

Kapitel 2

Modellbildung

Von Abel (1823) [Abe23] stammt die Integralgleichung

$$T = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_0^v \frac{F(y)}{\sqrt{v-y}} dy \quad (2.1)$$

Dort ergibt sich (2.1) beim Problem, die Gestalt eines Drahts zu finden, der so in einer vertikalen Ebenen liegt, daß eine daran befestigte Perle, ohne Reibung und unter dem Einfluß der Schwerkraft g von jedem beliebigen Punkt des Drahts in derselben Zeit T zum tiefsten Punkt des Drahts rutscht. Dabei wird die Bogenlänge σ in Abhängigkeit vom Draht durch die Beziehung

$$d\sigma = F(y) dy$$

ausgedrückt.

Dieses Problem heißt *Problem der Tautochrone* und es zeigt sich, daß der Draht die Gestalt einer Zykloide hat.

Die Bedeutung der Abelschen Integralgleichung erster Art

$$\frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^x (x-t)^{\alpha-1} u(t) dt = g(x), \quad x > 0, \quad 0 < \alpha < 1 \quad (2.2)$$

und ihrer Verallgemeinerung

$$\frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^x (x-t)^{\alpha-1} K(x,t) u(t) dt = g(x), \quad x > 0, \quad 0 < \alpha < 1 \quad (2.3)$$

ergibt sich aus einer Vielzahl von Anwendungen, deren Modell sie ist. Eine umfangreiche Liste von ausführlich dargestellten Anwendungsbeispielen findet man in [GV91, Gorb]. Im folgenden Abschnitt wird als Anwendung die Stereologie kugelförmiger Partikel zugrundegelegt.

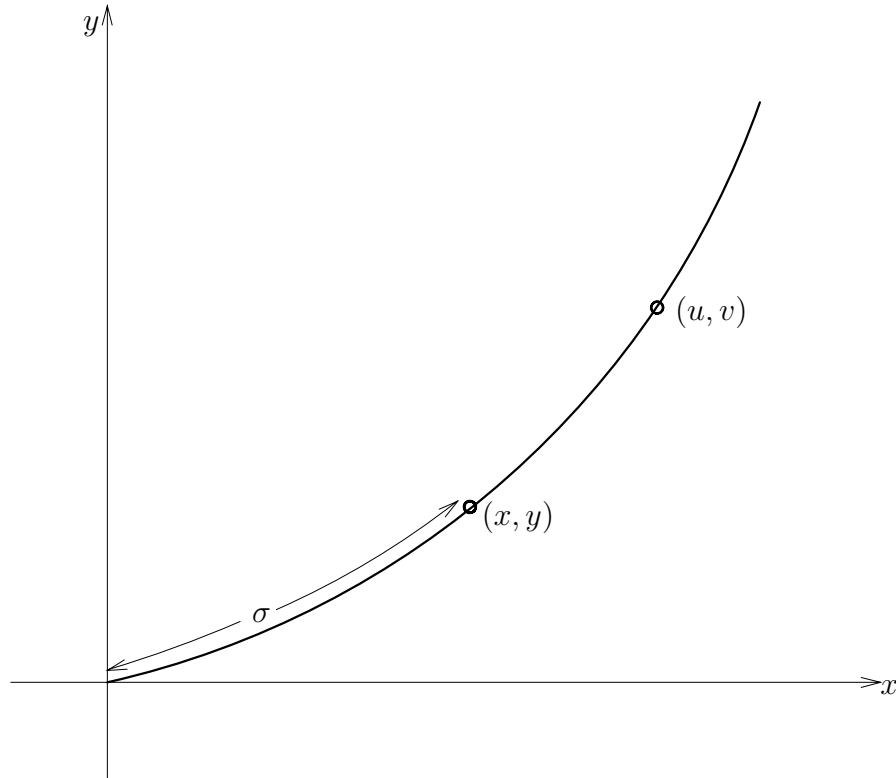


Abbildung 2.1:

2.1 Das Stereologie-Modell für kugelförmige Partikel

Viele Fragestellungen der Kristallographie, Histologie, Elektronenmikroskopie, Metallographie, Sediment-Petrographie und verwandter Disziplinen führen auf das Problem der Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Radien sphärischer Partikel in einem festen undurchsichtigen Medium aus der Verteilung der Radien ihrer Schnittkreise mit einer zufälligen Ebene.

Zahlreiche Autoren haben zum Teil unabhängig voneinander für dieses Problem ein Modell entwickelt, das auf die Lösung einer Abelschen Integralgleichung erster Art führt. Die zwei grundlegenden Arbeiten an diesem Modell stammen von Wicksell aus den Jahren 1925 und 1926 [Wic25, Wic26]. Dort liegt eine medizinische Anwendung vor. In Gewebeproben bestimmter Organe sollen Zellanomalien identifiziert werden. Dort sind Kugeln und Ellipsoide

als Partikelform zugelassen.

In [Sch31] wird das Modell für ein Problem aus der Kristallographie, wo die Schliffebene eines undurchsichtigen Körpers beobachtbar ist, beschrieben. In [Kru35] wird die zerstörungsfreie Untersuchung von Sedimenten in alten Gesteinen behandelt. In [Ful53] wird ein Problem aus der Metallographie, die Untersuchung der Mikrostruktur von Metallen behandelt. Dort werden auch zylinderförmige Partikel untersucht. Anderson und Calligaro untersuchen in [AC81] die Brechungseigenschaften optischer Fasern durch sogenanntes non-destructive testing und benutzen das Stereologie-Modell.

Eine umfangreiche Liste von ausführlich dargestellten Anwendungsbeispielen des Stereologie-Modells findet man in [GV91, Gorb]. Für die mathematische Modellierung sind besonders das Buch von Kendall und Moran über geometrische Wahrscheinlichkeitstheorie [KM63] und die Arbeit von Reid [Rei55] grundlegend.

Wir wollen jetzt das Stereologie-Modell darstellen.

In einem undurchsichtigen Körper unbegrenzter Dimension seien kugelförmige Partikel zufällig verteilt. Sei $0 < r \leq R < \infty$ oder $0 < r < R = \infty$, das heißt, der Radius 0 ist nicht zugelassen. Die Radien r der Kugeln genügen einer *unbekannten* stückweise stetigen Wahrscheinlichkeitsdichte $f(r)$, so daß gilt:

$$f(r) \geq 0, \quad \int_0^R f(r) dr = 1. \quad (2.4)$$

Wir setzen von den Kugeln darüber hinaus voraus, daß sie sich nicht *überlappen* (s. Abbildung 2.2), das heißt, daß der mittlere Abstand zwischen den Kugelmittelpunkten wesentlich größer ist als der mittlere Radius

$$\bar{r} = \int_0^R r f(r) dr. \quad (2.5)$$

Mit λ wird die mittlere Anzahl von Kugelmittelpunkten in einem Einheitsvolumen bezeichnet.

Sei E eine zufällige Ebene, die mit Wahrscheinlichkeit 1 mindestens eine Kugel schneidet. Dann ist

$f(r) dr$ eine Näherung an die Wahrscheinlichkeit, daß der tatsäch-

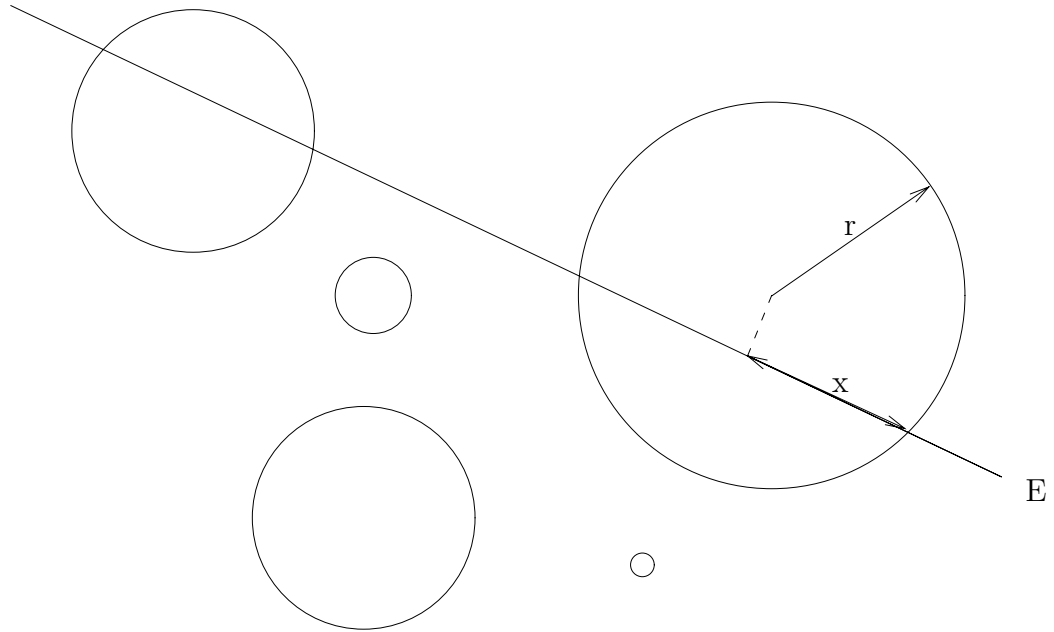


Abbildung 2.2:

$\lambda \cdot 2r \cdot f(r) dr$ liche Radius einer Kugel im Intervall $[r + r dr)$ liegt,
 die erwartete Anzahl von Kugeln mit tatsächlichem Radius
 in $[r, r + dr)$, die von E in einem Einheitsflächenstück \bar{E}
 geschnitten werden.

Bemerkung 2.1.1. Wir haben vorausgesetzt, daß die gesuchte Dichte der Kugelverteilung stückweise stetig ist. In vielen Anwendungen ist es sinnvoll mit diskreten Verteilungen zu arbeiten, wenn etwa nur bestimmte feste Partikelgrößen vorkommen können oder durch sogenannte Clusterbildung Partikel mit geringen Größenunterschieden zusammengefaßt werden. In diesem Fall muß man für die zugehörigen Dichten, für die das Modell entwickelt ist, *verallgemeinerte Funktionen* im Sinne von Gelfand und Shilov (s. [GS64]) zulassen; etwa die Summe einer integrierbaren Funktion und einer linearen Kombination von Dirac'schen δ -Funktionen. Arbeitet man allerdings mit verallgemeinerten Funktionen, so schreibt man statt $\int f(r) dr$, $\int dF(r)$, wobei F die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Radien ist.

Wir betrachten jetzt die Kugeln, die von E geschnitten werden und bezeichnen mit $f^*(r)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte dieser Radien. Es ist

$$f^*(r) = Kr f(r), \quad (2.6)$$

mit der Proportionalitätskonstante $K \in \mathbb{R}^{\geq 0}$.

Da aber $\int_0^R f^*(r) dr = 1$ gilt, erhalten wir nach einer Integration von (2.6)

$$K \int_0^R r f(r) dr = \int_0^R f^*(r) dr = 1$$

Daher folgt aus (2.5)

$$f^*(r) = \frac{r f(r)}{\bar{r}}. \quad (2.7)$$

Wir legen nun eine Kugel mit Radius r , die von der zufälligen Ebene E in dem betrachteten Einheitsflächenstück \bar{E} geschnitten wird, in ein Koordinatensystem, so daß der Kugelmittelpunkt im Ursprung liegt und die Ebene E parallel zur xz -Ebene ist.

Dann ist (s. Abbildung 2.3)

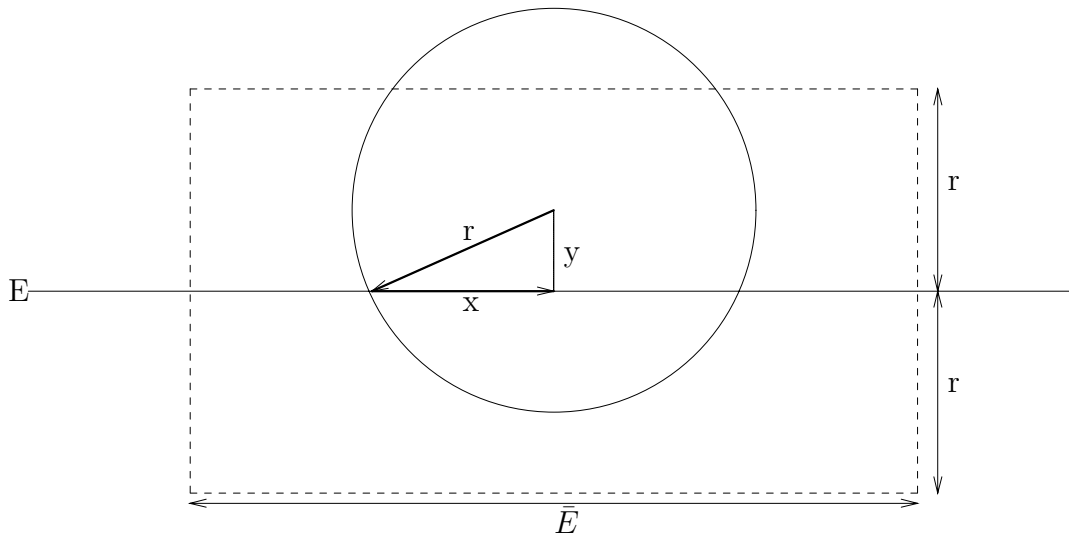


Abbildung 2.3:

$$y = \sqrt{r^2 - x^2}$$

und damit

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{x}{\sqrt{r^2 - x^2}}.$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß der Mittelpunkt dieser Kugel die Entfernung y von E hat, ist stückweise konstant

$$\begin{cases} \frac{1}{r}, & \text{für } 0 \leq y \leq r \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.8)$$

Eine Kugel, die von E geschnitten wird, erzeugt in \bar{E} einen Schnittkreis. Die Wahrscheinlichkeit, daß eine Kugel mit *tatsächlichem* Radius r in \bar{E} den *scheinbaren* Radius x erzeugt, ist nach diesen Vorbereitungen

$$\frac{1}{r} \left| \frac{dy}{dx} \right| = \frac{1}{r} \frac{x}{\sqrt{r^2 - x^2}}, \quad 0 \leq x \leq r. \quad (2.9)$$

Um die Dichte g der Verteilung der scheinbaren Radien x im Einheitsflächenstück \bar{E} zu ermitteln, wird (2.9) mit $f^*(r)$ multipliziert und im Bereich $x \leq r \leq R$ integriert, da nur Kugeln mit Radius $r \geq x$ den scheinbaren Radius x erzeugen können. Man erhält unter Berücksichtigung von (2.7):

$$\begin{aligned} g(x) &= \int_x^R f^*(r) \frac{1}{r} \frac{x}{\sqrt{r^2 - x^2}} dr \\ &\stackrel{(2.7)}{=} \frac{x}{\bar{r}} \int_x^R \frac{f(r)}{\sqrt{r^2 - x^2}} dr, \quad 0 \leq x \leq R. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Wir transformieren nun die Gleichung (2.10), indem wir anstelle eines *tatsächlichen* Radius r den *Flächeninhalt* A eines Äquatorschnittes der Kugel verwenden, statt des *scheinbaren* Radius x die Fläche a des Schnittkreises.

Seien

ϕ Dichte der Äquatorschnittflächeninhalte der Kugeln,

φ Dichte der Flächeninhalte der Schnittkreise in E .

Wegen $A = \pi r^2$ und $a = \pi x^2$ besteht zwischen f und ϕ bzw. g und φ der Zusammenhang

$$f(r) = 2\pi r \phi(A) \quad (2.11)$$

und

$$g(x) = 2\pi x\varphi(a), \quad (2.12)$$

Es gilt nämlich für $\tilde{A} = \pi\tilde{r}^2$

$$\int_0^{\tilde{r}} f(r) dr = P(r \leq \tilde{r}) = P(A \leq \tilde{A}) = \int_0^{\tilde{A}} \phi(A) dA = \int_0^{\tilde{r}} \phi(\pi r^2) 2\pi r dr. \quad (2.13)$$

Da f und ϕ stückweise stetige, nichtnegative Funktionen sind, folgt (2.11). Analog wird (2.12) gezeigt.

Mit der Substitution $A = \pi r^2$ und $a = \pi x^2$ geht (2.10) über in

$$\frac{g(x)}{x} = \frac{1}{2\tilde{r}} \int_a^{\pi R^2} \frac{1}{\sqrt{A-a}} f\left(\sqrt{\frac{A}{\pi}}\right) \frac{1}{\sqrt{A}} dA$$

und mit (2.11) und (2.12) in

$$\varphi(a) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\tilde{r}}} \int_a^{\pi R^2} \frac{1}{\sqrt{A-a}} \phi(A) dA, \quad 0 \leq a \leq \pi R^2. \quad (2.14)$$

Somit ist, bis auf eine geeignete Skalierung, die unbekannte Dichte der Verteilung der Äquatorschnittflächen der tatsächlichen Kugeln die Lösung einer klassischen Abelschen Integralgleichung erster Art mit der beobachtbaren Dichte der Schnittflächen in der Schnittebene E als rechte Seite.

Neben der Modellierung über die Radien oder über die Flächeninhalte der durch eine zufällige Ebene E gegebenen Schnittkreise kann die Verteilung der Kugelradien auch aus den Längen der *Sehnen* bestimmt werden, die eine *zufällige Gerade* in der Ebene E aus den Schnittkreisen ausschneidet. Diese Parametrisierungsmöglichkeit wird in [Rei55] beschrieben.

Häufig werden in Anwendungen nur bestimmte Größen (etwa mittlerer Radius, mittlere Oberfläche, mittleres Volumen, Streuung usw.) der Kugelverteilung gewünscht. Diese lassen sich leicht aus den Potenzmomenten

$$M_k := \int_0^\infty r^k f(r) dr, \quad m_k := \int_0^\infty r^k g(r) dr, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.15)$$

berechnen.

Die Berechnung von Momenten findet man zum Beispiel in [AC81] und [And86]. Die Momente haben folgende anschauliche Bedeutung:

$M_1 = \bar{r}$ ist der mittlere Radius der tatsächlichen Kugeln,
 $4\pi M_2$ ist die mittlere Oberfläche der tatsächlichen Kugeln und damit proportional zur chemischen oder physikalischen Aktivität der Partikel,
 $\frac{4}{3}\pi M_3$ ist das mittlere Volumen der Kugeln, also für ein homogenes Material proportional zur Massendichte.

Eine in der Literatur als Tomatensalat-Problem bekannte Variante des Stereologie-Modells liegt vor, wenn statt des Schnittes durch das Material eine Schnittscheibe positiver Dicke zur Verfügung steht. Wir werden nun diese Variante hier vorstellen, die man auch in [Bac58, Bac59, Gol67] findet. Aus einem durchsichtigen Medium, in dem undurchsichtige kugelförmige Partikel eingelagert sind, wird auf's Geratewohl eine Scheibe herausgeschnitten, die ein Paar von parallelen Flächen im Abstand $2s > 0$ besitzt. Diese Schnittscheibe wird senkrecht zu den Schnittflächen durchstrahlt. Dann beobachtet man in der Projektionsebene (vgl. Abbildung 2.4)

- von Kugeln, deren Mittelpunkt innerhalb der Schnittscheibe liegt, den tatsächlichen Radius oder Äquatorschnitt,
- von Kugeln, deren Mittelpunkt nicht innerhalb der Schnittscheibe liegt, den größten Schnittkreis der angeschnittenen Kugelschichten oder -kapfen.

Die Schnittscheibe wird dabei als so dünn vorausgesetzt, daß *Überlappungen* der projizierten Schnitte vernachlässigt werden können. Wenn keine Mittelpunkte im Innern der Schicht liegen, entspricht die Situation einem Schnitt durch das Material ($s = 0$). Man erhält dann also mit \bar{r} , wie in (2.5) nach (2.10), für die Dichte f der tatsächlichen Radien und die Dichte g der scheinbaren Radien die Integralgleichung

$$g(x) = \frac{x}{\bar{r}} \int_x^R \frac{f(r)}{\sqrt{r^2 - x^2}} dr, \quad 0 \leq x \leq R.$$

Zusätzlich sind die Kugeln mit Mittelpunkten innerhalb der Schnittscheibe zu berücksichtigen. Die mittlere Anzahl von Kugeln in einem Einheitsvolumen, deren Mittelpunkte in der Schnittscheibe der Dicke $2s$ liegen und deren Radien im Intervall $[r, r + dr)$ liegen, beträgt

$$2s\lambda f(r) dr.$$

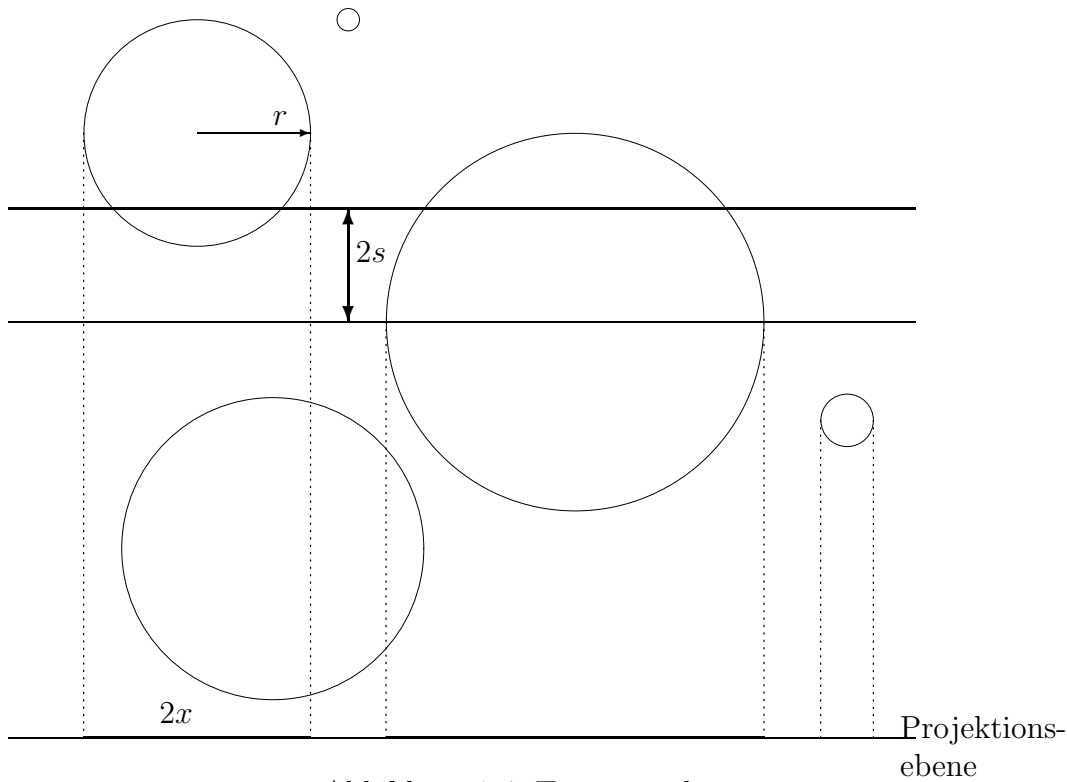


Abbildung 2.4: Tomatensalat

Für die Dichte g der scheinbaren Radien r der Schnittkreise in der Projektionsebene erhält man damit zusammen die Goldsmith-Gleichung

$$(s + \bar{r})g(x) = sf(x) + x \int_x^R \frac{f(r)}{\sqrt{r^2 - x^2}} dr, \quad 0 \leq x \leq R, \quad s > 0. \quad (2.16)$$

Mit den Transformationen (2.11) und (2.12) und der Substitution $A = \pi r^2$ bzw. $a = \pi x^2$ geht diese Gleichung über in die Bach-Gleichung

$$(s + \bar{r})\varphi(a) = s\phi(a) + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_a^{\pi R^2} \frac{\phi(A)}{\sqrt{A - a}} dA, \quad 0 \leq a \leq \pi R^2, \quad s > 0. \quad (2.17)$$

Die Dichte ϕ der Äquatorschnittflächen der tatsächlichen Kugeln hängt also wiederum, bis auf eine geeignete Skalierung, von den beobachteten Dichten φ der projizierten Schnittkreise über eine Abelsche Integralgleichung

zweiter Art ab. Damit ist das Tomatensalat-Problem gut gestellt. Der enge Zusammenhang zwischen dem Tomatensalt-Problem und dem klassischen Stereologie-Problem ist dadurch offensichtlich, daß für $s \rightarrow 0$ die Gleichung (2.17) gegen (2.14) strebt.

Aus der Beziehung

$$\int_{[0,\epsilon)} \lambda \cdot 2r\delta(r) dr = 0,$$

für alle $\epsilon > 0$ folgt, daß Kugeln mit Radius 0, also Punkte, mit der Wahrscheinlichkeit 0 von einer zufälligen Ebene geschnitten werden. Daher ist es mathematisch sinnvoll im klassischen Stereologie-Modell ($s = 0$) Kugeln vom Radius 0 auszuschließen.

Weiteres hierzu findet man in [Gorb].