unabhängig vom Platz  $i$ , und man kann  $n_X(t) = \langle n_X(i, t) \rangle$  und  $X(t) = \langle \hat{X}(t) \rangle$  schreiben.

Gerade durch die hier angewandte Technik der nicht vollständigen Vernetzung der einzelnen Knoten wird versucht, den möglichen Einfluss von Fluktuationen auf das Verhalten des Systems hervorzuheben. Durch die konsequente Anwendung des individuenbasierten Ansatzes entfernt sich diese Herangehensweise vom üblichen Mean-Field-Modell (3.4) erheblich. Die stark verminderte Konnektivität zwischen den einzelnen Knoten auf der periodischen Kette stellt einen großen Unterschied dar, denn die Dynamik des Systems wird ausschließlich durch Wechselwirkungen zwischen direkten Kettennachbarn nach den folgenden Regeln erzeugt:



Mittels der Raten  $\beta$  und  $\gamma$  lässt sich das Übergangsverhalten steuern. Die ersten beiden Regeln beschreiben wie ein einzelner  $S$ -Knoten durch Kontakt mit einem direkten  $I$ -Nachbarn selbst in den Status  $I$  gelangt. Jeder  $I$ -Knoten zerfällt nach Regel Drei in den Status  $R$  in einen endgültigen unveränderbaren Zustand, er ist immun, falls es sich um ein Modell zur Krankheitsausbreitung handelt.

Im hier untersuchten Modell sind nicht so sehr die Zustände der Subsysteme der  $S$ -,  $I$ - und  $R$ -Knoten  $n_X(i, t)$  interessant, sondern die Besetzungszahlen  $X(t)$  stehen im Mittelpunkt. Diese wiederum resultieren aus den Konfigurationsräumen der jeweiligen Zustände. Das Gesamtsystem besitzt zum Zeitpunkt  $t$  die Konfigurationen  $\vec{n}$ , d. h. jeder Knoten  $i$  hat genau einen der Zustände  $S$ ,  $I$  oder  $R$ . Die exakte zeitliche Änderung der

## 2 Methoden

Konfiguration des Systems kann nicht beschrieben werden. Es können nur Aussagen zur Wahrscheinlichkeit  $P(\vec{n}, t)$  gemacht werden und zwar der Wahrscheinlichkeit, dass zum Zeitpunkt  $t$  das System in der Konfiguration  $\vec{n}$  vorliegt. Betrachten wir nun das System zu den Zeitpunkten  $t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n$ , so ist die *Verbundwahrscheinlichkeit*  $P(\vec{n}_n, t_n; \vec{n}_{n-1}, t_{n-1}; \dots; \vec{n}_0, t_0)$  die Wahrscheinlichkeit, dass das System zum Zeitpunkt  $t_0$  in der Konfiguration  $\vec{n}_0$ , zu  $t_1$  in  $\vec{n}_1, \dots$ , zu  $t_n$  in  $\vec{n}_n$  vorlag. Aus der Definition der bedingten Wahrscheinlichkeit folgt auch

$$P(\vec{n}_n, t_n | \vec{n}_{n-1}, t_{n-1}; \dots; \vec{n}_0, t_0) = \frac{P(\vec{n}_n, t_n; \dots; \vec{n}_0, t_0)}{P(\vec{n}_{n-1}, t_{n-1}; \dots; \vec{n}_0, t_0)}.$$

Wenn man aber annimmt, dass das System nur ein „Kurzzeitgedächtnis“ besitzt, d. h. es ist nur vom vorhergehenden Zeitpunkt abhängig, so folgt daraus die *Markov-Eigenschaft*

$$P(\vec{n}_n, t_n | \vec{n}_{n-1}, t_{n-1}; \dots; \vec{n}_0, t_0) = P(\vec{n}_n, t_n | \vec{n}_{n-1}, t_{n-1}).$$

Die zeitliche Änderung dieser Wahrscheinlichkeit ist im symbolischen Sinne

$$\frac{\partial P(\vec{n}, t)}{\partial t} = \text{„Zustrom zu“ } \vec{n} - \text{„Abfluß aus“ } \vec{n}.$$

Die Größen „Zustrom zu“ und „Abfluß aus“ sind bei dieser Beschreibung Übergänge pro Zeiteinheit. Der Übergangswahrscheinlichkeit von der Konfiguration  $\vec{n}$  in die Konfiguration  $\vec{n}'$  ist  $P(\vec{n}', t + \Delta t | \vec{n}, t)$ . Das ist die Wahrscheinlichkeit, dass zum Zeitpunkt  $t + \Delta t$  die Konfiguration  $\vec{n}'$  vorliegt unter der Bedingung, dass zur Zeit  $t$  die Konfiguration  $\vec{n}$  galt. Es handelt sich hierbei um eine so genannte *bedingte Wahrscheinlichkeit*. Ein Strom oder Fluss von  $\vec{n}$  nach  $\vec{n}'$  ist so ein Übergang der Konfigurationen pro Zeiteinheit

$$w(\vec{n}' | \vec{n}, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{P(\vec{n}', t + \Delta t | \vec{n}, t)}{\Delta t}.$$

Der „Abfluß aus“  $\vec{n}$  ist also die Gesamtheit aller Ströme von  $\vec{n}$  zu allen möglichen Konfigurationen  $\vec{n}'$

$$\sum_{\vec{n}'} w(\vec{n}' | \vec{n}, t) P(\vec{n}, t)$$

und analog ist der „Zustrom zu“  $\vec{n}$

$$\sum_{\vec{n}'} w(\vec{n} | \vec{n}', t) P(\vec{n}', t).$$

Die daraus resultierende *Mastergleichung* für die Konfigurationen beschreibt die zeitliche Veränderung der Wahrscheinlichkeit  $P(\vec{n}, t)$ .

$$\frac{\partial P(\vec{n}, t)}{\partial t} = \sum_{\vec{n}'} [w(\vec{n} | \vec{n}', t) P(\vec{n}', t) - w(\vec{n}' | \vec{n}, t) P(\vec{n}, t)]$$

Die Mastergleichung lässt sich auch in eine Matrixschreibweise

$$\partial_t P(\vec{n}, t) = \mathcal{L}P(\vec{n}, t) \quad (2.2)$$

überführen. Die Matrixelemente von  $\mathcal{L}$  ergeben sich mittels

$$\mathcal{L} = w(\vec{n}|\vec{n}', t) - \sigma_{\vec{n}\vec{n}'} \sum_{\vec{y}} w(\vec{y}|\vec{n}', t).$$

Für das SIR-Modell ist es natürlich auch möglich, zu einer solchen Darstellung zu gelangen. Dabei ist zunächst zu bemerken, dass es sich hierbei um einen seriellen Prozess handelt, d. h. pro Zeitschritt erfolgt nur an einem Gitterplatz eine mögliche Umwandlung. Diese Forderung des Modells lässt sich bei genauerer Betrachtung gut rechtfertigen. Während der Entwicklung des Systems spielen zwei Unterprozesse eine Rolle. Es findet zum einen eine Umwandlung der  $S$ -Plätze in  $I$ -Plätze statt und zum anderen eine der  $I$ -Plätze in  $R$ -Plätze. Für den ersten Fall gilt die Wahrscheinlichkeit  $P_1$ , nach dem Zeitintervall  $dt$  einen  $I$ -Platz vorzufinden für jede Zeit  $t$

$$P_1(t + dt) = P_2(t)\tilde{\beta} dt - P_1(t)\tilde{\gamma} dt,$$

wobei  $P_2(t)$  die Wahrscheinlichkeit ist, zur Zeit  $t$  einen  $S$ -Platz vorzufinden. Für die Zeit  $t + dt$  gilt nun

$$P_2(t + dt) = -P_2(t)\tilde{\beta} dt + 0,$$

da es mit fortschreitender Zeit immer unwahrscheinlicher wird, einen  $S$ -Platz anzutreffen, eine Zunahme der Wahrscheinlichkeit ist ausgeschlossen. Die Tatsache, dass bei einer Umwandlung von  $S$  nach  $I$ , immer mindestens ein Nachbar im Status  $I$  sein muss, wird in dieser einfachen Beschreibung über eine geeignete Wahl der Raten  $\tilde{\beta}$  und  $\tilde{\gamma}$  realisiert. Die Wahrscheinlichkeit einen  $S$ - oder  $I$ -Platz vorzufinden ist  $P(t) = \begin{pmatrix} P_1(t) \\ P_2(t) \end{pmatrix}$ . Für  $dt \rightarrow 0$  ergibt sich somit

$$\frac{d}{dt}P(t) = \mathcal{L}P(t) = \begin{pmatrix} -\tilde{\gamma} & \tilde{\beta} \\ 0 & -\tilde{\beta} \end{pmatrix} P(t). \quad (2.3)$$

Um zu einer Darstellung gemäß Gleichung (2.3) für das Gesamtsystem zu gelangen, ist die Summe über alle Gitterplätze zu bilden. Der Vektor  $\vec{n}$  steht dann für eine Konfiguration aus  $S$ -,  $I$ - und  $R$ -Partikeln und  $P(\vec{n}, t)$  beschreibt die Wahrscheinlichkeit von deren Auftreten und es gilt eine Mastergleichung der Form (2.2). Um das System analytisch behandeln zu können, wird das System auf eine Darstellung im *Fock*-Raum abgebildet. Es gilt für Zustände im Fock-Raum die Entwicklung

$$|F(t)\rangle = \sum_{n_i} P(\vec{n}, t) |\vec{n}\rangle.$$

Die Gleichung (2.2) für das System lässt sich in dieser Darstellung als

$$\partial_t |F(t)\rangle = -H|F(t)\rangle$$

schreiben. Der Operator  $H$  ist so konstruiert, dass seine Matrixelemente mit denen von  $\mathcal{L}$  übereinstimmen. Eine formale Lösung dieser Gleichung ist mit

$$|F(t)\rangle = e^{-Ht}|F(0)\rangle$$

## 2 Methoden

gegeben. Durch diesen Ausdruck ist die Verbundwahrscheinlichkeitsverteilung in Abhängigkeit von der Startverteilung zur Zeit  $t = 0$  gegeben.

Es soll hiermit nochmals betont werden, dass diese Prozedur unabhängig vom Satz der gewählten Basisvektoren  $|n\rangle$  ist. In [19] und [20] wurde gezeigt, dass sich beliebige physikalische Größen  $\mathcal{R}(\vec{n})$  durch den Mittelwert des zugeordneten Diagonaloperators  $R(t)$  berechnen lassen. Es gilt somit

$$\langle R(t) \rangle = \sum_{n_i} P(\vec{n}, t) \mathcal{R}(\vec{n}) = \langle s | R | F(t) \rangle$$

mit dem Summenvektor  $\langle s | = \sum \langle \vec{n} |$ . Dargestellt in Kommutatorrelationen ist die Evolutionsgleichung für einen solchen Operator  $R(t)$  in Analogie zur *Schrödingergleichung*

$$\partial_t \langle R(t) \rangle = \langle s | [R(t), H] | F(t) \rangle. \quad (2.4)$$

Hier ist  $[R, H] = RH - HR$  die Kommutatorbeziehung zweier Operatoren  $H$  und  $R$ . Eine entscheidende Eigenschaft des entwickelten Modells besteht darin, dass die dynamischen Gleichungen, die das klassische Problem beschreiben, durch die Struktur des Evolutionsoperators  $H$  und die Vertauschungsregeln für Operatoren bestimmt werden. Dieser Evolutionsoperator ist durch die Regeln (2.1) des Modells definiert und ist

$$\begin{aligned} -H = & \beta \sum_i (b_{i+1}^\dagger a_{i+1} + b_{i-1}^\dagger a_{i-1} - A_{i+1}(1 - B_{i+1}) \\ & - A_{i-1}(1 - B_{i-1})) B_i + \gamma \sum_i (b_i - B_i). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Dabei sind die  $a_i$  und  $a_i^\dagger$  die Vernichter- bzw. Erzeugeroperatoren für die  $S$ -Partikel und dementsprechend die  $b_i$  und  $b_i^\dagger$  die für  $I$ -Partikel. Sie wirken ausschließlich auf die ihnen zugeordneten Teilchentyp, d. h.  $a_i$  und  $a_i^\dagger$  auf den  $S$ -Typ sowie  $b_i$  und  $b_i^\dagger$  auf den  $I$ -Typ. Als Beispiel werden hier verschiedene Szenarien gezeigt. Da ist zum einen ein Vernichteroperator  $a_{i+1}$ , der auf eine Konfiguration wirkt, die an der  $i + 1$ -ten Stelle ein  $S$ -Teilchen hat:

$$a_{i+1} | \dots 1_{S_{i+1}} \dots \rangle = | \dots 0_{S_{i+1}} \dots \rangle.$$

Befindet sich an dieser Stelle kein  $S$ -Teilchen, d. h. ein  $I$ - bzw.  $R$ -Teilchen, so ist

$$a_{i+1} | \dots 0_{S_{i+1}} \dots \rangle = 0.$$

Für einen Erzeugeroperator gilt, wenn er auf einen Zustand mit einem mit  $S$ -Teilchen unbesetzten Platz  $i + 1$  wirkt

$$a_{i+1}^\dagger | \dots 0_{S_{i+1}} \dots \rangle = | \dots 1_{S_{i+1}} \dots \rangle$$

und im entgegengesetzten Fall

$$a_{i+1}^\dagger | \dots 1_{S_{i+1}} \dots \rangle = 0.$$

Analog gilt für die  $b_{i+1}$ - und  $b_{i+1}^\dagger$ -Operatoren zusammen mit den ihnen zugeordneten  $I$ -Teilchen

$$\begin{aligned} b_{i+1}|\dots 1_{I_{i+1}} \dots\rangle &= |\dots 0_{I_{i+1}} \dots\rangle \\ b_{i+1}|\dots 0_{I_{i+1}} \dots\rangle &= 0, \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} b_{i+1}^\dagger|\dots 0_{I_{i+1}} \dots\rangle &= |\dots 1_{I_{i+1}} \dots\rangle \\ b_{i+1}^\dagger|\dots 1_{I_{i+1}} \dots\rangle &= 0. \end{aligned}$$

Die Operatoren  $A_i = a_i^\dagger a_i$  und  $B_i = b_i^\dagger b_i$  sind die Teilchenzahloperatoren. Es gilt nämlich

$$\begin{aligned} A_{i+1}|\dots 1_{S_{i+1}} \dots\rangle &= a_{i+1}^\dagger a_{i+1}|\dots 1_{S_{i+1}} \dots\rangle \\ &= a_{i+1}^\dagger|\dots 0_{S_{i+1}} \dots\rangle \\ &= 1|\dots 1_{S_{i+1}} \dots\rangle \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} A_{i+1}|\dots 0_{S_{i+1}} \dots\rangle &= a_{i+1}^\dagger a_{i+1}|\dots 0_{S_{i+1}} \dots\rangle \\ &= a_{i+1}^\dagger 0|\dots 0_{S_{i+1}} \dots\rangle \\ &= 0|\dots 0_{S_{i+1}} \dots\rangle. \end{aligned}$$

Die Eigenwerte der Operatoren sind 0 und 1. Der Teilchenzahloperator  $A_i$  korrespondiert mit der Besetzungsvariable  $n_S(i)$  und  $B_i$  steht in Verbindung mit  $n_I(i)$ . Die Struktur des Evolutionsoperators (2.5) lässt sich nun wie im Folgenden beschreiben. Der Term  $b_{i+1}^\dagger a_{i+1}$  beschreibt die Vernichtung eines  $S$ -Teilchens und die simultane Erzeugung eines  $I$ -Teilchens am Platz  $i + 1$  unter der Bedingung, dass am Platz  $I$  ein  $I$ -Teilchen ist, das durch den Teilchenzahloperator  $B_i = b_i^\dagger b_i$  realisiert wird. Ebenso verhält es sich am Platz  $i - 1$ , dem anderen Nachbarn des Platzes  $i$ , d. h. falls  $B_i = 1$  ist, wird gleichzeitig ein  $S$ -Partikel vernichtet und eines vom Typ  $I$  erzeugt ( $b_{i-1}^\dagger a_{i-1}$ ). Die  $I$ -Teilchen zerfallen mit der Rate  $\gamma$  mittels des Operators  $b_i$ . Die restlichen Terme, die ausschließlich aus Teilchenzahloperatoren gebildet werden, stellen die Wahrscheinlichkeitserhaltung sicher.

Wichtig ist es noch, die Vertauschungsregeln für die Erzeuger- und Vernichteroperatoren zu betrachten, denn diese bestimmen die Dynamik. Es gilt

$$[b_i, b_j^\dagger] = (1 - 2b_i^\dagger b_i)\delta_{ij}. \quad (2.6)$$

Für  $a$  und  $a^\dagger$  gelten analoge Regeln. Die Operatoren für Plätze gleichen Typs antikommutieren für den gleichen Gitterplatz. Die Regeln garantieren das Ausschlussprinzip, d. h. es ist  $a_i^2 = b_i^2 = a_i b_i = b_i a_i = 0$ , und im gemischten Fall gilt  $[b_i, a_i^\dagger] = 0$ . Den Zusammenhang zu den ursprünglichen Größen stellen die folgenden Beziehungen dar, es sind

$$\begin{aligned} \langle n_S(i, t) \rangle &= \langle A_i \rangle, \\ \langle n_I(i, t) \rangle &= \langle B_i \rangle \end{aligned}$$

## 2 Methoden

die Wahrscheinlichkeiten, dass sich der Ort  $i$  zur Zeit  $t$  im  $S$ - bzw.  $I$ -Status befindet, und daraus resultierend ist

$$\langle n_R(i, t) \rangle = 1 - \langle A_i \rangle - \langle B_i \rangle$$

die Wahrscheinlichkeit, am Ort  $i$  zur Zeit  $t$  ein Teilchen im Status  $R$  zu finden. Um nun zu den Mittelwerten  $\langle A_i \rangle$ ,  $\langle B_i \rangle$  zu gelangen, wird die Beziehung 2.4 mit den Operatoren  $A_i$  und  $B_i$  ausgewertet. Es ist also

$$\partial_t \langle A_r \rangle = \langle s | [A_r, H] | F(t) \rangle$$

und

$$\partial_t \langle B_r \rangle = \langle s | [B_r, H] | F(t) \rangle.$$

Von äußerster Wichtigkeit bei der Betrachtung obiger Beziehungen ist die Wirkung des Summenvektors  $\langle s |$  aus der Mittelwertbildung in Gleichung (2.4) auf die verschiedenen Operatoren. So ist z. B.  $\langle s | H = 0$ ,  $\langle s | a_r = \langle s | A_r$  und  $\langle s | a_r^\dagger = \langle s | 1 - A_r$  und ebenso  $\langle s | b_r = \langle s | B_r$  und  $\langle s | b_r^\dagger = \langle s | 1 - B_r$ . Die erste der beiden obigen Gleichungen lautet in Kommutatorschreibweise ausgeschrieben

$$\partial_t \langle A_r \rangle = \langle s | A_r H - H A_r | F(t) \rangle, \quad (2.7)$$

und sie wird bei ihrer Auswertung von Ausdrücken der Form

$$[A_r, a_j] = \begin{cases} 0, & r \neq j \\ -a_r, & r = j \end{cases} = -\delta_{rj} a_r$$

geprägt. In Gleichung (2.7) gilt für den Fall  $i = r - 1$

$$\frac{d}{dt} \langle A_r \rangle = -\beta ( \langle A_r (1 - B_r) B_{r-1} \rangle \dots + \langle A_{i+1} (1 - B_{i+1}) A_r B_{r-1} \rangle + \dots )$$

und zusammen mit  $i = r + 1$

$$\frac{d}{dt} \langle A_r \rangle = -\beta ( \langle A_r B_{r-1} \rangle + \langle A_r B_{r+1} \rangle ). \quad (2.8)$$

Eine ähnliche Rechnung für  $\partial_t \langle B_r \rangle = \langle s | B_r H - H B_r | F(t) \rangle$  ergibt

$$\frac{d}{dt} \langle B_r \rangle = \beta ( \langle A_r B_{r-1} \rangle + \langle A_r B_{r+1} \rangle ) - \gamma \langle B_r \rangle. \quad (2.9)$$

In den Gleichungen treten Korrelatoren höherer Ordnung wie  $\langle A_r B_{r-1} \rangle$  und  $\langle A_r B_{r+1} \rangle$  auf. Sie sind ein Hinweis auf die nichtlineare Natur des Problems. In ähnlicher Art und Weise wie oben lassen sich Gleichungen für solcherart Zweipunkt-Korrelatoren erhalten. Für  $\langle A_r B_{r+1} \rangle$  ist das

$$\frac{d}{dt} \langle \langle A_r B_{r+1} \rangle \rangle = -(\gamma + \beta) \langle A_r B_{r+1} \rangle + \beta ( \langle A_r A_{r+1} B_{r+2} \rangle - \langle B_{r-1} A_r B_{r+1} \rangle )$$

Um die entstehenden Ausdrücke weiterhin systematisch untersuchen zu können, ist es nützlich sogenannte  $n$ -Punkt-Clusterfunktionen folgendermaßen zu definieren. Da ist zum einen

$$H_r(n) = \langle A_r A_{r+1} \dots A_{r+n-1} B_{r+n} \rangle$$

die einseitig begrenzte  $n$ -Clusterfunktion und zum anderen

$$G_r(n) = \langle B_{r-1} A_r A_{r+1} \dots A_{r+n-1} B_{r+n} \rangle$$

die beidseitig begrenzte. Es ist leicht zu sehen, dass diese Funktionen den Wert 0 haben, falls ein Platz innerhalb des Clusters im Status  $R$  mit Wahrscheinlichkeit 1 ist. Diese so definierten Funktionen repräsentieren das Verhalten, dass Blöcke aus  $S$ -Plätzen ( $A_r$ ) nur von den Rändern des Clusters aus durch infizierte Plätze im Status  $I$  vermindert, d. h. umgewandelt werden können. Hier wird deutlich, dass es genau dieser Punkt ist, der es erlaubt, die Gleichungen analytisch zu lösen. In diesem eindimensionalen Modell besteht der Rand eines  $S$ -Clusters aus höchstens zwei  $I$ -Plätzen, die den Cluster begrenzen. Das ermöglicht obige einfache Beschreibung dieser Cluster, welche in höherdimensionalen Systemen so nicht gegeben ist. Diese Eigenschaft des eindimensionalen Modells gibt uns die Möglichkeit das beschriebene Verfahren anzuwenden.

Unter der Annahme der Translationsinvarianz der Anfangsverteilung ist es möglich, die Clusterfunktionen zu vereinfachen, indem durch sie die  $r$ -Abhängigkeit entfällt. Durch weitere Rechnungen nach obigen Muster kann man zeigen, dass die Clusterfunktionen  $H(n)$  und  $G(n)$  folgendes gekoppeltes System von Differentialgleichungen

$$\frac{d}{dt} H(n) = -(\gamma + \beta)H(n) + \beta(H(n+1) - G(n)), \quad (2.10)$$

$$\frac{d}{dt} G(n) = -2(\gamma + \beta)G(n) + 2\beta G(n+1) \quad \text{mit } n \geq 1 \quad (2.11)$$

erfüllen. Die Bedeutung dieser Evolutionsgleichungen ist direkt zu erkennen. Die Änderung des Erwartungswertes, der durch  $H(n)$  beschrieben wird, kann wie folgt durch die Terme auf der rechten Seite beschrieben werden. Die Zunahme erfolgt proportional zum Vorhandensein größerer Cluster  $H(n+1)$ , denn mit der Rate  $\beta$  wird das suszeptible Element  $A_{r+n}$  durch das infektiöse  $B_{r+n+1}$  infiziert und trägt somit zum Zuwachs auf der rechten Seite bei. Die Abnahme ist auf mehrere Ursachen zurückzuführen. Erstens scheiden infizierte Individuen  $B_{r+n}$  mit der Rate  $\gamma$  aus, indem sie in den Typ  $R$  umgewandelt werden. Zweitens schreitet die Infizierung mit Rate  $\beta$  auch am rechten Clusterrand fort, an der Stelle  $r+n-1$  wird das  $S$ -Teilchen in den Status  $I$  gesetzt, d. h. es erfolgt eine Abnahme auf der rechten Seite. Der letzte Term auf der rechten Seite, der zur Abnahme beiträgt, ist der Kopplungsterm  $-\beta G(n)$ , über den die beiden Gleichungen verbunden sind. Diese Kopplung über die  $G$ -Cluster unterstreicht nochmals die schon erwähnte nichtlineare Natur dieses Modells. Bei der Evolutionsgleichung für den Erwartungswert  $G(n)$  sind die Betrachtungen analog. Es handelt sich bei ihr um eine inhomogene lineare Differentialgleichung erster Ordnung mit konstanten Koeffizienten. Die Inhomogenität auf der rechten Seite ist  $G(n+1)$ . Die Lösung ist

$$G(n, t) = e^{-2(\gamma+\beta)t} \left( G(n, 0) + 2\beta \int_0^t G(n+1, t') e^{2(\gamma+\beta)t'} dt' \right).$$

## 2 Methoden

Durch weiteres rekursives Einsetzen erhält man schließlich

$$G(n, t) = e^{-2(\gamma+\beta)t} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2\beta t)^l}{l!} G(l+n, 0). \quad (2.12)$$

Setzt man  $G(n, t)$  in Gleichung (2.11) ein und löst diese Differentialgleichung in gleicher Weise, so ergibt sich

$$H(n, t) = e^{-(\gamma+\beta)t} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\beta t^l}{l!} H(l+n, 0) - \beta \int_0^t (e^{-(\gamma+\beta)(t-t')}) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{[\beta(t-t')]^l}{l!} G(l+n, t') dt' \quad (2.13)$$

für den anderen Clustertyp. Diese Lösungen sind exakt für beliebige translationsinvariante Anfangsverteilungen. Übersetzt in die ursprüngliche „Gitterschreibweise“ kann man die Anfangsverteilung der verschiedenen Typen von Individuen als Anfangsbedingung der Clusterfunktionen wie folgt schreiben:

$$G(n, 0) = n_S(0)^n n_I(0)^2 \text{ und } H(n, 0) = n_S(0)^n n_I(0).$$

Die  $n_I(0)$  und  $n_S(0)$  stehen hier für die Anfangsdichten die infektiösen ( $I$ ) und empfänglichen Individuen ( $S$ ). Setzt man dies nun in die Gleichungen (2.13) und (2.12) ein, so erhält man

$$G(n, t) = n_S(0)^n n_I(0)^2 e^{-2t/\tau}$$

und

$$H(n, t) = n_S(0)^n n_I(0) e^{-t/\tau} \left\{ 1 - \beta n_I(0) \tau [1 - e^{-t/\tau}] \right\} \quad (2.14)$$

mit  $\tau$  der Relaxationszeit, die durch

$$\tau = \frac{1}{\gamma + \beta[1 - n_S(0)]}$$

definiert ist. Besonderes Augenmerk ist hier auf den Fakt zu legen, dass die Relaxationszeit  $\tau$  von den Anfangsbedingungen, nämlich der anfänglichen Dichte der empfänglichen Knoten  $n_S(0)$ , abhängt. Dies ist auf die nichtergodische Natur des Prozesses zurückzuführen. Beide Clusterfunktionen fallen monoton zu Null mit wachsender Zeit  $t \rightarrow \infty$  ab.

Mit den oben mittels Quantenformalismus erhaltenen exakten Resultaten für die Erwartungswerte der Clusterfunktionen ist es nun möglich, die genaue Zeitentwicklung der Dichten für jede Spezies zu ermitteln. Da sind zum einen

$$n_S(t) = \langle A_r \rangle \quad \text{und} \quad n_I(t) = \langle B_r \rangle,$$

die Werte für die  $S$ - bzw.  $I$ -Individuen, und zum anderen ergibt sich der Wert für Individuen des Typs  $R$  aus  $n_R(t) = 1 - n_I(t) - n_S(t)$ , da immer  $n_I(t) + n_S(t) + n_R(t) = 1$  für jeden Zeitpunkt  $t$  gilt. Zusammen mit den Gleichungen (2.8) und (2.9) erhält man

$$\frac{d}{dt} n_S(t) = -2\beta H(1, t)$$

sowie

$$\frac{d}{dt}n_I(t) = 2\beta H(1,t) - \gamma n_I(t).$$

Zu bemerken ist, dass die Funktion  $H(1,t)$  für alle  $t$  positiv ist, d.h. es ist sofort zu erkennen, dass die Dichte der  $S$ -Individuen streng monoton fällt, denn es werden keine Knoten dieses Typs neu erzeugt während der gesamten Prozedur. Um nun  $n_S(t)$  zu ermitteln, setzt man die Gleichung (2.14) mit  $n = 1$  in die erste Gleichung oben ein und löst die Differentialgleichung. Es gilt

$$n_S(t) = n_S(0) - 2\beta\tau n_S(0)n_I(0) \left\{ (1 - e^{-t/\tau}) \times (1 - \beta\tau n_I(0)) + (1 - e^{-2t/\tau}) \frac{\beta\tau n_I(0)}{2} \right\}.$$

Es fällt auf, dass der Abfall der Dichte der  $S$ -Knoten nicht rein arrheniusartig verläuft. Er ist vielmehr durch die Superposition zweier unterschiedlicher Relaxationszeiten geprägt.

Im Langzeitverhalten stellt sich für  $n_S(t)$  ein nicht triviales stationäres Verhalten ein und ist gegeben durch die Gleichung

$$n_S^* = \lim_{t \rightarrow \infty} n_S(t) = n_S(0)(1 - \beta\tau n_I(0))^2.$$

In der selben Art wie oben findet man den Erwartungswert der Dichte der infektiösen Individuen

$$n_I(t) = n_I(0)(e^{-\gamma t} + 2\beta\tau n_S(0)f(t))$$

mit

$$f(t) = \frac{e^{-t/\tau} - e^{-\gamma t}}{\gamma\tau - 1} (1 - \beta n_I(0)\tau) + \frac{\beta n_I(0)\tau}{\gamma\tau - 2} (e^{-2t/\tau} - e^{-\gamma t}).$$

Der Erwartungswert der  $R$ -Individuen ist, wie erwähnt

$$n_R(t) = 1 - n_I(t) - n_S(t).$$

## 2.2 Numerische Methoden

Im Rahmen dieser Arbeit kamen verschiedene numerische Methoden zum Einsatz. Häufig handelt es sich um Simulationsverfahren, die dem Grunde nach Monte-Carlo-Simulationen sind, wie sie in Abschnitt 3.2.2 vorgestellt werden. Die hier verwendete Simulation stellt eine direkte numerische Realisierung des in Abschnitt 2.1 vorgestellten Dreizustandemodells dar und soll nun im Folgenden exemplarisch beschrieben werden. Die  $N$  Teilchen des Systems sind linear auf einem Graphen angeordnet und können die drei Zustände  $S$ ,  $I$  und  $R$  annehmen. Diese Situation ist in Abbildung 2.1 dargestellt. Die Simulation wird dann mittels folgender Vorschrift durchgeführt.

## 2 Methoden

1. INITIALISIEREN (von den  $N$  Plätzen des Graphen werden zufällig  $S_0$  als  $S$ -,  $I_0$  als  $I$ - und  $R_0$  als  $R$ -Typ gekennzeichnet)
2. WIEDERHOLE
3. zufällige Auswahl eines Platzes  $i$
4. Ziehe eine Zufallszahl  $\eta$  mit  $0 < \eta \leq 1$ .
5. Wenn Platz  $i$  Typ  $S$  und der rechte Nachbar vom Typ  $I$ , dann setze Platz  $i$  in den Status  $I$ , falls

$$0 < \eta \leq \frac{1}{2} \frac{\beta}{\beta + \gamma}.$$

6. Wenn Platz  $i$  Typ  $S$  und der linke Nachbar vom Typ  $I$ , dann setze Platz  $i$  in den Status  $I$ , falls

$$\frac{1}{2} \frac{\beta}{\beta + \gamma} < \eta \leq \frac{\beta}{\beta + \gamma}.$$

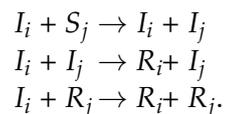
7. Wenn Platz  $i$  Typ  $I$ , dann setze Platz  $i$  in den Status  $R$ , falls

$$\frac{\beta}{\beta + \gamma} < \eta \leq 1.$$

8. BIS die Zahl der  $I$ -Plätze Null ist

Diese Art von Simulationen lässt sich leicht auf höhere Dimensionen übertragen. Dazu sind lediglich die Nachbarschaftsbeziehungen in den Punkten 5 und 6 anzupassen bzw. zu erweitern, denn im vorigen linearen Modell gibt es nur Beziehungen zum rechten oder linken Nachbarn. Mit der Dimension des Modells steigt auch der Aufwand. Im Fall von zwei Dimensionen gibt es auf einem quadratischen Gitter vier Nachbarn und bei drei Dimensionen sind es sechs die zu berücksichtigen sind.

Es scheint aussichtsreich, die Entwicklung eines SIR-Systems auf anderen Netzwerktypen zu untersuchen. In [98] ist eine Simulation beschrieben, bei der die SIR-Reaktionen auf einem hierarchischen Netzwerk nach dem Modell aus [93] ablaufen. Nachdem aus der Menge aller Knoten, die sich anfänglich im Status  $S$  befinden, zufällig ein Knoten ausgewählt und infiziert wird, so dass er den Status  $I$  erhält, erfolgt der weitere Verlauf der Simulation nach den folgenden Regeln:



Befindet sich ein Knoten  $i$  im Status  $I$  und erhält dieser Kontakt zu einem Knoten  $j$  im Status  $S$ , so wird dieser ebenfalls in den Status  $I$  gesetzt. Ist  $j$  jedoch vom Typ  $I$  oder  $R$ , dann wird  $i$  selbst in den Status  $R$  versetzt. Am Ende der Simulation erkennt man an den Knoten mit dem Zustand  $R$  die Größe und die Verteilung der Epidemie im Netzwerk.

Eine mögliche Modifikation der Simulation stellt die Einführung einer Wartezeit  $\tau$  dar. Der Übergang von  $S$  zu  $I$  bleibt wie er bereits ist, d. h. er erfolgt instantan sobald ein  $S$ -Knoten Kontakt zu einem  $I$ -Knoten bekommt. Der Übergang  $I \rightarrow R$  wird nun durch eine mittlere Wartezeit  $\langle \tau \rangle$  bestimmt. Nach einer Infektion beginnt die Krankheit und dauert die Zeit  $\langle \tau \rangle$ . Nach deren Ablauf befindet sich das Individuum im Status  $R$ , es ist immun oder tot. Die Simulation verläuft ähnlich wie oben, ein anfänglich zufällig ausgewählter Knoten wird infiziert. Während des Ablaufs der Zeitspanne  $\langle \tau \rangle$  infiziert er über seine Kontakte weitere Knoten, die es dann ebenso infektiös sind und die Epidemie im Netzwerk verbreiten.



## 3 Modellklassen

Mit Hilfe von Netzwerkmodellen lassen sich sowohl natürliche Systeme aus den Bereichen Ökologie, Neurologie, Chemie u. a. als auch technische Systeme (z. B. physisches Internet) und verschiedenste soziale Systeme beschreiben. Gerade dem ersten wie auch dem letzten Bereich wurde viel Aufmerksamkeit geschenkt. Herausragende Veröffentlichungen, die die Anwendung von Netzwerkmodellen zur Untersuchung von sozialen Strukturen zum Inhalt haben, sind [60], [94] und [93]. Grundlegendes zum Thema Netzwerkanalyse in den Sozialwissenschaften findet man in [62] und [100].

### 3.1 Soziale Netzwerke

Viele Teilaspekte menschlicher Gesellschaften, verstanden als Menge von Individuen und ihrer Kontakte in einem sozialen Raum, lassen sich herausgelöst aus dem Gesamtkontext mit Hilfe von speziellen Netzwerkmodellen beschreiben. Möglich ist diese partielle Betrachtung einzelner sozialer Vorgänge durch die Vielfalt der Interaktionen zwischen den Individuen einer Gesellschaft. Die Frage, wie sich Informationen oder Krankheiten in einer Gruppe Menschen ausbreiten, kann nicht beantwortet werden, ohne das Beziehungsgeflecht zwischen ihnen zu betrachten. Gerade diese Interaktionen stehen im Mittelpunkt der Arbeit [14], in der Geldbewegungen untersucht wurden, um daraus Rückschlüsse über das Reiseverhalten und die Ausbreitung von Epidemien mittels dieser Verbindungen zu ziehen.

#### 3.1.1 Das Small-World-Phänomen

Wenn man nach einem passenden Netzwerkmodell für derartige Verhältnisse sucht, so stellt man fest, dass es sich hierbei um ein Netzwerk handelt, welches nicht dem klassischen Typen entspricht. In einer ersten naiven Herangehensweise würde man annehmen, dass man das soziale Beziehungsnetzwerk als ein zufälliges Netzwerk mit einem normal verteilten Vernetzungsgrad beschreiben kann - im Durchschnitt hätten alle Menschen eine feste Zahl an Kontakten, einige haben weniger, andere mehr. Dies hätte zur Folge, dass man eine relativ lange mittlere Pfadlänge zu einem beliebigen anderen Menschen hätte, da man über viele Stationen gehen müsste, um ihn zu erreichen. 1969 führte der Soziologe Stanley Milgram das berühmte „*Small World*“-Experiment [88] durch. Dabei lies er die Teilnehmer einen Brief an eine beliebige Zielperson in der folgenden Art und Weise schicken:

1. Auswahl von Personen in geeigneten Start- und Zielorten. Milgram wählte damals die Personen ausschließlich aus Städten in den USA. Er achtete auf eine hohe geographische als auch soziale Distanz.

### 3 Modellklassen

2. Die Aufgabe besteht darin, die Sendung an eine persönlich bekannte Person zu schicken, von der man glaubt, dass sie dem Empfänger näher steht.
3. Diese Person wiederholt den Vorgang, es sei denn, sie kennt den Empfänger persönlich. Bei Milgram hieß das, die Personen kennen sich auf der Basis von Vornamen.

Gemessen wurden dann die jeweilige Pfadlänge, d. h. die Anzahl der benötigten „Zwischenstationen“ bis zum Erreichen des Empfängers. Das Experiment wurde in Nordamerika durchgeführt und erstaunlicherweise wurde eine mittlere Pfadlänge von 5,5 (sechs) ermittelt. Dieses Ergebnis prägte die bekannte Phrase „*six degrees of separation*“. Das ist insofern erstaunlich, als zwei beliebige Menschen in der Regel doch einen ziemlich hohen sozialen Abstand zueinander haben (im Sinne ihres Beziehungsstatus), d. h. die Dichte des Netzwerkes ist eigentlich gering.

Ein gängiges Erklärungsmuster für dieses Phänomen liefert das Modell der skalenfreien Netzwerke. Das sind Netzwerke, bei denen es keinen typischen Vernetzungsgrad gibt. Die Vernetzungsgradverteilung entspricht vielmehr einem Potenzgesetz  $P(k) \propto k^{-\gamma}$ . Folgende Eigenschaften kennzeichnen solche skalenfreie Netze:

1. Ein hoher Grad an *abkürzenden Wegen*, was die überraschend kleine durchschnittliche Pfadlänge zur Folge hat, obwohl die „Dichte“ des Netzwerkes, gemessen als das Verhältnis der realen zu den rechnerisch möglichen Kontakten, gering ist.
2. Die *Transitivität* bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeit hoch ist, wenn zwei Knoten, die jeweils mit einem dritten Knoten verbunden sind, ebenfalls miteinander verbunden sind.
3. Unter einem *geringem Durchmesser* versteht man, dass sich eine Nachricht, die von einem beliebigen Knoten emittiert wird, in kürzester Zeit alle Knoten des Netzwerkes (theoretisch) erreicht.

Die Realisierung von Netzen, die derartige Eigenschaften besitzen, beruht auf der Tatsache, dass es hochvernetzte Knoten gibt, so genannte *hubs* (hochvernetzte Knoten), während ein Großteil der Knoten nur wenige Verbindungen besitzt. Dies ist eine Eigenschaft von Netzen mit obiger Potenzgesetzverteilung der Vernetzung. Diese haben im Gegensatz zu den gewöhnlichen Knoten, die meistens nur lokale Verbindungen haben, auch langreichweitige, überregionale Kontakte.

Durch obige Eigenschaften bedingt, breiten sich in solcherart Netzwerken sowohl Informationen als auch Krankheiten im Falle des Netzwerkes der sozialen Kontakte zwischen den Menschen oder Viren in Computernetzwerken gemäß Punkt 3 sehr schnell aus. Die spezielle Topologie solcher Netze macht sie relativ robust gegenüber den zufälligen Ausfall einiger Knoten oder Verbindungen. Fallen jedoch gezielt die hoch vernetzten Knoten aus, zerfällt das Netz ziemlich schnell in Teilnetze.

Beispiele für skalenfreie Netze sind

1. das Netzwerk von zusammen auftretenden Schauspielern ( $\gamma = 2,3$ ) (vgl. [3, 101]),
2. das Stromnetz in Teilen der USA ( $\gamma = 4$ ) (vgl. [3]),

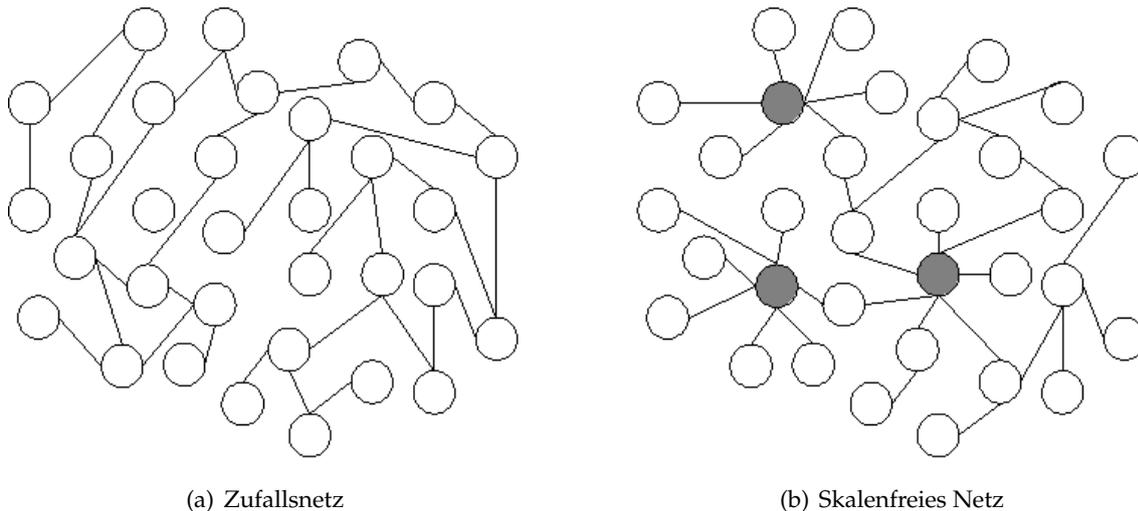


Abbildung 3.1: Verschiedene Netzwerktypen im Vergleich  
 ○ „normale“ Knoten      ● hubs      — bonds

3. die Verlinkung des WWW ( $\gamma = 2.1$ ) (vgl. [3]),
4. Email-Netzwerke [25] sowie
5. soziale Netzwerke wie z. B. Facebook oder StudiVZ.

Bei den Beispielen 4 und 5 ist es nicht verwunderlich, dass es sich bei ihnen um skalenfreie Netze handelt. Sie sind gewissermaßen Abbilder des realen Beziehungsnetzwerkes der Menschen. Sie sind allerdings stärker vernetzt, da Kontakte in ihnen leichter etabliert werden und nicht zwingend ein Pendant in der Realität vorhanden sein muss.

#### Ein hierarchisches Beziehungsnetzwerkmodell

Um das soziale Netzwerk der zwischenmenschlichen Beziehungen zu beschreiben, benötigt man ein Netzwerkmodell, das obige Eigenschaften möglichst gut reproduziert. Eine Möglichkeit, die an dieser Stelle vorgestellt und im Fortgang verwendet werden soll, wird in [93] beschrieben. Um ein soziales Netzwerk nach dieser Methode zu konstruieren, werden die  $N$  Agenten (Knoten des Netzwerkes) in Untergruppen der Stärke  $\langle g \rangle$  eingeteilt. Diese Untergruppen sind durch besonders starke soziale Bindungen gekennzeichnet. Sie stehen beispielsweise für familiäre Beziehungen, Arbeitsgruppen oder Freundeskreise bzw. lokale Beziehungen im Wohnquartier. Die Einteilung der  $N$  Knoten in diese Subgruppen erfolgt durch deren Aufteilung in  $b$  Teile  $M_n$  ( $n = 1 \dots b$ ). Diese Teilung in  $b$  Teile wird nun für jedes der  $M_n$  wiederholt, bis nach  $(l - 1)$  Teilungen Gruppen der Stärke  $g$  entstanden sind und die Struktur  $l$  Niveaus hat. Für  $g$  gilt  $1 \leq g \leq N$  und eine typische Größenordnung für  $g$  ist  $10^1 \dots 10^2$ . Eine so konstruierte Hierarchie, die einem CAYLEY-Baum gleicht, ist eindeutig durch die Größen  $b$ ,  $l$  und  $N$  bestimmt. In Abbildung 3.2 ist ein solcher Graph für  $b = 2$  und  $l = 4$  dargestellt. Da  $\langle g \rangle = 6$  ist, ergibt sich für  $N = b^{l-1} \langle g \rangle = 48$ .

Jeder dieser Graphen in Abbildung 3.2 steht für eine solche Klassifizierung. Die Aufteilung in Untergruppen ist nach [93] nicht eindeutig und jede Person im Netzwerk ist in

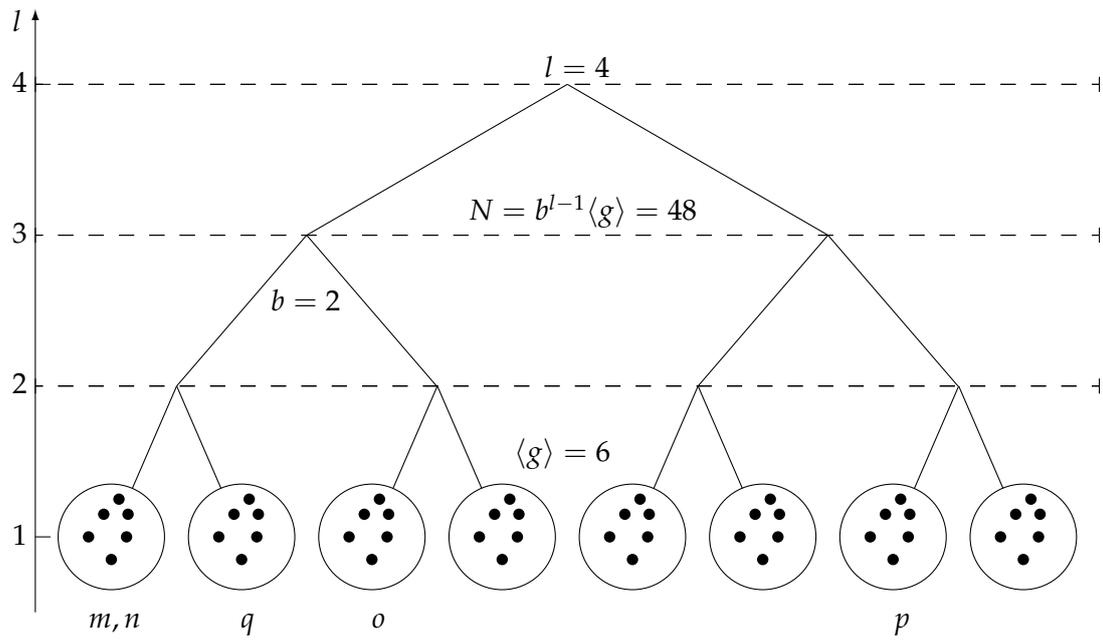


Abbildung 3.2: Darstellung eines hierarchischen Baumes zur Konstruktion des Abstandes  $x_{ij}$

mehrere Graphen einsortiert. So steht z. B. ein Manager einer international tätigen Firma im engen Kontakt mit Geschäftspartnern weltweit. Im privaten Kontext, der einer anderen Einteilung entspricht, hat er Kontakte zu Familienmitgliedern, Freunden u. a. Personen. Diese Einteilung ist auch nicht mit der Einteilung in soziale Schichten zu verwechseln, so ist es z. B. möglich, dass über Dienstleistungsverhältnisse schichtübergreifende Kontakte bestehen. Jede Hierarchie repräsentiert die verschiedenen Lebensbereiche der Individuen des Netzwerkes. Üblich ist eine Aufteilung in Geschäfts- oder berufliche Kontakte, familiäre Kontakte und die Kontakte im Freundeskreis. Zusätzlich sind noch Kontakte aus den Bereichen Vereinsleben oder Hobbys denkbar.

Eine zentrale Größe in diesem Modell ist der *soziale Abstand*. Sie liefert ein Abstandsmaß für die Mitglieder des Beziehungsnetzwerkes im Sinne einer sozialen Distanz und bestimmt über dessen Topologie. Im Rahmen dieses Modells definiert man zunächst den folgenden Abstand

$$x_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{wenn } i \text{ und } j \text{ in der selben Untergruppe sind.} \\ k, & \text{wenn } k \text{ das erste Niveau ist, über das eine Verbindung} \\ & \text{zwischen } i \text{ und } j \text{ hergestellt werden kann.} \end{cases} \quad (3.1)$$

So ist in Abbildung 3.2  $x_{mn} = 1$ . Für die Knoten  $n$  und  $q$  ist also  $x_{nq} = 2$  und für  $n$  und  $o$  gilt  $x_{no} = 3$ . Den Abstand  $x_{op} = 4$  haben die Knoten  $o$  und  $p$ .

Die so eingeführte Größe  $x_{ij}$  kann man in jeder der  $h$  Dimensionen bilden, d. h.  $x_{ij}^h$ . Der *soziale Abstand*  $y_{ij}$  im Netzwerk ist somit

$$y_{ij} = \min_h x_{ij}^h.$$

Die so eingeführte Größe ist allerdings keine Metrik im mathematischen Sinne. Sie liefert zwar eine Abbildung  $y : M \times M \rightarrow \mathbb{R}$ , wobei  $M$  die Menge aller Knoten des Netzwerkes ist, aber die Dreiecksungleichung  $y_{ij} \leq y_{ik} + y_{kj}$  ist nicht erfüllt. Als Gegenbeispiel sei folgendes Szenario genannt. Es seien zwei Graphen  $H = 2$  mit  $l \geq 2$  gegeben. Wir betrachten den Abstand zweier Individuen  $y_{ij}$ . Für diesen gelte  $y_{ij} \geq 2$ , da  $i$  und  $j$  in beiden Hierarchien in verschiedenen, weit entfernten Untergruppen sind. Ein drittes Individuum  $k$  befände sich in  $h_1$  zusammen mit  $i$  in einer Untergruppe und in  $h_2$  mit  $j$ . Daraus folgte dann  $y_{ik} = 1$  sowie  $y_{kj} = 1$  und somit  $y_{ij} \geq y_{ik} + y_{kj} = 1 + 1 = 2$ . Ein weiterer Punkt, der Raum zur Interpretation lässt und der entsprechenden Situation angepasst werden muss, ist die geforderte Eigenschaft der Symmetrie der Kontakte in der Form, dass  $y_{ij} = y_{ji}$ . Zunächst kommt es darauf an, was man unter „Kontakt haben“ versteht. Es ist beispielsweise oft so, dass man recht viele Personen des öffentlichen Lebens kennt, aber in der Regel nicht zu deren Bekanntenkreis gehört. Kann man in einem solchen Fall von „Kontakt“ reden? Es hängt auf jeden Fall von der konkreten Problemstellung ab. Bei der Untersuchung von Email-Netzwerken oder sozialen Netzwerken im Internet, wie z. B. Facebook oder StudiVZ, ist der Punkt unproblematisch, denn dort existieren Adressbücher bzw. Freundeslisten, die einen nicht zwangsläufig symmetrischen Kontakt anzeigen. Beim Small-World-Experiment [88] setzte Milgram als Kontakt voraus, dass sich die Personen persönlich kennen. Als Kriterium für das Bestehen eines Kontaktes wird die Tatsache genutzt, dass die jeweiligen Personen sich mit Vornamen ansprechen. Die Kontakte sind

### 3 Modellklassen

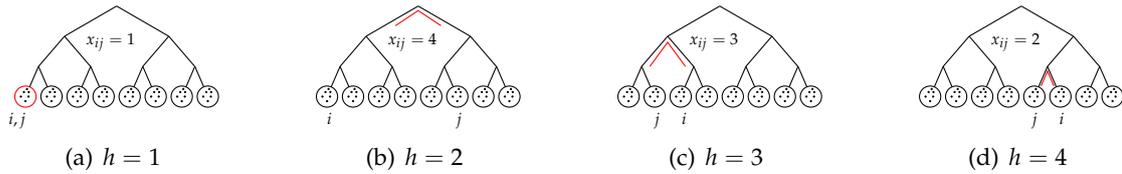


Abbildung 3.3:  $H = 4$ ,  $y_{ij} = 1$

in diesem Sinne symmetrisch. Untersucht man beispielsweise die Ausbreitung von Hepatitis C oder Aids über das soziale Netzwerk, so ist dabei einzubeziehen, dass ein enger Kontakt im topologischen Sinne erforderlich ist, um diese Krankheiten zu übertragen, d. h. die Beziehungen sind in der ebenfalls Regel symmetrisch. Herauszuheben ist hier nochmals der Fakt, dass der soziale Abstand größtenteils kein räumlicher Abstand ist.

Im Folgenden wird nun beschrieben, wie das soziale Netzwerk nach [93] konstruiert wird. Wichtig ist es, in diesem Zusammenhang herauszustellen, dass die Kontaktwahrscheinlichkeit zweier Knoten entscheidend von ihrem sozialen Abstand abhängt. Je größer der Abstand, desto geringer ist die Kontaktwahrscheinlichkeit zwischen ihnen. Am größten ist sie innerhalb der bestehenden Untergruppen mit  $x_{ij} = 1$ , d. h. zu Individuen aus dem unmittelbaren Umfeld (Freunde, Kollegen, ...). Kontakte zu entfernteren Personen sind durchaus möglich, aber aufgrund der geringeren Wahrscheinlichkeit eher selten. Modelliert wird dies, indem zu einem beliebigen Knoten  $i$  des zu erstellenden Netzwerkes ein sozialer Abstand  $x$  (vgl. Gleichung (3.1)) mit der Wahrscheinlichkeit

$$p(x) = ce^{-\alpha x} \quad (3.2)$$

zufällig bestimmt wird. Aus der Menge aller in Frage kommenden Knoten, die den Abstand  $x$  von  $i$  haben, wird ein Knoten  $j$  ebenfalls zufällig bestimmt und die Verbindung  $i \leftrightarrow j$  etabliert. Die Konstante  $c = 1/\sum_{n=1}^l e^{-\alpha n}$  dient der Normierung, da es sich bei  $p(x)$  um eine Wahrscheinlichkeitsdichte handelt und somit  $1 = \int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx$  gelten muss.  $\alpha$  ist ein Parameter, der die Affinität im soziologischen Sinne bestimmt. In diesem Modell steuert er die Kontaktwahrscheinlichkeiten für verschiedene Abstände  $x$ . Ist  $\alpha$  groß ( $e^{-\alpha} \ll 1$ ) so gibt es nur kurzreichweitige Verbindungen zu engen Nachbarn. Das Netzwerk zerfällt in seine Untergruppen, die untereinander keinen Kontakt haben. Sinkt  $\alpha$ , so werden langreichweitige Verbindungen immer wahrscheinlicher bis hin zum Zustand in dem jedes Individuum  $i$  mit gleicher Wahrscheinlichkeit mit einem beliebigen anderen Individuum  $j$  verbunden ist.

Diese Prozedur wird fortgesetzt, bis ein Netzwerk entstanden ist, in dem alle Knoten im Mittel  $z$  Verbindungen haben. Übersetzt heißt dies, alle Personen im Beziehungsnetzwerk haben durchschnittlich  $z$  Freunde/Bekannte. In [93] ist beschrieben, wie mit diesem Modell bei geeigneter Parameterwahl ein Netzwerk entsteht, das ähnliche Pfadlängen aufweist, wie das Beziehungsgeflecht, welches die Autoren von [88] gefunden zu haben glaubten. Der *Small-World*-Effekt konnte mit diesem Modell reproduziert werden.

### 3.1.2 Das SIR-Modell

In vielen Fällen ist es erstrebenswert, Infektionskrankheiten mathematisch zu modellieren, um z. B. ihr epidemiologisches Verhalten zu untersuchen bzw. vorherzusagen oder geeignete Impfstrategien im Falle einer drohenden Ausbreitung zu entwickeln. Eine zentrale Frage ist hierbei oft, ob eine ausgebrochene Krankheit *endemisch* ist, d. h. sie besteht in einer Population ohne äußere Einflüsse fort. Die entscheidende Größe hierbei ist die sogenannte *Basisreproduktionsrate*  $R_0$ , die die durchschnittliche Zahl der Folgefälle angibt, die durch einen Infizierten in einer Population hervorgerufen werden. Eine Infektionskrankheit ist also endemisch, wenn  $R_0 = 1$  ist, d. h. ein Kranker steckt im Mittel eine weitere Person an. Gilt  $R_0 > 1$ , so entwickelt sich eine Epidemie. Ist  $R_0 < 1$ , so endet die Krankheit in der Population. Bei solchen Betrachtungen setzt man natürlich voraus, dass die Population homogen gemischt ist und die Individuen ihre Kontakte zufällig knüpfen, d. h. dass sie sich nicht auf Gruppen/Schichten beschränken. Bei der Betrachtung der Gesamtbevölkerung sind diese Annahmen nicht so ohne Weiteres gerechtfertigt (vgl. Abschnitt 3.1.1). Falls man jedoch, wie es sich häufig anbietet, spezielle Gruppen der Bevölkerung untersucht oder diese Betrachtungen auf nichtbiologische Systeme (z. B. Computernetzwerke) anwendet, kann man davon ausgehen.

Ein klassischer Ansatz bei der mathematischen Modellierung von Epidemien ist das einfache **SIR-Modell** (*Susceptible–Infected–Recovered–Model*). Es beschreibt die Ausbreitung von Infektionskrankheiten mit Immunitätsbildung. Es stellt eine Erweiterung des einfachen SI-Modells dar. Diese Art von Modellen zur Beschreibung von Krankheitsausbrüchen stellen eine extreme Vereinfachung des Problems dar. Der Coarse-Grained-Vorgang besteht hier hauptsächlich in den folgenden Annahmen. Zum Ersten können die Personen nur eine bestimmte Anzahl von Zuständen annehmen, die jeweils eine Krankheitsphase bezeichnen. Zweitens ist der Ansteckungsvorgang auf einen Kontaktprozess reduziert. Letztenendes gesunden die Kranken einfach mit einer bestimmten Rate. Selbst dieses grobe Modell ist in der Lage, bestimmte Epidemien gut zu beschreiben, wie es bereits in [45] am Beispiel einer Pestepidemie in Bombay gezeigt wurde. Im Folgenden wird das SIR-Modell genau dargelegt. Die Individuen einer als konstant angenommenen Population können einen der drei Zustände annehmen:

S: Das Individuum ist nicht infiziert und empfänglich (nicht immun).

I: Das Individuum ist infiziert und ansteckend.

R: Das Individuum ist immun/tot.

Die Dynamik des Systems wird durch folgende Übergangsregeln bestimmt:



### 3 Modellklassen

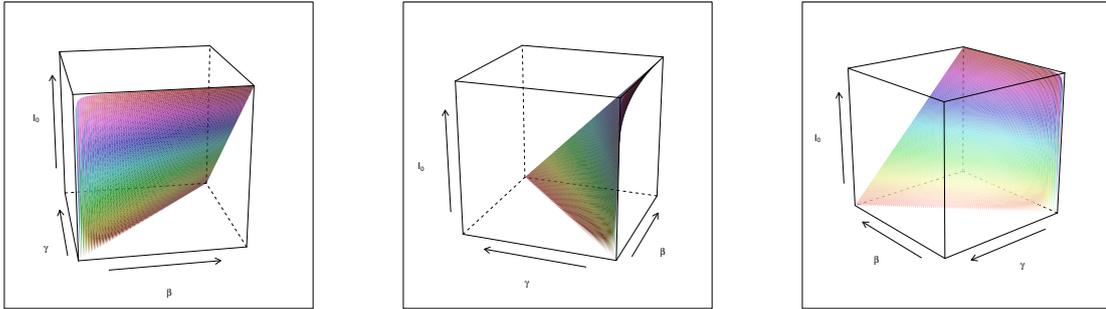


Abbildung 3.4: Phasendiagramm in verschiedenen Ansichten. Dargestellt ist  $I_0$  in Abhängigkeit von den Raten  $\beta$  und  $\gamma$  aus Gleichung (3.4)

Die ersten beiden Prozesse beschreiben die Erkrankung eines empfänglichen Individuums (*Susceptible*) bei Kontakt mit einem Kranken (*Infectious*). Der letzte Prozess in Gleichung (3.3) charakterisiert den Gesundungsvorgang, wobei ein krankes Individuum gesundet und die Immunität ausbildet bzw. verstirbt (*Recovered*).

Analog zu den Konzentrationen in der chemischen Reaktionskinetik wird im klassischen Mean-Field-SIR-Modell [45] zur Beschreibung einer Epidemie die Zahl der *S*-, *I*- und *R*-Individuen bestimmt. Bei der Verbreitung von Krankheiten spielen *Kontaktprozesse* eine entscheidende Rolle. Zur Übertragung der Krankheit muss es also zuerst zu einem Kontakt zwischen einem Kranken *I* und einem nicht immunisierten Gesunden *S* kommen. Dazu nimmt man an, dass ein einzelner Gesunder *S* in einer homogenen Population eine durchschnittliche Kontaktrate *C* zu anderen Individuen hat. Davon sind  $I/N$  Kontakte möglicherweise infektiös. Die *Infektionswahrscheinlichkeit* beträgt  $\tilde{\beta}$ . Die Ansteckungsrate der gesunden Individuen *S* ist  $\tilde{\beta}CSI/N$ . In der einschlägigen Literatur ([6, 18, 56, 91]) ist es üblich, Ausdrücke wie  $-\beta SI$  zu verwenden. Hier gilt  $\beta = \tilde{\beta}C/N$ , wobei  $\beta$  dann ein Übergangskoeffizient in Einheiten [1/s] ist. Die Größen  $S(t)$ ,  $I(t)$  und  $R(t)$  ergeben sich als Lösung von drei gekoppelten Differentialgleichungen.

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= -\beta SI \\ \frac{dI}{dt} &= \beta SI - \gamma I \\ \frac{dR}{dt} &= \gamma I\end{aligned}\tag{3.4}$$

mit den Anfangsbedingungen  $I(0) = I_0$ ,  $R(0) = 0$ ,  $S(0) = S_0 = N - I_0$  und  $S + I + R = N$ . Um zu entscheiden, ob der Ausbruch endemisch ist, genügt es,  $\frac{dI(t)}{dt} = \dot{I}$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  in der 2. Gleichung zu betrachten. Definiert man  $\rho := \gamma/\beta$ , so ist

$$\dot{I} = \beta SI - \gamma I = \beta(S - \rho)I.$$

Da  $\beta > 0$  und  $I > 0$  ist, gilt  $\dot{I} \leq 0$ , falls  $S \leq \rho$ . Gibt es also für  $t = 0$  ein  $S_0 < \rho$ , so fällt  $I(t)$  monoton, d. h. die Infektionskrankheit erlischt. Ist im Gegensatz dazu  $S_0 > \rho$ , steigt  $I(t)$  an bis ein Maximum bei  $t = t_{\max}$  erreicht ist. Es ist  $S(t_{\max}) = \rho$ , die Krankheit breitet

sich aus. Für  $t > t_{\max}$  fällt  $I(t)$  wieder monoton, da in diesem Fall  $S(t) < \rho$  ist und somit  $\dot{I} < 0$  gilt. In Abbildung 3.4 sind  $I_0$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  für den Fall  $S - \rho = 0$  dargestellt. Für Punkte unterhalb der Oberfläche gibt es ein Maximum der Infizierten  $I(t_{\max})$  und oberhalb gibt ein solches nicht.

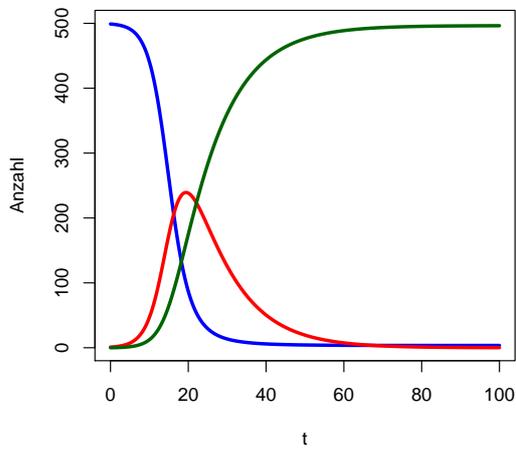
In Abbildung 3.5 sind einige Lösungskurven des Differentialgleichungssystems (3.4) dargestellt. Die blauen Kurven beschreiben den zeitlichen Verlauf der Anzahl der  $S$ -Individuen, die roten die der  $I$ -Individuen sowie die grünen die der  $R$ -Individuen. Die Differentialgleichungen wurden numerisch mit Hilfe des Statistikprogrammes  $\text{\textcircled{R}}$  [86] gelöst. Hier in dieser Arbeit wurden mehrere analytische Herangehensweisen zur Lösung von (3.4) angewendet, modifiziert und entwickelt, und in Abschnitt 2.1 erfolgt dazu eine ausführliche Darstellung. In Abbildung 3.5(a) ist die Entwicklung einer Infektion (Anzahl der Individuen im Status „ $I$ “) ausgehend von einem einzelnen  $I$ -Individuum dargestellt. Aufgrund von  $S_0 \gg \rho$  breitet sich die Krankheit aus, d. h.  $I(t)$  wächst zunächst monoton von  $I_0 = 1$  ausgehend. In Abbildung 3.5(b) hingegen sind die Parameter und Startwerte so gewählt, dass sich  $S_0$  und  $\rho$  nicht so stark unterscheiden. Die Zahl der Infizierten  $I$  steigt zunächst zwar, aber durch den zügigen Abbau der derer zu resistenten Individuen  $R$  kann sich die Krankheit nicht in der gesamten Population ausbreiten. Startet man mit einer größeren Zahl von Infizierten, so wie in Abbildung 3.5(c), erhält man für  $S_0 \gg \rho$  ebenfalls ein solches Verhalten wie in Abbildung 3.5(a). Das Maximum wird jedoch früher erreicht, da anfänglich mehr Infizierte  $I_0 > 1$  zum Anstecken der Empfänglichen zur Verfügung stehen.

Für die Vorbeugung bzw. Eingrenzung von Infektionskrankheiten ergeben sich hieraus zwei Maßnahmen:

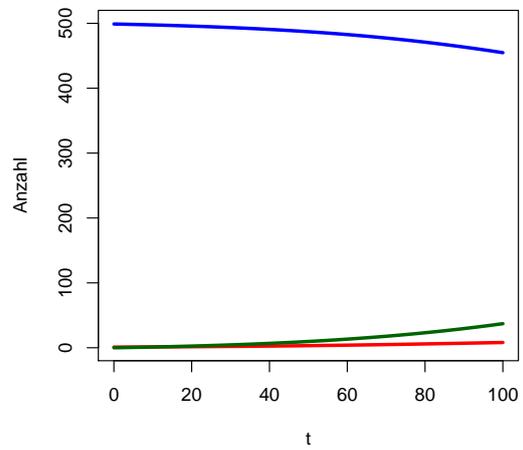
1. Das Absenken von  $S_0$  durch künstliche Immunisierung (Impfung), d. h. durch eine Erhöhung von  $R_0$ .
2. Die Erhöhung von  $\rho$  durch Verhinderung infektiöser Kontakte, z. B. durch Isolation von Infizierten bzw. Unterbrechung von Infektionswegen.

Das obige Modell ist eines der einfachsten und es sind verschiedenste Anpassungen und Erweiterungen denkbar. Zum Ersten werden die Kontakte der Mitglieder der einzelnen Fraktionen detaillierter beschrieben. Des Weiteren ist es möglich, weitere Zustände einzuführen, in denen sich die Individuen befinden können, was dann zu anderen, erweiterten Modellen führt. So gibt es z. B. das *SEIR-Modell* [18]. Die Zustände  $S$ ,  $I$  und  $R$  sind identisch mit denen im *SIR-Modell* und der Zustand  $E$  (*exposed*) bedeutet, dass das Individuum während einer Latenzzeit infiziert, aber noch nicht infektiös ist. Bei Krankheiten wie Grippe gibt es in der Regel keinen  $R$ -Zustand. Nach dem Ausheilen der Krankheit ist eine neue Ansteckung jederzeit prinzipiell möglich. In einem solchen Fall kann man die Situation mit einem *SIS*(...)-Modell mit einer zeitlich beschränkten Immunität beschreiben. Einen ähnlichen Ansatz bietet das *SIRS-Modell*, bei dem zwar eine Immunität nach Ausheilung der Krankheit eintritt, diese jedoch zeitlich begrenzt ist. Es kann ebenfalls zur Beschreibung von Grippeepidemien herangezogen werden. Die Immunität einer überstandenen Grippe besteht nur, bis in der folgenden Saison mutierte Grippeerreger

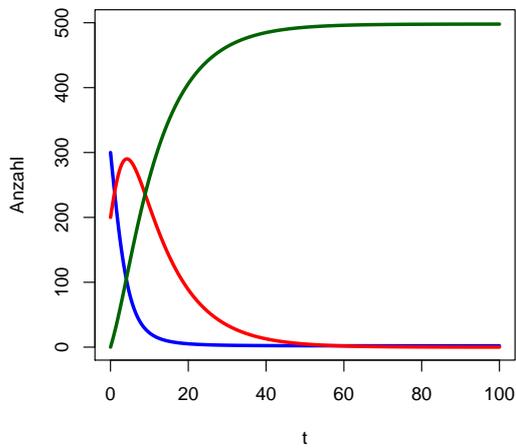
### 3 Modellklassen



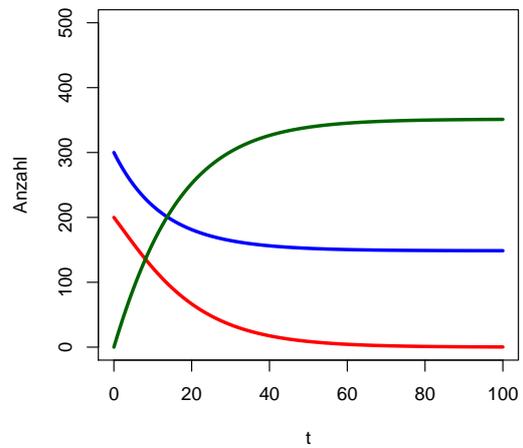
(a)  $S_0 = 499, I_0 = 1, R_0 = 0,$   
 $\rho = 100$



(b)  $S_0 = 499, I_0 = 1, R_0 = 0,$   
 $\rho = 400$



(c)  $S_0 = 300, I_0 = 200, R_0 = 0,$   
 $\rho = 100$



(d)  $S_0 = 300, I_0 = 200, R_0 = 0,$   
 $\rho = 500$

Abbildung 3.5: Verschiedene Lösungen des Systems (3.4) (SIR-Modell) mit  $N = 500$  und verschiedenen Anfangsbedingungen

auftreten. Das Modell wird durch die Gleichungen

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= -\beta SI + \kappa R \\ \frac{dI}{dt} &= \beta SI - \gamma I \\ \frac{dR}{dt} &= \gamma I - \kappa R\end{aligned}$$

$$N = S + I + R = N$$

beschrieben. Die räumliche Ausbreitung von Krankheiten lässt sich durch Anwendung solcher Modelle auf dem Gitter nachvollziehen oder durch die Einbeziehung von Diffusionsvorgängen (vgl. [6, 56, 91]). Eine andere Möglichkeit ist, ein Ausbreitungsmodell, wie es oben beschrieben wurde, mit Bewegungsdaten zu verknüpfen. Ziemlich umfangreiche Untersuchungen dazu worden in [14] durchgeführt. Mit Hilfe gekennzeichnete Banknoten wurden Bewegungsmuster erstellt und anhand dieser die Ausbreitung von Krankheiten mittels SIR-Modell simuliert.

Die Vielfalt möglicher Anwendungen von Netzwerkmodellen demonstriert der folgende Abschnitt.

### 3.1.3 Ein Meinungsbildungsmodell

Der Prozess der kollektiven Meinungsbildung ist ein sehr komplexer Vorgang. Seine Beschreibung anhand einzelner allgemeiner Grundeigenschaften gelingt nur, indem die hochkomplexen kognitiven, individuell und sozial vermittelten Vorgänge, die dabei ablaufen, radikal vereinfacht und auf simple Modellvorstellungen reduziert [79] werden. Diese entstammen oft der Statistischen Physik, und genannt seien hier z. B. das Zelluläre-Automaten-Modell oder spezielle ISING-Modelle. Neuerdings finden aber auch andere Entwicklungen wie andere computergestützte Methoden wie agentenbasierte Modelle Anwendung. So liegen eine Reihe von Arbeiten vor, die sich u. a. mit den Eigenschaften von Verkehrsflüssen [39], Migrationsproblemen [95] oder Meinungsbildung in speziellen sozialen Gruppen beschäftigen [41, 42, 71].

Mit Meinungsbildung ist hier ein kollektiver Prozess gemeint, bei dem sich ein System von vielen Agenten, die anfänglich gänzlich verschiedener Meinung sind, in einen Zustand entwickelt, in dem sie entweder komplett einer Meinung sind oder verschiedene Gruppen mit jeweils eigener Meinung entstanden sind. Eine mögliche Realisierung stellt das SNAJD-Modell dar [85], wo die Agenten auf einem quadratischen Gitter angeordnet sind, und zwei Gitternachbarn, die der selben Meinung sind, versuchen ihre Nachbarn zu überzeugen, ebenfalls diese Meinung zu übernehmen. Eine Verallgemeinerung dieses Modells erfolgte in [69]. Hier wird ein neu entwickeltes Meinungsbildungsmodell [12] vorgestellt, das die Meinungsbildung und Informationsflüsse in sozialen Strukturen beschreibt. Es ist in der Lage, Erklärungen für Phänomene zu liefern, wie sie in einem Artikel des Nachrichtenmagazins DER SPIEGEL [24] („Keine Ahnung ... ich ruf dich an“) beschrieben werden. Genauer gesagt, handelt es sich um Beobachtungen der Organisation des Nachtlebens einer speziellen Einwohnergruppe in einer Großstadt. Deren Gebaren

unterscheidet sich signifikant von dem vorheriger Generationen. Die entscheidende Ursache dieses Wandels ist demnach die ständige Verbindung via Mobilfunk der handelnden Personen, die alle der Altersgruppe der 20 - 35 Jährigen angehören. So ist es laut [24] in diesem Personenkreis nicht mehr üblich, verbindliche Verabredungen zu treffen. Statt dessen „sammeln“ diese Personen im Laufe der Woche „Angebote“, d. h. sie erhalten Einladungen zu Partys, treffen unverbindliche Terminzusagen, vereinbaren Rückrufe, halten sich sozusagen alle Möglichkeiten offen. Gleichzeitig stehen sie via Mobilfunk mit ihrem Freundeskreis ständig in Verbindung, so dass diese „Eventliste“ fortlaufend aktualisiert wird. Am Wochenende dann wird aus dieser „Liste“ ein oder mehrere Ereignisse nacheinander ausgewählt. Der Prozess der Auswahl ist ein komplexer Vorgang, der durch verschiedene Einflüsse gesteuert wird. Zum einen besteht auch hier ständiger Kontakt zu allen Freunden, zum anderen spielen auch manch subjektive Eindrücke des Einzelnen eine gewichtige Rolle. So stellt sich die Attraktivität eines Ereignisses für jeden anders dar. Aus diesen Beobachtungen resultierend werden in [24] überraschende Phänomene beschrieben. Besonders interessant sind die folgenden beiden: Plötzlich, ohne erkennbaren Grund, „trocknen“ manche Partys regelrecht aus, der Gastgeber steht allein da. Aber auch der gegensätzliche Fall tritt auf, einfache Geburtstagsfeiern schwellen ungeplant zu Partys mit mehreren hundert Teilnehmern an, einige Freunde sind so begeistert, dass sie über Mobilfunk ihren gesamten Bekanntenkreis mobilisieren, was dann auch noch weitere Anziehungskraft entwickelt, da die Informierten auch noch ihre Bekannten aufmerksam machen, und als Ergebnis dieser Kettenreaktion suchen dann alle, in Erwartung eines tollen Abends, die Gastgeber heim und überfordern sie maßlos. Wie stellt sich die Gesamtsituation dar?

Exemplarisch wird beschrieben, wie hoch mobile Nachtschwärmer immer auf der Suche nach dem besten Ereignis am Wochenende durch die Großstadt ziehen. Man geht in den Abend ohne feste Verabredungen/Ziele. Man schaut, was sich so ergibt. Ereilt einen dann die Nachricht mit der Aussicht auf ein besonders attraktives Ereignis, so informiert man seine Freunde und die wieder ihre Freunde. Vereint suchen sie das Event auf und bleiben bis sich eine bessere Alternative bietet. Den gesamten Abend über werden sämtliche Veranstaltungen überwacht und je nach Status wird entschieden, ob sich ein Wechsel lohnt oder nicht. Alle sind extrem flexibel: zu- oder absagen kann man schnell, eine kurze SMS genügt, mit dem Bus oder Taxi ist man schnell am anderen Ende der Stadt.

Disziplinübergreifend gibt es für solche und ähnliche Erscheinungen komplexer Systeme das Konzept der *Emergenz*. Dem Thema sind eine ganze Reihe von Büchern gewidmet. Genannt seien hier [70, 99]. Zusammengefasst sind unter diesem Begriff Phänomene auf der Makroebene eines Systems, die durch das Zusammenspiel der einzelnen Elemente hervorgerufen werden. Im Allgemeinen steht Emergenz dafür, dass sich manche Eigenschaften des Ganzen nicht aus den Eigenschaften der Einzelteile erklären lassen. Die folgenden Eigenschaften sind für emergentes Verhalten notwendig:

- Die Effekte sind kollektiv, d. h. einzelne Teile des Systems zeigen nicht dieses Verhalten. Durch einzelne Personen können z. B. obige soziale Effekte nicht hervorgerufen werden. Thermodynamische Größen wie Druck, Temperatur und Volumen sind emergente Größen, denn keine davon besitzen einzelne Atome oder Moleküle. Ein Schwarm Fische zeigt Verhaltensweisen, die sich nicht durch das Verhalten einzelner

Fische erklären lassen. Man spricht von *Irreduzibilität*.

- Erweitert man das System, um ein Teilsystem, so zeigt das Gesamtsystem neue, nicht vorhersagbare, emergente Effekte. Es entstehen zwischen den beiden Teilsystemen Beziehungen und Wirkungen, die nicht überschaubar waren. Diese Eigenschaft nennt man *Unvorhersagbarkeit*.
- Es handelt sich um *selbstorganisierende* komplexe Systeme, jede Aktivität des Systems wirkt sich auf dessen Verhalten aus.

All diese vorgenannten Eigenschaften, die das betrachtete System besitzt, haben zur Folge, dass es ohne starke Reduktion der Komplexität nicht simulierbar ist. Durch einen *Coarse-Grained*-Prozess entwickelt man ein einfaches Modell, um die Situation einigermaßen realistisch zu beschreiben. In unserem Fall heißt das, die handelnden Personen bilden ein Netzwerk, das das komplexe Beziehungsgefüge zwischen ihnen nachbildet. Des Weiteren befinden sich die Personen auf Partys oder nehmen an Veranstaltungen teil. Alle haben sie jederzeit den Überblick über die Alternativen und es gibt ein Kriterium, das darüber entscheidet, ob die entsprechende Person bleibt oder geht und sich ein neues Ereignis aussucht. Ausgehend von einer Anfangsverteilung der Agenten über die Events, entwickelt sich das System, in dem sich die Agenten ständig neu über die Events verteilen.

Waren bislang nichtphysikalische Systeme Gegenstand der Betrachtungen, so wendet sich der kommende Abschnitt physikalischen Problemen zu.

## 3.2 Polymersysteme

Bei *Polymere*n handelt es sich um verzweigte und/oder kettenförmige Makromoleküle, die ihrerseits aus gleichartigen Einheiten, den *Monomeren* zusammengesetzt sind. Ein großer Teil der irdischen Biomasse besteht aus Stoffen auf Basis von Polymeren. Pflanzliche Stoffe wie Zellulose, die am häufigsten vorkommende organische Verbindung, oder Stärke sind polymere Stoffe. Die zugrundeliegenden Makromoleküle sind die *Polysaccharide*, bei der Zellulose durch Wasserstoffbrücken verbundene Glucosemoleküle. Aber auch tierische Stoffe sind hauptsächlich polymerer Natur, man denke an Eiweiße und Proteine, wo Aminosäuren sich zu Makromolekülen verbinden. Dies sind auch die „Grundzutaten“ vieler uns umgebender Rohstoffe, wie z. B. Holz, pflanzliche Gewebe, Gelatine, Papier und vieles anderes mehr. Die z. T. sehr speziellen Eigenschaften dieser Rohstoffe, als herausragendes Beispiel sei hier nur der Naturkautschuk genannt, machten sie auch für die industrielle Nutzung interessant und in der Mitte des 19. Jahrhunderts entdeckte man bereits die ersten Kunststoffe. Diese waren nach diversen Vorläufern solche aus modifizierten natürlichen Polymeren. So wurde z. B. Naturkautschuk mit Schwefel zu Ebonit, einem besonders harten Gummi, verarbeitet. In diesem Zusammenhang sind noch Zelluloid, Schellack und Linoleum zu nennen, ebenfalls Materialien aus halbsynthetischen Polymeren. Kurze Zeit später wurden auch erste Kunststoffe aus vollsynthetischen Polymeren hergestellt. Einer der ersten Vertreter dieser Gruppe war das Bakelit, ein aus Phenol polymerisiertes Kunstharz. Im Zuge dessen wurde es immer dringlicher, ein grundlegendes Verständnis dieser Materialien zu entwickeln. Über den Aufbau dieser Stoffe gab es

um die vorletzte Jahrhundertwende nur diffuse Vorstellungen, die Struktur war gänzlich unbekannt. Als Erster äußerte Hermann Staudinger die Polymerhypothese [76–78] über den kettenförmigen Aufbau solcher Materialien durch *kovalente Bindungen*. Er gilt als der Begründer der Polymerwissenschaften. Den industriellen Durchbruch für die Herstellung von Kunststoffen brachte die Einführung der Petrochemie in den 1950er Jahren. Das Verhalten von Polymeren in Lösung und ihre Struktur sind Gegenstand der Monographien von [21, 29, 32].

#### 3.2.1 Polymermodelle

Um Polymerketten theoretisch zu beschreiben, bedient man sich einfachster Modelle, die oft schon ausreichend gute Aussagen zum Verhalten von Polymeren liefern. Wie auch zuvor stellen *Coarse-Grained-Modelle* vor allem einen guten Überblick über die Größen, die bei der grundsätzlichen Betrachtung von Polymerketten eine Rolle spielen, dar. Die Vereinfachung und Modellbildung besteht *im einfachsten Fall* darin, dass man die sich wiederholenden Atomgruppen unter Ignorierung ihrer chemischen Struktur zu Monomeren zusammenfasst. Als Beispiel betrachten wir die Polymerisation von Ethen  $[\text{CH}_2=\text{CH}_2]$  zu Polyethylen  $[-\text{H}_2\text{C}-\text{CH}_2-]_n$ . Ein entsprechendes Monomer ist in seiner Struktur in Abbildung 3.6 dargestellt. Die Modellierung des Polymers erfolgt, indem man es als Kette solcher Monomere auffasst  $[-\text{A}-\text{A}-\text{A}-\text{A}-]$ . Die Bindung zwischen den Monomeren bestimmt wesentlich das Kettenverhalten, und ihre Realisierung sowie Detailliertheit hängt von der Fragestellung der jeweiligen Untersuchung ab. Typisch für Polymere in diesem Bereich sind *kovalente Bindungen* zwischen den einzelnen Monomeren. In den minimalistischen Modellen, die häufig gebraucht werden, werden meist keinerlei topologische Einschränkungen an die Bindungen gemacht. Bei realistischeren Modellen ist die Situation manchmal eine andere, die Bindungen eines DNA-Moleküls sind relativ steif, freie Bindungen wären hier unangebracht. Auch gibt es speziellere Fragestellungen, bei denen Modelle erforderlich sind, die ein größeres Maß an strukturellen Einzelheiten berücksichtigen als es bei den beschriebenen simplen Modellen der Fall ist. Eine wichtige Größe in diesen Modellen ist die Anzahl der Monomere, der sogenannte *Polymerisationsgrad*, sie korrespondiert direkt mit der Anzahl der Basiseinheiten. In der Regel bezeichnet man Moleküle mit einem Polymerisationsgrad ab der Größenordnung 100 als Polymer. Typische Werte liegen für oben besprochene Materialien bei  $10^5$ – $10^9$ . Es ist schon aus diesen Tatsachen heraus einsehbar, dass derartige Materialien spezielle Eigenschaften haben. Liegt nur ein Monomertyp vor, so bezeichnet man solche Polymere als *Homopolymere*, gibt es hingegen zwei oder mehr Monomertypen, so sind es *Copolymere*. Bei mehreren Typen handelt es sich dementsprechend um Diblock-, Triblock-, ... Copolymeren. Oben erwähnte Kunststoffe sind meist Homopolymere.

#### Die frei bewegliche Kette

Das Modell der *frei beweglichen Kette* (vgl. Abbildung 3.7) ist das einfachste Modell, das eine einzelne Polymerkette beschreibt. Die einzelnen Monomere haben viele interne Freiheitsgrade, was nicht unbedingt unrealistisch ist, wenn man an die frei drehbare *kovalente Bindung* zwischen den Kohlenstoffatomen beim Polyethylen denkt. Der daraus resultierende hohe Grad an Flexibilität erlaubt es, dieses simple Modell zunächst zu betrachten.

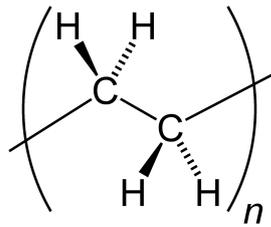


Abbildung 3.6: Struktur eines Monomers (Polyethylen)

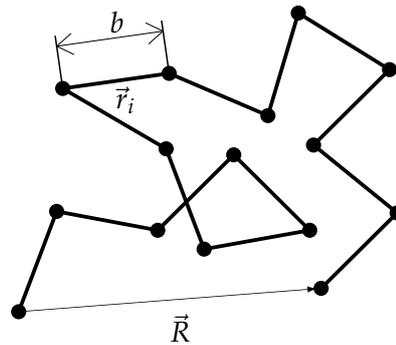


Abbildung 3.7: Die freie Kette und deren beschreibende Parameter

Das Polymer besteht demnach aus einzelnen Monomeren, verbunden durch  $N$  Segmente  $\vec{r}_i$  ( $i = 1 \dots N$ ), die alle die Länge  $b$ , die sogenannte *Kuhn'sche Segmentlänge* besitzen. Alle  $N + 1$  Monomere können sich, bei Einhaltung der Segmentlänge  $b$  zu ihren Kettennachbarn, unabhängig in jede Richtung bewegen. Es gibt keine Wechselwirkung zwischen den Segmenten. Sie können sich kreuzen und es gilt kein Volumenausschluss. Die Summe aller Segmente entlang der Kette ergibt die *Konturlänge*  $L$ , für dieses einfache Modell gilt  $L = \sum_{i=1}^N |\vec{r}_i| = Nb$ . Der Vektor, der vom ersten zum letzten Monomer einer solchen Konfiguration zeigt, ist der *Kettenendvektor*  $\vec{R}$  und seine Länge ist der *Kettenendabstand*  $R$ . Er gibt einen Überblick über die Ausdehnung einer Polymerkette. Der Kettenendvektor  $\vec{R}$  ist durch

$$\vec{R} = \sum_{i=1}^N \vec{r}_i$$

gegeben. Aufgrund der zufälligen Beschaffenheit der Kette in diesem Modell heißt es auch das *Random Walk* Modell und wie bei einem solchen ist auch hier bei vielen unterschiedlichen Realisierungen und den daraus folgenden Konformationen  $\langle \vec{R} \rangle = 0$ . Daraus lassen sich keine Aussagen über die Ausdehnung des Polymeres ableiten. Dem gegenüber ist  $\langle \vec{R}^2 \rangle$  eine physikalisch sinnvolle Größe und die Quadratwurzel aus dieser Größe lässt Rückschlüsse auf die Ausdehnung des Polymeres zu. Zunächst ist  $\langle \vec{R}^2 \rangle$  definiert als

$$\langle \vec{R}^2 \rangle = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \langle \vec{r}_m \vec{r}_n \rangle.$$

### 3 Modellklassen

Da alle Segmente unkorreliert sind und die gleiche Länge  $b$  haben, gilt  $\langle \vec{r}_m \vec{r}_n \rangle = \delta_{mn} b^2$ . Somit ist

$$\langle \vec{R}^2 \rangle = Nb^2.$$

Festzuhalten bleibt somit, dass sich die Ausdehnung eines Polymeres proportional zu  $\sqrt{N}$  verhält. Der Name des Modells legt es nahe [73], für großes  $N$  gehorchen die Endvektoren  $\vec{R}$  der Realisierungen einer speziellen Wahrscheinlichkeitsverteilung, nämlich der gleichen wie beim Zufallsweg einer GAUSSschen Verteilung.

Der hier betrachtete Kettenendabstand  $R$  ist aber nur ein sehr einfaches Mittel zur Einschätzung der Größe eines Makromoleküles. Ist die Struktur der Polymere eine andere als die einer Kette, beispielsweise eine Sternstruktur, so ist der Kettenendabstand nicht anwendbar, um die Ausdehnung der Moleküle im Raum abzuschätzen. Wünschenswert ist also eine Methode zur Größenbestimmung der Makromoleküle unabhängig von deren Struktur, die möglichst auch experimentell bestimmbar ist, wenn man z. B. Polymere in einer Lösung betrachtet. Eine solche Größe liefert der *Gyrationsradius*  $R_g$ . Zunächst wird angenommen, dass der Koordinatenursprung bei unserer Betrachtung im *Massenschwerpunkt* der Kette liegt. Die Vektoren, die die Lage der einzelnen Monomere mit den Massen  $m_i$  beschreiben, haben die Länge  $r_i$ , oder anders gesagt  $r_i$  ist der Abstand der einzelnen Monomere vom Schwerpunkt. Die mittlere Ausdehnung einer solchen Kette wird nun durch die mittleren Abstände der  $r_i$  gewichtet mit den dazugehörigen Massen  $m_i$  definiert

$$R_g^2 = \frac{\sum_{i=1}^N m_i r_i^2}{\sum_{i=1}^N m_i}.$$

Da in den betrachteten Kettenmodellen alle Monomere die gleiche Masse haben, gilt somit die vereinfachte Beziehung

$$R_g^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_i^2.$$

Der so gewonnene Gyrationsradius  $R_g$  ist ein Maß für die Ausdehnung der Kette im Raum. Anschaulich handelt es sich um die unscharfen kugelförmigen Umriss der Kette.

Damit eine solche modellierte Monomerkonfiguration im Raum eine Kette bildet, sind direkte Wechselwirkungen zwischen den Kettennachbarn nötig. Diese werden als *kurzreichweitige* Wechselwirkungen bezeichnet. Das soll zum Ausdruck bringen, dass diese Art Wechselwirkungen ausschließlich entlang der Kette wirken und andere räumliche Wechselwirkungen keine Rolle spielen. Wechselwirkungen, die zwischen entfernteren Monomeren bestehen und die räumlich interagieren, sind *langreichweitige* Wechselwirkungen.

#### **Der selbstvermeidende Random Walk**

Einzelne Polymere, die ohne Beachtung *langreichweitiger* Wechselwirkungen modelliert werden, bezeichnet man oft als *ideale* Ketten. Es ist auch klar, dass jedes Monomer und die Segmente zwischen ihnen den Platz beanspruchen, an dem sie sich befinden. Deshalb muss man räumliche, d. h. langreichweitige Wechselwirkungen zulassen. Das hat den Ausschluss von Überlappungen und Überkeuzungen zur Folge. Bezeichnet wird dieses Konzept als *Prinzip des ausgeschlossenen Volumens* (*excluded volume effect*).

Ist die ideale Kette der Pfad eines Random Walkes, so erreicht man obiges Modell einer nichtidealen Kette, d. h. einer überlappungs- und kreuzungsfreien Kette durch einen

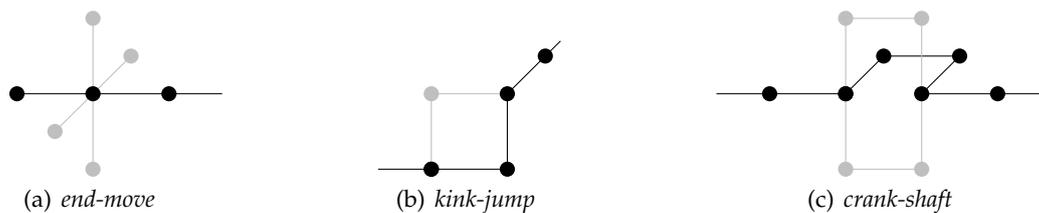


Abbildung 3.8: Die elementaren Bewegungsmodi im Verdier-Stockmayer-Modell [90]

*selbstvermeidenden* Random Walk (*self avoiding random walk* (SAW)). Die Kette schließt sich also selbst aus, bei der zufälligen Auswahl eines neuen zusätzlichen Segmentes ist die Möglichkeit ausgenommen, dass es ein bestehendes Segment kreuzt oder das neue Monomer die bestehende Kette überlappt. Vergleicht man die sich aus den Betrachtungen ergebenden Kettenendabstände

$$R \propto N^{\nu} b,$$

so ist für die ideale Kette  $\nu = 1/2$ , und für die nicht-ideale Kette ist  $\nu = 3/5$ . Die statistische Auswertung numerischer Resultate liefert für die nicht-ideale Kette den Wert  $\nu \approx 0.588$  (vgl. [21] und [73]). Die Ausdehnung einer nicht-idealen Kette mit *excluded volume effect* ist also größer als die einer idealen Kette.

### Ein minimales Gittermodell zur Dynamik der freien Kette

Eine mögliche Umsetzung der oben beschriebenen freien Kette stellt das folgende minimalistische Verdier-Stockmayer-Modell dar [90]. Es folgt radikal dem Grundsatz der Reduktion der Komplexität und zeigt trotz seiner Einfachheit einige generelle Eigenschaften eines Polymersystems. Es beschreibt das Verhalten einer linearen Kette in einer verdünnten Lösung. In der hier vorgestellten Umsetzung ist die Grundlage ein dreidimensionales quadratisches Gittermodell mit periodischen Randbedingungen. Die Startkonfiguration der Polymerkette wird durch einen zufälligen Wachstumsprozess erzeugt. Dazu platziert man zunächst ein Monomer willkürlich auf einem beliebigen Gitterpunkt. Anschließend wählt man zufällig einen Nachbarpunkt des ursprünglichen Punktes und verbindet diese beiden Punkte miteinander. Diesen Schritt wiederholt man unter Beachtung der schon erwähnten Selbstvermeidung, bis die gewünschte Kettenlänge  $N$  erreicht ist. Die Dynamik der Kette wird in diesem einfachen Modell durch die fortlaufende Anwendung der drei elementaren Bewegungsarten *kink-jump*, *crank-shaft* und *end-move* hervorgerufen, die in Abbildung 3.8 skizziert sind.

### 3.2.2 Monte-Carlo-Simulationen

Die MONTE-CARLO-Simulation ist eine Computersimulationsmethode zur Untersuchung statistisch-mechanischer Systeme. Ursprünglich geht der Begriff MONTE-CARLO-Simulation auf eine stochastische Simulationstechnik zurück, die auf der oft wiederholten Durchführung von Zufallsexperimenten beruht. Sie wird dazu benutzt, analytisch nicht oder nur schwer zugängliche Probleme numerisch zu lösen.

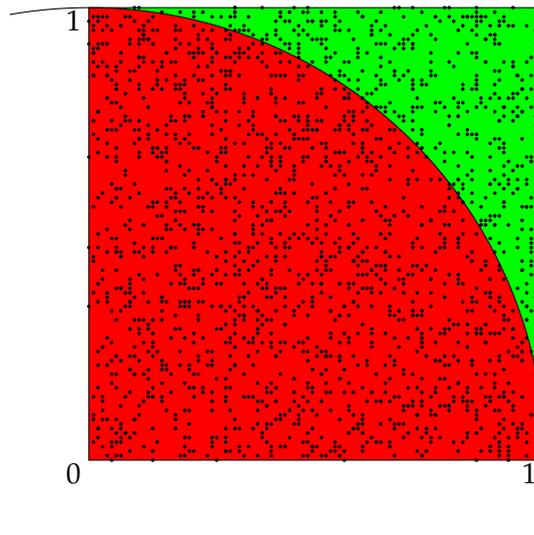


Abbildung 3.9: Der „Hit and Miss“ Algorithmus zur numerischen Bestimmung von  $\pi$

Ein oft genanntes illustratives Beispiel ist die MONTE-CARLO-Integration zur Bestimmung der Zahl  $\pi$ . Die Vorgehensweise ist in Abbildung 3.9 skizziert, man erzeugt *gleichverteilte* Zufallszahlen  $(x, y)$  im Intervall  $[0, 1] \times [0, 1]$  und prüft, ob sich die zufälligen Punkte innerhalb der Viertelkreisfläche befinden oder nicht. Aufgrund ihrer Natur liegen alle generierten Zufallszahlen im Quadrat mit Kantenlänge 1. Eine Schätzung der Wahrscheinlichkeiten, dass im Rahmen der Zufallsversuche, die Punkte innerhalb des Viertelkreissegments liegen, ergibt sich aus der Tatsache, dass die *relative Häufigkeit*, d. h. die Anzahl der Treffer relativ zur Anzahl der Versuche gleich dem Verhältnis der Flächen ist

$$P(\text{Treffer}) = \frac{\text{Treffer}}{\text{Anzahl der Versuche}} = \frac{A_{\text{Kreissegment}}}{A_{\text{Einheitsquadrat}}} = \frac{\frac{\pi}{4}r^2}{r^2}.$$

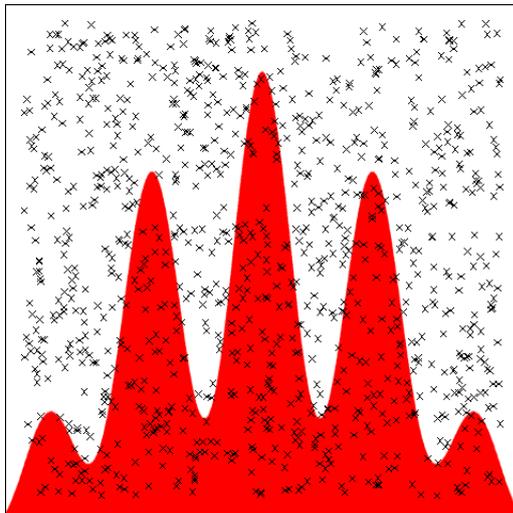
Eine Schätzung für  $\pi$  erhält man also mittels

$$\pi = 4 \frac{\text{Treffer}}{\text{Anzahl der Versuche}}$$

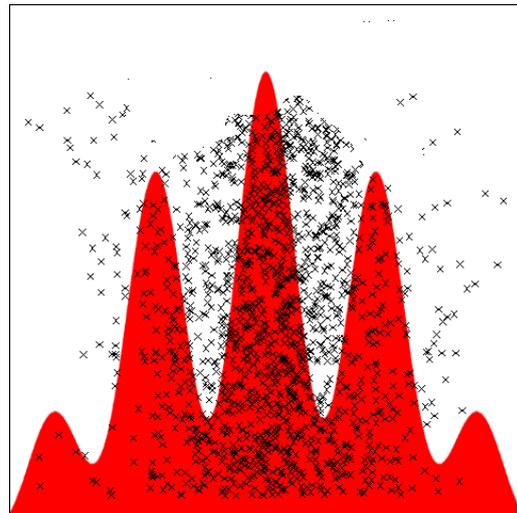
da  $r = 1$  ist.

### Importance Sampling

*Importance sampling* ist eine Methode um Monte-Carlo-Simulationen zu optimieren. Um das Grundprinzip zu verdeutlichen, soll hier nochmals auf das Beispiel der Monte-Carlo-Integration Bezug genommen werden. Als entscheidend für die Effizienz des Verfahrens erweist sich die Wahrscheinlichkeit die *relevanten Punkte* des Phasenraumes zu treffen. In Abbildung 3.10 ist die Problematik verdeutlicht, während im Fall 3.10(a) die zufällig gewählten Proben über die gesamte Fläche gleichmäßig verteilt liegen sind sie im Fall 3.10(b) so verteilt, dass sie mit höherer Wahrscheinlichkeit im relevanten Bereich liegen, d. h. dass sie aus der zu integrierenden Fläche stammen. Die Idee ist also die stärkere Gewichtung von Gebieten/Zuständen an denen „viel passiert“. Die Grundaufgabe besteht



(a) gleichverteilte Zufallszahlen



(b) speziell verteilte Zufallszahlen

Abbildung 3.10: Prinzip des *importance samplings*

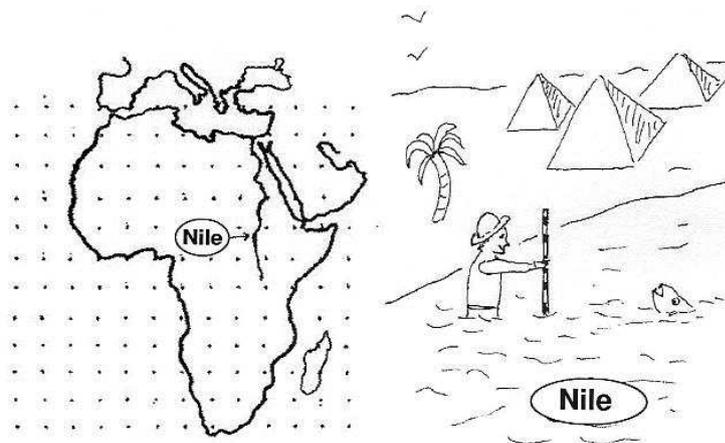


Abbildung 3.11: Eine Karikatur zur Verdeutlichung: Zur Bestimmung der Tiefe des Nils muss man nicht die Proben über den gesamten Kontinent verteilen. Es reicht den Fluss zu untersuchen!

### 3 Modellklassen

bei der Monte-Carlo-Integration in der Auswertung des Integrals

$$I = \int f(x) dx.$$

Die oben erwähnte Gewichtung der *relevanten Zustände* erfolgt durch eine Skalierung des Integrals in der Form

$$I = \int \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx,$$

wobei  $p(x) dx$  eine wahrscheinlichkeitsverteilte Größe ist. Das Integral kann als Mittelwert der Funktion  $g(x) = f(x)/p(x)$  mit  $p(x)$  verteilten Werten  $x$  interpretiert werden:

$$I = \int g(x(y)) dy.$$

Ausgewertet wird es dann mittels

$$I = \langle g(x) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(\xi_i).$$

Bei  $\xi_i$  handelt es sich um eine Stichprobe  $\{\xi_1, \dots, \xi_N\}$  der  $p(x)$  verteilten Zufallsgröße.

#### Der Metropolis Algorithmus

Bei der oben beschriebenen Prozedur benötigt man unbedingt  $p(x)$  verteilte Zufallszahlen und um diese zu erhalten, ist die Kenntnis des Integrals von  $p(x)$  unabdingbar, was in der Regel nicht der Fall ist. Dieses Problem umgeht man durch die Anwendung des METROPOLIS-Algorithmus [38, 53], der Standardmethode bei Monte-Carlo-Simulationen. Eine häufig auftretende Aufgabenstellung ist, in Systemen mit *vielen Freiheitsgraden*, das Berechnen von Summen oder Integralen. Das Hilfsmittel der Wahl stellt dabei oft die Monte-Carlo-Simulation dar. Die Zustandssumme oder -integral eines thermodynamischen Systems ist ein mächtiges Werkzeug der statistischen Physik. Aus ihr lassen sich im *Gleichgewicht* alle thermodynamischen Größen ableiten. Die Summation erstreckt sich über sämtliche Zustände des Systems. Bei realen Systemen ist die Zahl der Freiheitsgrade in der Größenordnung von  $10^{23}$ , ein einfaches zweidimensionales Spinsystem auf einem Gitter ( $32 \times 32$ ) mit  $\approx 10^{23}$  Spins hat  $2^{32 \times 32} \sim 10^{300}$  Konfigurationen. Es ist vollkommen ausgeschlossen, bei einer solchen nicht ungewöhnlichen Situation, mit heutigen Mitteln die Zustandssumme direkt auszuwerten.

Mittels obigen Überlegungen generiert die Simulation boltzmannverteilte Zustände mit dem Gewicht  $p(x)$ . Ein Monte-Carlo-Mittelwert ergibt sich dann mittels

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{A}(x_i)$$

mit der Stichprobenverteilung  $p(x_i) = e^{-\beta E(x_i)}/Z$  wobei  $\beta \equiv 1/k_B T$  ist. Diese hängt aber wiederum von der Zustandssumme  $Z$  ab, die nicht bekannt ist. Einen Ausweg bietet die folgende Vorgehensweise. Man erzeugt eine MARKOFFKETTE  $A_i$  von Zuständen durch eine gedachte Bewegung durch den Phasenraum. Markoffketten sind spezielle stochastische Prozesse in diskreter Zeit. Sie haben eine endliche Vorgeschichte, d. h. sie

hängen ausschließlich vom vorherigen Zustand ab. Sie ermöglichen eine Prognose über die Wahrscheinlichkeit zukünftiger Entwicklungen. Gekennzeichnet sind sie durch  $P(A, t)$ , die Wahrscheinlichkeit das sich das System zur Zeit  $t$  im Zustand  $A$  befindet und den Übergangsraten  $W(A \rightarrow B)$ , der Wahrscheinlichkeit, dass das System vom Zustand  $A$  in den Zustand  $B$  übergeht pro Zeiteinheit. Nun ist

$$P(A, t + 1) = P(A, t) + \sum_B [W(B \rightarrow A)P(B, t) - W(A \rightarrow B)P(A, t)].$$

Eine notwendige Eigenschaft unserer Markoffketten ist, dass sie für große  $t$  die Zustandswahrscheinlichkeiten *stationär* werden, d. h.  $P(A, t) \rightarrow p(A)$ . Die Eigenschaft der *detailed balance* ist, wenn

$$W(B \rightarrow A)p(B) = W(A \rightarrow B)p(A)$$

gilt. Es gilt für die Boltzmannverteilung

$$\frac{W(A \rightarrow B)}{W(B \rightarrow A)} = \frac{p(B)}{p(A)} = \frac{e^{-\beta E(B)}}{e^{-\beta E(A)}} = e^{-\beta \Delta E},$$

d. h. das System befindet sich im Gleichgewicht, die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Zustände ist zeitunabhängig. Das System ist *ergodisch*. Eine Konsequenz ist, dass jeder Zustand von jedem anderen Zustand in endlicher Zeit erreicht werden kann.

Der Metropolis-Algorithmus ist eine Auswahlregel für die Übergänge der Zustände  $A$  zu  $B$ , so dass die *detailed balance*-Bedingung erfüllt ist

$$W(A \rightarrow B) = \begin{cases} e^{-\beta \Delta E}, & \Delta E > 0 \\ 1, & \Delta E \leq 0 \end{cases} \quad \text{mit } \Delta E = E(B) - E(A). \quad (3.5)$$

Damit ist klar, wie eine Metropolis-Monte-Carlo-Simulation abzulaufen hat. Ausgehend von einer Startkonfiguration wird das System verändert. Der Metropolis-Algorithmus macht keine Aussagen, wie die Konfigurationen zu manipulieren sind, unabhängig wie sie auch aussieht, die geänderte Konfiguration wird nach der Regel (3.5) angenommen oder verworfen. Wichtig ist auch eine hinreichend große Schrittzahl, um sicherzustellen, dass sich das System im Gleichgewicht befindet. Die fortlaufende Abfolge der einzelnen Zustände hat nichts mit der realen Zeit  $t$  zu tun, befindet sich das System im Gleichgewicht, so ist es zeitunabhängig. Die Variable  $t$  dient ausschließlich der Kennzeichnung der Reihenfolge der Zustände, sie ist sozusagen eine reine „Computerzeit“.

### 3.2.3 Polymernetzwerke

Während in Abschnitt 3.2.1 die einzelne Polymerkette im Mittelpunkt stand, soll hier das Verhalten mehrerer Ketten zusammen Gegenstand der Betrachtungen sein. Zunächst sei bemerkt, dass sich das Verhalten von Polymerketten in einer Schmelze im Vergleich zur freien Kette drastisch ändert. In Abbildung 3.13 ist eine mittels Monte-Carlo-Simulation erzeugte Schmelze zu sehen. Schon anschaulich ist es gut vorstellbar, dass die einzelnen Ketten in der Schmelze eine Einschränkung ihrer Freiheit erfahren. Sie bewegen sich bildlich gesehen in einer Röhre, die durch die umgebenden Polymerketten gebildet wird.

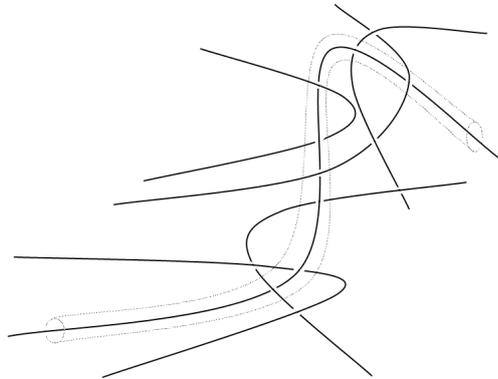


Abbildung 3.12: Schematische Darstellung eines Ausschnitts aus einer Polymerschmelze im Rahmen des Röhrenmodells (*tube model*)

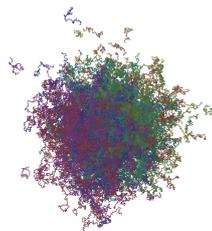


Abbildung 3.13: Eine mittels Monte-Carlo-Simulation generierte Polymerschmelze

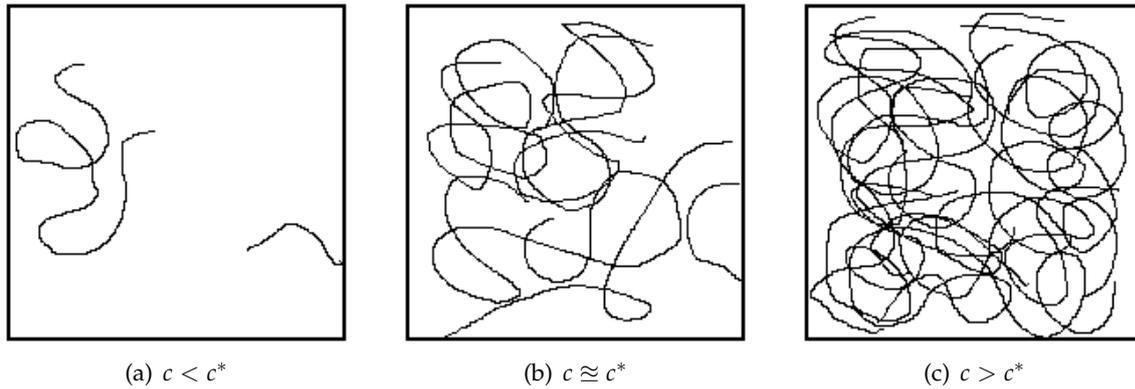
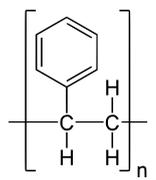


Abbildung 3.14: Schmelzen verschiedener Konzentrationen  $c$  im Vergleich mit der Überlappkonzentration  $c^*$

Diese Vorstellung wurde erstmals in [33] als das bekannte Röhrenmodell (*tube model*) veröffentlicht. In Abbildung 3.12 ist das Prinzip dargestellt. Die einzelne Polymerkette wird von vielen anderen Polymerketten umschlungen, sie steckt sozusagen in einer „Röhre“. Bewegungen verlaufen dann hauptsächlich longitudinal, schlangenartig entlang dieser Röhre, was mit dem Begriff der *Reptation* umschrieben wird. Ebenfalls dürfte klar sein, dass die Konzentration der Schmelze einen sehr großen Einfluss auf die Ketten hat. Während bei geringen Konzentrationen Einzelketten vorliegen, beginnen sie, sich bei höheren Konzentrationen zu überlappen. Der Punkt, an dem dies geschieht, nennt man *kritische Konzentration* oder auch *Überlappkonzentration*  $c^*$ . In Abbildung 3.14 sind die verschiedenen Fälle schematisch dargestellt. Der Fall einer sehr dünnen Polymerschmelze ist in Abbildung 3.14(a) zu sehen, die Konzentration ist weit unterhalb der Überlappkonzentration. Genau an dieser Grenze befindet sich der Fall 3.14(b), und darüber ist die dichte Lösung 3.14(c) der letzten Schmelze.

Geht man zurück auf ein Gitter, so erkennt man schnell die Verwandtschaft zu Perkulationsmodellen (vgl. [80]). Als Beispiel wird hier ein Simulationsmodell auf einem einfach kubischen Gitter zur Untersuchung der Struktur von Polymernetzwerken vorgestellt. Auf diesem Gebiet existieren umfangreiche Simulationsarbeiten, die bekanntesten sind in [23] veröffentlicht. Hier werden zwei spezielle Arten von Polymerisationsvorgängen untersucht, und zwar die *Polykondensation* als auch eine *radikalische Polymerisation*.

Als Beispiel für die radikalische Polymerisation wird hier das Kettenwachstum durch die Reaktion vom Styrol zum Polystyrol genannt



Als Vernetzer kann in diesem Fall das Divinylbenzol fungieren. Die Herstellung von Epoxidharzen ist ein Beispiel für eine Polyaddition.

### 3 Modellklassen

Beide Arten des Modells agieren auf einem kubischen Gitter, und es gibt zwei Typen von Monomeren, zum einen die kettenbildenden Monomere, die zwei Verbindungen eingehen können und zum anderen die Vernetzer, die vier Bindungen besitzen können. Das Kettenwachstum wird durch die 2er-Monomere hervorgerufen und die Ketten werden durch die Vernetzer untereinander verbunden, ein Netzwerk bildet sich. Der Unterschied besteht in der Art des Kettenwachstums. Bei der Polyaddition lagern sich einfach an den freien Enden der Monomere neue Kettenglieder an. Bei der radikalischen Polymerisation hingegen setzt die Anlagerung ein reaktionsfähiges, radikalisches Monomer voraus. Nur an solchen können sich neue Kettenglieder anlagern. Die Eigenschaft der Radikalität geht dabei immer auf das neue Endmonomer über. Die Simulation besteht dann aus:

1. Anlegen des Gitters,
2. Initialisieren des Gitters durch Verteilung der unterschiedlichen Monomere (2er-Monomere und Vernetzer),
3. Nur bei der radikalischen Reaktion: Einige Monomere werden als radikalisch gekennzeichnet,
4. Anlegen der Bindungen unter Beachtung der Restriktionen, d. h. ein 2er-Monomer kann nur zwei Bindungen annehmen und ein Vernetzer vier. Bei einer radikalischen Reaktion können nur die Radikale entsprechend ihrer Art reagieren.
5. Erkennen, wenn der *Sol-Gel-Übergang* an der Perkolationschwelle  $p_c$  erreicht ist, d. h. ein Cluster durchmisst das ganze System.

In jedem Schritt der Simulation wird versucht, eine Verbindung zu etablieren. Die Aktion ist erfolgreich, wenn ein freies Monomer erreichbar ist, d. h. ein Kettenglied angehängen bzw. eine Vernetzung hergestellt wird. Bei der radikalischen Reaktion ist die Möglichkeit an das Vorhandensein eines freien Radikales geknüpft, von dem die Reaktion ausgehen kann. Mit der Anzahl der Schritte steigt die Zahl der Verbindungen, was hier als *Umsatz*  $p$  bezeichnet wird. Ein weiterer Punkt ist die Bildung von *Clustern*. Zu Beginn einer Simulation werden die einzelnen Glieder zufällig im Gitter gesetzt und bilden somit die Elementarcluster. Im Fortgang lagern sich dann an diesen weitere Elemente an und sie nehmen an Größe zu. Später dann, wenn die Cluster eine gewisse Ausdehnung erreicht haben, kommt es in der Nähe der Überlappungskonzentration zu der Verbindung einzelner Cluster, ein „Vereinigungscluster“ bildet sich. Erreicht ein Cluster eine Größe, die das gesamte System durchmisst, so spricht man vom *unendlichen Cluster*, der *Sol-Gel-Übergang* ist erreicht. Die Simulation wird solange fortgeführt bis keine neuen Bindungen gefunden werden, der Umsatz erreicht die Sättigung.

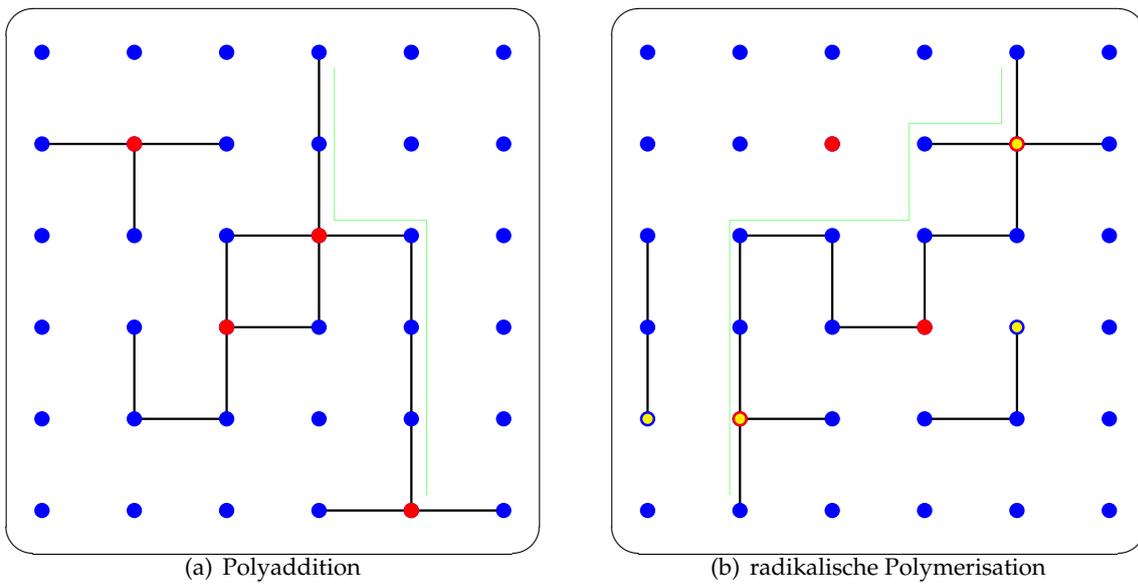


Abbildung 3.15: 2D-Darstellung der verschiedenen Polymerisationstypen  
 — Bindungen, ● 2er-Monomere, ● Vernetzer, ● Kennzeichnung eines Monomers als radikalisch, — unendlicher Cluster bei  $p_c$

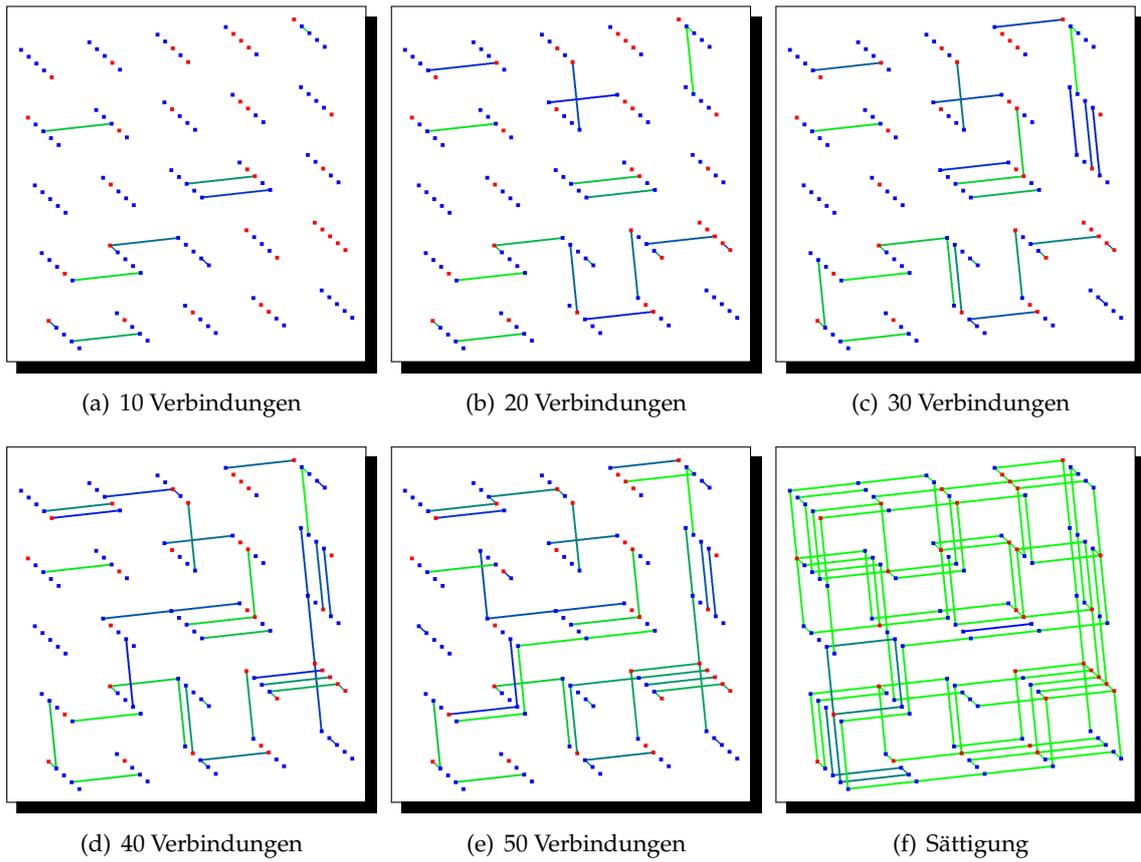


Abbildung 3.16: Beispiel einer Polyaddition auf einem 3D-Gitter  $5 \times 5 \times 5$  und 25% der Knoten (rot) sind Vernetzer

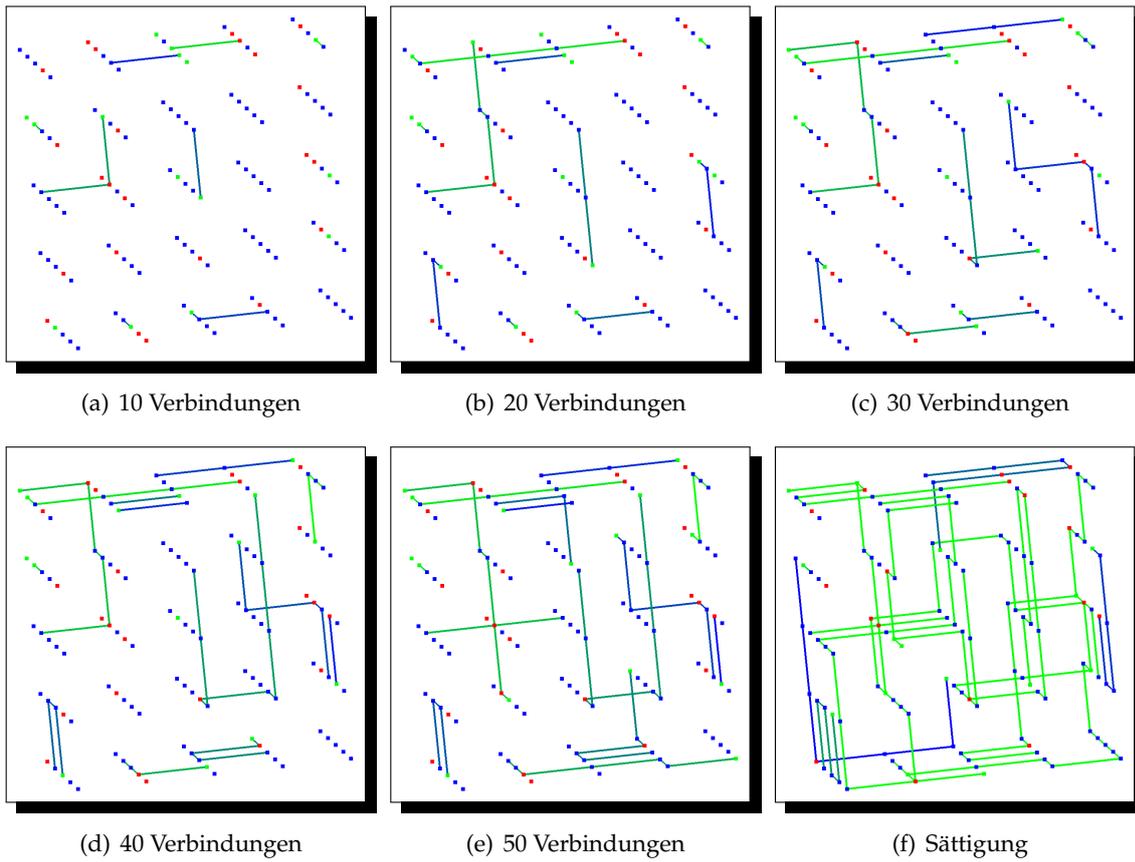


Abbildung 3.17: Beispiel einer radikalischen Polymerisation auf einem 3D-Gitter  $5 \times 5 \times 5$  und 25% der Knoten (rot) sind Vernetzer sowie 15 freie Radikale (grün)



## 4 Meinungsbildungsprozesse

Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit einem Verfahren zur konkreten Beschreibung von Meinungsbildungsprozessen in komplexen sozialen Strukturen [12]. Diese werden nach den Regeln aus den Abschnitten 3.1 und 3.1.1 generiert. Auf diesen erzeugten Strukturen wirkt das hier entwickelte Modell, das Vorgänge beschreibt, wie sie in Abschnitt 3.1.3 dargelegt wurden. Eine ausführlicher Bericht über die Untersuchungen ist in [51] zu finden.

Es ist bekannt, dass sich Informationen und Meinungen in sozialen Strukturen über Bekanntschaftsverhältnisse verbreiten. Das „Trägermedium“ (Email, Telefon, Post, direkter Austausch) bleibt dabei völlig unerheblich. Die Wirkung von weiteren Meinungsbeeinflussenden Prozessen, wie die verschiedener Massenmedien, bleibt hier außen vor. Es ist außerdem bekannt, dass die Vernetzung der einzelnen Personen, die Mitglied einer solchen Struktur sind, entscheidenden Einfluss auf die Informationsdurchdringung des Netzwerkes haben. Bei realen Daten in großen Strukturen zeigt sich die typische Verteilung des Vernetzungsgrades in Form eines Potenzgesetzes. Ein eindrucksvolles Beispiel dafür ist in [25] dargestellt. In den hier verwendeten Daten, die nach [93] erzeugt wurden, ist die Informationsdurchdringung ebenfalls der entscheidende Punkt, und er wird durch die verschiedenen Parameter des Modells beeinflusst. In der Abbildung 4.1 sind die Häufigkeitsverteilungen der Vernetzungsgrade der Knoten in verschiedenen Netzwerken dargestellt. Die Topologie der Netze wird über die beiden Parameter  $\alpha$  und  $H$  gesteuert, wobei von  $\alpha$  die Reichweite der Verbindungen im Netzwerk abhängt und  $H$  die Zahl der Hierarchien ist, die die verschiedenen sozialen Bereiche der Individuen repräsentieren. Es zeigt sich, dass sich bei vielen Knoten und starker Vernetzung die Verteilung der Vernetzungsgrade so entwickelt, wie es für soziale Netze typisch ist. Es gibt wenige Knoten mit sehr wenigen Kontakten und einige mit sehr vielen. Die Mehrheit der Knoten jedoch hat eine mittlere Anzahl an Verbindungen.

### 4.1 Die Entscheidungsfunktion

Der Informationsaustausch in diesen Netzwerken wird nun mittels des Meinungsbildungsmodells, wie es in 3.1.3 vorgestellt wurde, realisiert (vgl. [12]). Die Situation stellt sich wie folgt dar: Zunächst sind alle Knoten stochastisch über die Parties verteilt. Person  $i$  ist auf Party  $n$ , die Bekanntschaft von  $i$ , Person  $j$  ist auf Party  $m$ . Nun ruft  $i$  Person  $j$  auf Party  $m$  an und teilt  $j$  wichtige Details über Party  $n$  mit, auf der  $i$  sich gerade befindet. Person  $j$  hat nun zwei Möglichkeiten, entweder sie bleibt auf Party  $m$  oder sie wechselt zu Party  $n$ . Es stellt sich die Frage, wie fällt  $j$  eine Entscheidung? Es ist so, dass  $j$  Informationen über die eigene Party  $m$  selbst gesammelt hat und  $i$  via Telefon Person  $j$  die Informationen über seine Party  $n$  mitteilt. Zusammengefasst wird dieser Vorgang in der

## 4 Meinungsbildungsprozesse

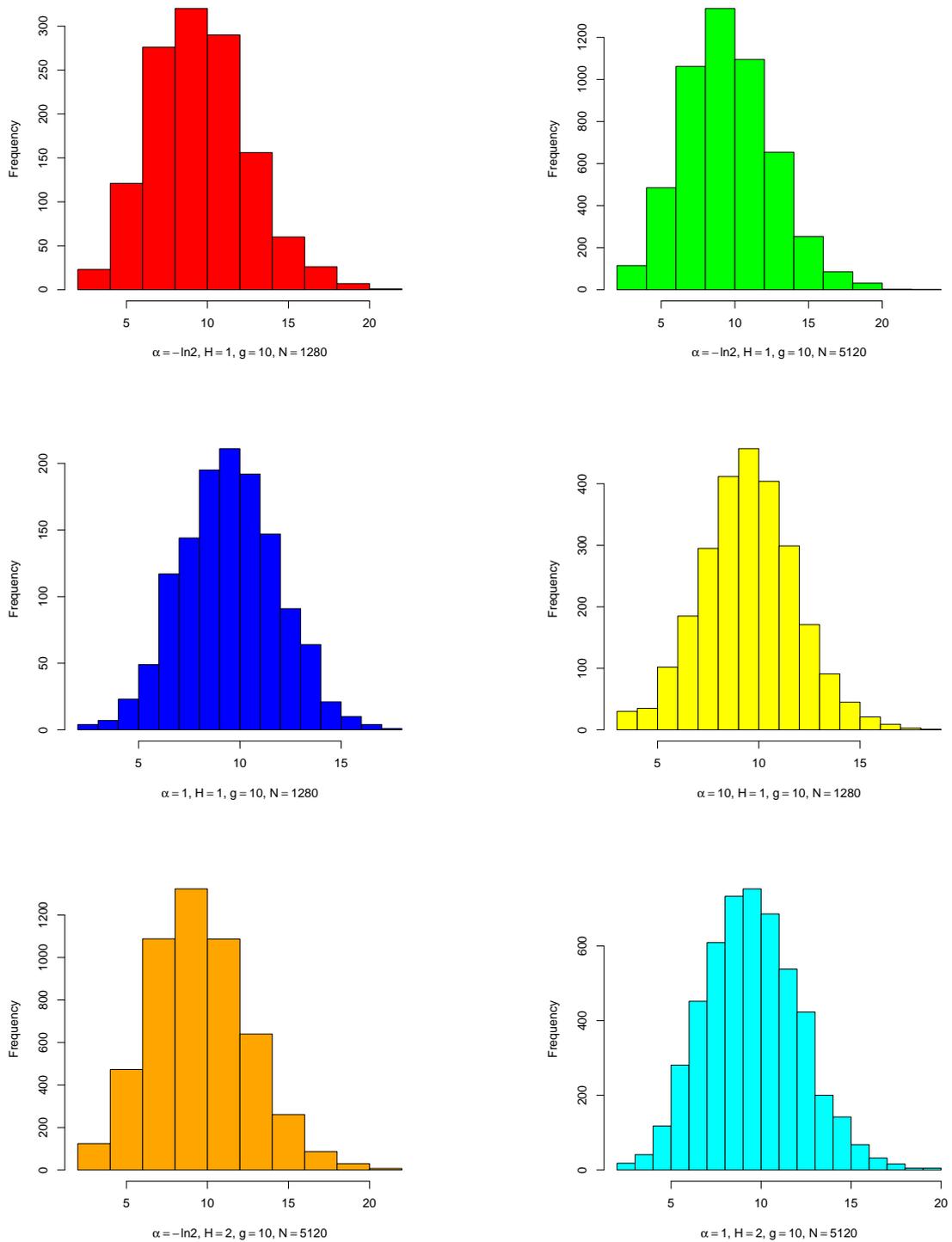


Abbildung 4.1: Häufigkeitsverteilung des Vernetzungsgrades, bei verschiedenen Netzwerkparametern  $\alpha$  und  $H$

Entscheidungsfunktion  $d$ . Hier wird der Fall untersucht werden, dass die Person  $j$  die Entscheidung ausschließlich nach der Zahl der sozialen Kontakte fällt.

$$d(n, m) = \begin{cases} \text{wechsle von } m \text{ zu } n, & \text{wenn Party } n \text{ attraktiver als Party } m \\ \text{bleibe auf Party } m, & \text{wenn Party } m \text{ attraktiver als Party } n \end{cases}. \quad (4.1)$$

Die Festlegung der Entscheidungsfunktion ist Bestandteil des Modells. Hier ist das folgendermaßen gelöst:  $j$  kennt natürlich die Zahl seiner Freunde auf Party  $m$ , die mit  $a$  bezeichnet wird, es ist einfach der Durchschnitt aus seinem Freundeskreis mit der Menge aller Teilnehmer an Party  $m$ . Person  $i$  gibt nun per Telefon die Teilnehmer an Party  $n$  durch und  $j$  ermittelt wieder den Durchschnitt mit seinem Freundeskreis und erhält mit der Zahl  $b$  die Anzahl seiner Freunde auf der Party, an der  $j$  teilnimmt. Damit hat man ein einfaches Kriterium und die Entscheidung (4.1) für  $j$  ist:

$$d(n, m) = \begin{cases} \text{wechsle,} & a < b \\ \text{bleibe,} & a \geq b \end{cases}.$$

Entscheidungsprozesse in der Realität sind komplexe Prozesse des Bewusstseins, deren Teilaspekte im Rahmen eines Modells niemals vollständig berücksichtigt werden können. Auch findet in diesem Modell keine Bewertung der Qualität der Kontakte statt. Einerseits ist die Anwesenheit eines sehr guten Freundes ein Grund, die Party zu wechseln. Ebenso ist denkbar, dass es keinen Grund gibt zu wechseln, obwohl auf der Party viele Bekannte sind. Trotz seiner Beschränktheit spiegelt unser Kriterium in seiner Einfachheit durchaus einen wichtigen Aspekt wider.

## 4.2 Simulationsergebnisse

Damit stehen alle Daten für die Simulation eines Meinungsbildungsprozesses in Form eines kollektiven Auswahl- und Verteilungsprozesses zur Verfügung:

1. *Initialisieren des Netzwerkes*( $H, l, b, g, \alpha$ )
2. *Anlegen von Parties*( $N_P$ ) ( $N_P$  Anzahl der verschiedenen Parties)
3. WIEDERHOLUNG
4. *wähle*  $\rightarrow x_i$  ( $x_i$  Person  $i$ ,  $x_i \in P_n$ )
5. *call*( $A_i$ )  $\leftarrow x_j$  (wähle Person  $j$  aus Freundesliste  $A_i$ , d. h.  $x_j \in P_m$ )
6.  $d_i(n, m)$
7. BIS EIN STATIONÄRER ZUSTAND ERREICHT IST

$P_n$  und  $P_m$  bezeichnen Menge der Teilnehmer der Party  $n$  bzw. der Party  $m$  während  $A_i$  die Menge der Freunde von  $i$  ist. Anfänglich sind alle Knoten gleichmäßig zufällig über alle Parties verteilt. Einen Eindruck, wie sich ein solches System entwickelt, vermittelt die Abbildung 4.2. Deutlich ist zu erkennen, dass sich aus der anfänglichen Gleichverteilung

## 4 Meinungsbildungsprozesse

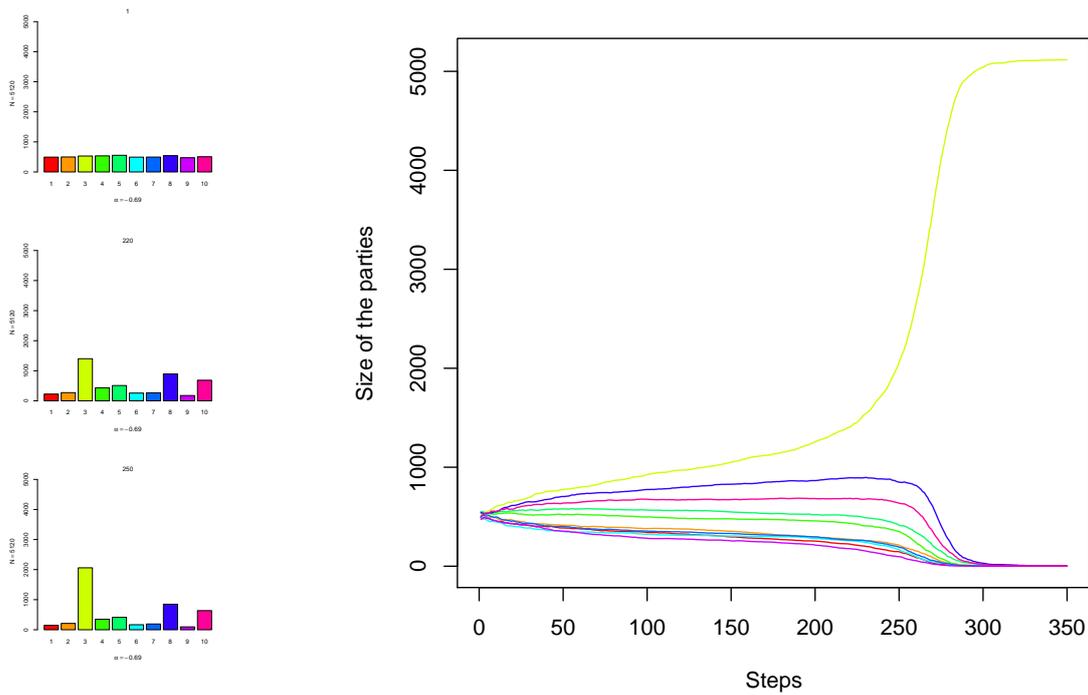


Abbildung 4.2: Zeitliche Entwicklung des Meinungsbildungsmodells mit 10 Parties und den Parametern  $\alpha = -\ln 2$ ,  $H = 1$ ,  $N = 5120$ . 1000 Programmschleifen entsprechen einem Zeitschritt in den Diagrammen. Links sind die Stärken der einzelnen Parties zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt, rechts der zeitliche Verlauf

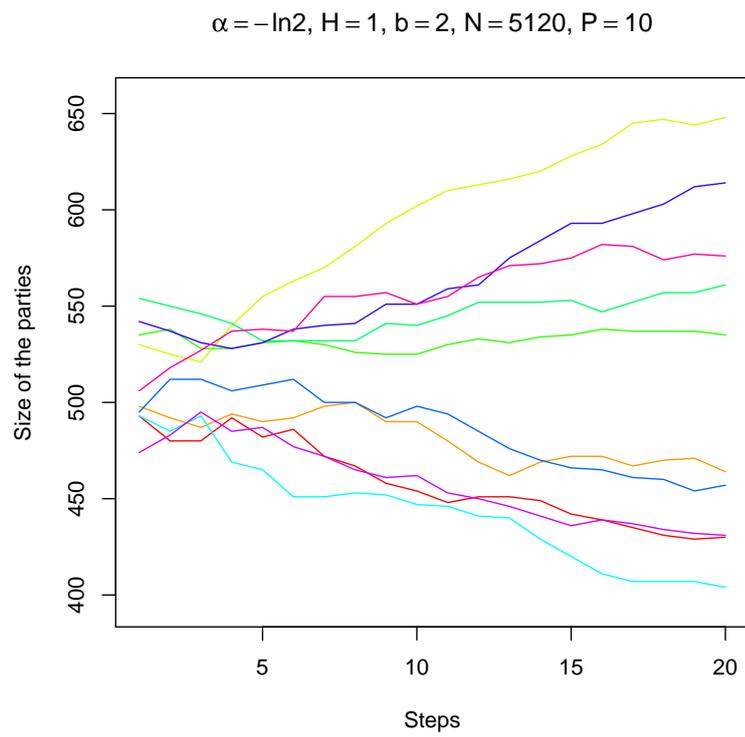
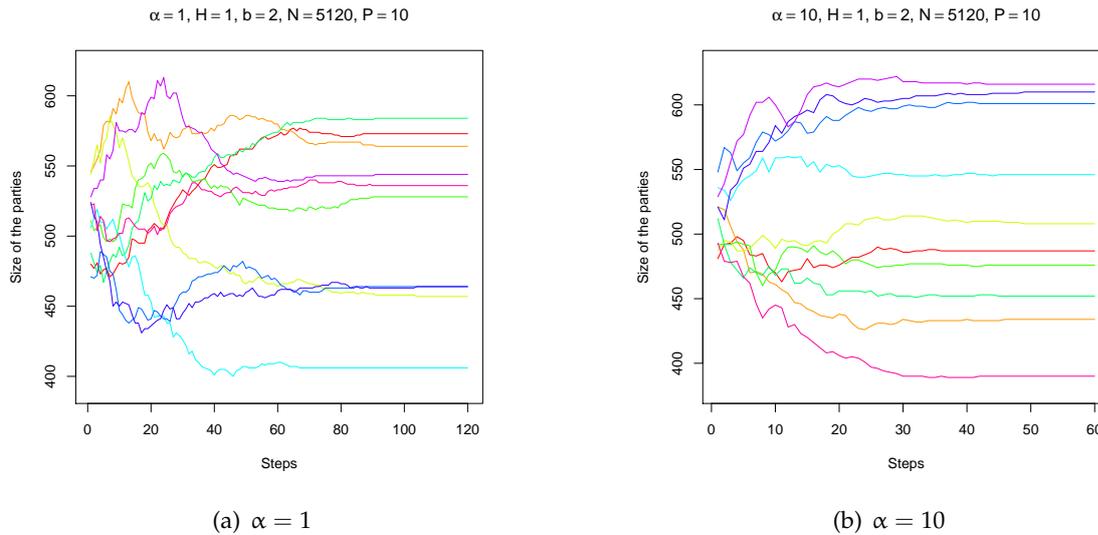


Abbildung 4.3: Die Startphase einer Simulation 4.2

heraus einzelne Parties stärker entwickeln. In Abbildung 4.3 ist einmal die Startphase dieser Simulation aufgetragen. Ebenso ist eindeutig zu sehen, dass nicht die anfänglich größten Parties gewinnen, entscheidend ist die Vernetzungsstärke ihrer Mitglieder. Der Parameter  $\alpha$  hat Einfluss auf die Reichweite der Bindungen in der sozialen Struktur. Die soziale Durchlässigkeit des Netzwerkes wird durch die Bindungslängen bestimmt und Gleichung (3.2) gibt die Wahrscheinlichkeit an für Bindungen der Länge  $x$  an. Um den Einfluss von  $\alpha$  auf das System abzuschätzen, wurden die Simulationen mit  $\alpha = 1$  und  $\alpha = 10$  wiederholt. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 4.4(a) bzw. 4.4(b) dargestellt. Es ist zu erkennen, dass bei kleinem  $\alpha$  (Abb. 4.2), wo langreichweitige Beziehungen vorherrschen, einzelne Parties die Oberhand gewinnen und sehr viele oder gar alle Knoten anzieht, während der Rest verarmt. Wächst  $\alpha$  (Abb. 4.4), so dominieren kurzreichweitige Beziehungen das System, dementsprechend gelingt es keiner Party, genug Anziehungskraft zu entwickeln, um sich auf Kosten der anderen durchzusetzen. Um dieses Verhalten genauer zu untersuchen, wurde eine Simulationsserie  $-0,5 \leq \alpha \leq 1$  durchgeführt, deren Ergebnisse in den Abbildungen 4.5(a) bis 4.5(e) dargestellt sind. Bemerkenswert ist, dass es einen *kritischen Wert*  $\alpha_c$  gibt, an dem das System zwischen den beiden Verhaltenstypen wechselt. In den Simulationen 4.5 findet man  $\alpha_c \approx -0.198$ . Unterhalb von  $\alpha_c$  gibt es während der Entwicklung des Systems einen deutlichen Übergang im Verhalten, nachdem sich zunächst alle Parties relativ gleichmäßig entwickeln, nimmt plötzlich die Stärke einer einzelnen Party stark zu. Auf Kosten der anderen Parties sammeln sich alle Knoten in ihr. Unterhalb von  $\alpha_c$  findet dieser Übergang nicht statt. Offenbar übernimmt der Parameter  $\alpha$  die Rolle eines Kontrollparameters, von dessen Werten das System bestimmt wird. Derartige Kontrollparameter sind ein weiteres Charakteristikum *nichtlinearer* Systeme. So spielt beispielsweise bei Phasenübergängen in magnetischen Systemen die Temperatur die Rolle eines Kontrollparameters. Bei einem bestimmten Wert, der Phasenübergangstemperatur  $T = T_c$ , wechselt das System in die andere Phase. Es ist für  $T > T_c$  das System paramagnetisch, während es für  $T < T_c$  einen ferromagnetischen Zustand zeigt.

Während der Wert von  $T_c$  durch die mikroskopische Wechselwirkung der den Magnetismus hervorrufenden Freiheitsgrade bestimmt ist, haben wir es bei dem hier betrachteten System mit einem Selbstorganisationsmechanismus zu tun. Im speziellen Fall des Partywechsels sind die Einflussgrößen, die  $\alpha_c$  bestimmen, nicht bekannt. Es bedarf zusätzlicher Untersuchungen in sozialen Systemen, um genauere Aussagen bzgl.  $\alpha_c$  treffen zu können.

Entscheidend ist die Struktur des sozialen Netzes zwischen den Knoten, auf die in den Simulationen 4.5 durch Variation des Parameters  $\alpha$  Einfluss genommen wurde. Die Existenz von langreichweitigen Beziehungen bei einem gleichzeitig vorherrschenden lokalen Charakter des Netzwerkes, d. h. die Mehrzahl der Knoten ist hauptsächlich mit ihm nahe stehenden anderen verknüpft, ist die Grundlage für obiges Verhalten. Ist dies der Fall, wie in unterschiedlichem Maße in den Abbildungen 4.5(a)–4.5(d), so beschränkt sich zunächst die Suche nach der „besten“ Party auf das nähere Umfeld und ist auch relativ ausgeglichen. Erst der zufällige Anruf einer hochvernetzten Person mit weitreichenden Kontakten erweitert den Spielraum einer Party um die Möglichkeit, auch Leute aus sozial weiter entfernten Gebieten zu rekrutieren. Dieser Mechanismus gibt den Ausschlag in diesem Modell, das System vollzieht einen Phasenübergang zwischen einem Singlepartyzustand

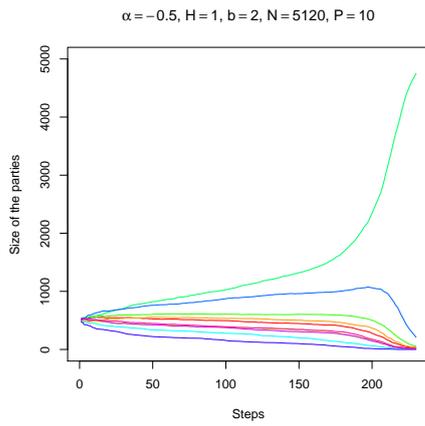
Abbildung 4.4: Simulationen für verschiedene größere Werte von  $\alpha$ 

bei  $\alpha < \alpha_c$  hin zu einem Multipartyzustand bei  $\alpha > \alpha_c$ . Der relativ scharfe Übergang des Systems wird nicht durch äußere Einflüsse hervorgerufen, er ist eine direkte Folge der inneren selbstorganisierenden Wechselwirkungen zwischen den Mitgliedern der sozialen Gruppe.

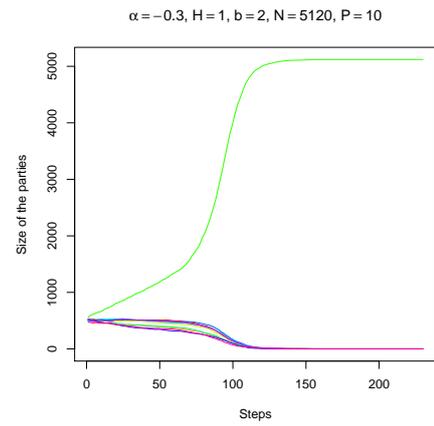
Eine weitere Möglichkeit in das System einzugreifen, ist die Erhöhung der Anzahl der Partys unter Beibehaltung der Netzwerkparameter. In der Simulationsserie 4.6 sind sie in sämtlichen Realisierungen auf  $\alpha = -\ln 2, H = 1, b = 2$  und daraus resultierend  $N = 5120$  gesetzt. In den Abbildungen 4.6(a) – 4.6(d) ist zu erkennen, dass über einen weiten Bereich die Zahl der Partys (10 – 20) keinen Einfluss auf das Verhalten des Systems zu haben scheint. Nur bei einer extremen Erhöhung der Anzahl wird der beobachtete Effekt zerstört, es dominiert keine Party. Sehr wohl unterscheiden sich die Partys jedoch stark in ihrer Mächtigkeit. Die Spannweite reicht von sehr großen Parties an denen ca. 8% der Personen teilnehmen bis hin zu eher kleinen, die nur wenige Teilnehmer (ca. 1,5% von der Gesamtzahl) haben.

Ein ähnliches Problem in einem anderen Kontext ist in [64] vorgestellt. In dem dort entwickelten Modell gibt es zunächst auch eine Gruppe von Personen unterschiedlicher Meinung. Es wird untersucht, unter welchen Bedingungen sie durch Meinungsänderungen zu einem Konsens gelangen können.

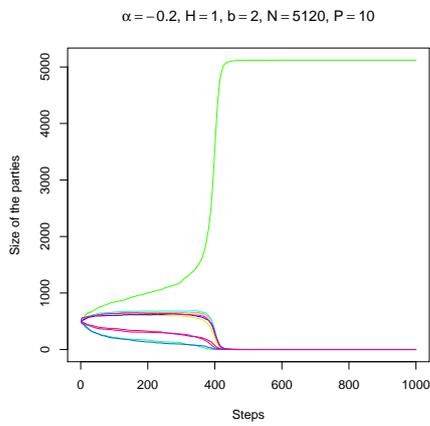
## 4 Meinungsbildungsprozesse



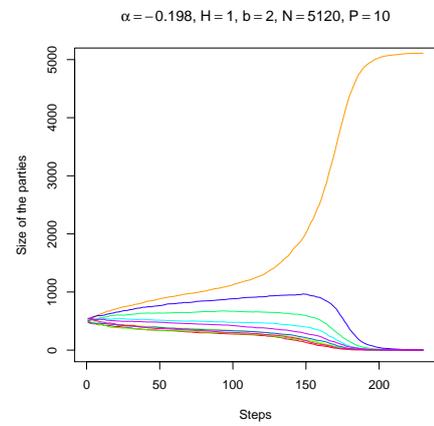
(a)  $\alpha = -0,5$



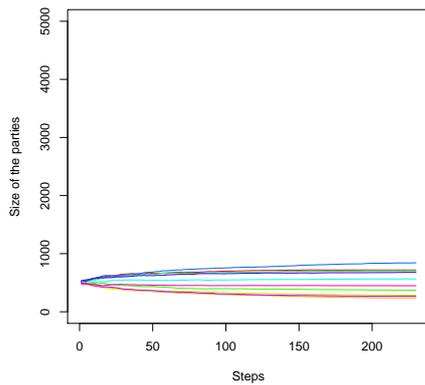
(b)  $\alpha = -0,3$



(c)  $\alpha = -0,2$



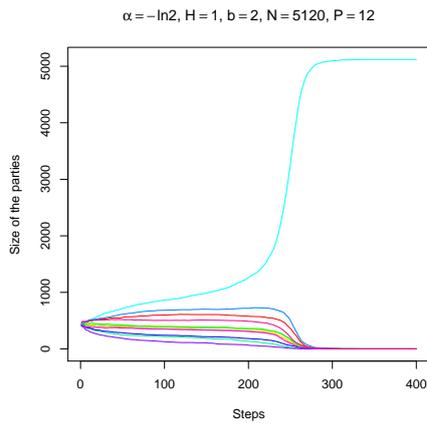
(d)  $\alpha_c = -0,198$



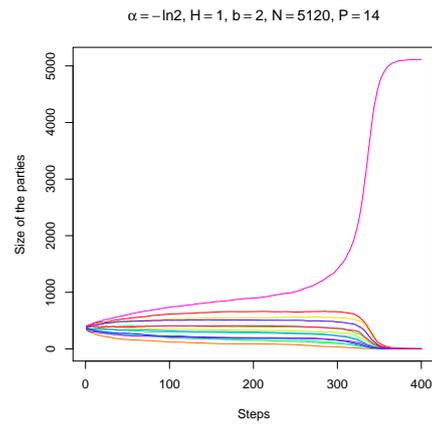
(e)  $\alpha > \alpha_c$

Abbildung 4.5: genauere Untersuchung der Abhängigkeit von  $\alpha$

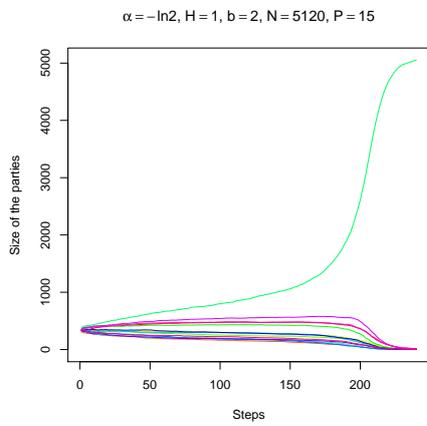
## 4.2 Simulationsergebnisse



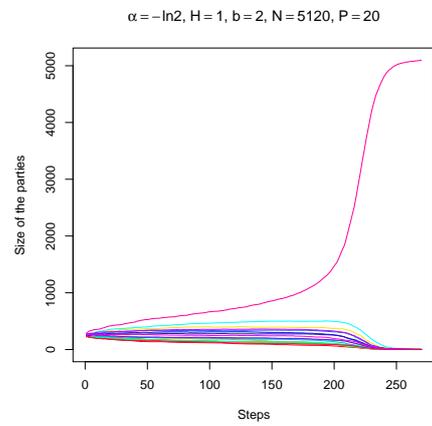
(a) 12 Parties



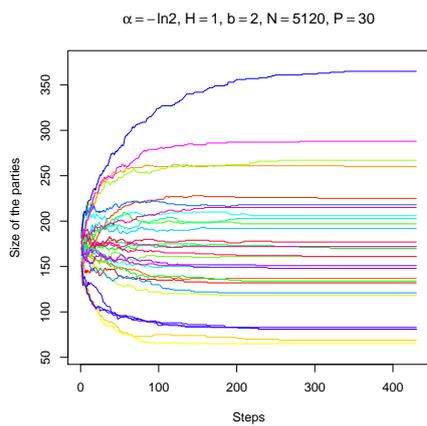
(b) 14 Parties



(c) 15 Parties



(d) 20 Parties



(e) 30 Parties

Abbildung 4.6: Variation der Zahl der verschiedenen Parties



# 5 Epidemien

Einen zentralen Punkt in dieser Arbeit nimmt die Modellierung der Ausbreitung von Krankheiten ein. Das bekannte *SIR*-Modell (vgl. Abschnitt 3.1.2) bildete als etabliertes Modell dazu in der überwiegenden Zahl der folgenden Untersuchungen die Grundlage.

1. Die klassische Auswertung des Differentialgleichungssystems (3.4) sowohl
  - a) mit analytischen Methoden als auch
  - b) numerischer Herangehensweise zur Lösung des Systems.
2. Die Betrachtung eines stochastischen eindimensionalen Dreizustandmodells
  - a) mit analytischen Methoden und durch
  - b) eine Simulation des Systems.
3. Die Simulation des *SIR*-Modells auf einem hierarchischen Netzwerk.

## 5.1 Untersuchungen am *SIR*-Modell

### 5.1.1 Ein analytischer Ansatz

Zum Punkt 1a wurden schon einige Untersuchungen unter dem Abschnitt 3.1.2 näher erläutert. Dort wurde u. a. bereits festgestellt, dass die zweite Gleichung des Systems (3.4) unter der Bedingung  $S(0) > \gamma/\beta$  ein Maximum annimmt.

Eine wichtige Fragestellung ist, ob das Modell integrierbar ist. Zur Untersuchung bietet es sich an, eine Hilfsfunktion  $g(t) = \ln S(t)$  einzuführen. Durch die erste Gleichung im System (3.4) erfüllt  $g(t)$  die Bedingung  $\dot{g} = -\beta I$ . Nochmaliges Differenzieren unter Einbeziehung der zweiten Gleichung aus dem System (3.4) ergibt eine integrierbare Differentialgleichung zweiter Ordnung für  $g$ .

$$\ddot{g} = \beta \dot{g} e^g - \gamma \dot{g}$$

Nach einer Integration gilt für  $g$

$$\frac{dg}{dt} = \beta e^g - \gamma g + \Delta,$$

wobei  $\Delta$  eine Integrationskonstante ist. Durch das Einsetzen von  $S(0) = S_0$ ,  $I(0) = I_0$  und  $R(0) = R_0$  kann sie als  $\Delta = \gamma \ln S_0 - \beta(I_0 + S_0)$  bestimmt werden. Oben eingesetzt, findet man die Beziehung

$$\frac{dg}{dt} = -\beta I = \beta S - \gamma \ln S + \gamma \ln S_0 - \beta(S_0 + I_0)$$

## 5 Epidemien

und schließlich

$$I(t) = -S(t) + \frac{\gamma}{\beta} \ln \frac{S(t)}{S_0} + N. \quad (5.1)$$

Aus der Erhaltung der Gesamtzahl der Individuen  $S(t) + I(t) + R(t) = N$  folgt

$$R(t) = -\frac{\gamma}{\beta} \ln \frac{S(t)}{S_0}.$$

Mit Hilfe von  $g = -\frac{\beta}{\gamma}R + \ln S_0$  ergibt sich

$$\frac{dR}{dt} = -\gamma S_0 e^{-\frac{\beta}{\gamma}R} + \gamma(N - R).$$

Diese Gleichung kann man auch als Bewegungsgleichung einer überdämpften Bewegung in einem Potenzial interpretieren. Es ist also

$$\frac{dR}{dt} = -\frac{dU}{dR}$$

mit dem Potenzial  $U(r)$

$$U(R) = \frac{S_0 \gamma^2}{\beta} e^{-\frac{\beta}{\gamma}R} - \frac{\gamma R}{2}(R - 2N).$$

Diese Bewegungsgleichung besitzt keine geschlossene Lösung, die durch elementare Funktionen ausgedrückt werden kann. Im Grenzfall  $t \rightarrow \infty$  geht Gleichung (5.1) in eine transzendente Gleichung für die stationäre Population der  $S$ -Teilchen  $S^* = S(t \rightarrow \infty)$  über:

$$S^* - \frac{\gamma}{\beta} \ln \frac{S^*}{S_0} - N = 0.$$

Auch hier findet man keine Lösung in geschlossener Form. Für große  $N$  verhält sich  $S^*$  asymptotisch

$$S^* \simeq S_0 e^{-\frac{\beta}{\gamma}N}. \quad (5.2)$$

Der Wert für die Populationsstärke der gesunden, empfänglichen  $S$ -Individuen  $S^*$  fällt exponentiell mit der Gesamtpopulationsstärke  $N$ , wovon man sich durch Einsetzen leicht überzeugen kann.

### 5.1.2 Die numerische Lösung

Die Lösung des Systems (3.4), welches ein nichtlineares System gewöhnlicher Differentialgleichungen darstellt, ist mittels üblicher Standardmethoden ohne Weiteres möglich. In Abschnitt 3.1.2 sind für einige Fälle Lösungskurven (siehe Abbildung 3.5 des Systems

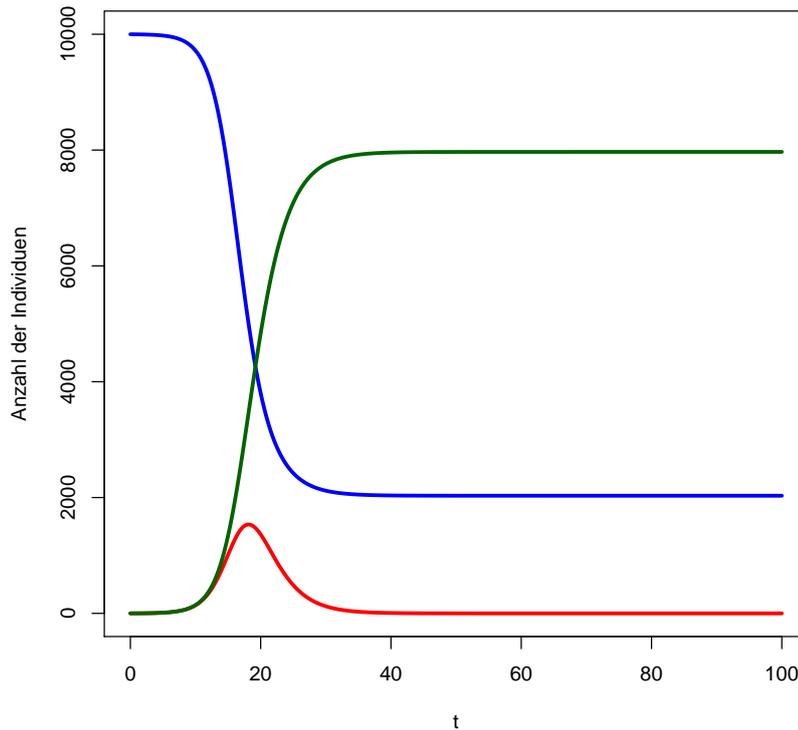


Abbildung 5.1: Numerische Lösung des Systems (3.4) mit den Startwerten  $N = 10000$ ,  $S_0 = N - 1$ ,  $I_0 = 1$ ,  $R_0 = 0$  und den Übergangsraten  $\beta = 0.001$  und  $\gamma = 0.5$

dargestellt, das mit Hilfe des Statistikprogrammes  $\text{\textcircled{R}}$  [86] numerisch gelöst wurde. Im Hinblick auf Gleichung (5.2) ist zu erwarten, dass nur für sehr kleine  $\gamma/\beta$  eine nennenswerte Zahl von stationären  $S$ -Teilchen geben kann. So sind in Abbildung 5.1 die Kurven für  $N = 10000$ ,  $S_0 = N - 1$ ,  $I_0 = 1$  und  $R_0 = 0$  bei den Parametern  $\beta = 0.001$  und  $\gamma = 0.5$  gezeichnet, und es ist eine stationäre  $S$ -Fraktion zu erkennen. Deutlich ist das nichtlineare Verhalten des Gleichungssystems (3.4) festzustellen. Bei steigendem  $N$  verringert sich deren Größe jedoch, wenn  $\gamma/\beta$  seinen Wert behält.

## 5.2 Das stochastischen SIR-Modells

### 5.2.1 Die exakte Lösung des stochastischen SIR-Modells

Eine weitere Methode, nach einer Lösung des Systems (3.4) zu suchen, ist die Verwendung eines Modells, wie es in Abschnitt 2.1 vorgestellt wurde. Dazu wird angenommen, dass die Individuen aller drei Fraktionen, nämlich  $S$ -,  $I$ - und  $R$ -Individuen, auf einem Gitter angeordnet sind. Die Übergänge  $S \rightarrow I$  und  $I \rightarrow R$  werden dann mittels Gitternachbarwechselwirkungen realisiert. Für den Fall eines eindimensionalen Graphen wurde

in Abschnitt 2.1 eine Methode vorgestellt, die eine exakte Lösung für die gemittelten Populationsgrößen liefert. Da es sich bei den erwähnten Wechselwirkungen um stochastische Vorgänge handelt, wurde eine Beschreibung durch eine *Mastergleichung* gewählt, welche dann auf einen Quantenformalismus mit Spinoperatoren abgebildet wurde. Die erhaltenen Evolutionsgleichungen

$$n_S(t) = n_S(0) - 2\beta\tau n_S(0)n_I(0) \left\{ (1 - e^{-t/\tau}) \times (1 - \beta\tau n_I(0)) + (1 - e^{-2t/\tau}) \frac{\beta\tau n_I(0)}{2} \right\} \quad (5.3)$$

und

$$n_I(t) = n_I(0) [e^{-\gamma t} + 2\beta\tau n_S(0)f(t)] \quad (5.4)$$

mit

$$f(t) = \frac{e^{-t/\tau} - e^{-\gamma t}}{\gamma\tau - 1} (1 - \beta n_I(0)\tau) + \frac{\beta n_I(0)\tau}{\gamma\tau - 2} (e^{-2t/\tau} - e^{-\gamma t})$$

sowie

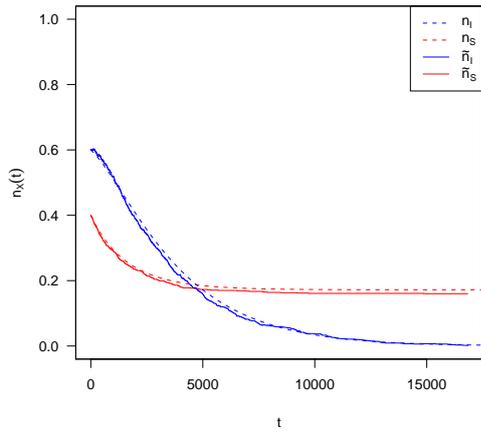
$$n_R(t) = 1 - n_I(t) - n_S(t)$$

stellen eine exakte Lösung des stochastischen *SIR*-Modells für beliebige Anfangsbedingungen  $n_S(0)$ ,  $n_I(0)$  auf einem linearen Graphen dar. Die in Abschnitt 5.1.2 vorgestellte numerische Lösung des klassischen *SIR*-Modells stellt im Gegensatz dazu die Lösung für einen vollvernetzten Graphen dar. Ein deutlicher Unterschied besteht im Langzeitverhalten der beiden Modelle. Für das hier entwickelte Modell ist ein wesentlicher Anteil an stationären *S*-Teilchen typisch, d. h.  $n_S^* > 0$ , während die klassische Lösung aufgrund von Gleichung (5.2) stets gegen Null tendiert.

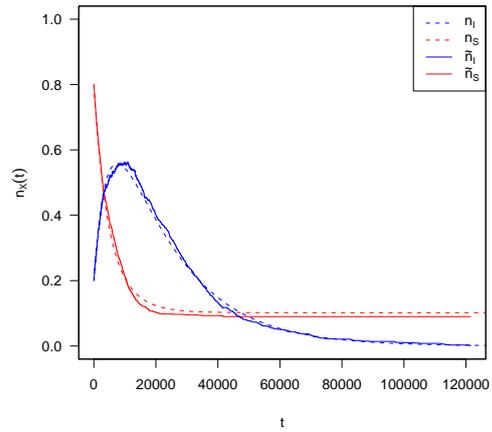
### 5.2.2 Einige Simulationsergebnisse

In diesem Abschnitt werden nun einige Simulationsergebnisse vorgestellt, die mit der in Abschnitt 2.2 eingeführten Simulationemethode erzeugt wurden. Angezeigt werden jeweils eine einzelne Realisierung des Simulationsprozesses. Gleichzeitig sind in den Abbildungen die exakten Ergebnisse gemäß Gleichung (5.3) und Gleichung (5.4) zum Vergleich eingetragen. In Abbildung 5.2 sind die Ergebnisse für zwei verschiedene Parameterkonfigurationen dargestellt. Zum einen ist in Abbildung 5.2(b) die Ausbildung eines Maximums der Infizierten zu beobachten, was in Abbildung 5.2(a) nicht der Fall ist. Auffällig ist vor allem die deutliche stationäre  $n_S$ -Fraktion, was im Gegensatz zum von der klassischen Theorie vorhergesagtem Wert steht, der im ersten Fall  $\approx 400e^{-7000}$  beträgt und somit nahezu Null ist. Es ist die sehr gute Übereinstimmung von exakter Lösung und Simulationsergebnissen zu erkennen.

In Abbildung 5.3 sind ebenfalls die zeitlichen Verläufe der Populationsstärken von  $\tilde{n}_S$  und  $\tilde{n}_I$  während eines einzelnen Simulationslaufes zusammen mit den exakten Lösungen dargestellt. In Abbildung 5.3(b) sind die Werte bei einer Gesamtpopulation der Stärke 10000 aufgetragen, in Abbildung 5.3(a) ist die Stärke nur 100. Sehr deutlich ist der stärkere Einfluss von Fluktuationen bei kleinen Populationsstärken  $N$  zu erkennen, wie es nach

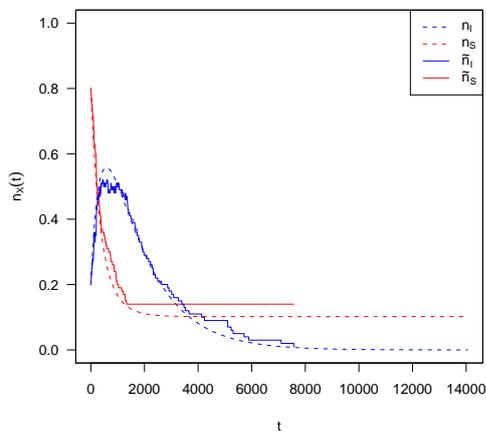


(a)  $\beta = 0,7, \gamma = 0,1, n_S(0) = 0,4, n_I(0) = 0,6$

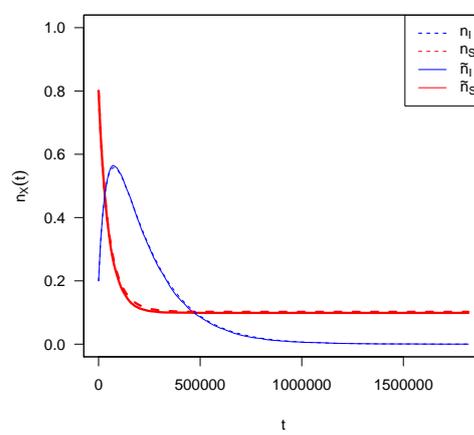


(b)  $\beta = 0,9, \gamma = 0,1, n_S(0) = 0,8, n_I(0) = 0,2$

Abbildung 5.2: Die zeitliche Entwicklung der empfänglichen (rot) und infektiösen (blau) Individuen bei unterschiedlichen Parametern, die durchgezogene Linie zeigt die Simulationsergebnisse ( $\tilde{n}_S$  und  $\tilde{n}_I$ ) und die gestrichelte die exakten Lösungen ( $n_S$  und  $n_I$ ). Die Populationsgröße beträgt in beiden Fällen  $N = 10^3$ .



(a)  $N = 10^2$



(b)  $N = 10^4$

Abbildung 5.3: Die zeitliche Entwicklung der beiden Spezies  $n_S$  und  $n_I$  bei den Parameterwerten  $\beta = 0,9$  und  $\gamma = 0,1$ . Die Startwerte betragen  $n_S(0) = 0,8$  sowie  $n_I(0) = 0,2$ .

dem Gesetz der großen Zahlen auch zu erwarten ist. Demzufolge sind bei Populationen der Größenordnung  $10^4$  Fluktuationen nahezu unbedeutend. Als Folge davon ist zu beobachten, dass es bei kleinem  $N$  zu größeren Unterschieden zwischen den Simulationsergebnissen und der exakten Lösung kommt.

### 5.3 Das SIR-Modell auf einem hierarchischen Netzwerk

Bislang erfolgten Simulationen des SIR-Modells auf einfachen regelmäßigen Gittern. In diesem Abschnitt wird der Schritt hin zu einem hierarchischen Netzwerk, wie es in Abschnitt 3.1.1 vorgestellt wurde, beschrieben, um ein realitätsnäheres Modell zu erhalten (vgl. [89]). Das Vorgehen dient vor allem dazu, die Ausbreitung von Krankheiten bzw. Informationen in komplexen sozialen Strukturen zu beschreiben. Will man z. B. untersuchen, wie sich ein Computervirus über ein Email-Netzwerk verbreitet, sind obige Modelle untauglich. Die Ausbreitung erfolgt nämlich nicht über die physischen Strukturen des Internets, sondern wird bestimmt durch das Beziehungsgeflecht der Personen, denn die Email-Viren werten oft die Adressbücher der Emailprogramme aus. Dieses so gebildete Netzwerk ist ein Abbild des realen Beziehungsnetzwerkes, vermutlich ist es dichter als dieses, denn im Emailverkehr werden oft Kontakte unterhalten, die es im realen Leben nicht gibt. Das Modell 3.1.1, wie es auch in [98] vorgestellt wurde, ist mit dem Parameter  $\alpha$  an die verschiedenen Gegebenheiten anpassbar, über welchen man direkt Einfluss auf die Art und den Grad der Vernetzung der Knoten bei einer festen Zahl von Hierarchien  $H$  hat. Die Knoten sind vom Typ  $S$ ,  $I$  oder  $R$ , da es sich auch hier um eine Realisierung des SIR-Modells handelt. Die Typenübergänge der Knoten im System sind im Abschnitt 2.2 ausführlich beschrieben. Ziel der Untersuchungen ist es, das Ausbreitungsverhalten in einem sozialen Netzwerk zu simulieren. Die Simulation umfasst dabei die Anzahl an Schritten, die notwendig sind, bis keine Knoten vom Typ  $I$  im Netzwerk vorhanden sind. Die Zahl der entstandenen  $R$ -Knoten zeigt dann, wie viele Knoten im Verlauf erkrankt waren, d. h. sich im Status  $I$  befanden. An der Verteilung der  $R$ -Knoten im Netzwerk nach Abschluss der Simulation kann man sehen, ob die Krankheit sich überwiegend lokal oder sogar global über das gesamte Netzwerk ausgebreitet hat. Als Maß dient die Wahrscheinlichkeit, dass man  $N_R$  Knoten im Status  $R$  nach Ablauf der Simulation vorfindet, die mit  $P(N_R)$  bezeichnet wird. In Abbildung 5.4 ist  $P(N_R)$  für verschiedene  $N_R$  dargestellt. Da der Parameter  $\alpha$  sehr groß ist, sind langreichweitige Verbindungen sehr unwahrscheinlich. Es gibt nur lokale Effekte, die unabhängig von der Zahl der Individuen  $N$  sind. Dementsprechend können sich Infektionen nicht über das gesamte Netzwerk ausbreiten und bleiben meist auf die engsten Nachbarn beschränkt. In diesem Fall sind das die Mitglieder der Subgruppen der Stärke  $\langle g \rangle$  und die Wahrscheinlichkeit  $P(N_R)$  nimmt ein Maximum im Bereich  $5 \dots 10$  an. Betrachtet man  $P(N_R)$  für kleinere  $\alpha$ , dann treten deutlich erkennbar langreichweitige Effekte auf. Deshalb ist in Abbildung 5.5 deutlich zu erkennen, dass auch bei  $N_R > \langle g \rangle$  die Wahrscheinlichkeit  $P(N_R)$  signifikant über Null liegt. Herrscht im Netzwerk eine hohe Konnektivität, wie dies bei sehr kleinem Parameter  $\alpha$  der Fall ist, beobachtet man zwei unterschiedliche Verhaltensweisen. Zum Einen wirken unabhängig von  $N$  lokale Beziehungen, d. h. in der Umgebung von  $\langle g \rangle$  nimmt  $P(N_R)$  ein Maximum an. Zum Anderen ist die Wahrscheinlichkeit  $P(N_R)$  in Abhängigkeit von

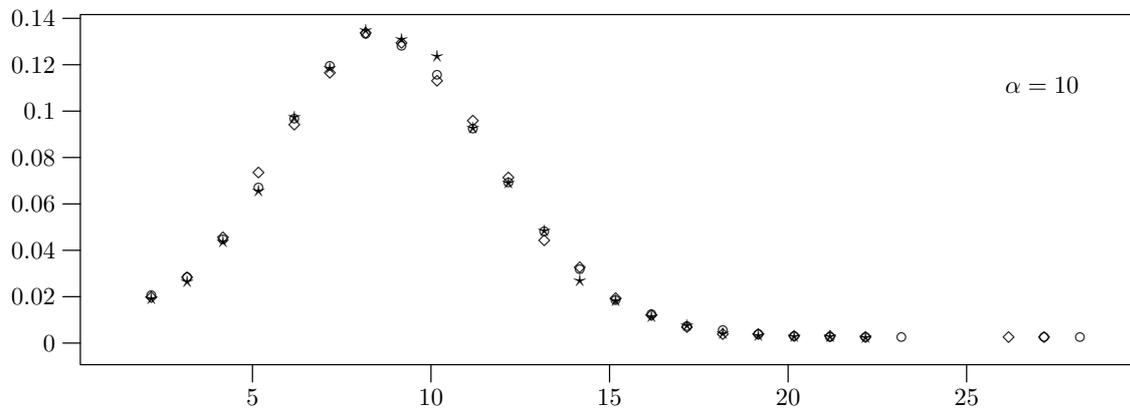


Abbildung 5.4: Die Wahrscheinlichkeit  $P(N_R)$  in Abhängigkeit von der Zahl der  $N_R$  bei  $\alpha = 10, \langle g \rangle = 10, b = 2, H = 1, l = 8 \rightarrow N = 1280$  ( $\star$ ),  $l = 9 \rightarrow N = 2560$  ( $\circ$ ),  $l = 10 \rightarrow N = 5120$  ( $\diamond$ )

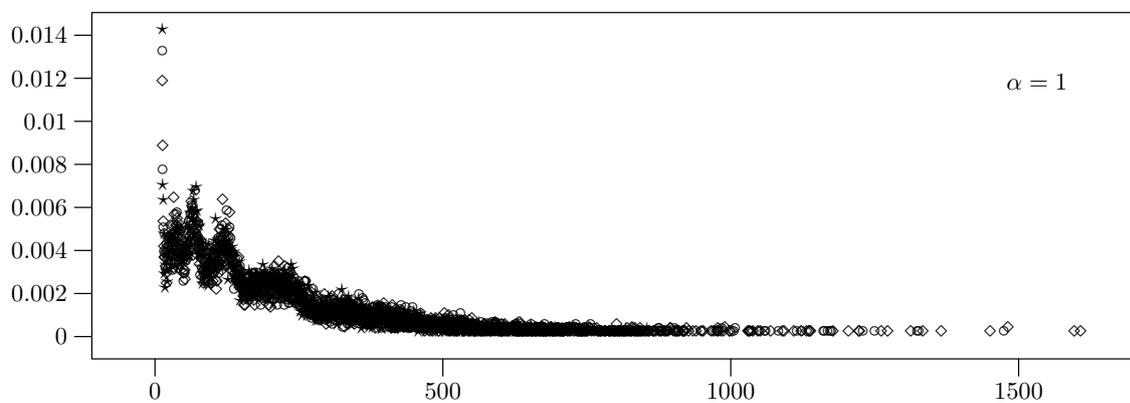


Abbildung 5.5: Die Wahrscheinlichkeit  $P(N_R)$  in Abhängigkeit von  $N_R$  bei den Parametern  $\alpha = 1, \langle g \rangle = 10, b = 2, H = 1, l = 8 \rightarrow N = 1280$  ( $\star$ ),  $l = 9 \rightarrow N = 2560$  ( $\circ$ ),  $l = 10 \rightarrow N = 5120$  ( $\diamond$ )

## 5 Epidemien

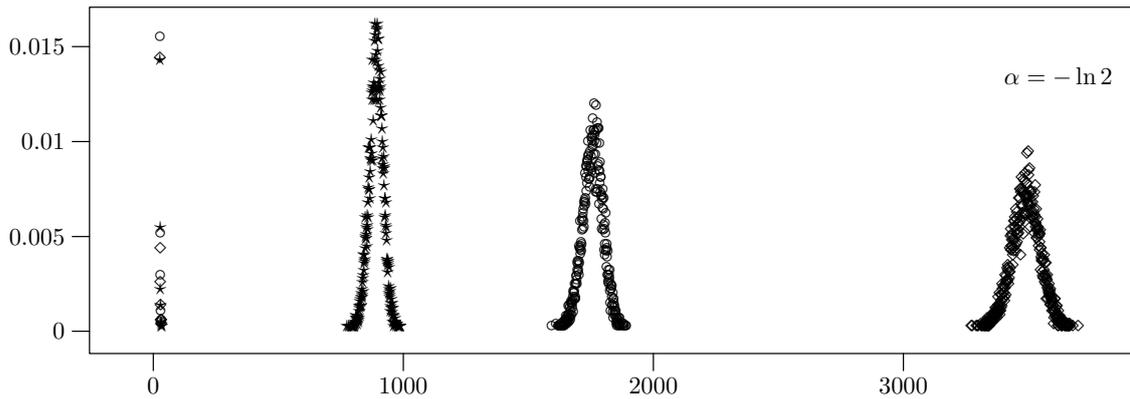


Abbildung 5.6:  $P(N_R)$  in Abhängigkeit von  $N_R$  bei den Parametern  $\alpha = -\ln 2$ ,  $\langle g \rangle = 10$ ,  $b = 2$ ,  $H = 1$ ,  $l = 8 \rightarrow N = 1280$  ( $\star$ ),  $l = 9 \rightarrow N = 2560$  ( $\circ$ ),  $l = 10 \rightarrow N = 5120$  ( $\diamond$ )

$N$  normalverteilt mit den Mittelwerten bei  $N_R \approx N$ . Dargestellt ist diese Situation in Abbildung 5.6.

Eine völlig andere Situation ergibt sich, wenn die Zahl der Hierarchien  $H$  erhöht wird. Natürlich besteht auch hier eine hervorragende Konnektivität zu den Mitgliedern der eigenen Subgruppen. Da es mehrere Hierarchien gibt, ist jeder Knoten sogar simultan zu mehreren (Familie, Freunde, Arbeitskollegen, u. a. m.) dieser Gruppen zugeordnet. Die Kontaktwahrscheinlichkeit zweier Individuen  $i$  und  $j$  ist in den verschiedenen Hierarchien unterschiedlich, da ihre Positionen zueinander und damit ihr sozialer Abstand  $x_{ij}$  in jeder Hierarchie anders ist. Die Verbindungen, die durch die einzelnen Hierarchien etabliert werden, sind dabei unabhängig voneinander. Als Folge verschwindet die  $\alpha$ -Abhängigkeit der Wahrscheinlichkeit  $P(N_R)$ , d. h. bei jedem Wert  $\alpha$  breitet sich die Epidemie im Netzwerk aus (vgl. Abbildung 5.7). Einen guten Überblick liefert die Abbildung 5.8. Dargestellt ist hier der Anteil der  $R$ -Knoten als Funktion von  $\alpha$  für verschiedene Netzwerkparameter. Dabei ist der Anteil der toten oder immunisierten Personen im Vergleich zur Gesamtzahl

$$r = \langle N_R \rangle = \frac{1}{N} \sum_{N_R=0}^N N_R P(N_R).$$

In Abbildung 5.8 (a) ist obige  $r(\alpha)$  für  $H = 1$  aufgetragen. Deutlich sind im Fall (a) die drei Phasen des Verhaltens von  $P(N_R)$  zu erkennen. Bei kleinen  $\alpha$  breitet sich die Epidemie unabhängig von  $N$  und  $\alpha$  aus. Es folgt ein Übergangsbereich, in dem die Ausbreitung  $N$  abhängig, wie in Abbildung 5.5 gezeigt, erfolgt. Daran schließt sich ein Bereich an, in dem es nur die lokale Ausbreitung gibt (vgl. Abbildung 5.4). Der Fall 5.8 (b) unterscheidet sich derart vom Fall 5.8 (a), dass die Ausbreitung der Epidemie dort immer unabhängig von  $N$  und  $\alpha$  erfolgt.

### 5.3.1 Modifikation des hierarchischen SIR-Modells

Im obigen Modell verläuft der Prozess der Infizierung der Empfänglichen im einzelnen instantan, d. h. immer wenn ein  $S$ -Teilchen mit einem  $I$ -Teilchen in Kontakt kommt oder

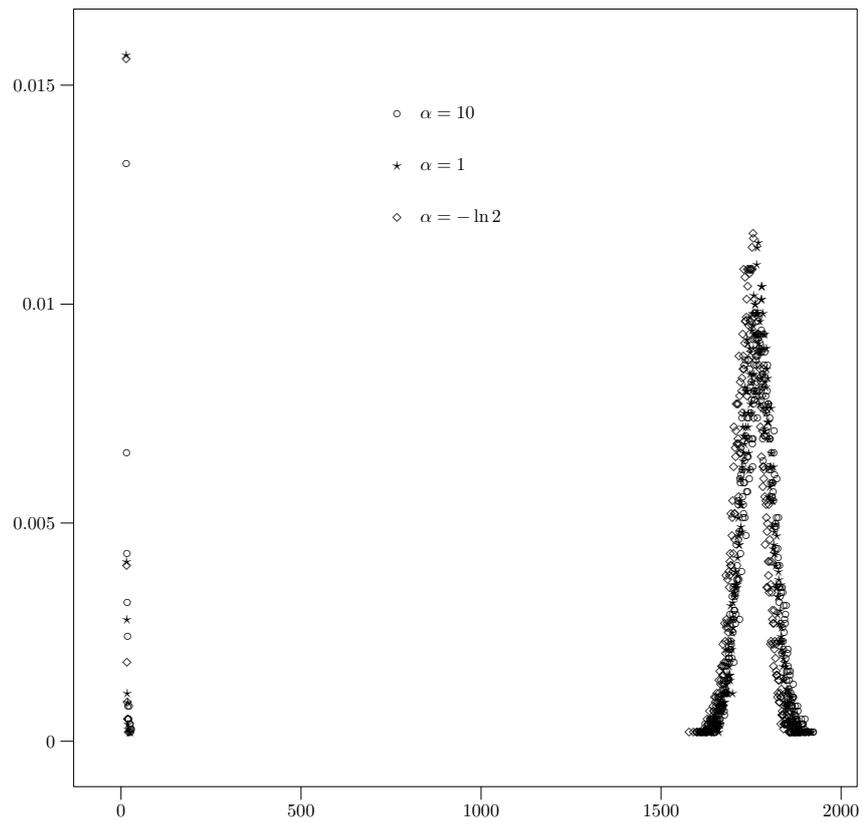


Abbildung 5.7: Simulationsergebnis mit den Werten  $\langle g \rangle = 10, b = 2, H = 2, l = 9$  und damit  $N = 2560$ ; Die Wahrscheinlichkeit  $P(N_R)$  ist für  $\alpha = 10(\circ), 1(\star)$  und  $-\ln 2(\diamond)$  aufgetragen.

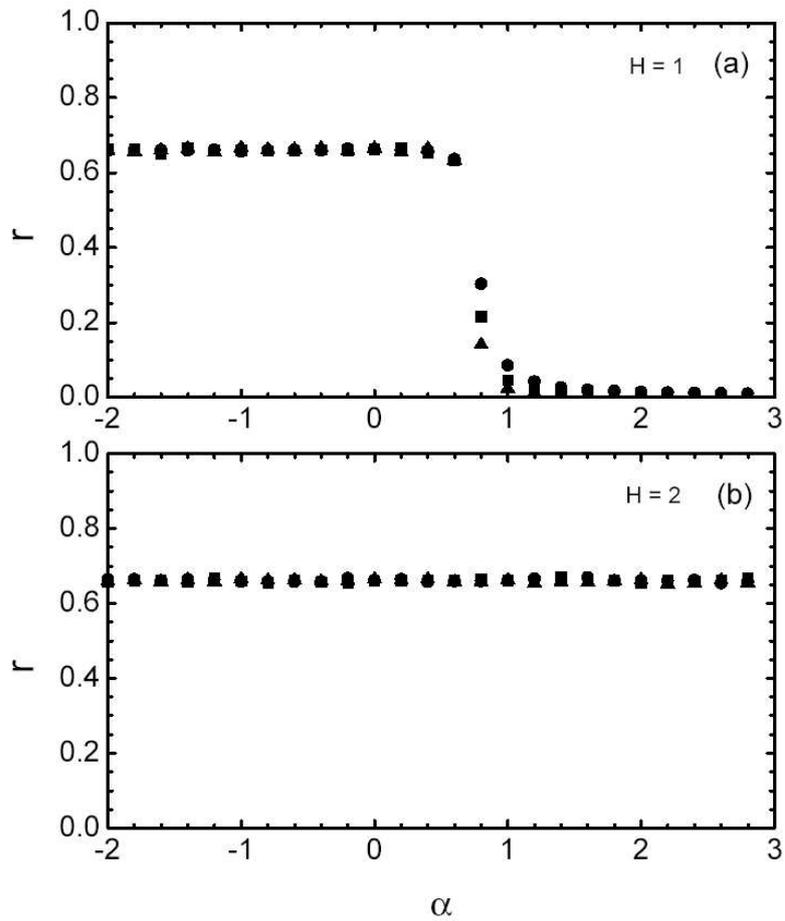


Abbildung 5.8:  $r(\alpha)$  für  $\langle g \rangle = 10, b = 2, l = 8 \rightarrow N = 1280$  ( $\bullet$ ),  $l = 9 \rightarrow N = 2560$  ( $\blacksquare$ ),  $l = 10 \rightarrow N = 5120$  ( $\blacktriangle$ ); Unterschieden werden die Fälle (a)  $H = 1$  und (b)  $H = 2$

### 5.3 Das SIR-Modell auf einem hierarchischen Netzwerk

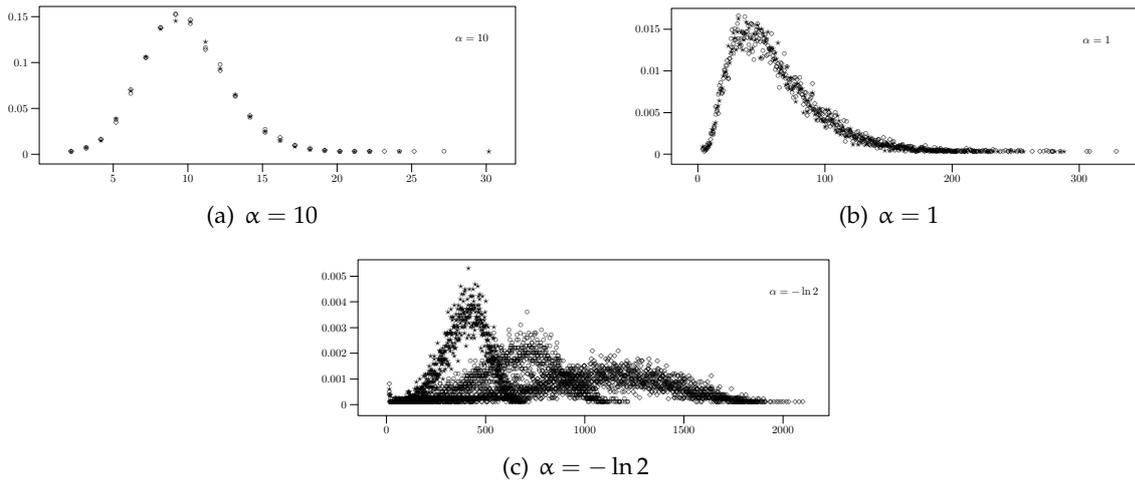


Abbildung 5.9:  $\langle \tau_i \rangle = 4$ ,  $\langle g \rangle = 10$ ,  $b = 2$ ,  $H = 1$ ,  $l = 8 \rightarrow N = 1280$  ( $\star$ ),  $l = 9 \rightarrow N = 2560$  ( $\circ$ ),  $l = 10 \rightarrow N = 5120$  ( $\diamond$ )

ein  $I$ - mit einem  $S$ -Teilchen, so wird das entsprechende  $S$ -Teilchen zu einem  $I$ -Teilchen. Diese verbleiben dann im Status  $I$ , bis es auf ein anderes  $I$ - oder  $R$ -Teilchen trifft und der Übergang  $I \rightarrow R$  ausgeführt wird. An diesem Punkt wurde das Modell durch die Einführung einer durchschnittlichen Wartezeit  $\tau_i$  verändert. Nachdem sich ein Knoten auf obigen Wege angesteckt hat und sich im Status  $I$  befindet, verbleibt es für die Dauer der Zeit  $\langle \tau_i \rangle$  in diesem Status. Nach Ablauf dieser Zeit fällt das Teilchen in den Status  $R$ .

Die folgenden Abbildungen geben einen Eindruck, wie das System auf die Modifikation reagiert. Es werden verschiedene Systemgrößen  $N$  und verschiedene Konnektivitäten  $\alpha$  bei verschiedenen Infektionszeiten  $\langle \tau \rangle$  betrachtet. In der ersten Simulationsreihe wurde  $P(N_R)$  für verschiedene Konnektivitäten  $\alpha$  bei einer sehr kurzen  $I$ -Verweilzeit aufgezeichnet. Es ist zu erkennen, dass die Vorgänge verzögert ablaufen. Bei sehr niedriger Konnektivität (vgl. Abbildung 5.9(a)) ist zunächst keine wesentliche Veränderung der Gestalt feststellbar. Sinkt die Konnektivität bis zu dem Wert, bei dem im herkömmlichen Fall ein Übergang des Verhaltens sich abzeichnet, ist hier noch keine Verhaltensänderung sichtbar. Lediglich ein „Verschmieren“ und eine Verschiebung des in 5.9(a) beobachteten Verhaltens ist in Abbildung 5.9(b) erkennbar. Selbst bei sehr kleinen  $\alpha$  kann sich das unmodifizierte Verhalten nicht durchsetzen, es bilden sich zwar Maxima in Abbildung 5.9(c) aus, aber sie sind bei  $\alpha = -\ln 2$  ebenfalls sehr breit und „verschmiert“, und sie befinden sich bei kleineren Werten von  $N_R$ , was für eine kürzere Reichweite der Vorgänge spricht.

Die zweiten Simulationsreihen für  $\langle \tau_i \rangle = 30$  (Abbildungen 5.10(a) – 5.10(c)) zeigen ein ähnliches Bild, jedoch weniger ausgeprägt. Wie in Abbildung 5.9 zeigt sich bei  $\alpha = 10$  das unveränderte Bild. Einzig das Maximum ist in Darstellung 5.10(a) bei etwas größerem  $N_R$ , als es in Darstellung 5.4 der Fall ist. Es liegt jetzt genau wie erwartet bei  $N_R = \langle g \rangle$ . Bei  $\alpha = 1$  in Darstellung 5.10(b) zeichnet sich das bekannte Übergangsverhalten ab, d. h. es spielen langreichweitige Effekte neben den lokalen eine Rolle. Insgesamt wirkt die Darstellung aber auch diffuser als die vergleichbare Abbildung 5.5. Einen ähnlichen Eindruck vermittelt Abbildung 5.9(c). Es zeigt sich die Koexistenz der langreichweitigen

## 5 Epidemien

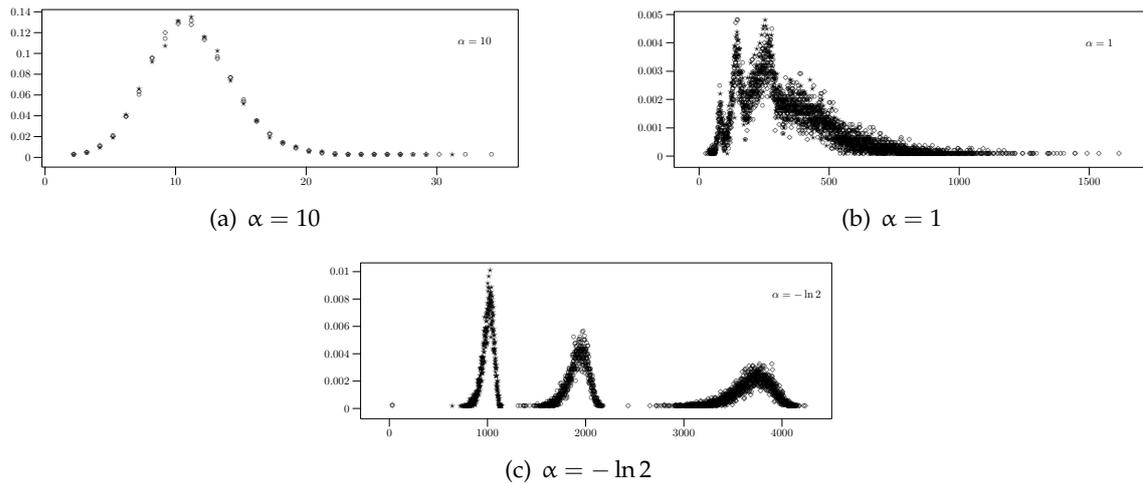


Abbildung 5.10:  $\langle \tau_i \rangle = 30$ ,  $\langle g \rangle = 10$ ,  $b = 2$ ,  $H = 1$ ,  $l = 8 \rightarrow N = 1280$  ( $\star$ ),  $l = 9 \rightarrow N = 2560$  ( $\circ$ ),  $l = 10 \rightarrow N = 5120$  ( $\diamond$ )

und lokalen Effekte, die entstehenden Maxima sind aber schiefer, diffuser und etwas verschoben, hin zu größeren  $N_R$ .

Wird  $\langle \tau_i \rangle$  weiter erhöht, so setzt sich der beobachtete Trend fort, bei  $\alpha = 10$  (Abbildung 5.11(a)) bildet sich, wie zuvor auch, nur bei  $N_R = \langle g \rangle$  ein Maximum von  $P(N_R)$ , d. h. ausschließlich lokale Beziehungen bestimmen das Verhalten. Die Darstellung 5.11(b) zeigt ein Übergangsverhalten, das sich deutlich von dem in Abbildung 5.5 unterscheidet. Die Reichweite der Beziehungen ist erhöht und die daraus resultierenden Maxima von  $P(N_R)$  dominieren das Verhalten im Gegensatz zu den lokalen Effekten, die gerade noch erkennbar sind. Bei sehr hoher Konnektivität, wie es in Darstellung 5.11(c) der Fall ist, treten nun fast nur noch die  $N$ -abhängigen Maxima für  $P(N_R)$  auf, die auf langreichweitige Beziehungen zurückzuführen sind.

Zusammenfassend ist festzustellen, dass für geringe Konnektivitäten die Wartezeit  $\langle \tau_i \rangle$  nur eine geringe Rolle spielt. Es verschiebt sich lediglich das Maximum von  $P(N_R)$  geringfügig in Richtung von  $N_R = \langle g \rangle$ . Bei steigender Konnektivität steigt mit  $\langle \tau_i \rangle$  die Reichweite der Effekte. Das ist auch plausibel, denn die Wahrscheinlichkeit der kontaktbasierten Typumwandlungen ( $S \rightarrow I$  und  $I \rightarrow R$ ) pro Teilchen steigt mit der Zeit, so dass auch langreichweitige Beziehungen stärker ins Gewicht fallen, wenn ausreichend Zeit für ihre Etablierung ist. Im unmodifizierten Modell scheint dies durch die Übergangsregeln gewährleistet zu sein.

5.3 Das SIR-Modell auf einem hierarchischen Netzwerk

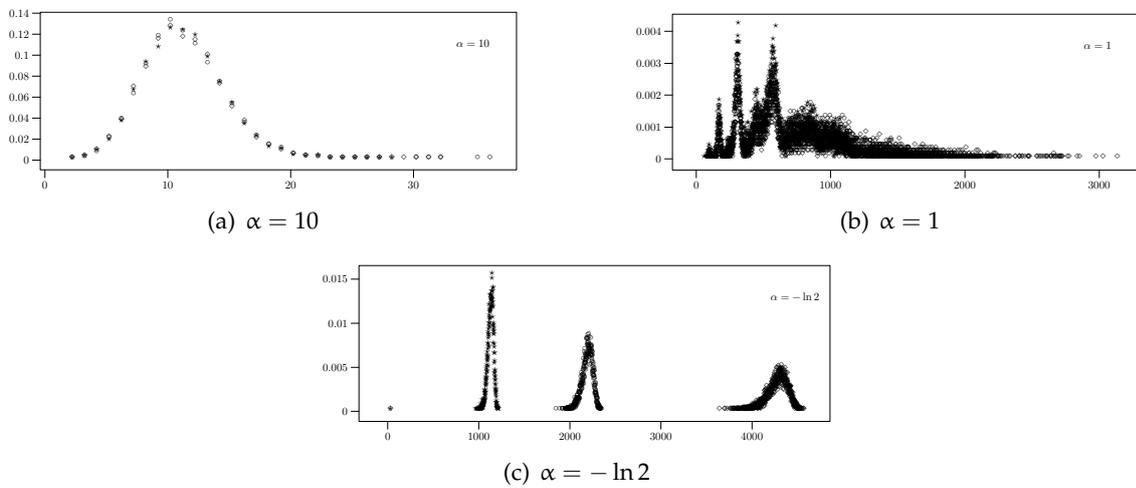


Abbildung 5.11:  $\langle \tau_i \rangle = 90$ ,  $\langle g \rangle = 10$ ,  $b = 2$ ,  $H = 1$ ,  $l = 8 \rightarrow N = 1280$  ( $\star$ ),  $l = 9 \rightarrow N = 2560$  ( $\circ$ ),  $l = 10 \rightarrow N = 5120$  ( $\diamond$ )



# 6 Dynamik von Polymerketten

## 6.1 Anmerkungen zu einem Simulationsalgorithmus

Bei der Untersuchung von sozialen Strukturen ist es nur sehr schwer, die betrachteten Phänomene experimentell zu realisieren. Dies scheitert zum einen daran, dass es sich bei den angewandten Modellen um starke Coarse-Grained-Modelle handelt, die oft nicht 1:1 in die Realität übersetzt werden können. Zum anderen ist es oft unmöglich, die benötigten Daten zu gewinnen, denn z. B. ist es schon aus rein datenschutzrechtlichen Gründen ausgeschlossen, komplette Beziehungsnetzwerke einer sozialen Gruppe zu erhalten. Im Gegensatz dazu sind Polymernetzwerke sehr gut experimentell realisierbar und verschiedenste Messungen sind möglich.

Gegenstand der Betrachtungen hier ist eine etablierte Simulationsmethode zur Erzeugung von Polymerkonformationen aus einer gegebenen Startkonfiguration, die kurz umrissen werden soll. Es ist eine gitterfreie Simulation, d. h. die Monomere, die hier die Form von harten Kugeln haben, befinden sich innerhalb der Simulationsbox an Raumplätzen, deren Koordinaten nicht in einer Gitterstruktur angeordnet sind. Die Monomere können sich unkorreliert im Raum bewegen, abgesehen von der Auflösung der Koordinaten im Rahmen der Computergenauigkeit. Eingeschränkt werden die Monomere zunächst durch ihre Anordnung innerhalb einer Polymerkette, die durch ein Potential zusammengehalten wird, das Unendlich groß wird, falls ein maximaler Abstand zweier Monomere aus der Kette überschritten wird. Dieser ist so gewählt, dass sich die Kette nicht überkreuzen kann. Des Weiteren gilt auch hier der Volumenausschluss, die Monomere dürfen sich nicht durchdringen.

Bei der Simulation einer solchen Kette besteht ein Schritt darin, ein zufällig ausgewähltes Monomer zufällig zu verschieben, falls dies möglich ist. In Abbildung 6.1 ist eine solche Situation skizziert. Eingeschränkt ist dies durch obige Bedingungen, deren Überprüfung bei vielen Monomeren sehr aufwändig ist. Das liegt vor allem daran, dass der Volumenausschluss zwischen allen Monomeren sichergestellt sein muss. Eine Möglichkeit, dies zu optimieren, ist es, in diese Prüfung nur solche Monomere einzubeziehen, die sich in der Nachbarschaft des zu bewegenden Monomers befinden. Dazu ist eine Nachbarschaftsbuchhaltung für die Monomere notwendig, d. h. es ist einfach möglich festzustellen, welche Monomere sich in der Nachbarschaft eines jedes Monomers befinden. Dazu werden oft Zellenmethoden genutzt. Die Simulationsbox wird in Zellen geteilt, so dass sich jedes Monomer einer Zelle zuordnen lässt. Die Zellen sind so dimensioniert, dass alle möglichen Monomere, die beim Volumenausschluss geprüft werden müssen, sich in den Nachbarschaftszellen befinden. Zum Verschieben eines Monomers ist es zunächst nötig, einen Verschiebungsvektor  $\vec{v}$  in eine zufällige Raumrichtung mit einer ebenfalls zufälligen Länge festzulegen. Um diesen wird dann versucht, das Monomer zu verschie-

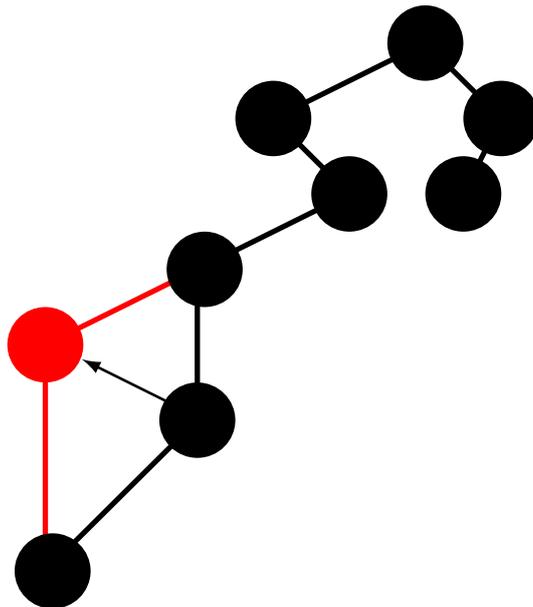


Abbildung 6.1: Skizze einer Verschiebung eines Monomers in einer Kette

ben. Besonders einfach wird die Prüfung, wenn man statt der direkten Auswahl des Verschiebungsvektors die sechs Raumrichtungen  $\pm\vec{e}_x$ ,  $\pm\vec{e}_y$  und  $\pm\vec{e}_z$  einzeln festlegt. In der Annahme, dass alle Raumrichtungen gleichwertig sind, wurden sie in der Reihenfolge  $+\vec{e}_x, -\vec{e}_x, +\vec{e}_y, -\vec{e}_y, +\vec{e}_z, -\vec{e}_z$  aufgerufen.

Die oben beschriebene Simulationemethode zeigte hier während der Arbeit unerwartetes Verhalten. Dieses soll beschrieben und Ansätze zu dessen Erklärung geliefert werden. Zunächst muss erwähnt werden, dass die Abweichungen nur bei sehr wenigen Ketten aufgefallen und untersucht wurden. Es hat sich gezeigt, dass bei den Verschiebungen der Monomere bestimmte Richtungen bevorzugt werden, d. h. es tritt eine Drift des Schwerpunktes der Kette auf. Besonders bemerkenswert ist, dass dieser Effekt nur bei zu Ketten verbundenen Monomeren auftritt, während freie Monomere das von der Brownschen Bewegung gewohnte Verhalten zeigen, die Verschiebung des Schwerpunktes ist im Mittel Null. In Abbildung 6.2 ist die Verschiebung des Schwerpunktes dargestellt. Bei der alternierenden Auswahl der Richtungen  $(+\vec{e}_x \rightarrow -\vec{e}_x \rightarrow +\vec{e}_y \rightarrow -\vec{e}_y \rightarrow +\vec{e}_z \rightarrow -\vec{e}_z \rightarrow -\vec{e}_x \rightarrow +\vec{e}_x \rightarrow -\vec{e}_y \rightarrow +\vec{e}_y \rightarrow -\vec{e}_z \rightarrow +\vec{e}_z \dots)$  zeigt sich das erwartete Verhalten. Werden die Richtungen jedoch immer in starrer Reihenfolge  $(+\vec{e}_x \rightarrow -\vec{e}_x \rightarrow +\vec{e}_y \dots)$  oder umgekehrt) aufgerufen, so zeigt sich eine eindeutige Verschiebung des Schwerpunktes vom Ursprung. Die mittlere quadratische Verschiebung des Schwerpunktes weicht ebenso vom erwarteten Verhalten ab.

Es liegt nahe, sich zunächst die Akzeptanzraten der einzelnen Richtungssprünge anzuschauen, um so ggf. erste Hinweise auf die Ursachen der Abweichung zu erhalten. In den Abbildungen 6.3-6.5 sind die Differenzen der Anzahl der ausgeführten Richtungssprünge dargestellt, wobei jeder Balken 500.000.000 versuchten Verschiebungen entspricht. Bei der

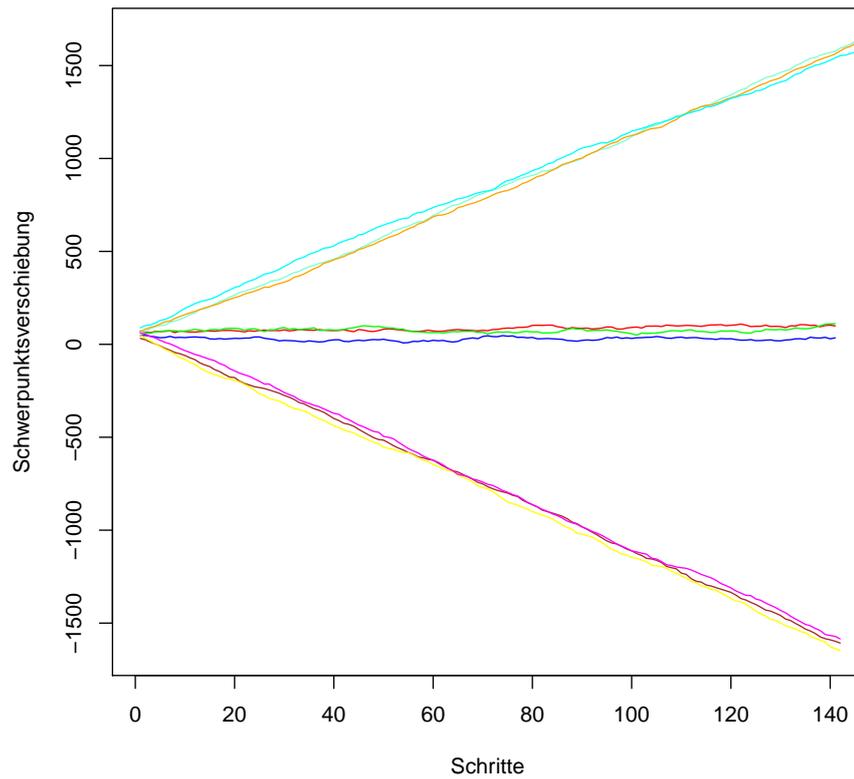


Abbildung 6.2: Die drei Komponenten des Schwerpunktes  $S_x$ ,  $S_y$  und  $S_z$  für alternierende Reihenfolge des Aufrufes  $+\vec{e}_x \rightarrow -\vec{e}_x \rightarrow +\vec{e}_y \dots -\vec{e}_x \rightarrow +\vec{e}_x \dots$  der Richtungen (rot, grün, blau), für die Reihenfolge  $+\vec{e}_x \rightarrow -\vec{e}_x \rightarrow +\vec{e}_y \dots$  (braun, gelb, magenta) und für den umgekehrten Fall (orange, aquamarin, cyan)

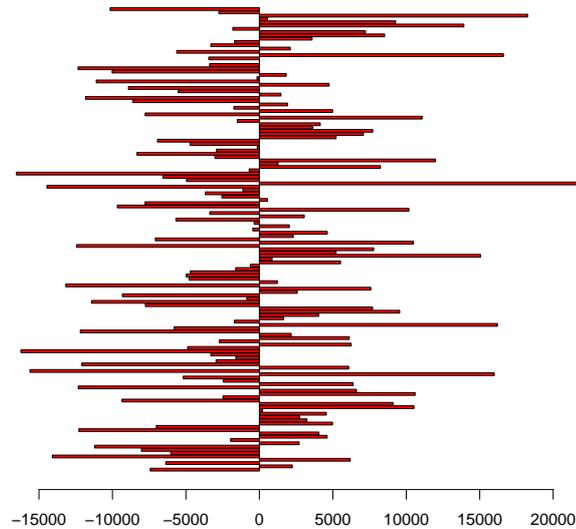


Abbildung 6.3: alternierende Reihenfolge  $+ - + - \dots - + - + \dots$

Abbildung 6.3 handelt es sich um die Zahlen, bei der die Auswahl der Verschiebungsversuche nach der alternierenden Reihenfolge geschieht. Es herrscht Gleichgewicht, d. h. es erfolgten im Mittel gleich viele Sprünge in jede Richtung. In Abbildung 6.4 ist die Differenzen der Anzahl der ausgeführten Richtungssprünge dargestellt, wobei die Auswahl der Richtungen starr nach dem Schema  $+\vec{e}_x \rightarrow -\vec{e}_x \rightarrow +\vec{e}_y \dots$  erfolgte. In Abbildung 6.5 wurde die Richtungswahl genau umgekehrt, d. h.  $-\vec{e}_x \rightarrow +\vec{e}_x \rightarrow -\vec{e}_y \dots$  durchgeführt. Es ist deutlich zu erkennen, dass hierbei eine ausgeprägte Ungleichheit in jeweils eine Richtung  $+$  oder  $-$  auftritt. Als Nächstes stellt sich die Frage, woher diese deutlichen Übergewichte herrühren. Dazu wäre eine genaue Untersuchung der Ablehnungshäufigkeiten und deren Ursachen erforderlich. Das würde den Rahmen dieser Arbeit an dieser Stelle deutlich sprengen.

6.1 Anmerkungen zu einem Simulationsalgorithmus

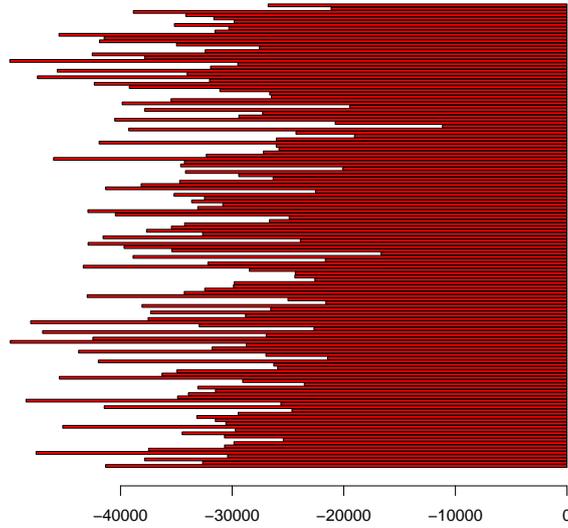


Abbildung 6.4: starre Reihenfolge  $+ - + - \dots$

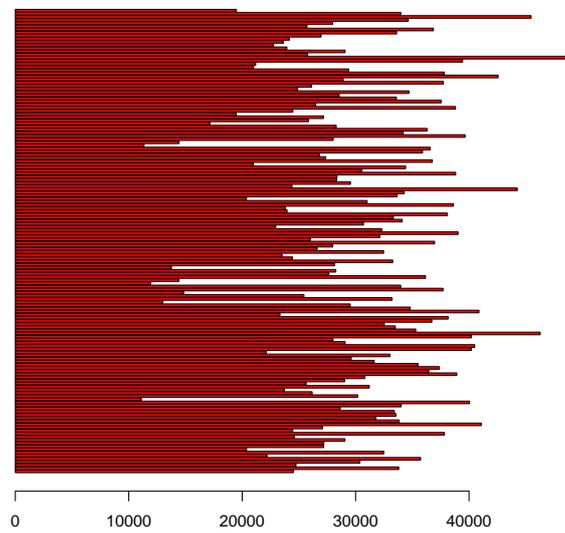


Abbildung 6.5: starre Reihenfolge  $- + - + \dots$



## 7 Adsorption und Mustererkennung mit Multiblock-Copolymeren

Die Adsorption von Makromolekülen auf chemisch strukturierten Oberflächen stellt ein weiteres Thema dar, welches mit den in der Arbeit diskutierten Methoden beschreibbar ist. Es bietet ein weites Feld an möglichen und vorstellbaren Anwendungen in verschiedenen Bereichen der Wissenschaft und der Technologie [27]. Als Beispiele seien hier die Entwicklung von hoch effizienten Schmiermitteln, die schützende Beschichtung von elektronischen Bauelementen, die Gel-Permeation-Chromatographie oder biomedizinische Anwendungen genannt. Eine alternative Methode bei der lithographischen Herstellung von Nanobauteilen ist eine besonders viel versprechende Anwendung. Sowohl synthetische als auch Biopolymere werden hier zur Erkennung von Nanostrukturen eingesetzt [40]. In [67] sind erfolgreiche Experimente beschrieben, in denen Materialien hergestellt wurden, die für medizinische Implantate oder bioaffine Sensoren in Frage kommen, indem spezielle organische Oberflächen so behandelt wurden, dass sie resistent gegenüber Proteinadsorption wurden. Eine andere praktische Anwendung ist der Vorgang der Angleichung von Polymeren an Muster auf einer Oberfläche, der eine wichtige Rolle in der Entwicklung von antiviralen Medikamenten gegen Milzbrand und Cholera spielt [65].

Der Adsorptionsprozess eines Homopolymers an einer homogenen Oberfläche ist in vielen Details inzwischen gut untersucht. Der Adsorptionsvorgang eines Heteropolymers an einer verschieden gestalteten Oberfläche ist komplexer, und es wurden bislang weniger Untersuchungen zu diesem Thema durchgeführt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Adsorption eines Multiblock-Copolymers an einer in der Form eines Schachbretts strukturierten Oberfläche untersucht (vgl. [82]). Zwischen den jeweils verschiedenen Bereichen des Polymeres und der Oberfläche bestehen unterschiedliche Wechselwirkungsbeziehungen. Besonders das Problem der Mustererkennung stand bei der Untersuchung mit einem einfachen Modell in Vordergrund.

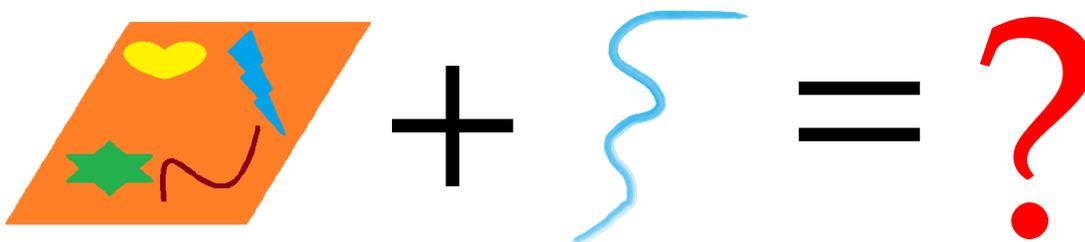


Abbildung 7.1: Schematische Darstellung zur generellen Fragestellung



Abbildung 7.2: Bezeichnung verschiedener Polymertypen

## 7.1 Multiblock-Copolymere

*Multiblock-Copolymere* stehen im Mittelpunkt bei diesen Untersuchungen. Im Gegensatz zu den Homopolymeren (7.2(a)), die aus  $N$  gleichartigen Monomeren gebildet werden, sind die Blockcopolymeren aus verschiedenartigen Monomeren, die zu Blöcken der Länge  $l$  zusammengefasst sind, zusammengesetzt. Im vorliegenden Fall sind dies zwei Arten von Monomeren A und B. Gibt es nur zwei Blöcke, wie in Abbildung 7.2(b), so werden diese Polymere als *Diblock-Copolymere* bezeichnet, bei drei Blöcken als *Triblock-Copolymere* (vgl. Abbildung 7.2(c)). Bei vielen Blöcken (Abbildung 7.2(d)) spricht man von *Multiblock-Copolymeren*. Im hier betrachteten Modell bestehen die Multiblock-Copolymere aus zwei Monomerarten A und B. Jeweils  $l$  Monomere selben Typs formen einen A-Block bzw. B-Block, die periodisch angeordnet sind. Insgesamt besteht das Polymer aus  $N$  Monomeren, die durch kovalente Bindungen eine Kette bilden.

## 7.2 Gittersimulation mit Multiblock-Copolymeren

Um die Charakteristik der Adsorption eines selbstvermeidenden zufälligen Copolymers mit einer schachbrettartig strukturierten flachen Oberfläche zu untersuchen, wurden umfangreiche Monte-Carlo-Simulationen durchgeführt. Das Modell besteht aus einem simplen quadratischen Gitter mit gleichmäßigen Gitterabstand und einer undurchdringbaren planaren Oberfläche, die durch die Ebene  $z = 0$  vertreten ist. Die Ausdehnung des Gitters ist in  $xy$ -Richtung  $L_x = L_y = 300$ , und in  $z$ -Richtung ist sie  $L_z = N$ . Am  $x$ - und  $y$ -Rand gelten periodische Randbedingungen, in  $z$ -Richtung wirkt der Rand bei  $z = N$  reflektierend. Die Oberfläche in der  $z = 0$ -Ebene ist wie ein Schachbrett strukturiert, wobei die quadratischen Felder die Kantenlänge  $w$  haben. Die Multiblock-Copolymerkette ist als selbstvermeidender Zufallsweg auf dem Gitter modelliert, d. h. die einzelnen Monomere befinden sich auf den Gitterpunkten und die Bindungen bilden die Kanten zwischen diesen. Wie oben schon beschrieben, gibt es zwei Typen von Monomeren A und B, die Blöcke zu je  $l$  Monomeren gleichen Typs bilden. Diese Blöcke sind entlang der Kette abwechselnd angeordnet (A-B-A-B-...). Die undurchdringbare Oberfläche besteht aus zwei Typen von Feldern, Dies sind zum einen die A-Felder und zum andern die B-Felder, die in Form eines Schachbretts angeordnet sind, welche jeweils verschiedene Wechsel-

wirkungen mit den A und B-Monomeren des Polymers haben. Zwischen A-Monomeren und A-Feldern auf der Fläche  $z = 0$  besteht eine anziehende Wechselwirkung  $\epsilon < 0$ , zu B-Feldern hingegen besteht eine abstoßende Wechselwirkung  $\epsilon > 0$ . Ebenso ziehen sich B-Felder und B-Monomere an, während A-Monomere abgestoßen werden. Denkbar sind natürlich auch andere Konstellationen, so ist es leicht realisierbar, dass A-Monomere inert sind zu B-Feldern und B-Monomere inert zu A-Feldern sind.

Begonnen wird zunächst mit einem Monomer, das an der Oberfläche haftet. Davon ausgehend generiert man das Polymer mittels des in 3.2.1 beschriebenen zufälligen Wachstumsprozesses. Anschließend werden die unterschiedlichen Konfigurationen mittels des ebenfalls in 3.2.1 vorgestellten *Verdier-Stockmayer-Algorithmus* erzeugt. Die Adsorptionsenergie einer solchen Konfiguration ist durch die Beziehung

$$E_{\text{ads}} = n_A \epsilon_{AA} + n_B \epsilon_{BB} \quad (7.1)$$

gegeben. Die Zahl der A- bzw. B-Monomere, für deren  $z$ -Koordinate  $z = 0$  gilt, wird hierbei mit  $n_A$  und  $n_B$  bezeichnet.

Eine vorgeschlagene Konfiguration wird gemäß dem *Metropolis-Verfahren* bewertet, d. h. eine neue vorgeschlagene Konfiguration wird akzeptiert, wenn

1. die Selbstvermeidung erfüllt bleibt,
2. die Kette nicht zerstört wird und
3. entweder  $\Delta E \leq 0$  oder  $\exp(-\Delta E/k_B T) > \eta$  gilt, wobei  $\Delta E$  die Differenz der nach Gleichung (7.1) berechneten Adsorptionsenergien der ursprünglichen und der vorgeschlagenen Konfiguration ist.

Dabei ist  $\eta$  jeweils eine gleichverteilte Zufallszahl zwischen Null und Eins. Es ist noch zu erwähnen, dass im Folgenden die Temperatur in Einheiten von  $\epsilon k_B$  angegeben wird, d. h. es ist  $T \equiv k_B T / \epsilon$  und  $\epsilon$  bezeichnet jegliche paarweise Wechselwirkungsenergie. Mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit kann sich die Polymerkette bei sehr hohen Temperaturen oder niedrigen Adsorptionsenergien von der Oberfläche entfernen und in den Raum diffundieren. Um dies zu verhindern, ist durch die Erzeugung der Startkonfiguration sichergestellt, dass mindestens ein Monomer zu Beginn an der Oberfläche haftet. Eine signifikante Änderung der statistischen Eigenschaften der adsorbierten Kette bei niedrigen Temperaturen ist aber nicht zu erwarten. Ein *Monte-Carlo-Schritt* (MCS) ist definiert als die Zahl der benötigten Versuche, die Kette zu bewegen. Bei  $10^5$  MCS wird wie üblich in solchen Fällen angenommen, dass sich das System im Gleichgewicht befindet. Die angegebenen Ergebnisse sind über  $10^6$  Realisierungen gemittelt.

Ziel dieses minimalen Modells ist die Bestimmung von thermodynamischen Eigenschaften des Systems sowie von Größen, die die räumliche Ausbreitung der Kette kennzeichnen. Die erste wichtige Größe des Systems ist die Adsorptionsenergie pro Monomer als Funktion der Temperatur. Unter Zuhilfenahme von (7.1) ergibt sie sich aus

$$|E| / N = |n_A \epsilon_{AA} + n_B \epsilon_{BB}| / N.$$

Das Standardverfahren zur Bestimmung der Adsorptionsübergangstemperatur ist die Messung der Energiefluktuationen. Dies kann beispielsweise durch die Bestimmung

$\epsilon$	A	B
A	-1	0
B	0	-0.5

Tabelle 7.1: Die verschiedenen Wechselwirkungsenergien  $\epsilon$  zwischen den Monomertypen (A und B) und den Oberflächenfeldern (A und B)

der Wärmekapazität  $C_V$  erfolgen, denn deren Fluktuationen wiederum zeigen einen Überschuss an diesen Stellen. Die Adsorptionswärme  $\langle E \rangle$  wird als nichtgewichteter Mittelwert über alle Ketten an jeder Stelle ermittelt. Die dimensionslose Wärmekapazität pro Monomer ist dann

$$C_V/Nk_B = (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)\beta^2/N,$$

wobei  $\beta$  die inverse Temperatur ist. Außerdem werden noch Größen gemessen, die Aussagen über die Konformation der Kette erlauben, wie der Gyrationradius und dessen senkrechte sowie die planaren Komponenten.

Ziel ist es, grundsätzliche Aspekte des Adsorptionsverhaltens eines Multiblock-Copolymers an einer schachbrettartig gemusterten Oberfläche mit zwei Typen von Feldern A und B zu untersuchen. Die Multiblock-Copolymerkette der Länge  $N$  ist aus  $N/l$  Blöcken bestehend aus jeweils  $l$  Monomeren verschiedenen Typs, nämlich A und B, zusammengesetzt. Die A- und B-Monomere wechselwirken mit den A- und B-Feldern der Oberfläche mit den Absorptionsenergien  $\epsilon_{AA}$  bzw.  $\epsilon_{BB}$ . Die Wechselwirkungsenergien ist zwischen A-Monomeren und B-Feldern  $\epsilon_{AB}$  bzw. im anderen Fall zwischen B-Monomeren und A-Feldern  $\epsilon_{BA}$ . Oft wird angenommen, dass  $\epsilon_{AB} = \epsilon_{BA}$  ist, damit die wichtigsten Parameter  $\epsilon_{AA}$ ,  $\epsilon_{BB}$  und  $\epsilon_{AB}$  sind. Ist die Adsorptionsenergie  $\epsilon$  negativ, so handelt es sich um eine anziehende Wechselwirkung, ist die Energie hingegen positiv, so ist sie abstoßend. Bei den hier vorgestellten Simulationen wurden hauptsächlich die in Tabelle 7.1 eingetragenen Wechselwirkungsenergien  $\epsilon$  verwendet. Die Annahmen bestehen darin, dass die Wechselwirkung zwischen B-Monomeren und B-Feldern der Oberfläche geringer ist als die zwischen A-Monomeren und A-Feldern. Weiterhin sind die Wechselwirkungen zwischen A-Monomeren und B-Feldern bzw. B-Monomeren und A-Feldern meist abstoßend, nur in einigen Spezialfällen sind die Monomere gegenüber diesen Feldern inert. Beobachtet wird die Entwicklung hin zum adsorbierten Zustand der gesamten Kette als Funktion abhängig von der reduzierten Temperatur  $T$ , der Kettenlänge  $N$ , des Verhältnisses der Blocklänge  $l$  zu der Kantenlänge der quadratischen Felder  $w$ .

Die Abbildung 7.3 stellt den Betrag der Adsorptionsenergie pro Monomer als Funktion der inversen Temperatur  $1/T$  dar. Die Geometrie der Oberfläche ist für alle in Abbildung 7.3 aufgetragenen Kurven, die das Verhalten für verschiedene Blocklängen  $l$  zeigen, gleich ( $w = 20$ ). Zusätzlich ist noch die Kurve für ein Homopolymer, das an einer homogenen Oberfläche haftet, aufgetragen. Dieses Polymer ist als Kette, die ausschließlich aus A-Monomeren besteht, realisiert und es besteht eine anziehende Wechselwirkung ( $\epsilon_{AA} = -1$ ) zur Oberfläche, die in diesem Fall unstrukturiert ist und ein reines A-Verhalten zeigt. Die Kurve zeigt die erwartete, für Adsorptionsvorgänge typische Schwannenhalsform. Der Plateauwert der Kurven bei niedrigen Temperaturen für die Multiblock-Ketten ist von der Blocklänge abhängig und von der Zahl der anhaftenden A- und B-Monomere.

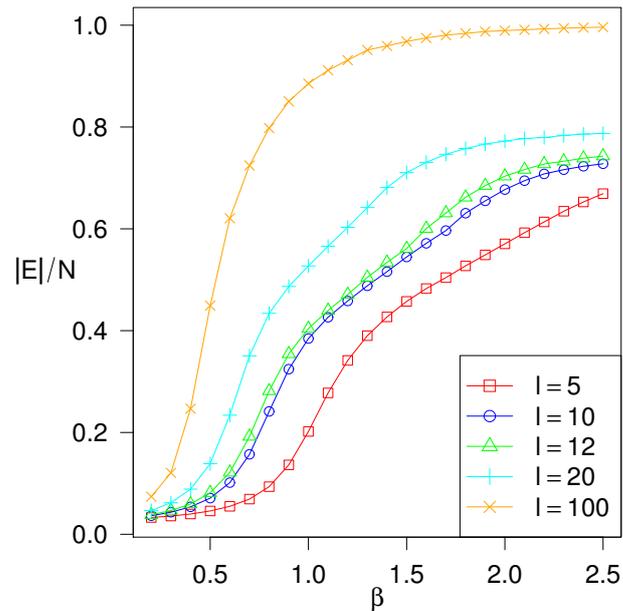


Abbildung 7.3: Gemittelte Adsorptionsenergie pro Monomer für Multiblock-Ketten bei verschiedenen Blocklängen aufgetragen gegen die inverse Temperatur. Die Feldgröße ist durch  $w = 20$  festgelegt, und die Wechselwirkungsenergien sind auf  $\epsilon_{AA} = -1$ ,  $\epsilon_{BB} = -0,5$  und  $\epsilon_{AB} = \epsilon_{BA} = +1$  gesetzt. Zum Vergleich ist die Kurve für ein an einer homogenen Oberfläche adsorbierten Homopolymer ( $l = 100$ ) eingetragen.

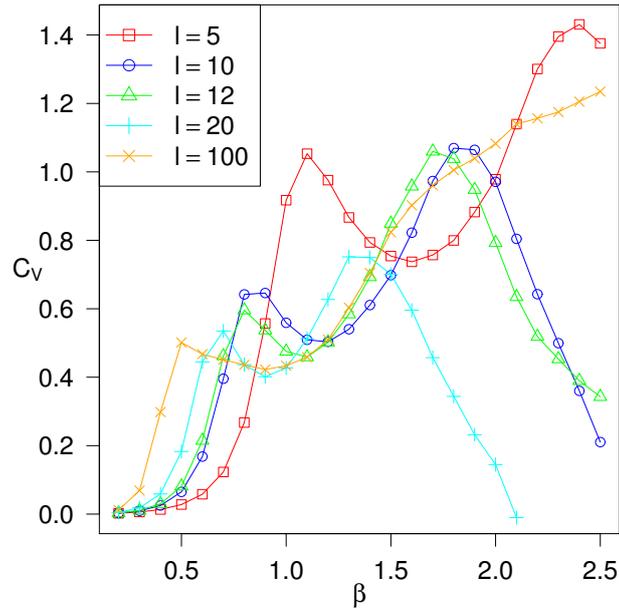


Abbildung 7.4: Die spezifische Wärmekapazität  $C_V$  als Funktion der inversen Temperatur für verschiedene Blocklängen bei der Oberfläche mit  $w = 20$ . Die Wechselwirkungsenergien sind auf  $\epsilon_{AA} = -1$ ,  $\epsilon_{BB} = -0,5$  und  $\epsilon_{AB} = \epsilon_{BA} = +1$  gesetzt. Zum Vergleich ist die Kurve für ein an einer homogenen Oberfläche adsorbierten Homopolymer ( $l = 100$ ) eingetragen.

Als Grenzwert ergibt sich für eine vollständig anhaftende Kette, bei der alle Monomere A und B an der Oberfläche gleich adsorbiert werden

$$|E|/N = 1/2 |\epsilon_{AA} + \epsilon_{BB}|. \quad (7.2)$$

Auf den Fall des Homopolymers trifft obige Aussage zu, und es wird dieser Wert der Adsorptionsenergie gemäß Gleichung (7.2) auch erreicht. Es ist zu beobachten, dass kurze Blöcke, wie z. B.  $l = 5$  erst bei sehr niedrigen Temperaturen fast vollständig an der Oberfläche anhaften. Die Ursache ist im Verhältnis der Schachbrettdimension zur Blocklänge zu suchen. Sind die Felder im Gegensatz zur Zahl der Monomere, die anhaften können in so einem Feld, sehr groß, so ist es schwer, die gesamte Kette in einem Feld unterzubringen. Das Auftreten von Schleifen ist die Folge, was nur bei sehr niedrigen Temperaturen unterdrückt werden kann. Größere Blöcke mit  $l = 10$  oder  $l = 12$  erreichen Grenzwerte der Adsorptionsenergie pro Monomer von  $\approx 0,75$  und für  $l = 20$  wird der erwartete Wert  $0,8$  angenommen. Eine weitere interessante Beobachtung an den Energiekurven in Abbildung 7.3 ist die Abweichung von der Idealform bei den Multiblock-Ketten. Änderungen am Anstieg an zwei verschiedenen Temperaturen sind erkennbar. Bei der Kurve für  $l = 20$  ist ein Wechsel der Form bei  $\beta = 0,7$  und  $\beta = 1,2$  deutlich sichtbar. Dies zeigt den zweiphasigen Charakter des Adsorptionsprozesses; zuerst erfolgt die Adsorption der stärker angezogenen A-Monomere, gefolgt von den B-Monomeren bei niedrigeren Temperaturen.

In Abbildung 7.4 sind die zu den Kurven in Abbildung 7.3 korrespondierenden Wärmekapazitätskurven ebenfalls für verschiedene Blocklängen  $l$  dargestellt. Die These von

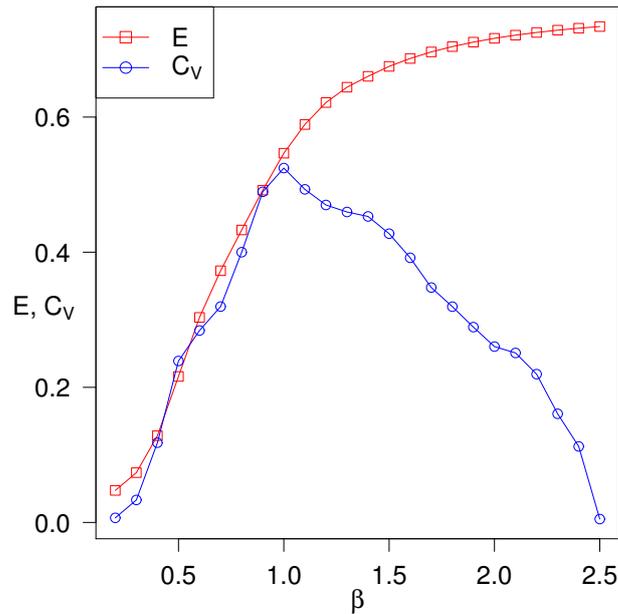


Abbildung 7.5: Die Adsorptionsenergie  $E$  und die spezifische Wärmekapazität  $C_V$  für ein Diblock-Copolymer ( $l = 50$ ) an einer Schachbrettoberfläche der Größe  $w = 20$ . Die paarweise Wechselwirkungsenergien ist wie in Abbildung 7.3

den zwei Phasen des Adsorptionsprozesses, wie sie schon in [84] vertreten wurde, wird eindeutig durch die zwei Maxima der Kurven auch für den vorliegenden Fall bestätigt. Bei den Adsorptionsvorgängen ist es von entscheidender Bedeutung, dass das Polymer die verschiedenen Felder erkennt, um mit den jeweils passenden Monomeren die Oberfläche zu kontaktieren. Ist die Blocklänge  $l$  des Multiblock-Copolymers klein gegenüber der Kantenlänge der Felder  $w$ , so ist es äußerst schwer und oftmals unmöglich, eine solche Konfiguration herbeizuführen, die ein entsprechendes Feld ausfüllt. Eine Möglichkeit stellt eine Konfiguration dar, bei der die Kette um eine Grenze zwischen zwei unterschiedlichen Feldern entlang immer so adsorbiert ist, dass die Monomertypen überwiegend zu dem Typ des Oberflächenfeldes passt. Die Kurve der spezifischen Wärmekapazität in Abbildung 7.4 ist deshalb stark in die Richtung niedrigerer Temperaturen verschoben, wenn man sie mit den Kurven größerer Blocklängen vergleicht. Steigen die Blocklängen, dann vollziehen sich die Übergänge früher. So ist es beispielsweise für die Kette mit Blocklänge  $l = 20$  leichter, eine günstige Konfiguration einzunehmen, die Felder sind ja von der Abmessung  $20 \times 20$ . Verglichen mit den Vorgängen bei der Adsorption eines Diblock-Copolymers an einer gestreiften Oberfläche, wie sie in [84] untersucht wurde, sind die Übergänge für den Fall von Multiblock-Copolymerketten stärker und deutlicher ausgeprägt. Die Abbildung 7.5 zeigt die Energie zusammen mit der spezifischen Wärmekapazität als Funktion der Temperatur für ein Diblock-Copolymer ( $l = 50$  bei  $N = 100$ ) mit einer Schachbrettoberfläche der Dimension  $w = 20$ .

Ein weiterer interessanter Punkt, der in Abbildung 7.6 dargestellt ist, ist die separate, nach A- und B-Blöcken getrennte Betrachtung der Wärmekapazität. Die Simulationen wurden mit einer Schachbrettoberfläche, deren Felder die Kantenlänge  $w = 20$  hatten,

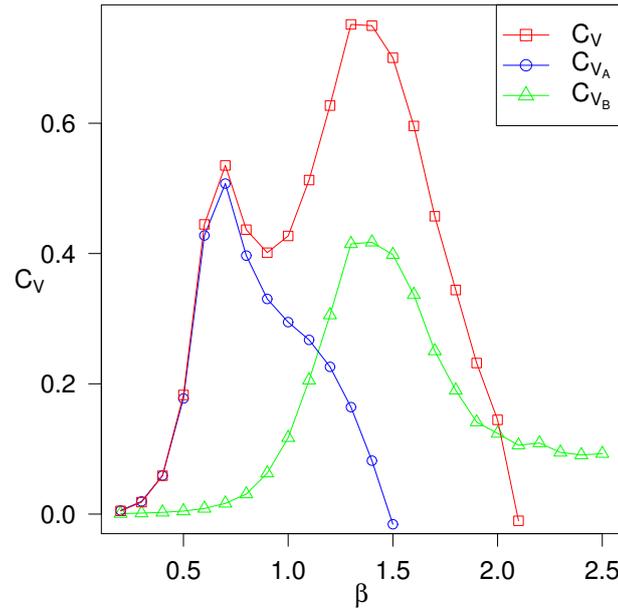


Abbildung 7.6: Kurven der spezifischen Wärmekapazität eines Multiblock-Copolymers der Länge  $N = 100$  als Funktion von  $1/T$ . Die Parameter sind  $l = 20$ ,  $w = 20$ ,  $\epsilon_{AA} = -1$ ,  $\epsilon_{BB} = -0,5$ ,  $\epsilon_{AB} = +1$  und  $\epsilon_{BA} = +1$ .

und die Blocklänge betrug  $l = 20$ . Die jeweils zum A- und B-Blocktyp gehörenden Kurven zeigen ihr einziges Maximum genau an den Stellen, an denen die Kurve der gesamten Wärmekapazität die korrespondierenden Maxima hat. Es ist plausibel, dass A-Monomere mit ihrer höheren Wechselwirkungsenergie  $\epsilon_{AA} = -1$  als erstes an der Oberfläche adsorbiert werden. Die Mehrzahl der Monomere verbleibt jedoch aufgrund der höheren Konformationsentropie im freien Raum. Wird die Temperatur weiter abgesenkt, so gewinnt in der Konkurrenz der Konformationsentropie auf der einen Seite und dem Energiegewinn durch die Adsorption der Monomere an die entsprechenden Segmente der Oberfläche auf der anderen Seite, der Energieanteil wachsende Bedeutung und dominiert das System. In diesem Fall handelt es sich um Monomere vom Typ B, deren Wechselwirkungsenergie geringer ist als die der A-Monomere. Ein Hinweis ist dieser zweite Übergang, der als einfache Umordnung von bereits adsorbierten Monomeren verstanden wird. In [13] wurde der Fall eines anderen Systems zur Mustererkennung untersucht, nämlich der eines zufälligen Heteropolymers auf einer zufälligen Oberfläche. Es wurde ein zusätzlicher Umordnungsprozess bereits adsorbierter Monomere gefunden, der der Optimierung der Energiebilanz der Kette dienen soll.

Weitere Hinweise zur Untermauerung dieser These liefern die Abbildungen 7.7 und 7.8, auf denen Fluktuationen des Anteils der adsorbierten Monomere und der Adsorptionsenergie dargestellt sind.

Die Fluktuationen des Anteils der adsorbierten Monomere wird mit

$$\delta N_{\text{ads}}^2 = \langle N_{\text{ads}}^2 \rangle - \langle N_{\text{ads}} \rangle^2$$

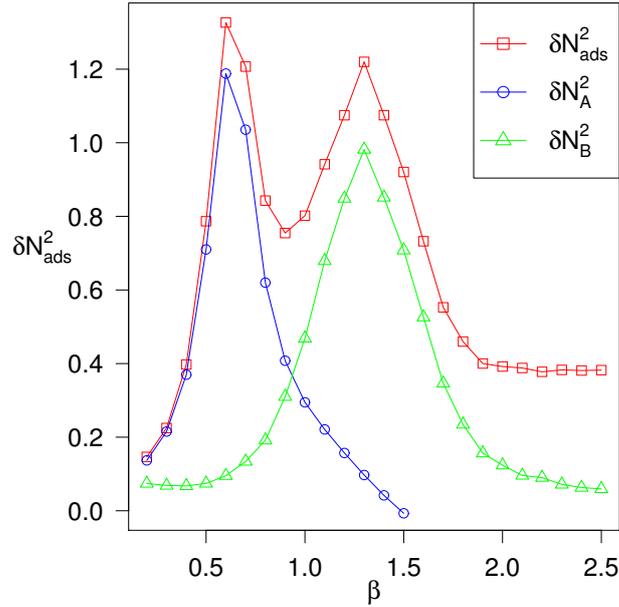


Abbildung 7.7: Die Fluktuationen des adsorbierten Anteils der Monomere  $\langle \delta N_{\text{ads}}^2 \rangle$  für ein Multiblock-Copolymer der Blocklänge  $l = 20$  jeweils individuell für die Monomertypen A und B auf einer strukturierten Oberfläche als Funktion der inversen Temperatur.

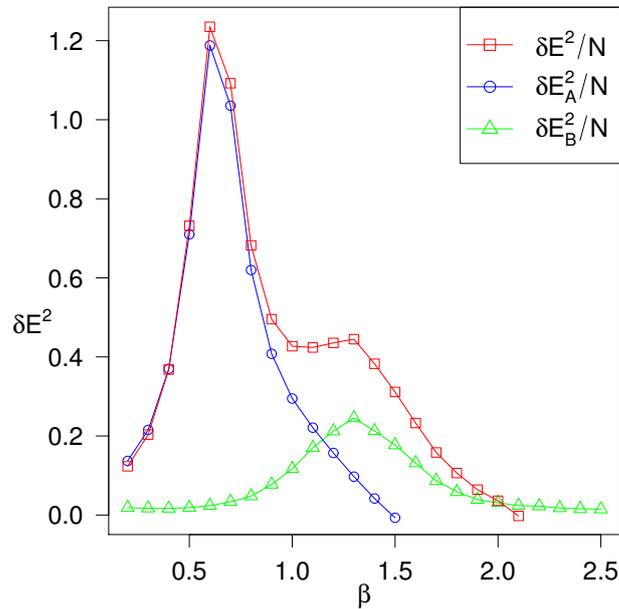


Abbildung 7.8: Die Fluktuationen der Adsorptionsenergie  $\langle \delta E^2 \rangle$  für ein Multiblock-Copolymer der Blocklänge  $l = 20$  individuell für die A und B Blöcke als Funktion der inversen Temperatur.

und die der Adsorptionsenergie mit

$$\delta E_{\text{ads}}^2 = \langle E_{\text{ads}}^2 \rangle - \langle E_{\text{ads}} \rangle^2$$

ermittelt. Die individuellen Fluktuationen der verschiedenen Blöcke sind ebenfalls in den Graphiken 7.7 und 7.8 eingezeichnet. Wie die Betrachtung der spezifischen Wärmekapazität zeigt, erlaubt die Untersuchung der Fluktuationen des adsorbierten Anteils der Monomere einen Einblick in den Adsorptionsvorgang der Polymerkette. Die Abbildung 7.7 zeigt analog wie in Abbildung 7.6 die Kurve der gesamten Fluktuationen mit Maxima an den Stellen, an denen die einzelnen Kurven der A- bzw. B-Blöcke ihr Maximum haben. Dies zeigt ebenfalls, dass der zweite Übergang eine Optimierung der Adsorptionsenergie durch die Adsorption zusätzlicher B-Monomere an der Oberfläche bei niedrigeren Temperaturen nach sich zieht. Damit verbunden ist eine Umordnung bereits gebundener Monomere hin zu einer Konfiguration, bei der die Monomere an denen von ihnen bevorzugten Feldtypen haften. Gleichzeitig muss man feststellen, dass in Abbildung 7.8 in den Kurven der Energiefluktuationen der zweiphasige Adsorptions- und Anpassungsprozess weniger deutlich zu erkennen ist.

Festzuhalten bleiben Analogien zwischen den hier durchgeführten Untersuchungen, bei denen geordnete Polymere auf heterogenen, aber ebenfalls geordneten Oberflächen Gegenstand sind und denen in [13], die sich mit zufälligen heterogenen Polymeren auf ebensolchen Oberflächen beschäftigen. Insbesondere fallen die Analogien bei den doppelten Maxima in den Kurven der spezifischen Wärmekapazität auf. Ebenso fällt auf, dass das Verhältnis der beiden Temperaturen, an denen sich die Maxima befinden, in allen Studien in der Größenordnung von Zwei ist. Die unterschiedlichen Wechselwirkungen zwischen den jeweils verschiedenen Copolymer-Blöcken und den unterschiedlichen Oberflächensegmenten entsprechen denen, die auch in [13] angewandt wurden. Sie führen zu einer effektiven Anziehung zwischen Monomeren des selben Typs und zu Abstoßung zwischen Monomeren verschiedenen Typs. Auf diesem Mechanismus basiert die Mustererkennung mittels Multiblock-Copolymeren.

Um weitere Erkenntnisse über die Adsorptionsvorgänge zu erlangen, wurden in Abbildung 7.9 die mittlere Adsorptionsenergie zusammen mit der spezifischen Wärmekapazität und der senkrechten Komponente des Gyrationradius dargestellt. Alle drei Kurven bestätigen das Vorhandensein eines zweiphasigen Adsorptionsprozesses. Die senkrechte Komponente des Gyrationradius zeigt einen deutlichen Abfall seiner Werte im Zusammenhang mit der ersten Phase, welcher dann mit niedrigeren Temperaturen weniger deutlich abnimmt. Verursacht durch die zweite Phase ergibt sich nochmals eine Beschleunigung der Geschwindigkeit der Abnahme. Die Konfigurationsentropie zeigt also eine deutlich größere Abnahme bei zwei verschiedenen Temperaturen. Diese Beobachtung lässt sich in der folgenden Art und Weise interpretieren: Zunächst ist die Polymerkette nur teilweise an der Oberfläche adsorbiert, die erste Phase der Adsorption hat zur Adsorption der A-Monomere geführt. An diesem Punkt spürt das Polymer nicht die Ungleichheit der Oberfläche. Bei Absenkung der Temperatur werden immer mehr Monomere adsorbiert, überwiegend die vom Typ B. Das Polymer ist dadurch gezwungen, seine Konformation so einzurichten und sich gegebenenfalls neu anzuordnen, dass die A- und B-Monomere an ihren bevorzugten Oberflächensegmenten adsorbiert werden, d. h. A-Monomere an

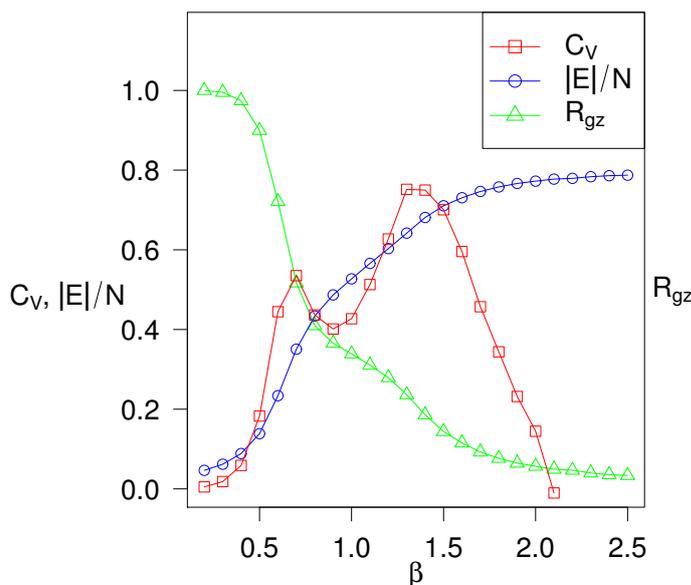


Abbildung 7.9: Die mittlere Adsorptionsenergie pro Monomer  $|E|/N$ , die spezifische Wärmekapazität  $C_V$  und die senkrechte Komponente des Gyrationradius  $R_{\perp}$  für eine Multiblockkette der Länge  $N = 100$  als Funktion der inversen Temperatur. Die Parameter sind  $l = w = 20$ .

A-Feldern und B-Monomere an B-Feldern. Daraus resultiert das zuvor beobachtete zwei-stufige Adsorptionsverhalten, wie es auch gut in Abbildung 7.10 zu sehen ist. Man kann den Status der Konfiguration bei drei unterschiedlichen Temperaturen erkennen. Bei so hohen Temperaturen wie im Bild (a) befinden sich die meisten Monomere im freien Raum, denn sie haben eine hohe Konfigurationsentropie. Je tiefer die Temperaturen sind, desto mehr Monomere haften an den entsprechenden Feldern der Oberfläche. Es ist auch zu sehen, dass das Muster der Oberfläche recht gut erkannt wird. Die einzelnen Monomere der Kette befinden sich zumindest in der Nähe zu den korrespondierenden adsorbierenden Segmenten der Oberfläche. Von besonderem Interesse sind die A-Block – B-Block-Verbindungen, die entscheidender Bedeutung bei der Mustererkennung sind. Sie befinden sich nämlich meist an den A–B-Feldgrenzen.

Außerdem wurden noch der Einfluss der Änderung der Feldgrößen  $w$  auf den Adsorptionsprozess untersucht. Abbildung 7.11 gibt einen Überblick über die mittleren Adsorptionsenergien bei verschiedenen Größen der Quadrate des Schachbrettmusters der Oberfläche. Die Blocklänge des Multiblock-Copolymers beträgt  $l = 10$ . Es fällt zunächst direkt auf, dass die Kurve für die Blocklänge  $w = 20$  sich beträchtlich von den restlichen Kurven unterscheidet. Sie zeigt deutlich markante Abschnitte, die auf Adsorptionsvorgänge hinweisen. Um diesen Umstand genauer zu untersuchen, ist es interessant, zusätzlich die spezifische Wärmekapazität für diese Fälle zu betrachten, wie es mit Abbildung 7.12 möglich ist. Die Kurve für den Fall  $w = 20$  zeigt die ausgeprägtesten Maxima genau für diese Blocklänge  $l = 10$ , besonders das zweite Maximum ist besonders prominent und sticht heraus. Es spricht sehr viel dafür, dass bei dieser Parameterkombination das Polymer sich am besten an die strukturierte Oberfläche anpasst und somit „das Muster

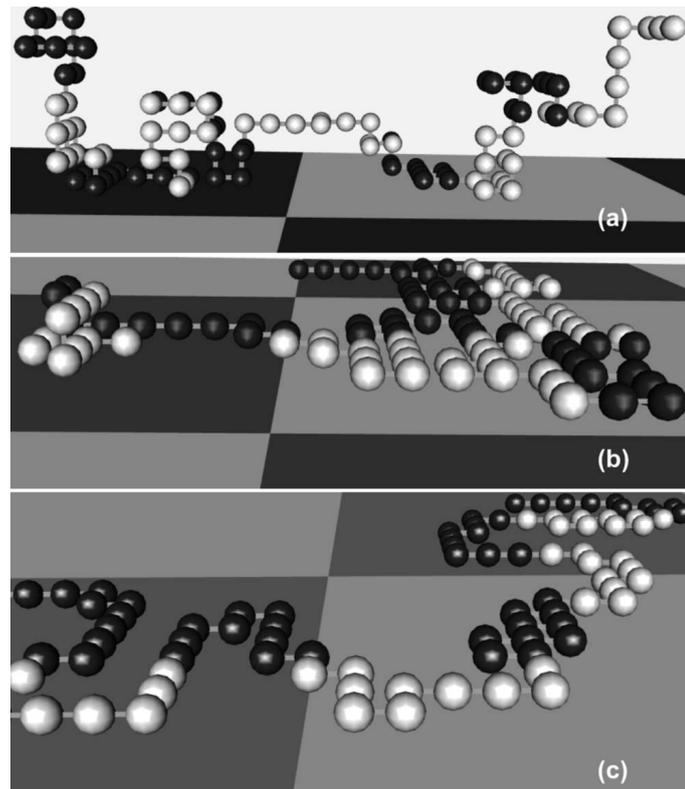


Abbildung 7.10: „Schnappschuss“ eines Multiblock-Copolymers auf einer Schachbrettoberfläche bei (a) hohen Temperaturen, (b) mittleren Temperaturen und (c) niedrigen Temperaturen

## 7.2 Gittersimulation mit Multiblock-Copolymeren

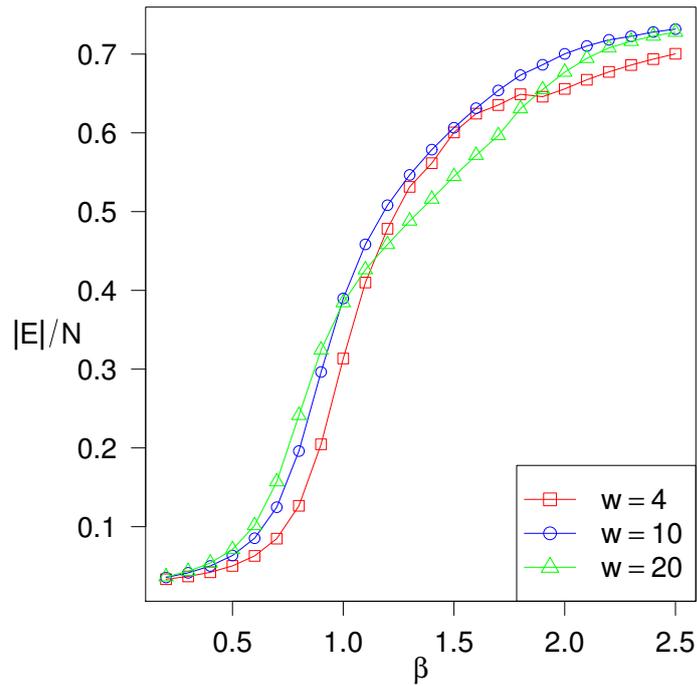


Abbildung 7.11: Darstellung der mittleren Adsorptionsenergie für  $l = 10$  als Funktion der inversen Temperatur bei verschiedenen großen Schachbrettfeldern

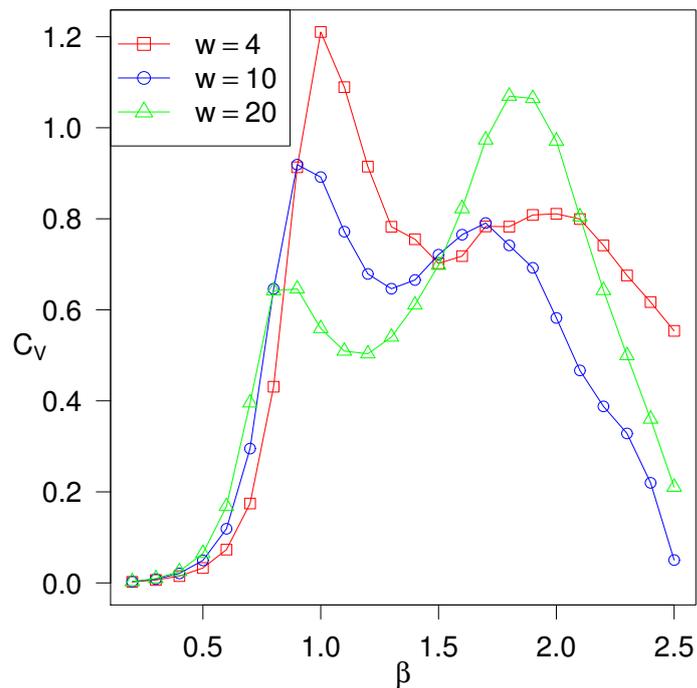


Abbildung 7.12: Die spezifische Wärmekapazitätskurven für  $l = 10$  bei verschiedenen Abmessungen der Schachbrettfelder vs. inverse Temperatur

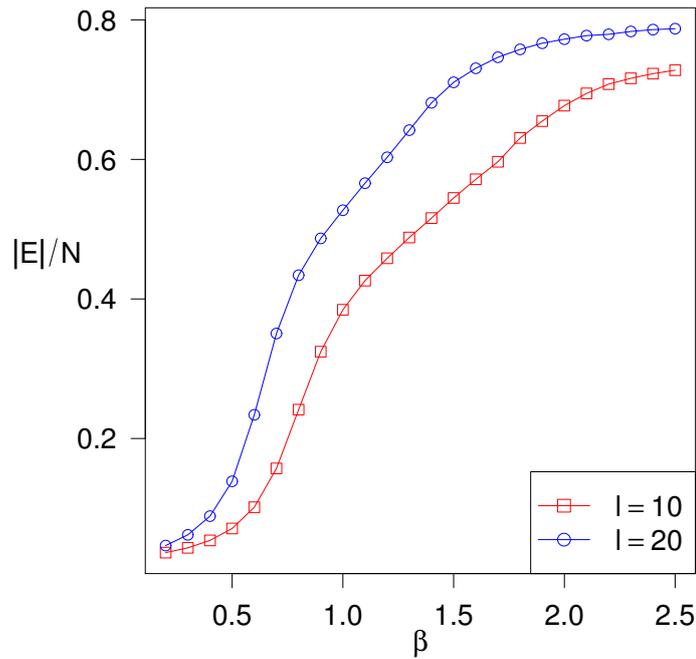


Abbildung 7.13: Darstellung der mittleren Adsorptionsenergie  $|E|/N$  vs.  $1/t$  für zwei verschiedene Blocklängen  $l = 10$  und  $l = 20$  auf einer Schachbrettoberfläche mit  $w = 20$ .

erkennt“. Es ist hier auf die Schwierigkeit hinzuweisen, die Bedingungen für diese Mustererkennung zu optimieren, denn viele Parameter spielen eine Rolle und die Bedingungen variieren von Muster zu Muster. In den semianalytischen Studien der Adsorption von Multiblock-Copolymeren an einer gestreiften Oberfläche [49, 50] hat man herausgefunden, dass Copolymere mit kleineren Blocklängen besser adsorbiert werden als solche mit großen Blöcken. Allerdings wurde ein solches Verhalten in den vorliegenden Untersuchungen nicht beobachtet. Dies zeigt die Problematik, die die Verallgemeinerung der Ergebnisse darstellt, denn die zweiphasige Mustererkennung zieht eine Anpassung der Längenskalen der Oberfläche und des Polymeres nach sich. Festzuhalten bleibt, dass gerade der zweistufige Adsorptionsprozess die zentrale Eigenschaft zur Mustererkennung ist, was man gut in Abbildung 7.13 erkennen kann. Dargestellt ist die Adsorptionsenergie pro Monomer  $E/N$  als Funktion von  $1/T$ . Abgebildet sind die Kurven für zwei Multiblock-Copolymerketten mit verschiedenen Blocklängen  $l = 10$  und  $l = 20$  zusammen mit einer Schachbrettoberfläche mit Feldern der Kantenlänge  $w = 20$ .

Weitere wichtige Anhaltspunkte, um das Adsorptionsverhalten der Multiblock-Copolymere zu beurteilen, liefern Eigenschaften, die die Konformation des Polymeres beschreiben. In Abbildung 7.14 ist die Abhängigkeit der senkrechten Komponente des Gyrationradius  $R_{\perp}$  von verschiedenen Feldgrößen  $w$  der Schachbrettoberfläche dargestellt. Die Kettenlänge beträgt  $N = 100$  und die Blocklänge ist bei allen Simulationen  $l = 10$ . Es sind direkte Rückschlüsse auf die räumliche Ausdehnung des Polymeres möglich. Ist  $R_{\perp}$  groß, so befindet sich die Kette im freien Raum. Abnehmende Werte zeigen eine geringe Höhe des gesamten Polymeres an. Hier bedeutet dies, je geringer der Wert von  $R_{\perp}$ , umso größer

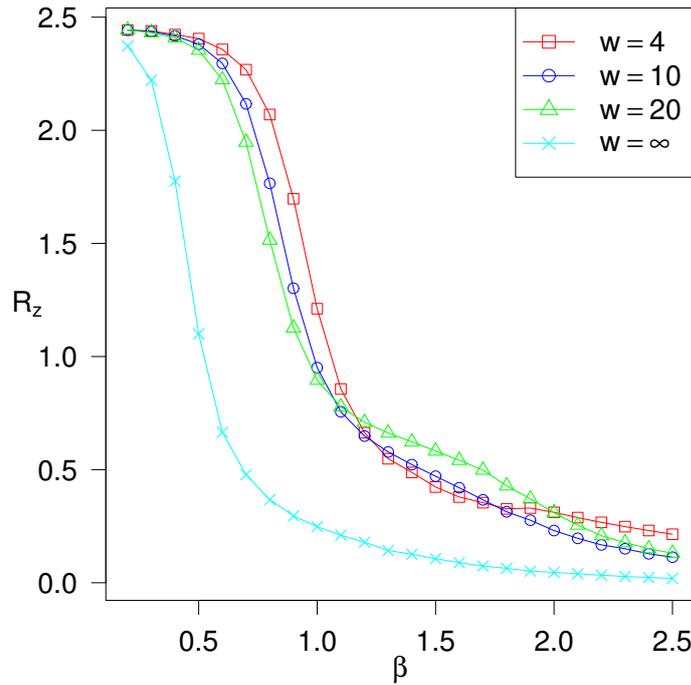


Abbildung 7.14: Die senkrechte Komponente des Gyrationradius  $R_{\perp}$  für verschiedene Werte  $w$  als Funktion der inversen Temperatur. Die Länge des Polymers ist  $N = 100$  und die Blocklänge des Polymers ist  $l = 10$

ist der Anteil der adsorbierten Monomere. Zu Vergleichszwecken ist die Kurve für ein gewöhnliches Homopolymer auf einer homogenen Oberfläche eingezeichnet. Sofort fällt auf, dass sich die Kurven der Multiblock-Copolymere eklatant unterscheiden, sie werden später, d. h. bei niedrigeren Temperaturen und dann weniger stark von der Oberfläche adsorbiert. Deutlich sind für den Fall  $w = 20$  die zwei ausgezeichneten Übergänge zu erkennen, die bereits in Abbildung 7.12 in der entsprechenden Kurve der  $C_V$  auffällig waren und an denen hier eine Veränderung des Anstiegs bemerkbar ist. Im Gegensatz zu der herkömmlichen homogenen Kurve zeigt sich hier wieder der zweiphasige Adsorptionsprozess der Multiblock-Copolymerketten, der von den unterschiedlichen Monomertypen herrührt. Die Abbildung 7.15 zeigt zusätzlich die Entwicklung von  $R_{\perp}$  bei unterschiedlichen Blocklängen  $l$  zusammen mit der Schachbrettoberfläche ( $w = 20$ ).

Die  $x$ - und  $y$ -Komponente des Gyrationradius zeigen gleiches Verhalten und  $R_{gx}$ , der  $x$ -Anteil, ist in Abbildung 7.16 dargestellt. Es sind die Kurven von Ketten der Länge  $N = 100$  für verschiedene Blocklängen bei einer Oberfläche mit  $w = 20$  dargestellt. Hier zeigt sich ein Unterschied zu gestreiften Oberflächen, wie sie in [83, 84] betrachtet werden, bei denen sich eine von beiden entlang den Streifen ausbreitet. Dies ist hier nicht der Fall, im Gegenteil ist besonders zu erwähnen, dass die Multiblock-Copolymere sich sogar geringer während der Adsorption ausdehnen als das Homopolymer auf der homogenen Oberfläche. Aufgrund der quadratischen Fläche der bevorzugten Oberflächensegmente ist es der Kette in beiden Richtungen nur begrenzt möglich, sich auszudehnen, da die verschiedenen Blöcke die mit ihnen assoziierten Flächen bevorzugen.

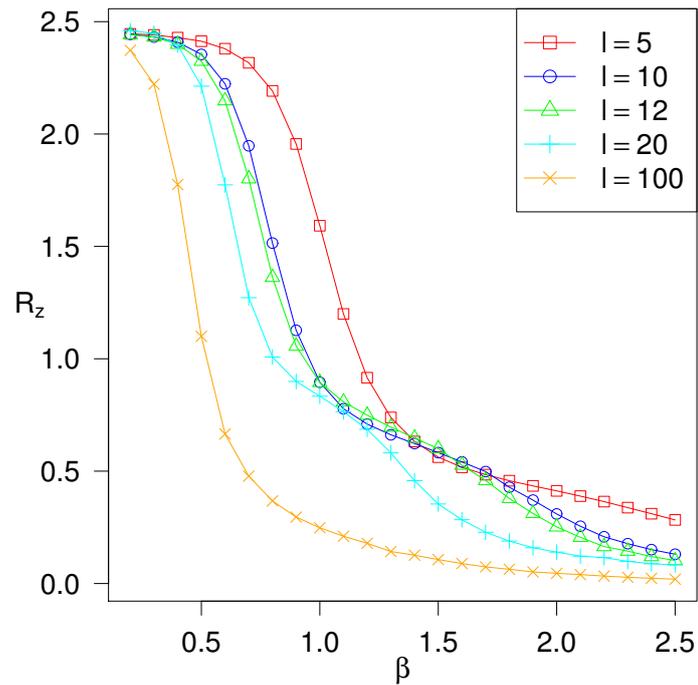


Abbildung 7.15: Die senkrechte Komponente des Gyrationradius  $R_{\perp}$  für verschiedene Werte  $i$  als Funktion der inversen Temperatur. Die Länge des Polymer ist  $N = 100$  und die Kantenlängelänge der Schachbrettfelder ist  $w = 20$ . Außerdem ist zum Vergleich ein Homopolymer auf einer gleichmäßigen Oberfläche ( $i = 100$ ) eingetragen.

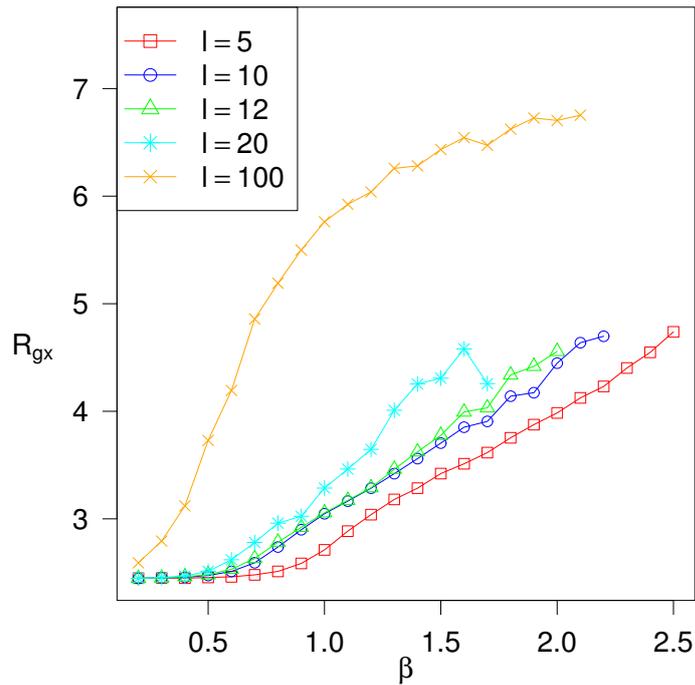


Abbildung 7.16: Die planaren Komponenten des Gyrationradius  $R_{gx}$  für verschiedene Blocklängen  $l$  als Funktion der inversen Temperatur. Die Parameter sind weiterhin  $N = 100$  und  $w = 20$ . Die Kurve eines Homopolymers auf einer homogenen Oberfläche ist beigefügt.

Abschließend kann man zusammenfassen, dass mit Hilfe dieser Monte-Carlo-Gittersimulation, bei der ein Multiblock-Copolymer einen Adsorptionsprozess an einer heterogenen Oberfläche in Form eines Schachbretts durchläuft, wesentliche Aspekte dieses Vorgangs untersucht wurden. Als wichtigster Befund ist der gefundene zweiphasige Adsorptionsprozess zu bewerten, der vor allem vom Verhältnis der Dimension der Schachbrettoberfläche  $w$  zu der Blocklänge  $l$  des Multiblock-Copolymers abhängt. Es bestehen deutliche Unterschiede zu anderen minimalen Modellen, wie z. B. das eines Diblock-Copolymers auf einer gestreiften Oberfläche. Der zweiphasige Adsorptionsprozess wurde anhand verschiedener Punkte nachgewiesen. Da sind zum einen die Kurven der mittleren Adsorptionsenergien, die zwei deutliche Umschlagpunkte des Anstiegs zeigen. Zum anderen ist deutlich geworden, dass die A- und B-Monomere die jeweils zu ihnen assoziierten Oberflächensegmenten bei der Adsorption bevorzugen, wobei sich die Übergänge zwischen den A- und B-Blöcken möglichst in der Nähe oder auf den Segmentgrenzen befinden. In der ersten Phase des Vorgangs werden zunächst nur Blöcke von Monomeren eines Typs adsorbiert, woraus noch keine Rückschlüsse auf die Beschaffenheit der Oberfläche gezogen werden können. Anschließend in Phase zwei werden die verbliebenen Monomerblöcke des anderen Typs adsorbiert. Da die Adsorptionseigenschaften, wie oben schon erwähnt wurde, direkt vom Verhältnis der Größen  $w$  und  $l$  abhängen, erlaubt dies Rückschlüsse auf die Struktur der adsorbierenden Oberfläche. In den vorangestellten Beispielen hat sich gezeigt, dass eine Multiblock-Copolymerkette mit einer Blocklänge  $l = 10$  die eindeutigsten Werte für den beschriebenen zweistufigen Adsorptionsprozess liefert.

# 8 Zusammenfassung und Ausblick

## 8.1 Zusammenfassung

Gegenstand der Arbeit waren Systeme, die aus einer großen Anzahl von Teilchen, Personen oder Daten bestehen, welche vermöge der gegenseitigen Wechselwirkung neue Verhaltensweisen generieren, die den einzelnen Komponenten nicht zuzuordnen sind. In der statistischen Physik erkennt man z. B. in der Temperatur eine solche kollektive Größe, die für ein Vielteilchensystem charakteristisch ist. Wenn - wie in der Arbeit vorgestellt - Konzepte der Statistischen Physik auch auf nichtphysikalische Systeme wie soziale Netze oder auf die Ausbreitung von Krankheiten angewandt werden, so ist die eindeutige Charakterisierung solcher Systeme weitaus schwieriger. So sind beispielsweise Einflussgrößen in die Betrachtung einzubeziehen, die sich einer strengen mathematisch-physikalischen Charakterisierung entziehen. Um dennoch solche Systeme näherungsweise beschreiben zu können, ist es üblich, Ansätze der Physik von Vielteilchensystemen zu nutzen. Ein wesentliches Element dabei ist die Selektion von Freiheitsgraden, die Klassifizierung der Umgebung, die Charakterisierung der Wechselwirkungen und die Skala der Beschreibung. So kann z. B. die Beschreibung von physikalischen Objekten auf einer mikroskopischen, sprich atomaren Zeit- und Längenskala erfolgen. Sie kann aber durchaus auch erfolgreich auf einer mesoskopischen Skala erfolgen. Dabei laufen die elementaren Prozesse auf einer größeren Zeitskala ab. Gleichfalls werden viele mikroskopische Freiheitsgrade einem mesoskopischen Freiheitsgrad zugeordnet. Ein typisches Beispiel dafür sind hydrodynamische Prozesse, wobei den  $10^{12}$  Wassermolekülen ein Geschwindigkeitsfeld  $v(\vec{r}, t)$  zugeordnet wird. Diese als „coarse graining“ bezeichnete Vorgehensweise hat sich in der Physik seit Langem bewährt, was die Hoffnung berechtigt, dass das Vorgehen zumindest näherungsweise auch bei nichtphysikalischen Systeme erfolgreich anwendbar sein könnte. Die vorliegende Arbeit leistet zu dieser Problematik an ausgewählten Beispielen einen signifikanten Beitrag.

In dieser Arbeit wurden verschiedene Modelle sowohl aus dem Bereich sozialer Strukturen wie auch aus dem Bereich polymerer Systeme betrachtet. Als das gemeinsame Band zwischen den beiden höchst unterschiedlichen Feldern wurden Netzwerke erkannt, die ein effektives Werkzeug bilden, um die Zusammenhänge zwischen den Konstituenten des Systems zu charakterisieren. Neben dieser Charakterisierung können die Netzwerke auch eine eigene Dynamik aufweisen, wie es in polymeren, aber auch in sozialen Netzwerken der Fall ist. Neben Netzwerken standen außer analytischen Zugängen, wie beispielsweise über eine Master-Gleichung, verschiedene numerische Verfahren zur Verfügung, um Aussagen über komplexe Systeme zu erzielen. Es soll an dieser Stelle auch der unmittelbare und evidente Zusammenhang zwischen MC-Simulation und Master-Gleichung betont werden. Im Folgenden sollen die wichtigsten Ergebnisse der Arbeit nochmals

zusammengefasst werden:

### (1) Polymere

In diesem Bereich ist es gut möglich, bei dem oben erwähnten „coarse graining“ den Grad der Abstraktion an die gegebenen Erfordernisse anzupassen. Um grundlegende, generelle Eigenschaften von verschiedenen Polymersystemen zu untersuchen, werden im Rahmen von Monte-Carlo-Studien oft simple Modelle genutzt. Bei den einfachsten bestehen die einzelnen Moleküle, die als Monomere der Polymerkette fungieren, aus Kugeln, die sich auf einem Gitter befinden. Die chemische Bindung zwischen den Monomeren ist hierbei einfach durch die Kanten zwischen den benachbarten Kugeln im Gitter realisiert. Des Weiteren gehört zum Modell ein Satz elementarer Bewegungsmodi für die Ketten, durch die die Dynamik im Modell realisiert wird. Trotz dieser sehr starken Vereinfachung und Außerachtlassung jeglicher struktureller Einflüsse, wie z. B. Gestalt der Moleküle, Flexibilität der Bindungen u. a., ist es möglich, einige generelle Eigenschaften sowie deren Phänomene zu beschreiben. Will man jedoch das Vernetzungsverhalten von Polymerketten in einer Schmelze beschreiben, reicht oft ein solch einfaches Modell nicht aus. Die Möglichkeiten, Polymermodelle realistischer zu gestalten, sind vielfältig, gehen jedoch oft mit einer aufwändigeren Simulationstechnik einher und erfordern zudem mehr Rechenkapazität bei der computergestützten Simulation. Realitätsgetreuer ist beispielsweise, der Verzicht auf das Gitter, so dass sich die Monomerkugeln frei im Simulationsraum bewegen können. Eine Zwischenposition in dieser Hinsicht nimmt das Bond-Fluctuation-Modell (vgl. [15]) ein. Es nutzt zwar bei der Positionierung der Monomere ein Gitter, aber die Verbindungen zwischen den Monomeren sind flexibel und nicht an das Gitter gebunden. Eine weitere Möglichkeit, das Modell detaillierter zu gestalten, ist die Realisierung der Bindungen zwischen den Monomeren einer Kette. So besteht diese in den einfachsten Fällen aus einem starren Stab, der die kugelförmigen Monomere verbindet und im Falle des oben beschriebenen Gittermodells, sind diese identisch mit den Kanten des Gitters. Im Falle des Bond-Fluctuation-Modells ist das nicht der Fall, dort variieren die Bindungslängen zwischen verschiedenen möglichen Werten, und sie verlaufen nicht auf den Gitterkanten. Bewegen sich die Monomere unabhängig von einem Gitter, so gibt es viele Möglichkeiten, die Bindung zu modellieren. Oft nimmt man an, dass sich jedes Monomer im Potential seiner Nachbarn bewegt. Diese Potentiale üben in der Regel auf das Monomer eine abstoßende Kraft bei Annäherung an ein Nachbarmonomer aus, die bei einem minimalen, nicht zu unterschreitenden Abstand über alle Maßen wächst. Bei der Entfernung vom Kettennachbarn wirken sie jedoch anziehend und verhindern so das Reißen der Kette. Ein besonders einfaches Potential ist das *Harte-Kugel-Potential*, bei dem man annimmt, dass die Kette aus harten undurchdringlichen Kugeln besteht und jede Monomerkugel bewegt sich frei zwischen dem Minimalabstand, bei dem sich die Nachbarkugeln berühren und dem maximal zulässigen Kettenabstand. Ein solches Modell wurde bei der Untersuchung von Polymerketten in einer Schmelze in Abschnitt 6 verwendet. Des Weiteren kann man die Modelle so modifizieren, dass man die Bindungen einschränkt, indem nur bestimmte Bindungswinkel zulässig sind. Man erreicht so auch eine gewisse Steifheit der Kette, was bei manchen Beschreibungen

erforderlich ist.

Wie oben schon erwähnt, eignen sich solche Modelle trotz aller Einfachheit gut zur Untersuchung grundlegender Polymereigenschaften. Mit Monte-Carlo Simulationen, die das rudimentäre Verdier-Stockmayer-Modell nutzen, wurde das Adsorptionsverhalten eines Multiblock-Copolymers an einer heterogenen Oberfläche untersucht. Es gab zwei Typen von Monomeren, deren Adsorptionsverhalten an einer Schachbrettoberfläche betrachtet wurde. Es wurde das Verhalten für verschiedene Dimensionen der Felder auf der Schachbrettoberfläche und für verschiedene Blocklängen untersucht. Die Kurven der spezifischen Wärmekapazität für die Adsorption zeigen einen double peak, was für einen zweiphasigen Mustererkennungsvorgang des Copolymers an der Oberfläche spricht. Es ist auch zu beobachten, dass der Übergang, der bei niedrigen Temperaturen abläuft mit der Adsorption der Monomere auf den Feldern korrespondiert, während später die Nahtstellen der einzelnen Monomerblöcke an den Grenzflächen der Oberfläche adsorbiert werden. Es ist interessant zu betrachten, wie sich die Multiblock-Copolymere formen, wenn sie an den verschiedenartigen Zonen der Oberfläche adsorbiert werden. Es existiert ein optimales Verhältnis zwischen Blocklänge und Feldquadratgröße der Oberfläche, bei der die Adsorption und damit die Erkennung der Oberfläche am besten abläuft. Entfernt man sich von diesem Verhältnis, gleicht sich das Verhalten an das eines Homopolymers an einer homogenen Oberfläche an. Im Vergleich zu früheren Studien, in denen Diblock-Copolymere an streifenförmigen Oberflächen untersucht wurden, ist hier der Erkennungsvorgang stärker ausgeprägt und die mittlere Adsorptionsenergie, die senkrechte Komponente des Gyrationradius zeigen schärfere Wechsel im Verhalten, was mit den zwei Phasen der Adsorption erklärt wird. Die Anpassungseigenschaften des Multiblock-Copolymers an der Schachbrettoberfläche zeigen interessante Effekte in den senkrechten Komponenten, die sich deutlich von Standardverhalten unterscheiden.

Treten in einer Schmelze von vielen Polymerketten Verbindungen zwischen den einzelnen Ketten auf, so bildet sie ein Netzwerk. Es ist zweckmäßig, auf derartige Probleme Konzepte der Netzwerk- oder Graphentheorie anzuwenden. Als ein einfaches Beispiel für diese Situation sei hier die Einschätzung der Konnektivität eines Netzwerkes genannt. Sie wird maßgeblich von der Zahl der Verbindungen bestimmt, die die einzelnen Cluster des Netzwerkes verbinden. Ein Werkzeug zur Bestimmung dieser Größe ist der so genannte *Min-Cut*-Algorithmus. Anschaulich gesprochen, soll er die geringste Zahl an Verbindungen liefern, die es zu durchtrennen gilt, damit das gesamte Netzwerk in zwei komplett getrennte Teile zerfällt. Dabei könnte man z. B. annehmen, dass die einzelnen Ketten im Netzwerk die Knoten sind, und die Vernetzungsstellen zwischen ihnen sind die Verbindungen der Knoten. So oder ähnlich laufen die Untersuchungen der Simulationsergebnisse bei Polymerschmelzen mit obigen Methoden ab.

## (2) Meinungsbildungsprozess

In den kommenden beiden Bereichen der Arbeit wurden Vorgänge in nichtphysikalischen Zusammenhängen untersucht. Zunächst stand Verbreitung von Meinungen in sozialen Strukturen im Mittelpunkt der Analysen. Um das Problem im Rahmen von

Netzwerkmodellen zu betrachten, war es notwendig das zwischenmenschliche Beziehungsgeflecht als komplexes System aufzufassen, welches man anschließend mittels eines speziellen Netzwerks modelliert. Das sind Netzwerke, die zur Beschreibung von sozialen Systemen entwickelt wurden und als soziale Netze bezeichnet werden. Diese sozialen Netze, wie sie hier verwendet wurden, unterscheiden sich jedoch deutlich von den oben erwähnten Polymermodellen. Eine sehr wichtige Eigenschaft solcher Netze ist, dass räumliche Nähe nicht unbedingt auch zu topologischer Nähe führt. Das ist sinnvoll, denn die soziale Nähe von Menschen hat in der Regel nichts mit ihrer räumlichen Nähe zu tun.

Es wurde ein Modell entwickelt, das das Wachsen und Verarmen von Parties unter dem Einfluss der permanenten Kommunikation ihrer Mitglieder untereinander beschreibt. Durch die Möglichkeit, immer und schnell Informationen auszutauschen, sind die Partyteilnehmer jederzeit in der Lage, ihre mit denen ihrer Freunde zu vergleichen. Durch die so ausgelösten Wechsel schwanken die Teilnehmerzahlen der Parties ständig. Abhängig von der Reichweite der sozialen Kontakte ändert sich das Verhalten des Systems von einem Mehrpartyverhalten, bei dem alle Parties Teilnehmer haben, hin zum Einpartyverhalten, bei dem sich alle Teilnehmer in einer Party versammeln. Die beiden Verhaltensweisen wechseln schlagartig an einem kritischen Punkt. Das Modell basiert auf dem hierarchischen sozialen Netzwerk. Die Wahrscheinlichkeit, dass zwei Personen in Kontakt sind, ist abhängig von ihrem sozialen Abstand, der mit dem sozialen Netzwerk eingeführt wurde. Mit einem Parameter  $\alpha$  wird die Reichweite der Kontakte im Netzwerk beeinflusst.

### (3) Krankheitsausbreitungen

Die Untersuchung der Ausbreitung von Infektionskrankheiten war ebenso Gegenstand dieser Arbeit. Grundlage dieser Betrachtungen waren Kompartiment-Modelle, speziell das SIR-Modell, bei dem die Individuen einer Population in die Gruppen  $S$  (*susceptible*),  $I$  (*infected*) und  $R$  (*recovered*) eingeteilt werden und untereinander wechselwirken. Ursprünglich wurde das Modell mit einem System von gewöhnlichen Differentialgleichungen beschrieben, zu dem Beiträge zur analytischen Untersuchung in dieser Arbeit geliefert werden. Dieses ODE-Modell liefert naturgemäß nur wenig Einblick in die konkreten Vorgänge der einzelnen Übertragungen. Diesen erreicht man mit der in Abschnitt 2.1 entwickelten Realisierung des SIR-Modells auf einem eindimensionalen Netzwerk, bei dem das vielfach untersuchte Modell erstmalig unter Einschluss von Fluktuationen exakt analytisch gelöst wurde. Dies gelang dadurch, dass gezeigt werden konnte, dass sich die Hierarchie der Bewegungsgleichungen schließt. Im Falle unkorrelierter Anfangsbedingungen wurde die Zeitentwicklung für alle drei Individuen  $S$ ,  $I$  und  $R$  gefunden. Abhängig von den Anfangskonfigurationen und dem Verhältnis der Übergangsraten zwischen den Zuständen, steigt zunächst die  $I$ -Konzentration und entwickelt später ein Maximum. Infolge der Einbeziehung von Fluktuationen können isolierte Inseln von  $S$ -Individuen entstehen, die im Unterschied zur Mean Field Lösung endliche stationäre Verteilungen liefern. Ein ausführlicher Vergleich zwischen MFA, analytischer Lösung und Simulationsdaten ergab sehr gute Übereinstimmungen.

Die räumliche Ausbreitung von Seuchen ist mittels des ODE-Modells nicht beschreibbar, es macht ausschließlich Aussagen über die Gruppenstärke der einzelnen Fraktionen. Bei dem netzbasierten Modell aus Abschnitt 2.1 haben die Individuen zwar eine Position im Netzwerk, aber das Modell kann nicht direkt auf soziale Systeme angewandt werden, da, wie schon oben erwähnt, räumlicher Abstand und soziale Nähe in der Regel nicht zusammenhängen. Es liegt in der konzeptionellen Begründung dieser Modelle, dass der Umstand nicht berücksichtigt wird, dass viele Infektionskrankheiten sich vorwiegend über soziale Kontakte ausbreiten. Dem wurde in dieser Arbeit dadurch Rechnung getragen, dass die Regeln des SIR-Modells mit einem sozialen Netzwerk gemäß Abschnitt 3.1.1 verknüpft wurden. Für diese Netze gelten die in Punkt 2 (erster Absatz) getroffenen Aussagen. Mit dem resultierenden SIR-Modell auf einem hierarchischen Netzwerk (vgl. Abschnitt 5.3) wurden die Ausbreitung von Infektionen in sozialen Strukturen untersucht. Wieder wurde beobachtet, dass das Verhalten des Systems entscheidend von der Topologie des sozialen Netzwerkes abhängt, das wiederum hauptsächlich auch von dem Parameter  $\alpha$  beeinflusst wird, der schon im Meinungsbildungsmodell von Bedeutung war.

Zusammenfassend kann bemerkt werden, dass es mit Konzepten der Statistischen Physik zusammen mit der Anwendung von netzwerkspezifischen Ansätzen gelungen ist, universelle Charakteristika komplexer Systeme aus verschiedenen Bereichen aufzuzeigen und zu untersuchen. Die Systeme waren sowohl physikalischer als auch nichtphysikalischer Natur. Während es bei den physikalischen Problemen oft möglich ist, es separat zu betrachten und die Situationen, die von Interesse sind experimentell und theoretisch (z. B. im Rahmen einer Simulationsstudie) direkt herbeizuführen, gelingt dies bei den betrachteten nichtphysikalischen sozialen Systemen in der Regel nicht. Vorgänge wie die Krankheitsausbreitung oder Meinungsbildungsprozesse lassen sich nicht herausgelöst aus dem Komplex der menschlichen Gesellschaft betrachten. Oft resultieren die dort auftretenden Phänomene gerade aus dessen Beziehungsgeflecht. Das dieses wiederum großen Veränderungen unterworfen ist, die derzeit durch die technischen Möglichkeiten hervorgerufen werden, lässt sich gut an aktuellen Vorgängen beobachten. Die im Vergleich zu früheren Zeiten riesige weltweite Mobilität führt inzwischen dazu, dass die sozialen Beziehungen langreichweitiger werden und ständig die Gefahr globaler Seuchen droht. Auch ganz allgemein besteht aufgrund der rasante Entwicklung der Telekommunikation und Massenmedien heute eine erhöhte Konnektivität über viele Kanäle gleichzeitig zwischen den Menschen, wodurch sich Meinungen viel stärker und anders verbreiten. Die in dieser Arbeit entwickelten Modelle zur Krankheitsausbreitung beinhalten zum einen ein soziales Netzwerkmodell, über das die Reichweite und die Konnektivität der Individuen beeinflusst werden kann, als auch das SIR-Modell, mit dem die Ausbreitung der Krankheit an sich simuliert wird. Die oben beschriebenen Zusammenhänge können damit reproduziert und z. T. erklärt werden. In Abhängigkeit von der Reichweite der Beziehungen und der allgemeinen Konnektivität breiten sich Krankheiten nur lokal oder über die gesamte Population aus. Das in dieser Arbeit entwickelte Meinungsbildungsmodell arbeitet ebenfalls auf der Grundlage des sozialen Netzwerkes. Es zeigt überraschende Eigenschaften, die auch durch das Verhalten des sozialen Netzes hervorgerufen werden. Es wird deutlich, dass das soziale Netzwerk die treibende Kraft hinter den beobachteten

Phänomenen in den verschiedenen Bereichen ist. Diese speziellen Eigenschaften sozialer Netze werden unter dem Schlagwort „Small-World“ zusammengefasst.

### 8.2 Ausblick

In dieser Arbeit wurde ein weites Themenfeld mit Hilfe der Netzwerkanalyse betrachtet. Die dabei verwendeten Modelle bestehen überwiegend aus zwei Teilen. Die Grundlage bildet das Netzwerk, dessen Knoten dann über die netzvermittelten Beziehungen miteinander interagieren. Es besteht die Möglichkeit, beide Teile zu modifizieren, um detailliertere Untersuchungen durchführen zu können. In Abschnitt 3.1.2 wurde bereits angedeutet, wie man die SIR-Dynamik zum SIRS-Modell erweitern kann, um Krankheitsverläufe genauer zu beschreiben. Bei der Einführung eines  $R \rightarrow S$  Überganges erhält man zunächst ein erweitertes System von Differentialgleichungen mit einer Rückkopplung. Dies lässt weitere nichtlineare Effekte wie Oszillationen erwarten, wie sie das System bei ersten numerischen Untersuchungen zeigt. Des Weiteren wäre zu prüfen, ob das SIRS-Modell ebenso zu realisieren ist, wie es in Abschnitt 2.1 für das SIR-Modell durchgeführt wurde.

Ein Weiteres schwer umsetzbares Vorhaben ist die Entwicklung von anderen Modellen für soziale Strukturen nach obigen Vorbild und deren Vergleich mit Daten aus realen Systemen. Welch großer Aufwand bei solchen Untersuchungen getrieben wird, kann in [14] und [25] nachgelesen werden. Oft ist es dazu notwendig, Zugang zu geschlossenen Kommunikationssystemen großer Organisationen zu haben.

# Literatur

- [1] Bernt Øksendal. *Stochastic Differential Equations: An Introduction with Applications (Universitext)*. 6th ed. 2003. Corr. 4th printing. Springer, Juli 2003.
- [2] Réka Albert und Albert-László Barabási. „Statistical mechanics of complex networks“. In: *Rev. Mod. Phys.* 74.1 (Jan. 2002), S. 47–97.
- [3] Réka Albert und Albert-László Barabási. „Emergence of scaling in random networks“. In: *Science* 286.5439 (Okt. 1999), S. 509–512.
- [4] M. P. Allen und D. J. Tildesley. *Computer simulation of liquids*. Oxford science publications. Oxford: Clarendon Press, 2007.
- [5] Rolf Auhl. „Computersimulation von Copolymeren an Polymer-Polymer-Grenzflächen“. Diss. Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 1997.
- [6] Robert B. Banks. *Growth and Diffusion Phenomena: Mathematical Frameworks and Applications*. 1. Aufl. Springer, Dez. 1993.
- [7] J. Baschnagel, J. P. Wittmer und H. Meyer. *Monte Carlo Simulation of Polymers: Coarse-Grained Models*. Feb. 2006.
- [8] E. Ben-Naim und P. L. Krapivsky. „Size of outbreaks near the epidemic threshold“. In: *Physical Review E* 69.5 (Mai 2004), S. 050901.
- [9] K. Binder. „Applications of Monte Carlo methods to statistical physics“. In: *Reports on Progress in Physics* 60.5 (1997), S. 487–559.
- [10] K. Binder und W. Paul. „Monte Carlo simulations of polymer dynamics: Recent advances“. In: *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics* 35.1 (1997), S. 1–31.
- [11] Marian Brandau. „Stochastic differential equations with nonlinear semigroups“. In: *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik* 82.11-12 (2002), S. 737–743.
- [12] Marian Brandau und Steffen Trimper. „Network of social groups or let’s have a party“. In: *International journal of modern physics C* 17.4 (Apr. 2006), S. 511–520.
- [13] D. Bratko, Arup K. Chakraborty und E. I. Shakhnovich. „Adsorption of random copolymers on disordered surfaces“. In: *Computational and Theoretical Polymer Science* 8.1-2 (1998), S. 113–126.
- [14] D. Brockmann, L. Hufnagel und T. Geisel. „The scaling laws of human travel“. In: *Nature* 439 (2006), S. 462.
- [15] I. Carmesin und Kurt Kremer. „The bond fluctuation method: a new effective algorithm for the dynamics of polymers in all spatial dimensions“. In: *Macromolecules* 21.9 (1988), S. 2819–2823.

- [16] H. P. Deutsch und K. Binder. „Interdiffusion and self-diffusion in polymer mixtures: A Monte Carlo study“. In: *The Journal of Chemical Physics* 94.3 (Feb. 1991), S. 2294–2304.
- [17] Hans-Peter Deutsch und Ronald Dickman. „Equation of state for athermal lattice chains in a 3d fluctuating bond model“. In: *The Journal of Chemical Physics* 93.12 (Dez. 1990), S. 8983–8990.
- [18] O. Diekmann und JAP Heesterbeek. *Mathematical epidemiology of infectious diseases: model building, analysis and interpretation*. Wiley, 2000.
- [19] Masao Doi. „Second quantization representation for classical many-particle system“. In: *Journal of physics A: Mathematical and general*. 9.1 (1976), S. 1465–1477.
- [20] Masao Doi. „Stochastic theory of diffusion-controlled reaction“. In: *Journal of physics A: Mathematical and general*. 9.1 (1976), S. 1479–1495.
- [21] Masao Doi und Samuel F Edwards. *The Theory of Polymer Dynamics*. International series of monographs on physics ; 73. Oxford [u.a.]: Clarendon Pr, 2007.
- [22] S. N Dorogovtsev und J. F. F Mendes. *Evolution of networks*. Oxford [u.a.]: Oxford University Press, 2003.
- [23] Karel Dušek. „Epoxy Resins and Composites III“. In: Bd. 78. *Advances in Polymer Science*. Springer Berlin/Heidelberg, 1986. Kap. Network formation in curing of epoxy resins, S. 1–59.
- [24] Manfred Dworschak. „Keine Ahnung ... ich ruf dich an“. In: *Der Spiegel* 12 (2004), S. 110.
- [25] Holger Ebel, Lutz-Ingo Mielsch und Stefan Bornholdt. „Scale-free topology of e-mail networks“. In: *Physical Review E* 66.3 (Sep. 2002), S. 035103.
- [26] E. Eisenriegler. „Universal density-force relations for polymers near a repulsive wall“. In: *Phys. Rev. E* 55.3 (März 1997), S. 3116–3123.
- [27] Erich Eisenriegler. *Polymers Near Surfaces: Conformation Properties and Relation to Critical Phenomena*. World Scientific Publishing Company, Dez. 1993.
- [28] P. Erdős und A. Rényi. „On Random Graphs“. In: *Publ. Math.* 6 (1959), S. 290–297.
- [29] P.J. Flory. *Principles of polymer chemistry*. Cornell Univ Pr, 1953.
- [30] Crispin Gardiner. *Stochastic methods : a handbook for the natural and social sciences*. Springer series in synergetics Springer complexity. Berlin: Springer, 2009, XVII, 447 S.
- [31] Pierre-Gilles de Gennes. *Introduction to Polymer Dynamics (Lezioni Lincee)*. Cambridge University Press, Sep. 1990.
- [32] Pierre-Gilles de Gennes. *Scaling concepts in polymer physics*. Cornell Univ Pr, 1979.
- [33] Pierre-Gilles de Gennes. „Reptation of a Polymer Chain in the Presence of Fixed Obstacles“. In: *The Journal of Chemical Physics* 55.2 (1971), S. 572–579.
- [34] Iosif I Gichman und Anatolij V Skorochod. *Stochastische Differentialgleichungen*. Mathematische Lehrbücher und Monographien Abt. 2, Math. Monographien. Berlin: Akademie-Verlag, 1971.

- [35] Roy J. Glauber. „Time-Dependent Statistics of the Ising Model“. In: *Journal of Mathematical Physics* 4.2 (1963), S. 294–307.
- [36] P. Grassberger, H. Frauenkron und W. Nadler. „Perm: A Monte Carlo Strategy For Simulating Polymers And Other Things“. In: *in Monte Carlo Approach to Biopolymers and Protein Folding*. World Scientific, 1998.
- [37] F. Géný und L. Monnerie. „Simulation of the brownian motion of macromolecular chains. I. Local motions and chain conformations“. In: *Journal of Polymer Science: Polymer Physics Edition* 17.1 (1979), S. 131–146.
- [38] W. K. Hastings. „Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications“. In: *Biometrika* 57.1 (1970), S. 97–109.
- [39] Dirk Helbing. „Traffic and related self-driven many-particle systems“. In: *Rev. Mod. Phys.* 73.4 (Dez. 2001), S. 1067–1141.
- [40] C. Joachim, J. K. Gimzewski und A. Aviram. „Electronics using hybrid-molecular and mono-molecular devices“. In: *Nature* 408 (Nov. 2000), S. 541–548.
- [41] Krzysztof Kacperski und Janusz A. Holyst. „Phase transitions as a persistent feature of groups with leaders in models of opinion formation“. In: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 287.3-4 (2000), S. 631 –643.
- [42] Krzysztof Kacperski und Janusz A. Holyst. „Opinion formation model with strong leader and external impact: a mean field approach“. In: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 269.2-4 (1999), S. 511 –526.
- [43] Erich Kamke. *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. 10. Aufl., unveränd. Nachdr. d. 8., durchges. Aufl. *Differentialgleichungen : Lösungsmethoden und Lösungen / von E. Kamke ; 1*. New York: Chelsea Publ., 1983.
- [44] Nicolaas Godfried van Kampen. *Stochastic processes in physics and chemistry*. 3. ed. North-Holland personal library. Amsterdam [u.a.]: Elsevier, 2007.
- [45] W. O. Kermack und A. G. McKendrick. „A Contribution to the Mathematical Theory of Epidemics.“ In: *Proc. Roy. Soc. A* 115 (1927), S. 700–721.
- [46] J. Klos und J.-U. Sommer. „Random copolymers at a selective interface: Saturation effects“. In: *The Journal of Chemical Physics* 127.17, 174901 (2007), S. 174901.
- [47] J. S. Klos und J.-U. Sommer. „Adsorption of random copolymers by a selective layer: Monte Carlo studies“. In: *The Journal of Chemical Physics* 128.16, 164908 (2008), S. 164908.
- [48] D. H. Kobe. „Second quantization of an arbitrary operator“. In: *Proceedings of the Physical Society* 88.1 (1966), S. 9–12.
- [49] Yuri A. Kriksin, Pavel G. Khalatur und Alexei R. Khokhlov. „Recognition of complex patterned substrates by heteropolymer chains consisting of multiple monomer types“. In: *The Journal of Chemical Physics* 124.17, 174904 (2006), S. 174904.
- [50] Yury A. Kriksin, Pavel G. Khalatur und Alexei R. Khokhlov. „Adsorption of multiblock copolymers onto a chemically heterogeneous surface: A model of pattern recognition“. In: *The Journal of Chemical Physics* 122.11, 114703 (2005), S. 114703.

- [51] Robert Matthews. „Discovering the nature of party people“. In: *NewScientist* 2531 (2005).
- [52] Daniel C. Mattis und M. Lawrence Glasser. „The uses of quantum field theory in diffusion-limited reactions“. In: *Rev. Mod. Phys.* 70.3 (Juli 1998), S. 979.
- [53] Nicholas Metropolis u. a. „Equation of State Calculations by Fast Computing Machines“. In: *Journal of Chemical Physics* 21 (1953), S. 1087.
- [54] Thomas Michael, Steffen Trimper und Michael Schulz. „Glauber model in a quantum representation“. In: *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)* 73.6 (Juni 2006), S. 062101.
- [55] S. Milgram. „The small world problem“. In: *Psychology Today* 2.1 (1967), S. 60–67.
- [56] James Dickson Murray. *Mathematical biology 1: An introduction*. 3. ed., corr. 5. print. Interdisciplinary applied mathematics ; 17. New York, NY [u.a.]: Springer, 2008.
- [57] James Dickson Murray. *Mathematical biology 2: Spatial models and biomedical applications*. 3. ed., corr. 2. print. Interdisciplinary applied mathematics ; 18. New York, NY [u.a.]: Springer, 2004.
- [58] Marcus Müller. „The Bond Fluctuation Model and Other Lattice Models“. In: *Handbook of Materials Modeling*. Springer Netherlands, 2005. Kap. Handbook of Materials Modeling, S. 2599–2606.
- [59] M. E. J. Newman. „The Structure and Function of Complex Networks“. In: *SIAM Review* 45.2 (2003), S. 167–256.
- [60] M. E. J. Newman, D. J. Watts und S. H. Strogatz. „Random graph models of social networks“. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 99.Suppl 1 (Feb. 2002), S. 2566–2572.
- [61] G. Palla, A. L. Barabasi und T. Vicsek. „Community dynamics in social networks“. In: *Fluctuation and noise letters* 7.3 (Sep. 2007), S. 273–287.
- [62] Franz Urban. Pappi. *Techniken der empirischen Sozialforschung, Bd.1, Methoden der Netzwerkanalyse*. Oldenbourg, Jan. 1990.
- [63] Wolfgang Paul und Jörg Baschnagel. *Stochastic processes : from physics to finance*. Springer-Verlag GmbH, 1999, XIII, 231 S.
- [64] Alessandro Pluchino, Vito Latora und Andrea Rapisarda. „Changing opinions in a changing world: A new perspective in sociophysics“. In: *International Journal of Modern Physics C* 16.4 (Apr. 2005), S. 515–531.
- [65] Prakash Rai u. a. „Statistical pattern matching facilitates the design of polyvalent inhibitors of anthrax and cholera toxins“. In: *Nature Biotechnology* 24 (2006), S. 582–586.
- [66] Matthias Rosche. „Kontinuierliche Monte-Carlo-Simulation zum topologisch induzierten Glasübergang“. Diss. Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 1995.

- [67] L. A. Ruiz-Taylor u. a. „Monolayers of derivatized poly(l-lysine)-grafted poly(ethylene glycol) on metal oxides as a class of biomolecular interfaces“. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 98.3 (2001), S. 852–857.
- [68] Michael Schulz und Steffen Trimper. „Fock-space approach to the kinetic Ising model“. In: *Physical Review B* 53.13 (Apr. 1996), S. 8421–8433.
- [69] Christian Schulze. „Advertising in the Snajd marketing model“. In: *International Journal of Modern Physics C* 14.1 (2003), S. 95–98.
- [70] Frank Schweitzer. *Brownian Agents and Active Particles: Collective Dynamics in the Natural and Social Sciences*. 1. Aufl. Springer, Aug. 2003.
- [71] Frank Schweitzer und Janusz A. Holyst. „Modelling collective opinion formation by means of active Brownian particles“. In: *European Physical Journal B: Condensed Matter Physics* 15 (2000), S. 723–732.
- [72] Gunter M. Schütz, Marian Brandau und Steffen Trimper. „Exact solution of a stochastic susceptible-infectious-recovered model“. In: *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)* 78.6 (Dez. 2008), S. 061132.
- [73] H. See und M. Doi. *Introduction to Polymer Physics*. Oxford University Press(UK), 1995.
- [74] J. Scott Shaffer. „Monte Carlo Simulations of Random Copolymers near Solid Surfaces“. In: *Macromolecules* 28 (1995), S. 7447–7453.
- [75] L. H. Sperling. *Introduction to Physical Polymer Science*. 4. Aufl. Wiley-Interscience, Dez. 2005.
- [76] H. Staudinger. „Über die Konstitution des Kautschuks (6. Mitteilung)“. In: *Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft (A and B Series)* 57.7 (1924), S. 1203–1208.
- [77] H. Staudinger. „Über Polymerisation“. In: *Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft (A and B Series)* 53.6 (1920), S. 1073–1085.
- [78] H. Staudinger, K. Frey und W. Starck. „Hochmolekulare Verbindungen, 9. Mitteilung: Über Poly-vinylacetat und Poly-vinylalkohol“. In: *Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft (A and B Series)* 60.8 (1927), S. 1782–1792.
- [79] Dietrich Stauffer. *How to convince others? Monte Carlo simulations of the Sznajd model*. Juli 2003.
- [80] Dietrich Stauffer und Amnon Aharony. *Introduction To Percolation Theory*. 1. Aufl. CRC, Juli 1994.
- [81] Gert Strobl. *The Physics of Polymers: Concepts for Understanding Their Structures and Behavior*. 3rd rev. and exp. ed. Springer, März 2007.
- [82] K. Sumithra, M. Brandau und E. Straube. „Adsorption and pinning of multiblock copolymers on chemically heterogeneous patterned surfaces.“ eng. In: *The Journal of Chemical Physics* 130.23 (2009), S. 234901.

- [83] K. Sumithra und E. Straube. „Adsorption and freezing of diblock copolymers on stripe-patterned surfaces: A scaling analysis“. In: *The Journal of Chemical Physics* 127.11, 114908 (2007), S. 114908.
- [84] K. Sumithra und E. Straube. „Adsorption of diblock copolymers on stripe-patterned surfaces“. In: *The Journal of Chemical Physics* 125.15, 154701 (2006), S. 154701.
- [85] Katarzyna Sznajd-Weron und Józef Sznajd. „Opinion evolution in closed community“. In: *International Journal of Modern Physics C* 11.6 (2000), S. 1157–1165.
- [86] R Development Core Team. *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. ISBN 3-900051-07-0. R Foundation for Statistical Computing. Vienna, Austria, 2009. URL: <http://www.R-project.org>.
- [87] Anita Verena Thoma. „Experimental and theoretical investigations on lipid bilayer permeation“. Diss. ETH Zürich, 2007.
- [88] Jeffrey Travers und Stanley Milgram. „An Experimental Study of the Small World Problem“. In: *Sociometry* 32.4 (1969), S. 425–443.
- [89] Steffen Trimper, Dafang Zheng und Marian Brandau. „Social networks and spreading of epidemics“. In: Hrsg. von Zoltan Gingl. Bd. 5471. 1. Maspalomas Gran Canaria Island, Spain: SPIE, 2004, S. 289–297.
- [90] Peter H. Verdier und W. H. Stockmayer. „Monte Carlo Calculations on the Dynamics of Polymers in Dilute Solution“. In: *The Journal of Chemical Physics* 36.1 (1962), S. 227–235.
- [91] Gero Vogl. *Wandern ohne Ziel: Von der Atomdiffusion zur Ausbreitung von Lebewesen und Ideen (German Edition)*. 1. Aufl. Springer, Juli 2007.
- [92] Fugao Wang und D. P. Landau. „Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States“. In: *Phys. Rev. Lett.* 86.10 (März 2001), S. 2050–2053.
- [93] Duncan J. Watts, Peter Sheridan Dodds und M. E. J. Newman. „Identity and Search in Social Networks“. In: *Science* 296.5571 (Mai 2002), S. 1302–1305.
- [94] D. J. Watts und S. H. Strogatz. „Collective dynamics of ‘small-world’ networks“. In: *Nature* 393.6684 (Juni 1998), S. 440–442.
- [95] W. Weidlich und G. Haag. *Concepts and models of a quantitative sociology*. Springer Series in Synergetics Vol. 14. Berlin: Springer, 1984.
- [96] M. E. J. Woolhouse u. a. „Heterogeneities in the transmission of infectious agents: Implications for the design of control programs“. In: *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 94.1 (1997), S. 338–342.
- [97] Knud Zabrocki. „Transport und Reaktion in Systemen mit und ohne Rückkopplung“. Diss. Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 2008.
- [98] Da-Fang Zheng u. a. „Epidemics and dimensionality in hierarchical networks“. In: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 352.2-4 (2005), S. 659–668.
- [99] Frank Schweitzer, Hrsg. *Self-Organization of Complex Structures: From Individual to Collective Dynamics*. 1. Aufl. CRC Press, Juli 1997.

- [100] Christian Stegbauer, Hrsg. *Netzwerkanalyse und Netzwerktheorie*. VS Verlag für Sozialw., Jan. 2008.
- [101] *The Oracle of Bacon*. URL: <http://oracleofbacon.org>.

## Veröffentlichungen

- [11] Marian Brandau. „Stochastic differential equations with nonlinear semigroups“. In: *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik* 82.11-12 (2002), S. 737–743.
- [12] Marian Brandau und Steffen Trimper. „Network of social groups or let’s have a party“. In: *International journal of modern physics C* 17.4 (Apr. 2006), S. 511–520.
- [72] Gunter M. Schütz, Marian Brandau und Steffen Trimper. „Exact solution of a stochastic susceptible-infectious-recovered model“. In: *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)* 78.6 (Dez. 2008), S. 061132.
- [82] K. Sumithra, M. Brandau und E. Straube. „Adsorption and pinning of multiblock copolymers on chemically heterogeneous patterned surfaces.“ eng. In: *The Journal of Chemical Physics* 130.23 (2009), S. 234901.
- [89] Steffen Trimper, Dafang Zheng und Marian Brandau. „Social networks and spreading of epidemics“. In: Hrsg. von Zoltan Gingl. Bd. 5471. 1. Maspalomas Gran Canaria Island, Spain: SPIE, 2004, S. 289–297.

## Danksagung

Hier an dieser Stelle bedanke ich mich bei all jenen Personen, die mich bei der Anfertigung dieser Arbeit unterstützt haben.

An erster Stelle ist Prof. Dr. Steffen Trimper zu nennen, der mir die Möglichkeit dazu in der Arbeitsgruppe Statistische Physik gab. Ohne dessen Unterstützung, die Zurverfügungstellung seiner Erfahrung und „physikalischen Intuition“ wäre ich nicht in der Lage gewesen, diese Arbeit anzufertigen.

Prof. Dr. Ekkehard Straube danke ich für das Überlassen seines Programmes und die Hilfestellungen bei dessen Benutzung.

Prof. Dr. Michael Schulz danke ich für die Unterstützung bei der Simulation von Epoxydharzen und bei der langen und aufwändigen Fehlersuche im Programm.

Ebenso möchte ich meinem Freund, Kommilitonen und langjährigen Kollegen Dr Knud Zabrocki für dessen fachlichen Rat und die anderweitige Unterstützung danken.

Nicht zu vergessen sind Thomas Michael und Thomas Bose, die immer nette Bürokollegen waren.

Ganz besondereren Dank möchte ich den Gutachtern für ihre Arbeit aussprechen.

Großer Dank gebührt meiner Frau Claudia für ihre umfängliche Unterstützung während der gesamten Zeit.

Mein Dank gilt auch der DFG für die finanzielle Unterstützung im Rahmen des SFB 418, durch die diese Arbeit erst möglich wurde.



**Eidesstattliche Erklärung**

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe, dass alle Stellen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß aus anderen Quellen übernommen wurden, als solche kenntlich gemacht sind und dass die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegt wurde.

Halle (Saale), den 8. Februar 2011

Marian Brandau

