

# Ein gutes, zusammengedrücktes, gerütteltes, überfließendes Maß

## Ansprache zur Ehrenpromotion am 19. Oktober 2001

Dietrich Stoyan

Magnifizenz! Spektabilität!

Liebe Kommilitonen, Kollegen, Freunde und Verwandte!

Meine Damen und Herren!

Ich bin sehr glücklich und stolz, nun Ehrendoktor der großen, angesehenen TU Dresden zu sein und danke der Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften und dem Senat der TU Dresden für diese große Auszeichnung. Es ist eine ganz besondere Ehre, dort ausgezeichnet zu werden, wo man ausgebildet wurde; das ist ja so etwas wie eine Anerkennung als Prophet im eigenen Lande. Ich bin Magnifizenz Achim Mehlhorn und Spektabilität Volker Nollau sehr dankbar für die so freundlichen und lobenden Worte über meine Person.

Gestatten Sie mir bitte zunächst einige persönliche Bemerkungen.

Wie schon gesagt, habe ich von 1959 bis 1964 hier in Dresden studiert. Die damalige TH wollte 1959 die Zahl der Mathematikstudenten drastisch erhöhen und annoncierte daher Anfang September im „Neuen Deutschland“, der damals wichtigsten Tageszeitung der DDR. Meine Mutter - sie ist heute hier anwesend - las die Anzeige, ich schrieb nach Dresden, und meine Bewerbung wurde akzeptiert. So entging ich einem sinnlosen praktischen Jahr in einem Halberstädter Industriebetrieb und kam nicht, wie ursprünglich geplant, an die Jenaer Universität, an der aber später meine Kinder studierten. Insgesamt 86 waren wir damals im Herbst 1959, was übrigens zeigt, dass Zeitungsanzeigen zur Studienwerbung sinnvoll sein können, da z.B. auch Spektabilität Nollau auf ähnliche Art und Weise nach Dresden kam. Wir waren ein bunter Haufen, kamen aus allen Teilen der DDR und aus dem Ausland und wiesen auch in kaderpolitischer Hinsicht ein breites Spektrum auf. So wurden wir sicherlich ein sehr interessanter Mathematik-Jahrgang der TU Dresden, und es ist auch kein Wunder, dass darunter die für mich passende Frau war.

Lang ist es her, dass wir Studenten waren. Die Gebäude am Zelleschen Weg waren damals neu, und zwischen dem Dresdner Hauptbahnhof und dem Altmarkt waren Wiesen, auf denen Schafe weideten.

Unser Jahrgang hatte Glück mit seinen akademischen Lehrern, wir genossen eine sehr gute Ausbildung im Stil einer klassischen TH. Mich haben die Professoren Paul Heinz Müller und Max Landsberg sowie mein Diplomarbeitsbetreuer, der spätere Professor Thomas Riedrich, geprägt wie auch die allgemeine Atmosphäre damals in Dresden. Trotzdem blieb ich nach dem Studium nicht in Dresden, weil es damals für mich aussichtslos war, dort eine Wohnung zu bekommen und weil ich an meiner Befähigung als Lehrender zweifelte.

So ging ich meinen Weg in Freiberg, unterstützt von meiner Frau und toleriert von rücksichtsvollen Vorgesetzten. Meine ersten mathematischen Arbeiten erschienen in der Wiss. Z. TUD und der ZAMM, die damals in Dresden ihre Redaktion hatte. Beide Dokortitel erwarb ich als Externer, neben meiner Berufsarbeit. Das heißt, es gab keine Betreuer, Freistellungen oder Stipendien. Da bin ich nun glücklich, ohne eine weitere Dissertation schreiben zu müssen, Doktor meiner alten alma mater zu werden und so doch noch das zu erreichen, was in den 60er Jahren nicht geschah.

In meinem wissenschaftlichen Vortrag werde ich über ein schwieriges ungelöstes Problem im Grenzbereich von Wahrscheinlichkeitstheorie, Statistik und Geometrie sprechen. Ich werde den Gebrauch von Formelzeichen weitgehend vermeiden und mich auf die Anschauung und das gesprochene Wort verlassen.

(Bild 1)

Der Titel meiner Rede sagt Ihnen vielleicht schon, dass es um Packungen oder Schüttungen geht. Nach dem Evangelisten Lukas benutzte Jesus das Bild eines wohlgefüllten Maßes Getreide, um zu zeigen, wie großzügig, jeden Einspruch ausschließend, Gott misst. (Bild 2) Ich will hier bei dem in der Bibel so anschaulich beschriebenen Bild bleiben und mich mit Packungen beschäftigen.

Das dritte Bild zeigt eine Packung von Maiskörnern. Offensichtlich spielt dabei der Zufall eine gewisse Rolle – wo kommt welches Korn hin? – und natürlich ist die Geometrie des Behälters und der Körner von Bedeutung. (Bild 3)

Trotz der Unterschiede im Kleinen sind aber wesentliche Parameter solcher Packungen konstant. Würden wir den Mais mehrmals einfüllen und jedesmal wiegen, so kämen wir auf dasselbe Gewicht. Ebenso ist der Volumenanteil der Maiskörner fast konstant – jedesmal wird der Behälter etwa 60 % Mais und 40 % Luft enthalten.

Mit solchen körnigen Stoffen haben wir alle im Haushalt oft zu tun, denken wir an Zucker, Mehr oder Megaperls-Waschmittel. Vielfach misst man sie nicht mit der Waage, sondern mittels Teelöffeln oder Messbehältern.

Aber auch in Wirtschaft und Technik spielen solche Stoffe eine wichtige Rolle, ich nenne nur granulare Medien wie Sand oder Schüttgüter. In vielen Fällen sind die einzelnen Körner nicht mehr frei beweglich, sondern untereinander oder in einer Matrix fest verbunden. Metallpulver werden gesintert (Bild 4), in Beton werden die Sandkörner durch den Zement zusammengehalten. Witzigerweise kann auch Porenbeton (Bild 5) geometrisch so gesehen werden – allerdings muss man hier von einer Packung von Gasblasen

ausgehen. Ähnlich ist die Struktur von Brot, Zwieback oder Kuchen.

Aus vielerlei Gründen interessiert man sich für die Mikrogeometrie solcher Stoffe. Man setzt also diverse Messgeräte ein, unterstützt durch Mikroskope oder Röntgenstrahlen. Solche Messungen haben aber nur Sinn, wenn sie auf der Grundlage von mathematischen Modellen ausgewertet werden. Die zugehörige mathematische Theorie ist die stochastische Geometrie, die im gegebenen Fall mit markierten Punktprozessen arbeitet. Dabei sind die Kornmittelpunkte die „Punkte“ und die Durchmesser, Volumina oder andere Größen die „Marken“. Joseph Mecke (Bild 6), einer der Väter der stochastischen Geometrie, war es, der mich diese Art der Modellierung lehrte, mit der wir beide, und später viele andere, erfolgreich waren.

Im Folgenden nehme ich vereinfachend an, dass die gepackten Objekte Kugeln sind. Das ist in vielen Fällen eine realistische Annahme. Für eine Weile setze ich sogar voraus, dass die Kugeln gleich groß sind.

Wohl jeder von uns, der gleich große Kugeln, wie Apfelsinen oder Kanonenkugeln, nacheinander packen würde, würde das so tun, wie auf dem nächsten Bild (Bild 7) dargestellt. Würde man das unbegrenzt fortsetzen, käme man auf eine sehr dichte Packung, bei der die Kugeln 74 % des Volumens einnehmen. Die von Kepler formulierte Hypothese, dass der Wert von  $\pi/(\sqrt{18}) = 0,7405$  durch keine Packung überboten werden kann, wurde seit langem von allen Physikern und Ingenieuren als wahr angesehen. Einer der ganz großen Mathematiker, David Hilbert, hatte 1900 den Beweis als das 18. von 23 bedeutenden Problemen der Mathematik formuliert. Dementsprechend wurde in den Medien darüber berichtet, als 1991 Hsiang einen zweifelhaften und 1998 Hales einen bis jetzt für korrekt angesehenen, schrecklich langen Beweis geliefert hat.

Gehen wir aber nun in das Gebiet des Zufalls, in die Stochastik! Zufällige Kugelpackungen stellen mathematische Probleme, die ebenfalls sehr schwierig, für die Praxis aber ungleich wichtiger sind. Es geht dabei um den exakten Wert des Volumenanteils und um verschiedene Größen, die die Lage der Kugeln zueinander beschreiben. Dahinter steckt die bisher ungelöste Frage, wie denn „die“ zufällige dichte Kugelpackung eigentlich mathematisch definiert ist, und auch mein Vortrag gibt darauf keine Antwort.

Der sehr vielseitige englische Physiker Bernal hatte in den 60er Jahren die Hypothese aufgestellt, dass Flüssigkeiten und metallische Gläser näherungsweise eine Struktur wie zufällige Kugelpackungen besitzen, wobei an die Stelle der Kugeln Moleküle treten. Zu ihrem Nachweis benötigte er Kenntnisse über Kugelpackungen, und als Physiker wählte er den Weg des Experiments. Er füllte Stahlkugeln in Behälter ein, schüttelte und verdichtete sie. Seine Messungen ergaben, dass es zwei Typen von Kugelpackungen gibt, wobei die dichtere, die „dichte zufällige Kugelpackung“, einen Volumenanteil von 0,64 hat. Witzige Leute fanden dafür den Ausdruck  $2/\pi$ , ohne die Spur eines mathematischen Beweises. Ferner ermittelte Bernal die Paarkorrelationsfunktion, vgl. Bild 8. Diese Funktion, die auch in ganz anderen Zusammenhängen wichtig ist, beschreibt statistisch die räumliche Variabilität von Punktsystemen, im Fall von Kugelsystemen die des Systems der Kugelmittelpunkte; ihre Maxima hängen mit besonders häufig auf-

tretenden Abständen der Kugelmittelpunkte zusammen.

Ich möchte sie kurz im Sinne der schon im Gymnasium üblichen Kurvendiskussionen kommentieren. Eine klare Sache scheint das 1. Maximum oder der Pol der Paarkorrelationsfunktion bei  $r = 1$  zu sein. Es hängt mit den Kugeln zusammen, die ganz dicht zusammen liegen. Dabei ist die Situation aber recht diffizil. Es gibt erstens eine  $\delta$ -Funktionskomponente, die mit den echten Berührungen zusammenhängt und außerdem vermutlich noch einen Pol, der zu extrem kurzen Kugelabständen gehört. Interessant ist die Aufspaltung des 2. Maximums in zwei Teile, in ein kleines Maximum bei  $r = \sqrt{3}$  und ein großes, scharfes Maximum bei  $r = 2$ .

Die Paarkorrelationsfunktion ist deswegen von physikalischem Interesse, weil ihre Fouriertransformierte für mikroskopisch kleine Kugelsysteme durch Kleinwinkelstreuung, also ein Messverfahren, das Röntgenstrahlen benutzt, ermittelt werden kann.

Seit den 70er Jahren werden Hartkugelsysteme auf Computern simuliert. Die Bilder 9 und 10 zeigen die Ergebnisse zweier solcher Simulationen, einmal für gleich große Kugeln und einmal für Kugeln mit zufällig gewählten Durchmessern. Von diesen Kugeln hat man alle Parameter – die  $(x, y, z)$ -Koordinaten der Mittelpunkte und die Durchmesser – im Speicher, und man kann somit alle statistischen Untersuchungen mit Leichtigkeit ausführen.

Es gibt Simulationsalgorithmen, die das Packen von Kugeln in einem Behälter nachahmen. Die sind nicht besonders gut, wenn sie nicht auch das Rütteln und Verdichten nachahmen. Die wirklich guten Algorithmen, und auch der, mit dem meine Bilder erzeugt worden sind, benutzen aber Prinzipien, die mit der Idee des Packens gar nichts zu tun haben. Daher ist eine statistische Testung notwendig, also eine Prüfung, ob sich die simulierten Packungen wirklich so verhalten wie reale. Man vergleicht insbesondere die Paarkorrelationsfunktion für die simulierte Kugelstruktur mit empirisch bekannten oder als präzise anerkannten Kurven.

Dabei ist nun der räumliche Statistiker gefragt, der möglichst genaue Schätzungen der Paarkorrelationsfunktion liefern soll.

1980 kam Joachim Ohser (Bild 11) zu mir und servierte mir seinen ersten Schätzer einer verwandten Größe. Wir entwickelten das weiter - der Schätzer heißt heute Translationskorrektur-Schätzer -, und wir wussten damals nicht, dass Physiker schon einen ähnlichen Schätzer kannten und konnten nicht ahnen, dass uns das Problem bis heute beschäftigen würde. Noch im vergangenen Jahr erschien eine Arbeit von meiner Frau und mir, in der wir systematisch das Problem der Schätzung von Paarkorrelationsfunktionen studiert haben, vielleicht nun doch zum letzten Male.

Hat man nun eine gut simulierte Kugelpackung, dann kann man mit ihr alles mögliche anstellen. Zum Beispiel kann man die Kugeln als Sandkörner ansehen und das Strömen einer Flüssigkeit durch das Porensystem simulieren. Oder die Kugeln als zu zerkleinerte Teilchen ansehen und ihr Verhalten bei äußerer Last untersuchen.

Leider ist in den Anwendungen die Datensituation oft eine viel schlechtere als bei

Simulationen oder bei der Anwendung der Computertomographie, die ja auch dreidimensionale Daten liefert. Oft, z.B. bei der Untersuchung metallischer und keramischer Werkstoffe, liegen nur Bilder ebener Schnitte vor, wie auf dem Bild 12 gezeigt. Von den geschnittenen Kugeln liegen dann nur Schnittkreise vor, und man hat keine Chance, für die einzelnen Kugeln ihre Durchmesser zu ermitteln. Es gibt aber eine statistische Methode, genannt Stereologie, die hier weiterhilft. 1981 habe ich zusammen mit meinem damaligen Doktoranden Karl-Heinz Hanisch (Bild 13) eine Methode entwickelt, um aus ebenen Schnitten die Paarkorrelationsfunktion der Kugelmittelpunkte zu ermitteln. Die Idee ist ganz natürlich: Man muss die Paarkorrelationsfunktion der Schnittkreismittelpunkte statistisch bestimmen und dann eine Integralgleichung lösen, die beide Funktionen enthält, die gesuchte und die statistisch ermittelte. Das ist wichtig in Situationen, in denen man nicht sicher ist, dass eine Packung gleich großer Kugeln vorliegt und man die wahre Struktur erforschen möchte. Wir haben damals die Integralgleichung numerisch gelöst und uns nicht weiter um sie gekümmert. Zwei Physiker aus St. Petersburg haben voriges Jahr eine Arbeit publiziert, die ihre exakte Lösung enthält, die allerdings sehr kompliziert ist.

Zum Schluss noch einige Bemerkungen zu Packungen aus nicht kugelförmigen Körnern. Auf Bild 14 ist zunächst eine dichte zufällige Packung von Ellipsoiden dargestellt. Die haben wir einfach durch affine Transformation einer dichten zufälligen Kugelpackung erhalten. Hier ist der Volumenanteil also wieder 64%. (Übrigens ist das Problem der dichten deterministischen Packung von Ellipsoiden mathematisch noch ungelöst.) Das Bild 15 zeigt zwei weitere Systeme von Ellipsoiden, die durch Simulation erhalten worden sind. Für die Kenner sei gesagt, dass es sich um Realisierungen von Gibbs-Prozessen handelt, die mittels molekulardynamischer Simulation erhalten worden sind. Im Fall der größeren Packungsdichte stellt sich von allein, der länglichen Form der Körner entsprechend, eine Paralleltätstendenz ein. Die würden wir auch bei verdichteten Packungen von Getreidekörnern beobachten, und wir kennen sie schon von Bild 14 her. Der Volumenanteil dieser Packung beträgt allerdings nur 0,47.

Der Grad der Parallelität kann statistisch mit Hilfe der Markenkorrelationsfunktionen beschrieben werden. Bild 16 zeigt diese Funktionen für den Fall der Korrelation der Richtungen der Hauptachsen der Ellipioide. Die erste Kurve quantifiziert die in der lockeren Packung schnell eintretende Unabhängigkeit der Orientierungen, während die zweite die anhaltende Parallelität auch bei größeren Abständen verdeutlicht.

Bemerkenswerte Effekte beobachtet man bei der Packung polyedrischer Körner. Eine Doktorandin in Freiberg stellte kürzlich Baustoffproben mit Körnung in einer Zementmatrix mit Körnungsanteilen von 50, 55 und 60 % her, vgl. Bild 17. Es ergab sich überraschender Weise die maximale Festigkeit bei 55 % (Bild 18a). Wir haben daraufhin die drei zugehörigen Paarkorrelationsfunktionen der Teilchenzentren statistisch ermittelt. Siehe da, sie zeigten für 55 % den höchsten Grad an Homogenität an, vgl. Bild 18b. Damit hätten wir eigentlich zufrieden sein können, da nämlich bekannt ist, dass die Festigkeit vieler Werkstoffe mit dem Grad der Homogenität ihrer Mikrostruktur wächst. Aber wir wollten es genau wissen und haben daher den Versuch mit kugelförmigen

Teilchen wiederholt. Hier ist es klar, dass der Grad der Homogenität mit wachsendem Volumenanteil der Kugeln ansteigt (Bild 18c). Und tatsächlich konnten wir den erwarteten Effekt beobachten, dass nämlich die Festigkeit im Fall kugelförmiger Teilchen wirklich fast linear mit dem Volumenanteil ansteigt, vgl. Bild 18d.

Meine Damen und Herren!

Ich habe versucht, Ihnen einen Eindruck vom Denken eines räumlichen Statistikers zu geben. Vielleicht konnten Sie spüren, dass die Arbeit eines Statistikers interessant, sogar spannend sein kann und mitunter Spaß macht. Sie haben gesehen, wie ein konkretes Problem aus dem Alltagsleben sich in ein schwieriges mathematisch-statistisches Problem verwandelt hat, das noch vielen Mathematikern, Naturwissenschaftlern und Ingenieuren zu denken geben wird.

Ich danke Ihnen für Ihre Aufmerksamkeit und Geduld und schließe, wie es sich für einen Freiburger Bergakademisten gehört, mit

„Glück auf!“