

# **Projekt Chemisches Rauschen**

Anja Seegebrecht, Julia Kirchner

Wintersemester 2015-2016

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2 Radioaktiver Zerfall</b>	<b>3</b>
2.1 Einleitung . . . . .	3
2.2 Differentialgleichung . . . . .	3
2.3 Übergangsrate . . . . .	4
2.4 Simulation . . . . .	4
2.5 Vergleich und Fazit . . . . .	5
<b>3 Brusselatormodell</b>	<b>6</b>
3.1 Einleitung . . . . .	6
3.2 Differentialgleichungen . . . . .	6
3.3 Übergangsraten . . . . .	6
3.4 Erste Simulation . . . . .	7
3.5 Inverse Konzentration $\alpha$ und Verhältnis $p$ . . . . .	8
3.6 Zweite Simulation . . . . .	8
3.7 Nachbetrachtung . . . . .	12
<b>4 Wichtige Befehle in Python</b>	<b>14</b>
<b>5 Quellenverzeichnis</b>	<b>15</b>

# 1 Einleitung

In unserem Projekt „Chemisches Rauschen“ soll es um die stochastische Simulation chemischer Reaktionen gehen. Dies geschieht mit Hilfe des Gillespie Algorithmus. Es werden hauptsächlich zwei Beispiele aufgeführt, in denen das Prinzip verwendet wird.

Im ersten Beispiel des radioaktiven Zerfalls wird der stochastische Ansatz von Gillespie umgesetzt und mit dem deterministischen Ansatz verglichen. Im zweiten Beispiel wird der Brusselator, das Modell eines chemischen Oszillators, untersucht.

## 2 Radioaktiver Zerfall

### 2.1 Einleitung

Beim radioaktiven Zerfall wandeln sich Kerne eines Elements A unabhängig voneinander in Kerne eines Elements B um. Dabei ist die Reaktionsrate  $k_0$  die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Kern des Elements A zerfällt. Für einen einzelnen Kern kann nicht festgestellt werden, nach welcher Zeit er zerfällt. Stattdessen untersucht man das Verhalten aller Kerne in einem Zeitintervall. Auf diese Weise kann man sagen, wie viele Kerne durchschnittlich zu einer bestimmten Zeit zerfallen sind.

### 2.2 Differentialgleichung

Bekannt ist, dass der Quotient  $dN(t)/dt$  proportional zu  $N(t)$  ist. Der Proportionalitätsfaktor ist durch die Reaktionsrate  $k_0$  gegeben. Somit erhält man die Differentialgleichung für die Anzahl  $N_A$  des radioaktiven Stoffs:

$$\frac{dN_A(t)}{dt} = -k_0 \cdot N_A(t) \text{ bzw. } dN_A(t) = -k_0 \cdot N_A(t) \cdot dt.$$

Da das Volumen sich während der Reaktionen nicht verändert, lautet die Differentialgleichung für die Konzentration  $a$  dementsprechend

$$d\frac{N_A}{V}(t) = -k_0 \cdot \frac{N_A}{V}(t) \cdot dt, \text{ wobei } V = \text{konst.}$$

Für die Lösung der Differentialgleichung wird diese umgeformt und das Integral von  $t_0 = 0$  bis  $t$  gebildet. Im Folgenden ist die Konzentration  $a_0$  zum Zeitpunkt  $t_0 = 0$  gegeben durch  $N_A/V(0)$ .

$$\begin{aligned} dN_A/V(t) &= -k_0 \cdot N_A/V(t) \cdot dt \\ \Leftrightarrow (N_A/V(t))^{-1} \cdot dN_A/V(t) &= -k_0 \cdot dt \\ \Leftrightarrow \ln(N_A/V(t)) - \ln(N_A/V(0)) &= -k_0 \cdot t \\ \Leftrightarrow \ln(N_A/V(t)) - \ln(a_0) &= -k_0 \cdot t \\ \Leftrightarrow e^{\ln(N_A/V(t)) - \ln(a_0)} &= e^{-k_0 \cdot t} \\ \Leftrightarrow N_A/V(t) &= a_0 \cdot e^{-k_0 \cdot t} \end{aligned}$$

Zum Zeitpunkt  $t_0 = 0$  ist  $a$  erfahrungsgemäß maximal, nämlich  $a_0$ . Mit fortschreitender Zeit nimmt die Konzentration exponentiell ab, da auch die Anzahl der Kerne des Stoffs A exponentiell abnimmt und das Volumen konstant bleibt.

## 2.3 Übergangsrate

Durch die Übergangsrate  $r_0$  wird bei der Simulation bestimmt, welche der möglichen Reaktionen als nächstes stattfindet. Da im gegebenen Beispiel des radioaktiven Zerfalls lediglich eine Reaktion, nämlich die Reaktion  $R_0 : A \rightarrow B$ , möglich ist, findet diese allerdings in jedem Fall statt. Die Übergangsrate ist das Produkt aus der Reaktionsrate der (jeweiligen) Reaktion, der momentanen Anzahl der Teilchen der beteiligten Stoffe sowie des Volumens, in dem sie sich befinden. Im Falle des radioaktiven Zerfalls lautet die Gleichung für die Übergangsrate

$$r_0 = k_0 \cdot N_A(t) \cdot V. \quad (1)$$

## 2.4 Simulation

Zunächst werden einige Variablen für die Simulation initialisiert und deklariert. Standardmäßig ist das Volumen  $V = 1$ , die Zahl  $N_{B,0}$  der Teilchen des Stoffs B ist gleich 0. Für die Zahl  $N_{A,0}$  der Teilchen des Stoffs A werden die Werte  $10^1, 10^2, \dots, 10^6$  als Anfangswerte verwendet. Für die Reaktionsrate  $k_0$  wird 1 gewählt, sie ist hier noch nicht von Relevanz. Da es nur eine mögliche Reaktion gibt, ist die Wahrscheinlichkeit, dass genau diese Reaktion innerhalb einer Zeiteinheit stattfindet, 100 Prozent. Es wird ein Array  $n_0$  angelegt, der die Anzahl aller an der Reaktion  $R_0$  beteiligten Teilchen enthält, also zu Beginn der Simulation  $N_{A,0}$  und  $N_{B,0}$ . Ein weiteres Array  $k$  enthält die Reaktionsraten aller möglichen Reaktionen, also hier lediglich  $k_0$  der Reaktion  $R_0$ .

Eine Funktion `reaction()` wird definiert. Innerhalb dieser Funktion wird der Anfangswert  $t_0$ , über den die Zahl der vorhandenen Teilchen später geplottet wird, auf 0 gesetzt. Das Array  $n$ , welches im Folgenden zu jedem Zeitpunkt die Anzahlen der beteiligten Teilchen enthält, wird mit den Anfangswerten aus dem Array  $n_0$  versehen.

Für jede mögliche Reaktion muss zunächst die jeweilige Übergangsrate berechnet werden. Hierfür wird die Funktion `calculate_r()` definiert, die dies nach (1) für den Übergang von A nach B tut. Um die nächste Reaktion festzulegen, muss eine gleichverteilte Zufallszahl, hier  $i$ , im Intervall  $[0, 1)$  generiert werden. Durch die Division der kumulativen Summe der ermittelten Übergangsgraten durch deren gewöhnliche Summe erhalten wir ein Array mit Zahlenwerten zwischen 0 und 1. Dadurch findet eine Einteilung in Bereiche statt. Als nächstes wird nun geprüft, in welchen Bereich die Zufallszahl  $i$  fällt, also welche die kleinste größere Zahl im Array ist. Die Position dieser kleinsten größeren Zahl des Arrays ist nun relevant, um die Reaktion auszuwählen und die Teilchenzahl entsprechend der Auswahl zu aktualisieren. Da beim radioaktiven Zerfall lediglich die Reaktion  $R_0$  stattfindet, wird in jedem Schritt ein Teilchen des Stoffs A subtrahiert und eines des Stoffs B addiert.

Gleichzeitig wird die Zeit  $t$  um das Zeitintervall  $dt$  vergrößert.  $dt$  ist dabei exponentialverteilt mit dem scale Parameter  $\beta = 1/\lambda$ , wobei  $\lambda$  die Summe der Übergangsgraten ist. Ist die Summe aller Übergangsgraten, bzw. hier die Übergangsrate  $r_0$  gleich 0, so bedeutet das, dass alle Teilchen des Stoffs A zerfallen sind. Dieser Fall wird mit `break` als Abbruchbedingung festgelegt. Zusätzlich wird das Ganze so lange wiederholt, bis die Anzahl der Teilchen des Stoffs A gleich 0 ist. Der in diesem Absatz geschilderte Ablauf wird als „Monte-Carlo-Schritt“ bezeichnet. Analog ist der geschilderte Ablauf auf das später vorgestellte Brusselatormodell übertragbar.

## 2.5 Vergleich und Fazit

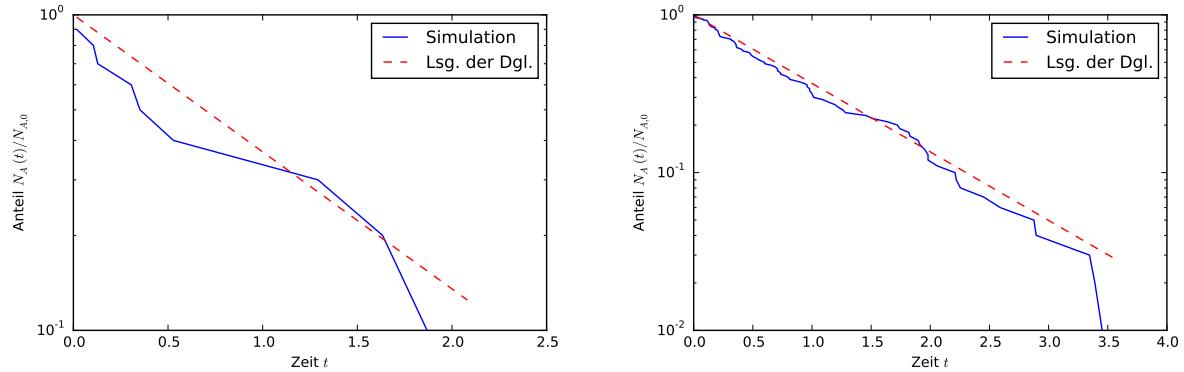


Abbildung 1:  $N_{A,0} = 10^1$  (links) und  $N_{A,0} = 10^2$  (rechts)

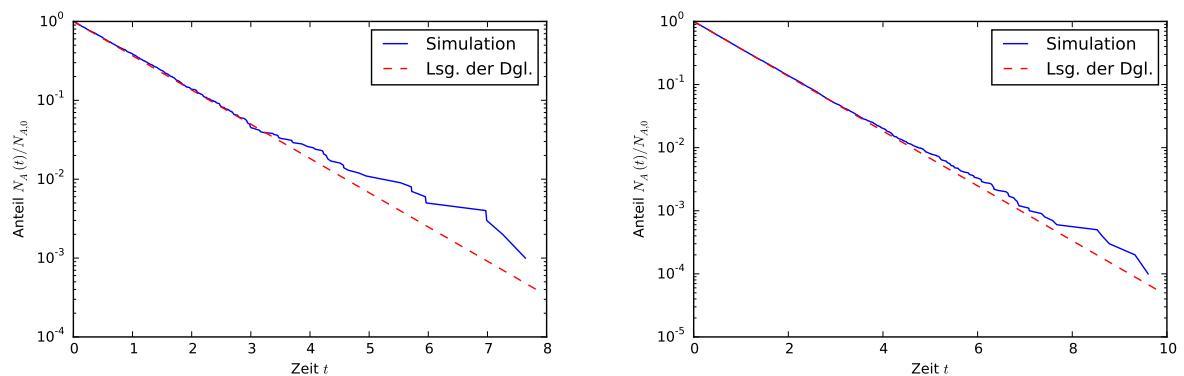


Abbildung 2:  $N_{A,0} = 10^3$  (links) und  $N_{A,0} = 10^4$  (rechts)

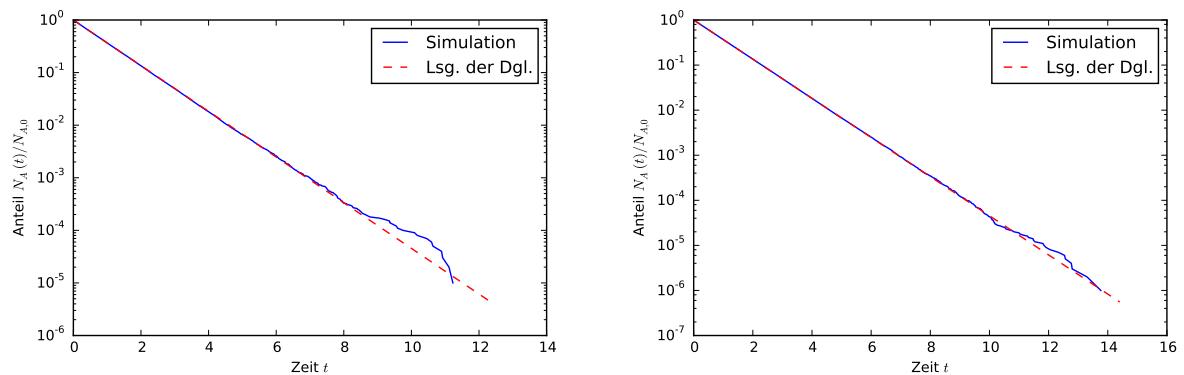


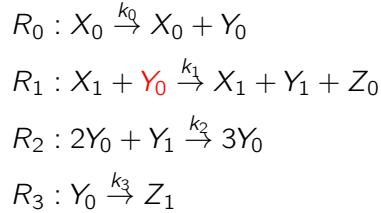
Abbildung 3:  $N_{A,0} = 10^5$  (links) und  $N_{A,0} = 10^6$  (rechts)

Im Vergleich mit der Lösung der Differentialgleichung liefert die Simulation bei kleinen Anfangswerten von  $N_A$  ein stark abweichendes Ergebnis. Je größer dieser Anfangswert jedoch gewählt wird, desto besser stimmen die Graphen überein. Folglich wird hier die beste Übereinstimmung bei einem Startwert  $N_{A,0}$  von  $10^6$  Teilchen erreicht. Dennoch ist auch hier zu späteren Zeitpunkten eine stärkere Abweichung erkennbar. Es tritt ein ähnlicher Fall ein wie bei klein gewählten Anfangswerten auf. Nur noch vergleichsweise wenige Edukte sind vorhanden. Der stochastische Ansatz liefert demnach nur dann übereinstimmende Ergebnisse mit dem deterministischen, so lange für die Reaktionen das „Gesetz der großen Zahlen“ gilt.

## 3 Brusselatormodell

### 3.1 Einleitung

Das Brusselatormodell ist eine Reaktion mit dynamischer Instabilität und wird durch folgende Reaktionen beschrieben:



Die Teilchen der Sorte  $X_i$  sind die Resource der Reaktion. Die Anzahl der Edukte  $X_i$  wird konstant gehalten, indem immer, wenn z.B.  $X_0$  in  $Y_0$  umgewandelt wird, wieder ein  $x_0$  Teilchen hinzugefügt wird ( $R_0$  und  $R_1$ ). Es handelt sich beim Brusselator um ein einfaches Modell chemischer Oszillatoren.

### 3.2 Differentialgleichungen

Für die Konzentrationen  $y_0$  und  $y_1$  der einzelnen Reaktionen erhält man die Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} R_0 : dy_0/dt &= k_0 \cdot x_0 \\ R_1 : dy_1/dt &= k_1 \cdot x_1 \cdot Y_0 \\ R_2 : dy_0/dt &= k_2 \cdot (3 - 2) \cdot y_0^2 \cdot y_1 = k_2 \cdot y_0^2 \cdot y_1; \\ &dy_1/dt = k_2 \cdot (0 - 1) \cdot y_0^2 \cdot y_1 = -k_2 \cdot y_0^2 \cdot y_1 \quad \text{und} \\ R_3 : dy_0/dt &= -k_3 \cdot y_0, \end{aligned}$$

wobei  $k_0$ ,  $k_1$ ,  $k_2$  und  $k_3$  die jeweiligen Reaktionsraten der Reaktionen  $R_0$ ,  $R_1$ ,  $R_2$  und  $R_3$  bezeichnen. Zusammengenommen lauten die Differentialgleichungen dann

$$dy_0/dt = k_0 \cdot x_0 + k_2 \cdot y_0^2 \cdot y_1 - k_3 \cdot y_0 \quad \text{und} \quad dy_1/dt = k_1 \cdot x_1 \cdot Y_0 - k_2 \cdot y_0^2 \cdot y_1.$$

Ersetzt man die Konzentrationen  $y_0$  und  $y_1$  durch die entsprechende Stoffmenge geteilt durch das Volumen, so erhält man die Gleichungen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \cdot \frac{N_{Y_0}}{V} &= k_0 \cdot \frac{N_{X_0}}{V} + k_2 \cdot \frac{N_{Y_0}^2}{V^2} \cdot \frac{N_{Y_1}}{V} - k_3 \cdot \frac{N_{Y_0}}{V} \\ \rightarrow \frac{dN_{Y_0}}{dt} &= k_0 \cdot N_{X_0} + k_2 \cdot \frac{N_{Y_0}^2 \cdot N_{Y_1}}{V^2} - k_3 \cdot N_{Y_0} \\ \frac{d}{dt} \cdot \frac{N_{Y_1}}{V} &= k_1 \cdot \frac{N_{X_1}}{V} \cdot \frac{N_{Y_0}}{V} - k_2 \cdot \frac{N_{Y_0}^2}{V^2} \cdot \frac{N_{Y_1}}{V} \\ \rightarrow \frac{dN_{Y_1}}{dt} &= k_1 \cdot \frac{N_{X_1} \cdot N_{Y_0}}{V} - k_2 \cdot \frac{N_{Y_0}^2 \cdot N_{Y_1}}{V^2} \end{aligned}$$

### 3.3 Übergangsraten

Die Übergangsraten  $r_i$  sind relevant, um zu bestimmen, welche Reaktion  $R_i$  aller möglichen Reaktionen in einer Iteration abläuft. Aus der Aufgabenstellung kennen wir  $\gamma_0 = k_0 \cdot N_{X_0} = 5000s^{-1}$ ,  $\gamma_1 = k_1 \cdot N_{X_1}/V = 50s^{-1}$ ,  $\gamma_2 = k_2/V^2 = 5 \cdot 10^{-5}s^{-1}$  und  $\gamma_3 = k_3 = 5s^{-1}$ . Aus der Originalquelle von Gillespie sind die Parameter  $h_0 = N_{X_0}$ ,  $h_1 = N_{X_1} \cdot N_{Y_0}$ ,  $h_2 = N_{Y_1} \cdot N_{Y_0} \cdot (N_{Y_0} - 1)/2$  sowie  $h_3 = N_{Y_0}$  und die Formel

$r_i = h_i \cdot k_i$  bekannt. Die Übergangsraten berechnen sich also in diesem Beispiel durch

$$\begin{aligned}r_0 &= h_0 \cdot k_0 = N_{X0} \cdot 5000\text{s}^{-1}/N_{X0} = 5000\text{s}^{-1} \\r_1 &= h_1 \cdot k_1 = N_{X1} \cdot \textcolor{red}{N_{Y0}} \cdot 50\text{s}^{-1}/N_{X1} = \textcolor{red}{N_{Y0}} \cdot 5 \cdot 10^{-5}\text{s}^{-1} \\r_2 &= h_2 \cdot k_2 = N_{Y1} \cdot N_{Y0} \cdot (N_{Y0} - 1)/2 \cdot 5 \cdot 10^{-5}\text{s}^{-1} \\r_3 &= h_3 \cdot k_3 = N_{Y0} \cdot 5\text{s}^{-1}\end{aligned}$$

### 3.4 Erste Simulation

$N_{X0}$ ,  $N_{X1}$ ,  $N_{Z0}$  und  $N_{Z1}$  werden bei der Simulation konstant gehalten. Immer wenn ein  $X_0$  oder  $X_1$  Molekül bei einer Reaktion verbraucht wird, wird sofort ein neues dem System zugeführt. Entsteht während Reaktion 1 oder 3 ein  $Z_0$  oder  $Z_1$ , wird es sofort aus dem System entfernt.

Die Teilchenzahlen von  $Y_0$  und  $Y_1$  sind veränderlich, sie müssen also bei jedem Iterationsschritt erneut angepasst werden. Startwerte für unsere Simulation sind 1000 für  $Y_0$  und 2000 für  $Y_1$ . Findet Reaktion  $R_0$  statt, muss bei der nächsten Iteration mit einem  $Y_0$  mehr gerechnet werden. Nach  $R_1$  befindet sich ein  $Y_1$  mehr im System, das im darauffolgenden Rechenschritt beachtet werden muss. In  $R_2$  entsteht unter dem Verlust eines  $Y_1$  ein  $Y_0$  und nach  $R_3$  ist es ein  $Y_0$  weniger.

Da die Übergangsraten  $r_1$ ,  $r_2$  und  $r_3$  in Abhängigkeit mit  $N_{Y0}$  und  $N_{Y1}$  stehen, muss auch hier bei jedem Schritt erneut die Übergangsrate berechnet werden.

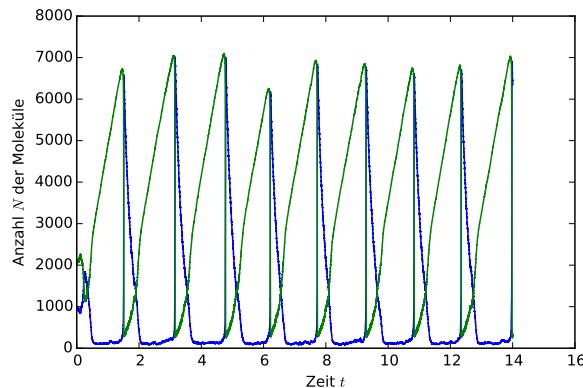


Abbildung 4: Simulation von  $N_{Y0}$  (blau) und  $N_{Y1}$  (grün)

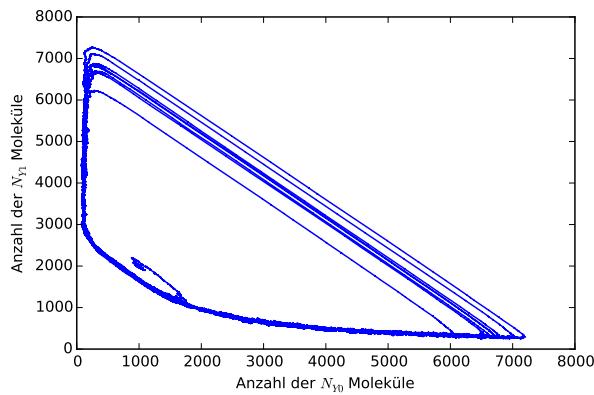


Abbildung 5:  $N_{Y1}$  über  $N_{Y0}$

### 3.5 Inverse Konzentration $\alpha$ und Verhältnis $p$

In der Aufgabenstellung werden die inverse Konzentration  $\alpha$  sowie das Verhältnis  $p$  definiert als

$$\alpha = \frac{2k_3}{k_1 x_1}, \text{ wobei } x_1 = N_{X1} \text{ und } p = \frac{k_2 k_0^2 x_0^2}{k_3^2 k_1 x_1}, \text{ wobei } x_0 = N_{X0}.$$

Gesucht ist zunächst die Darstellung dieser Größen durch die vorher definierten Systemparameter  $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ . Durch Umformen und Einsetzen erhält man

$$\alpha = \frac{2k_3}{k_1 x_1} = \frac{2\gamma_3}{\gamma_1 \cdot V} \text{ und } p = \frac{k_2 k_0^2 x_0^2}{k_3^2 k_1 x_1} = \frac{\gamma_2 \cdot V^2 \cdot \gamma_0^2}{\gamma_3^2 \gamma_1 \cdot V} = \frac{\gamma_2 \gamma_0^2}{\gamma_3^2 \gamma_1} \cdot V.$$

Als nächstes sollen  $\gamma_0$  und  $\gamma_1$  durch  $\alpha, p, \gamma_2$  und  $\gamma_3$  ausgedrückt werden. Die Gleichungen lauten dann

$$\gamma_1 = \frac{k_1 x_1}{V} = \frac{2k_3}{\alpha \cdot V} = \frac{2\gamma_3}{\alpha} \cdot \frac{1}{V} \text{ und } \gamma_0 = k_0 x_0 = \sqrt{\frac{p \cdot k_3^2 k_1 x_1}{k_2}} = \sqrt{\frac{p \cdot \gamma_3^2 \gamma_1 \cdot V}{\gamma_2 \cdot V^2}} = \sqrt{\frac{2p \cdot \gamma_3^3}{\alpha \cdot \gamma_2 \cdot V^2}}.$$

### 3.6 Zweite Simulation

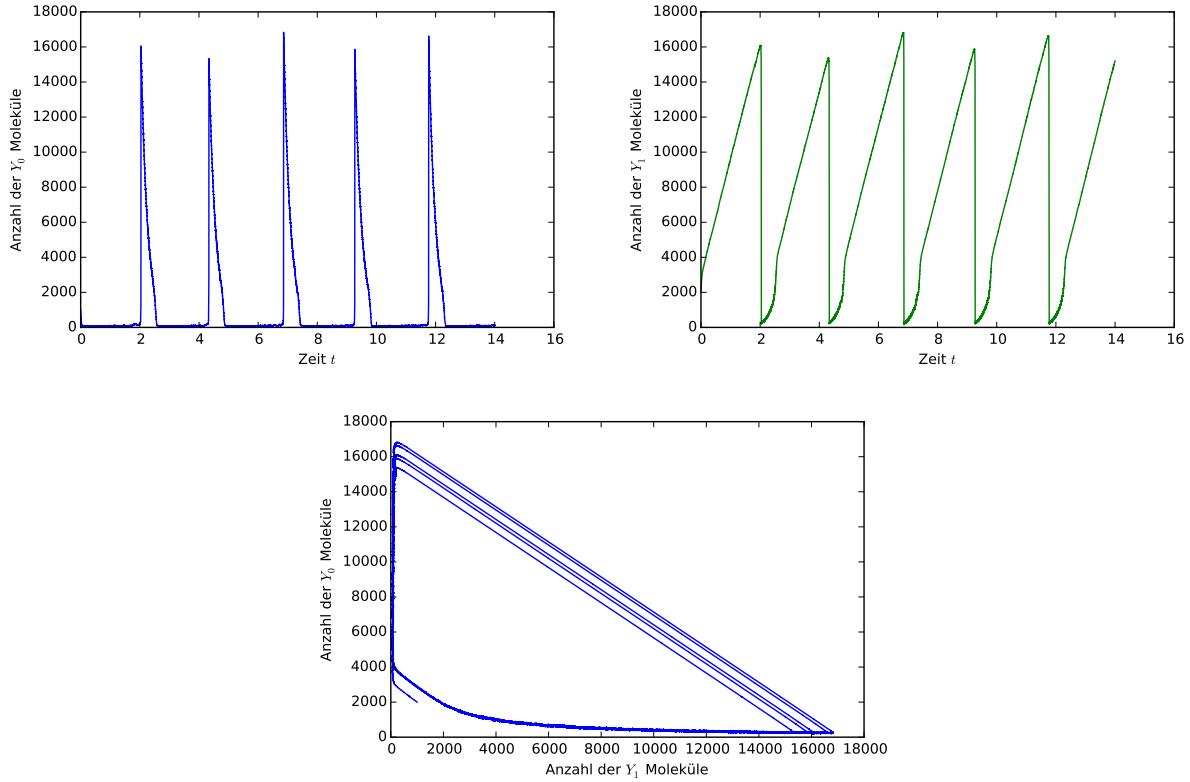


Abbildung 6: Simulation mit  $\alpha = 0, 1$

Durch die Veränderung von  $\alpha$  wird die Stabilität der Reaktionen beeinflusst. Ein oszillierendes System liegt nur bei kleineren Werten für  $\alpha$  vor. Zu beobachten ist dies beispielsweise bei den Werten 0,1 und 0,5. Bei größeren Werten, beispielsweise 1 und 10, oszilliert das System nicht mehr. Die Anzahl der  $Y_0$  und der  $Y_1$  Teilchen bewegt sich dann immer genauer um einen stationären Wert.

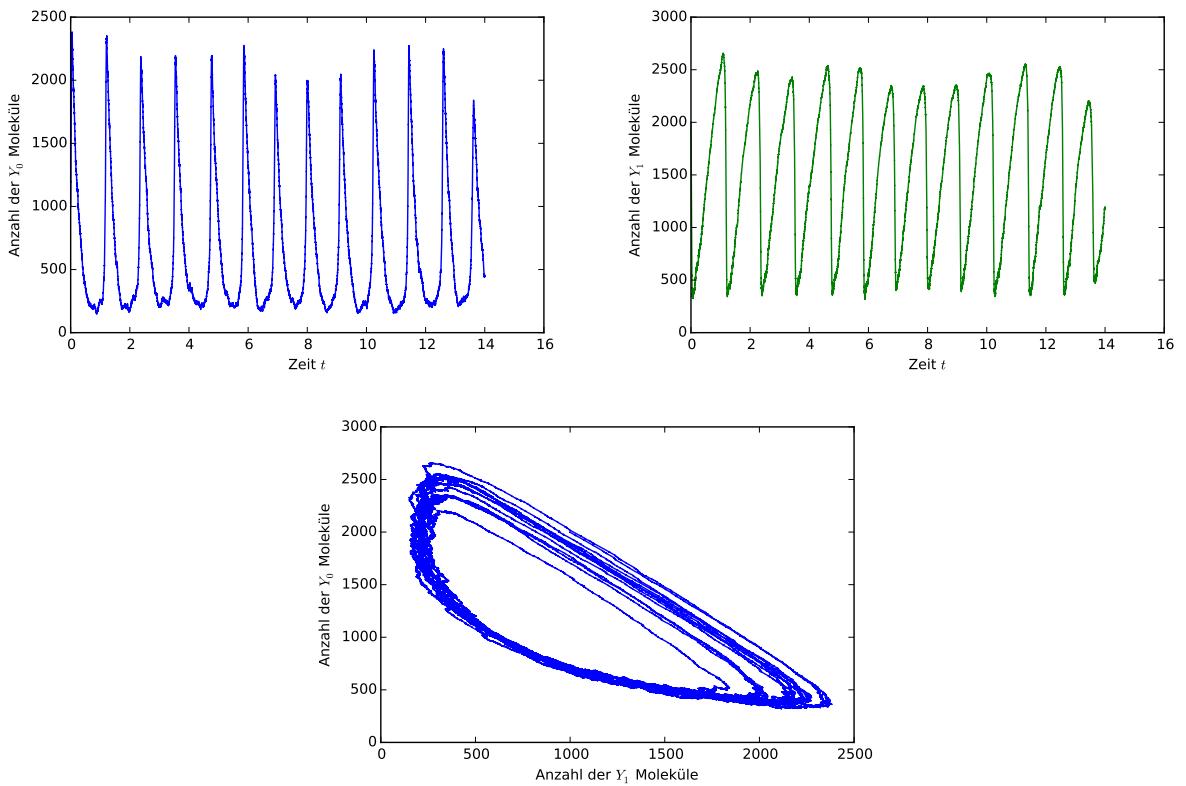


Abbildung 7: Simulation mit  $\alpha = 0,5$

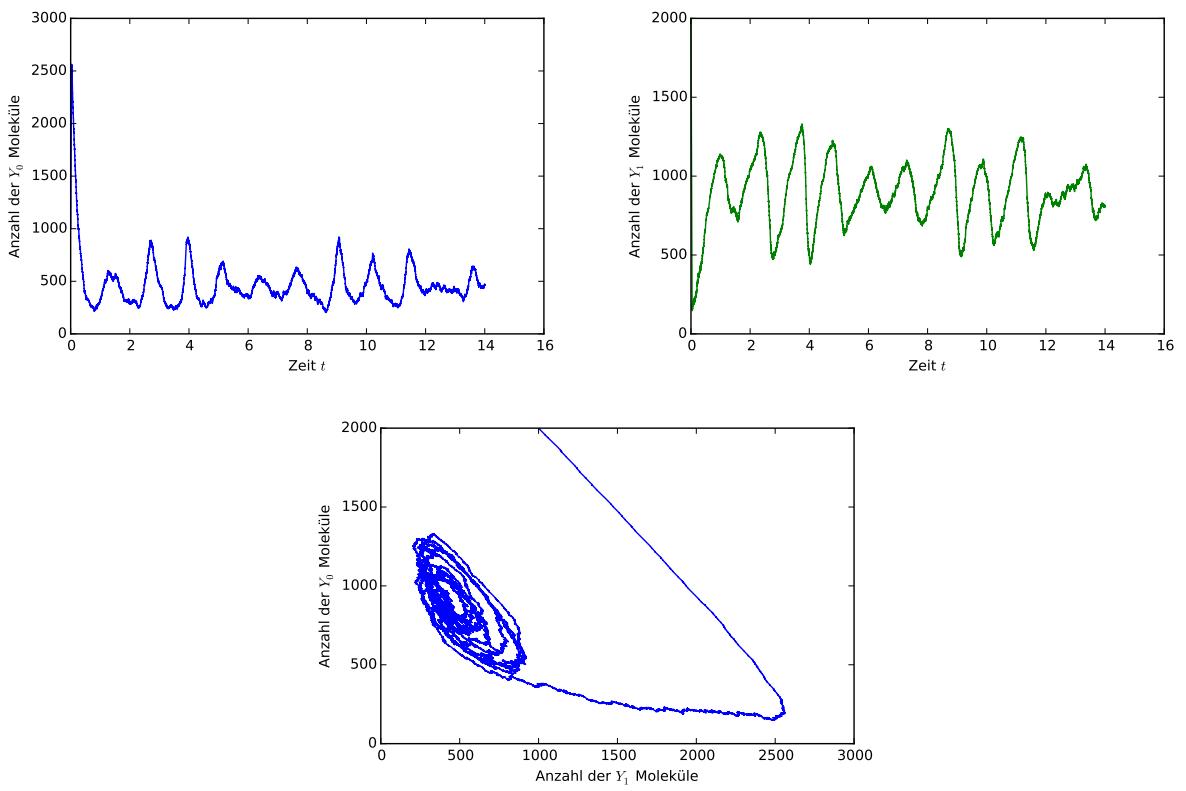


Abbildung 8: Simulation mit  $\alpha = 1$

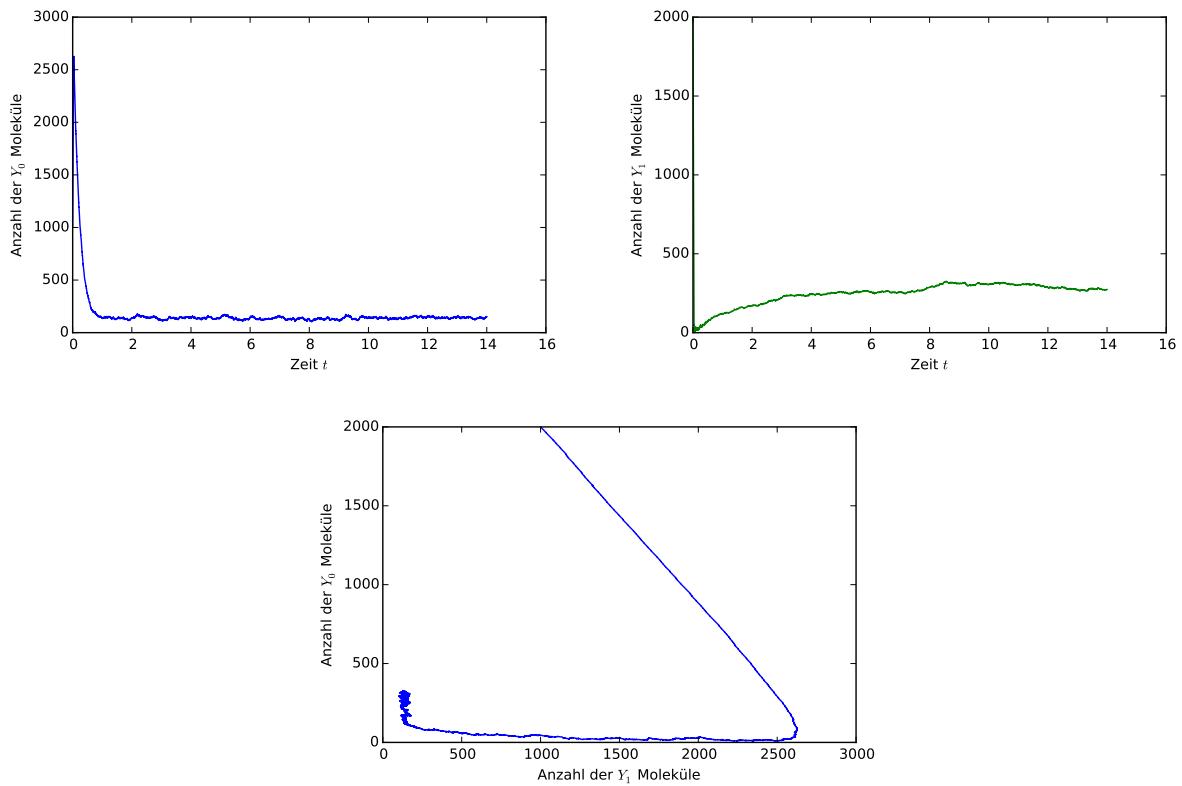


Abbildung 9: Simulation mit  $\alpha = 10$

Hält man aber  $\alpha$ ,  $p$ ,  $\gamma_1$  und  $\gamma_3$  konstant und verändert das Volumen um einen Faktor  $\mu$ , mit  $0 < \mu < 1$ , kommt es nicht unbedingt zu einem oszillierenden System.

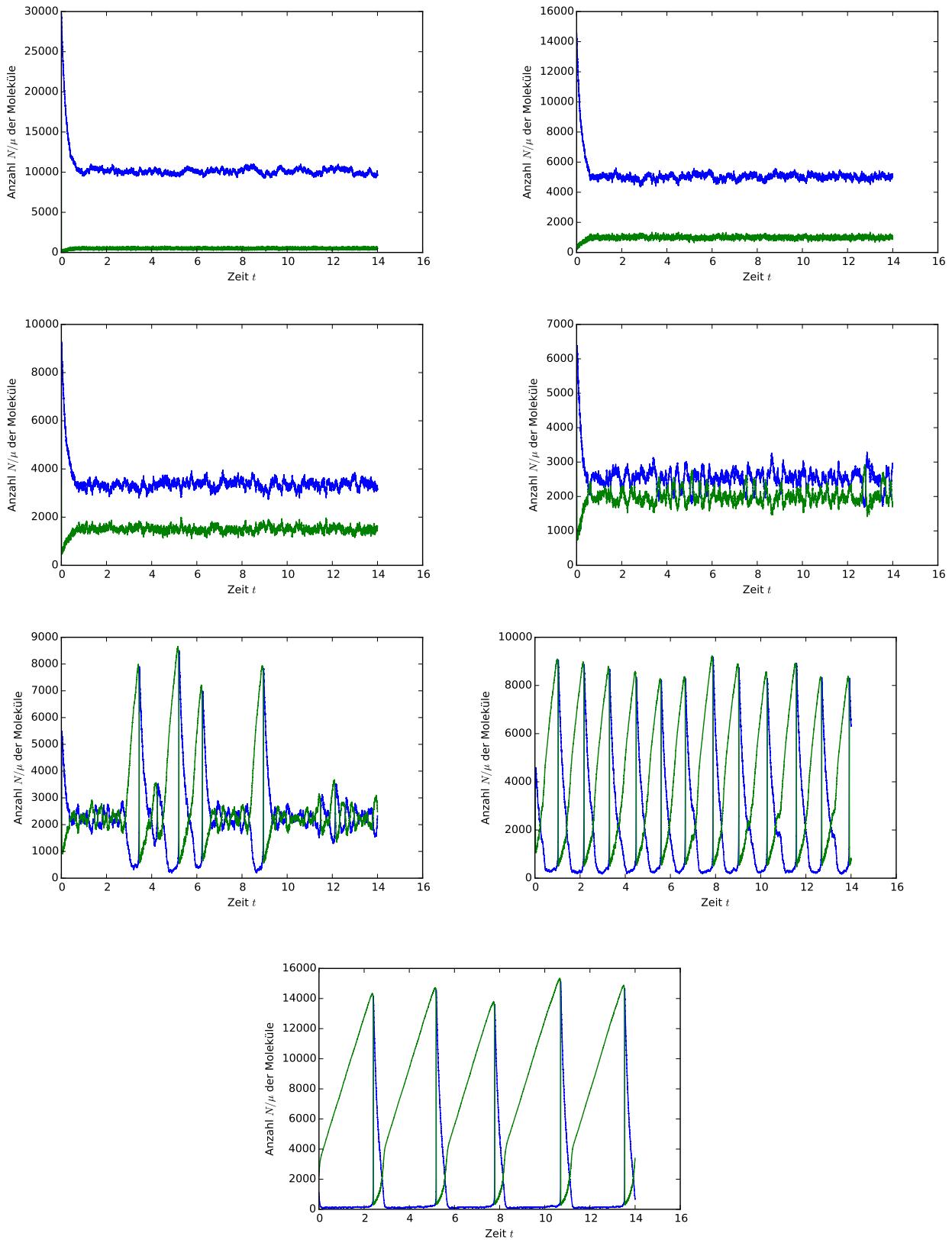
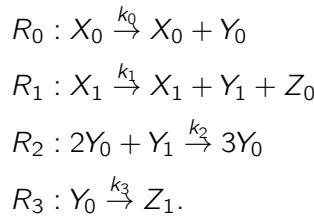


Abbildung 10: Simulation mit  $\mu = 0, 1; 0, 2; 0, 3; 0, 4; 0, 45; 0, 5; 0, 9$

Es ist offensichtlich, dass das System für  $\mu < 0,45$  noch nicht oszilliert.

### 3.7 Nachbetrachtung

Die originale Aufgabenstellung enthielt die Gleichungen



Die differentialgleichungen für die Aufgabenstellung lauten

$$\begin{aligned} R_0 : dy_0/dt &= k_0 \cdot x_0 \\ R_1 : dy_1/dt &= k_1 \cdot x_1 \\ R_2 : dy_0/dt &= k_2 \cdot (3 - 2) \cdot y_0^2 \cdot y_1 = k_2 \cdot y_0^2 \cdot y_1; \\ &dy_1/dt = k_2 \cdot (0 - 1) \cdot y_0^2 \cdot y_1 = -k_2 \cdot y_0^2 \cdot y_1 \quad \text{und} \\ R_3 : dy_0/dt &= -k_3 \cdot y_0, \end{aligned}$$

Zusammen genommen erhält man somit

$$dy_0/dt = k_0 \cdot x_0 + k_2 \cdot y_0^2 \cdot y_1 - k_3 \cdot y_0 \quad \text{und} \quad dy_1/dt = k_1 \cdot x_1 - k_2 \cdot y_0^2 \cdot y_1.$$

Für die Konzentrationen gilt dann

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \cdot \frac{N_{Y_0}}{V} &= k_0 \cdot \frac{N_{X_0}}{V} + k_2 \cdot \frac{N_{Y_0}^2}{V^2} \cdot \frac{N_{Y_1}}{V} - k_3 \cdot \frac{N_{Y_0}}{V} \\ \rightarrow \frac{dN_{Y_0}}{dt} &= k_0 \cdot N_{X_0} + k_2 \cdot \frac{N_{Y_0}^2 \cdot N_{Y_1}}{V^2} - k_3 \cdot N_{Y_0} \\ \frac{d}{dt} \cdot \frac{N_{Y_1}}{V} &= k_1 \cdot \frac{N_{X_1}}{V} - k_2 \cdot \frac{N_{Y_0}^2}{V^2} \cdot \frac{N_{Y_1}}{V} \\ \rightarrow \frac{dN_{Y_1}}{dt} &= k_1 \cdot N_{X_1} - k_2 \cdot \frac{N_{Y_0}^2 \cdot N_{Y_1}}{V^2}. \end{aligned}$$

Die Reaktionsraten berechnen sich folgendermaßen:

$$\begin{aligned} r_0 &= h_0 \cdot k_0 = N_{X_0} \cdot 5000\text{s}^{-1}/N_{X_0} = 5000\text{s}^{-1} \\ r_1 &= h_1 \cdot k_1 = N_{X_1} \cdot 50\text{s}^{-1}/N_{X_1} = 5 \cdot 10^{-5}\text{s}^{-1} \\ r_2 &= h_2 \cdot k_2 = N_{Y_1} \cdot N_{Y_0} \cdot (N_{Y_0} - 1)/2 \cdot 5 \cdot 10^{-5}\text{s}^{-1} \\ r_3 &= h_3 \cdot k_3 = N_{Y_0} \cdot 5\text{s}^{-1}. \end{aligned}$$

Mit diesen konnte kein oszillierendes System entwickelt werden. Daher wurden stattdessen die Gleichungen aus dem Originalpaper von Gillespie für die Simulation verwenden.

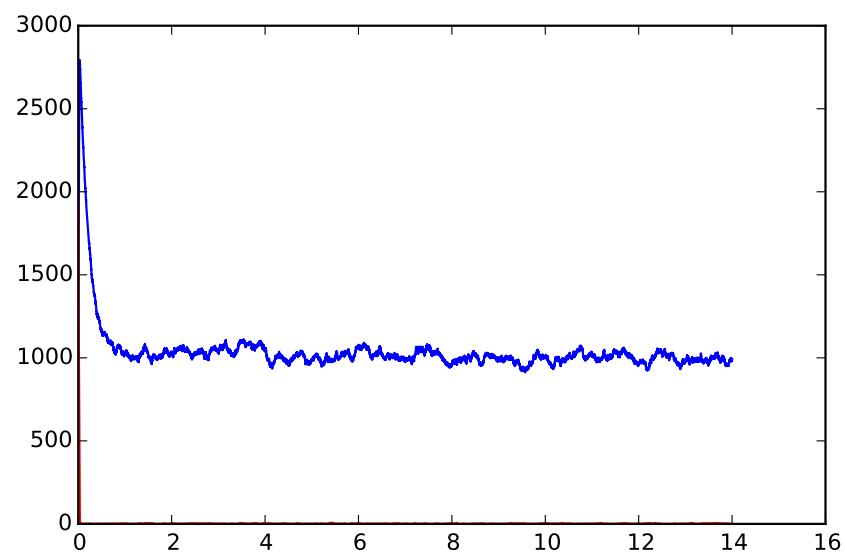


Abbildung 11: Simulation mit Reaktionsgleichungen aus Aufgabenstellung

## 4 Wichtige Befehle in Python

1. `np.random.exponential(scale=1.0, size=None)`

Erzeugt exponentiell verteilte Zufallszahlen mit der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

$$f(x; \frac{1}{\beta}) = \frac{1}{\beta} \exp(-\frac{x}{\beta}).$$

Der scale Parameter  $\beta$  entspricht  $1/\lambda$ .

2. `np.random.rand(d0, d1, ..., dn)`

Erzeugt gleichverteilte Zufallszahlen im Intervall [0, 1). Optional können die Dimensionen eines Arrays übergeben werden, so dass eine Matrix mit Zufallszahlen zwischen 0 und 1 zurück gegeben wird.

3. `np.argmax(a, axis=None, out=None) [source]`

Gibt den Index des Maximums auf einer gegebenen Achse zurück.

4. `list(seq)`

Nimmt sequency type Variablen entgegen und erstellt aus ihnen eine Liste.

5. `zip(*iterables)`

Fügt bestehende Listen zu einer zusammen. Werden beispielsweise zwei Listen mit jeweils 5 Elementen übergeben, so wird eine Liste erstellt, die ebenfalls fünf Elemente enthält. Allerdings liegen nun Tupel vor, welche die jeweiligen Elemente der vorigen Listen beinhalten.

## **5 Quellenverzeichnis**

- /1/ Differentialgleichungen – Ausgewählte Probleme aus der Physik,  
URL: [http://www.uni-magdeburg.de/exph/mathe\\_gl/dgl-phys1.pdf](http://www.uni-magdeburg.de/exph/mathe_gl/dgl-phys1.pdf)
- /2/ D. T. Gillespie, A General Method for Numerically Simulating the Stochastic Time Evolution of Coupled Chemical Reactions, J. Comp. Phys. 22 4, (1976)
- /3/ D. T. Gillespie, Exact Stochastic Simulation of Coupled Chemical Reactions, J. Phys. Chem. 81 25, (1977)