

Gradientenfluss und Variationsformulierung

Michael Möller

19.04.07

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung in die Problemstellung	2
1.1	Motivation: Entwicklung von Mikrostrukturen	2
1.2	Lösungsansätze	2
2	Gradienten und Skalarprodukte	3
2.1	Skalarprodukte für Vektoren	3
2.2	Innere Produkte für Funktionen	3
3	Prinip des 'gradient flows' am Beispiel der Diffusion	5
3.1	Physikalische Ausgangssituation	5
3.2	Gewichtung von inneren Produkten	6
3.3	Berechnung des Gradienten ∇F	6
3.4	Bestimmung des 'gradient flows'	7
4	Anwendungen des 'gradient flows'	7
4.1	Beispiele für die Herleitung physikalischer Gleichungen	7
4.2	Zusammengesetzte freie Energiedichten	8
4.3	Bewegung geometrischer Strukturen	8
4.3.1	Motion by curvature	8
4.3.2	Surface diffusion	9
4.3.3	Motion by weighted mean curvature	9
4.3.4	Wulff Formen	9
4.3.5	Beispiel Seifenblasen	9
4.4	Berücksichtigung der bulk energy	10
4.5	Eckige Wulff-Formen	10
4.6	Innere Produkte als Volumenintegrale	12
5	Zusammenfassung	12
6	Quellen	13

1 Einführung in die Problemstellung

1.1 Motivation: Entwicklung von Mikrostrukturen

Die Motivation für die Betrachtung geometrischer Flüsse ist physikalisch begründet. Angenommen, man hat irgendeine irreguläre, flüssige Masse, auf die keinerlei Kräfte (wie Gravitation) wirken. Aus den Gesetzen der Thermodynamik wissen wir, dass abgeschlossene Systeme immer versuchen, den Zustand geringster Energie anzunehmen. Da es sich bei der flüssigen Masse nicht um eine Kugel handelt, hat sie nicht die kleinste Oberfläche für ihr Volumen. Sie wird ihre Oberfläche also reduzieren. Die hier interessante Fragestellung ist nun: Wie entwickelt sie sich? Welche Formen kann sie annehmen? Welche Gesetzmäßigkeiten bestimmen die Bewegung?

Betrachtet man beispielsweise einen Eiskristall unter dem Mikroskop, so hat dieser nicht die Form eines Balls, sondern eher die eines hexagonalen Prismas. Wie entwickelt sich gefrierendes Wasser zu solch einer Struktur?

Ein weiteres Beispiel ist das Erstarren von Legierungen. Hier sieht man eine Simulation des Erstarrens einer Kupfer-Nickel Legierung:

<http://www.ctcms.nist.gov/wcraig/>

1.2 Lösungsansätze

Um Probleme wie die oben beschriebenen zu lösen, müssen häufig zunächst viele vereinfachende Annahmen gemacht werden, wie z.B. Isotropie (=der betrachtete Stoff verhält sich in alle Richtungen gleich), Regularität, Linearität gewisser Zusammenhänge, Differenzierbarkeit von Funktionen. Bei den praktisch relevanten Problemen sind solche Annahmen häufig ungerechtfertigt und führen zu einer falschen Beschreibung der physikalischen/chemischen Vorgänge. Es wäre nützlich, wenn man ein generelles Verfahren entwickeln könnte, das ohne die oben beschriebenen Vereinfachungen auskommt und so eine systematische Beschreibung mikrostruktureller Prozesse zulässt.

Der in diesem Vortrag vorgestellte Ansatz ist das Finden eines sogenannten 'gradient flows'. Die Idee, die hinter dieser Methode steckt, ist die folgende: Durch die Thermodynamik haben wir die gesamte freie Energie einer Struktur gegeben und wissen, dass sich das System so entwickeln wird, dass diese Energie möglichst schnell minimiert wird. Daher bestimmen wir zunächst den Gradienten der Energie als Funktion von der gesuchten Eigenschaft (z.B. Gesamtenergie in Abhängigkeit von der Oberfläche, der Konzentration, etc.). Dieser zeigt, wie wir wissen, in Richtung der größten Steigung. Anschließend bestimmen wir die gesuchte Eigenschaft dadurch, dass die zeitliche Ableitung dieser Eigenschaft dem Verhalten des negativen Gradienten entsprechen soll: $\frac{d}{dt}c(x, t) = -\nabla F(c)$ (z.B. für die Gesamtenergie F in Abhängigkeit von der Konzentration c). Um diese Idee besser verstehen und umsetzen zu können, wollen wir zunächst einen Zusammenhang zwischen Gradienten und Skalarprodukten herstellen.

2 Gradienten und Skalarprodukte

2.1 Skalarprodukte für Vektoren

Wir kennen Skalarprodukte für Vektorräume wie den R^n . Hier ist uns aus Analysis 2 auch bekannt, dass

$$\left[\frac{d}{dt}f(\vec{a} + t\vec{v})\right]_{t=0} = L(\vec{v}) = \langle \nabla f(\vec{a}), \vec{v} \rangle$$

Die Richtungsableitung in Richtung eines Vektors \vec{v} ist gleich dem Standardskalarprodukt aus dem Gradienten der Funktion mit dem Richtungsvektor \vec{v} . Was passiert aber nun, wenn wir statt des standard Skalarproduktes ein beliebiges anderes Skalarprodukt wählen? Gibt es zu diesem Skalarprodukt einen anderen Gradienten, so dass die obige Gleichheit weiterhin gilt? Diese Problemstellung, nämlich zu einer Linearform $L(\vec{v})$ und einer Bilinearform $B(\vec{w}, \vec{v})$ ein w zu finden, so dass $L(\vec{v}) = B(\vec{w}, \vec{v})$ für alle \vec{v} des Vektorraums gilt, nennt man Variationsformulierung. Sie ist uns letztes Semester in der Numerik partieller Differentialgleichung bereits einmal begegnet: Die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung zu diesem Problem liefert das Lax-Milgram Lemma. (Voraussetzungen 'symmetrische, stetige, koerzive Bilinearform' sind für ein Skalarprodukt trivialerweise erfüllt.)

Sei $\langle \cdot, \cdot \rangle_b$ ein beliebiges Skalarprodukt. Dann ist

$$\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle_b = \sum v_i w_j \langle e_i, e_j \rangle_b$$

Mit $\langle e_i, e_j \rangle_b = a_{ij}$ erhält man eine symmetrische Matrix $A = (a_{ij})_{ij}$ und somit

$$\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle_b = \langle A\vec{v}, \vec{w} \rangle$$

Damit gehört also zu $\langle \cdot, \cdot \rangle_b$ der Gradient $\nabla_{\langle \cdot, \cdot \rangle_b} = A^{-1} \nabla_{\langle \cdot, \cdot \rangle}$. In unserem Problem (wie oben beschrieben) soll nun aber der Gradient eines Funktionals (d.h. einer Funktion von einer Funktion) bestimmt werden. Konkret auf das obige Beispiel bezogen heißt dies: Bei der Diffusion hängt die Energie F von der Konzentration c ab. Die Konzentration selbst ist aber wiederum eine Funktion $c(\vec{x}, t)$ (abhängig von dem Ort und der Zeit). Wir wollen nun nach dem Vorbild der Vektorrechnung den Gradienten $\nabla F(c)$ aus einem geeigneten Skalarprodukt eines Funktionenraums bestimmen.

2.2 Innere Produkte für Funktionen

Analog zu Vektoren, kann man auch für Funktionen Skalarprodukte definieren. Uns bekannt ist beispielsweise das L_2 Produkt

$$\langle f, g \rangle_{L^2} = \int f \cdot g dV$$

Durch ein Skalarprodukt wird immer eine dazugehörige Norm induziert:

$$\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle}$$

Im Gegensatz zum Standardskalarprodukt in euklidischen Vektorräumen haben wir bei Funktionen keine intuitive Vorstellung vom Wert der zu einem Skalarprodukt gehörigen Norm. Der Begriff 'Länge eines Vektors' ist anschaulich. Was bedeutet es aber für eine Funktion, 'nah an 0' zu sein? Dieser Begriff ist wichtig für die Bestimmung unseres Gradienten $\nabla F(c)$, denn wenn wir wollen, dass der negative Gradient in Richtung des größten Abstiegs zeigt, muss zunächst klar sein, was dies für eine Funktion bedeutet.

$$f(x; \beta) = \begin{cases} \frac{1}{2\epsilon} & \beta - \epsilon < x < \beta + \epsilon \\ \frac{-1}{2\epsilon} & (2\pi - \beta) - \epsilon < x < (2\pi - \beta) + \epsilon \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases} \quad (3)$$

Abbildung 1: Funktionsdefinition

Betrachten wir beispielsweise folgende Funktion:

Für zwei verschiedene Werte von β hat diese Funktion folgende Gestalt:

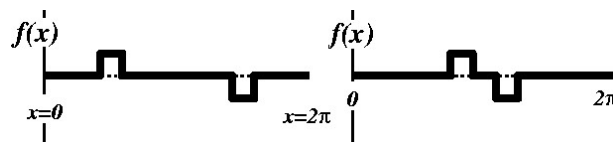


Abbildung 2: Gestalt von f für verschiedene β

Stellt man sich nun die Frage welche der Funktionen 'näher an 0' liegt, so muss man sagen, dass dies vom physikalischen Zusammenhang abhängt, den die Funktionen beschreiben.

Handelt es sich bei f um eine Funktion, die die Position von Korngrenzen (d.h. Begrenzungen von Mikroteilchen) beschreibt, so wird der Abstand der beiden Hügel unwichtig sein. Beide oben gezeichneten Funktionen sollten als 'gleich weit von 0 entfernt' angesehen werden. Dies ist z.B. in der L_2 Norm erfüllt.

Handelt es sich bei f allerdings um eine Temperaturverteilung, so wird es maßgeblich sein, ob die Hügel (warmer und kalter Bereich) nah an einander stehen (sich also schnell ausgleichen) oder nicht.

Immer wenn etwas von einem Bereich in den anderen 'fließen' muss, wird der Abstand der Hügel eine Rolle spielen. Bei der Diffusion müssen beispielsweise Teilchen von Bereich hoher Konzentration in den Bereich niedriger Konzentration fließen. Für diesen Fall bietet sich die H^{-1} Norm an. Das zugehörige Skalarprodukt ist wie folgt definiert:

$$\langle f, g \rangle_{H^{-1}} = \int \nabla \phi_f \cdot \nabla \phi_g \, dV$$

Dabei ist ϕ_f eine Lösung der Poisson-Gleichung $\nabla^2 \phi_f = f(\vec{x})$, wobei wir die möglichen Lösungen auf die Menge der ϕ_f mit $\int \phi_f dV = 0$ beschränken. Symbolisch schreibt man auch $\phi_f = (\nabla^2)^{-1} f$.

Um das etwas unhandliche H^{-1} Produkt besser zu veranschaulichen, kann man sich folgendes vorstellen: ϕ_f ist das Temperaturprofil im Gleichgewichtszustand, wenn die Wärmequellenverteilung durch f gegeben ist. Die H^{-1} Norm ist somit die L^2 Norm der Flussdichte.

Betrachtet man die oben definierte Funktion für sehr kleine ϵ , so erhält man im Limes eine Funktion aus zwei δ Distributionen. Für das H^{-1} Produkt müssen zunächst ϕ und $\nabla \phi$ bestimmt werden. Man erhält:

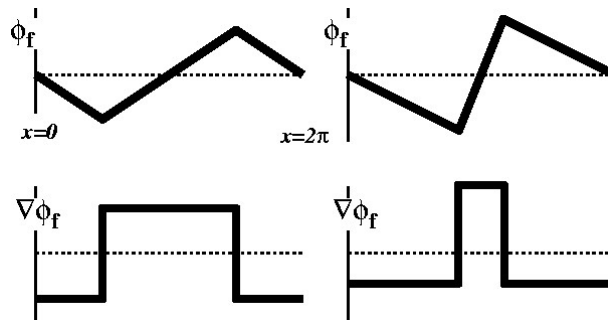


Abbildung 3: Stammfunktionen von f

Somit ergibt sich für die H^{-1} Norm:

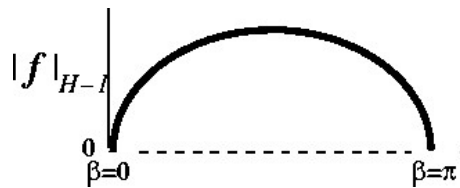


Abbildung 4: H^{-1} Norm

Hier sieht man die Abhängigkeit der Norm von β .

Das H^{-1} Produkt kann man auch noch auf eine andere Weise schreiben: Wegen

$$\nabla \cdot (\phi_f \cdot \nabla \phi_v) = \nabla \phi_f \cdot \nabla \phi_v + \phi_f \cdot v$$

Gilt:

$$\langle f, g \rangle_{H^{-1}} = \int \nabla \phi_f \cdot \nabla \phi_g dV = \int \nabla \cdot (\phi_f \cdot \nabla \phi_g) dV - \int \phi_f \cdot g dV$$

Nun kann man den ersten Term mittels des Satzes von Gauß vereinfachen:

$$\int \nabla \cdot (\phi_f \cdot \nabla \phi_g) dV = \oint \phi_f \cdot \nabla \phi_g d\vec{S} = 0$$

wenn man davon ausgeht, dass ϕ auf dem Rand Null ist. Wie wir später sehen werden, ist diese Form nützlich, um den zu einem Skalarprodukt gehörigen Gradienten zu finden.

3 Prinzip des 'gradient flows' am Beispiel der Diffusion

3.1 Physikalische Ausgangssituation

Betrachten wir nun am Beispiel der Diffusion die Vorgehensweise: $F(c)$ sei die gesamte, freie Energie eines Systems in Abhängigkeit von der Konzentration c . F ist häufig als Integral über die freie Energiedichte f gegeben, die z.B. von der Konzentration, dem Gradienten der Konzentration und dem Ort abhängt. F lässt sich dann also schreiben als:

$$F(c) = \int f(c(\vec{x}), \nabla c(\vec{x}), \vec{x}) dx$$

Ist v das Flussfeld, so beträgt die freie Energie für kleine $t > 0$: $F(c+tv)$. Damit ist die anfängliche Veränderungsrate der Funktion gegeben durch:

$$\left[\frac{d}{dt}F(c+tv)\right]_{t=0} = \langle \nabla F(c), v \rangle$$

Auch hier gibt es zu jedem inneren Produkt einen Gradienten, so dass obige Gleichheit gilt. ($- >$ Existenz und Eindeutigkeit folgen aus dem Satz von Lax Milgram. Man kann innere Produkte durch Modifikation des Gradienten in einander umrechnen. Statt einer Umrechnungsmatrix erhalten wir bei Funktionen einen Operator)

3.2 Gewichtung von inneren Produkten

Um der jeweiligen Physik eines Problems gerecht zu werden, kann es sinnvoll sein die Skalarprodukte noch zu gewichten, d.h. mit einer konstanten oder von x abhängigen Funktion M zu multiplizieren. Die gewichteten Produkte haben dann die Form:

$$\langle f, g \rangle_{L^2} = \int \frac{fg}{M} dV$$

$$\langle f, g \rangle_{H^{-1}} = \int [(\nabla M \nabla)^{-1} f] g dV$$

So kann berücksichtigt werden, dass sich Konzentrationsgefälle in Regionen hoher Teilchenmobilität schneller ausgleichen als in Regionen niedriger Mobilität. Solche Regionen könnten z.B. durch lokale Temperaturunterschiede entstehen: In den wärmeren Regionen ist die Mobilität deutlich höher als in den kälteren.

3.3 Berechnung des Gradienten ∇F

Für das Beispiel der Diffusion schauen wir uns die Berechnung des Gradienten aus dem mit einer Konstanten gewichteten H^{-1} Produkt einmal an:

Bei der Diffusion ist die gesamte freie Energie gegeben durch $F(c) = \frac{1}{2} \int c^2$ Wir suchen nun also einen Gradienten, der für das H^{-1} Skalarprodukt folgende Gleichheit erfüllt:

$$\left[\frac{d}{dt}F(c+vt)\right]_{t=0} = \langle \nabla F(c), v \rangle$$

Also

$$\left[\frac{d}{dt} \frac{1}{2} \int (c+vt)^2 dV\right]_{t=0} = -\frac{1}{M} \int [(\nabla^2)^{-1} \nabla F(c)] v dV$$

Bilden der Ableitung liefert:

$$\frac{1}{2} \int 2cv dV = -\frac{1}{M} \int [(\nabla^2)^{-1} \nabla F(c)] v dV$$

Etwas anders geschrieben, muss also für alle Funktionen v gelten:

$$\int (-Mc) \cdot v dV = \int [(\nabla^2)^{-1} \nabla F(c)] \cdot v dV$$

Da diese Gleichheit für alle v erfüllt sein muss, muss schon gelten:

$$-Mc = (\nabla^2)^{-1} \nabla F(c)$$

bzw.

$$\nabla F(c) = -M \nabla^2 c$$

3.4 Bestimmung des 'gradient flows'

Zu einem physikalischen Problem, bei dem die Gesamtenergie gegeben ist, kann man also zu einem geeigneten Skalarprodukt den Gradienten der Energiefunktion berechnen. Als nächstes sucht man die Funktion $c(t)$, so dass die zeitliche Entwicklung dieser Funktion dem negativen Gradienten der Energiefunktion entspricht und sich somit immer (entsprechend der Thermodynamik) in Richtung der kleinsten Energie entwickelt. In unserem Beispiel suchen wir also die Konzentration $c(t)$ so, dass

$$\frac{d}{dt}c(t) = -\nabla F(c)$$

Diese Konzentration erfüllt nun insgesamt die Gleichung $\frac{d}{dt}c(\vec{x}, t) = M\nabla^2 c(\vec{x}, t)$. Wie wir sehen, haben unsere Berechnungen das richtige Ergebnis geliefert. Die erhaltene Gleichung ist die Diffusionsgleichung. Um die obigen Gleichung nun tatsächlich zu lösen, entwickeln wir ein Verfahren, das im Wesentlichen dem impliziten Eulerverfahren entspricht.

Wir fixieren eine Startkonzentration $c(0)$ Für einen festen Zeitschritt $\Delta t = 2^{-j}$ konstruieren wir die Folge $c_j(0) = c(0), c_j(2\Delta t), c_j(3\Delta t), c_j(4\Delta t) \dots$

so, dass für alle $k = 0, 1, 2, \dots$ die Felder $q = c_j((k+1)\Delta t)$ aus den vorherigen Feldern $c = c_j(k\Delta t)$ errechnet werden, indem man den Ausdruck

$$F(q) - F(c) + \frac{1}{(2\Delta t)} \langle (q - c), (q - c) \rangle$$

minimiert. Für solch ein q gilt, dass $\frac{q-c}{\Delta t} = -\nabla F(q)$, denn: Wenn der Ausdruck in q minimal ist, so ist der Gradient (bezüglich q) dieses Ausdrucks gleich Null.

$$\begin{aligned} \nabla_q [F(q) - F(c) + \frac{1}{2\Delta t} \langle (q - c), (q - c) \rangle] &= 0 \\ \Rightarrow \nabla_q F(q) + \frac{1}{2\Delta t} 2(q - c) &= 0 \\ \Rightarrow \frac{q - c}{\Delta t} &= -\nabla_q F(q) \end{aligned}$$

Die linke Seite dieser Gleichung können wir als Näherungslösung für die zeitliche Ableitung der Konzentration ansehen. Nun haben wir also für jeden Zeitpunkt $k\Delta t$ ein Konzentrationsfeld $c(\vec{x})$. Durch lineare Interpolation in der Zeit erhalten wir eine Entwicklung $c_j(t)$. Um nun die tatsächliche Konzentration zu erhalten, zeigt man, dass der Limes für $j \rightarrow \infty$ existiert und setzt $c(t) = \lim_{j \rightarrow \infty} p_j(t)$. Um auf diese Weise eine Konzentration c zu konstruieren, braucht man einige Voraussetzungen, wie die Positivität von F , lower Semicontinuity ($\liminf f(x) \leq f(x_0)$ für alle x an jedem Punkt x_0), und eine Hölderstetigkeit (mit Exponent $1/2$) der linearen Interpolationen über $c_j(t)$. (Der Konvergenzbeweis wird hier nicht mehr ausgeführt.)

4 Anwendungen des 'gradient flows'

4.1 Beispiele für die Herleitung physikalischer Gleichungen

Mit diesem Schema kann nicht nur das Problem der Diffusion behandelt werden. So ergibt sich beispielsweise im L_2 Produkt mit $F = \frac{1}{2} \int y^2$ ein Gradient $\nabla F = My$, also insgesamt die Lösung der Bewegungsgleichung $\dot{y} = -My$. Mit $F = \frac{1}{2} \int (\nabla f)^2$ ergibt sich (ebenfalls) die Lösung der Wärmeleitungs-/Diffusionsgleichung $\frac{df}{dt} = \Delta f$.

4.2 Zusammengesetzte freie Energiedichten

Eine übliche Form für freie Energiedichten ist $f(y(\vec{x})) = f_{hom}(y) + \epsilon^2 \Gamma^2(\nabla y)$. Dabei ist f_{hom} die freie Energiedichte für ein homogenes System und der zweite Term berücksichtigt Energie aufgrund von Gradienten in y . Für isotrope Oberflächen ist $\Gamma(\nabla y) = \nabla y$.

So ergibt sich für $\epsilon^2 = 0.5$ im H^{-1} Produkt die Cahn-Hillard Gleichung: $\dot{y} = -\nabla M \nabla (f'_{hom}(y) - \nabla \cdot \Gamma \Gamma')$. Sie beschreibt die Entwicklung eines Konzentrationsfeldes während einer Phasentrennung, wobei die Konzentration insgesamt eine Erhaltungsgröße ist. Metallegierungen sind beispielsweise in der flüssigen Phase homogen gemischt. Erstarrt die Legierung aber wieder, so trennt sich das homogene Gemisch zum Teil wieder. Es bilden sich Teilchen einer Metallsorte, die kleinere Metallteilchen der selben Sorte in sich aufnehmen und so wachsen. Dieser Prozess ist auf www.ctcms.nist.gov/wcraig durch Farben schön illustriert.

Im L^2 Produkt erhält man die Allen-Cahn Gleichung: $\dot{y} = -M(f'_{hom}(y) - \nabla \cdot \Gamma \Gamma')$. Auch hierbei handelt es sich um eine spezielle physikalische Gleichung der Materialwissenschaften. (Entwicklung einer nicht-Erhaltungsgröße während 'anti-phase domain coarsening' = 'anti-Phasen Gebietsvergrößerung')

4.3 Bewegung geometrischer Strukturen

Als nächstes schauen wir uns an, ob man mit der 'gradient flow' Methode nicht nur Temperaturverteilungen oder Konzentrationen behandeln, sondern auch die Bewegung einer geometrischen Struktur beschreiben kann.

Sei C_0 eine glatte Kurve in der Ebene. Betrachte Vektorfelder $v\vec{n}_{C_0}$, die senkrecht auf C_0 stehen. Diese sollen eine Anfangsgeschwindigkeit beschreiben, mit der sich die Kurve in den einzelnen Punkten bewegt. Für verschiedene v 's und kleine Zeiten t bezeichnen wir mit $C_t(v)$ die Kurve, die wir erhalten, wenn wir den Punkt p auf C_0 zum Punkt $p + tv(p)\vec{v}_{C_0}(p)$ verschieben. Wieder wählen wir ein inneres Produkt und eine Energiefunktion in Abhängigkeit von der Oberfläche, um daraus den Gradienten und die Beschreibung der Kurve zu erhalten. Im folgenden sei die Energiefunktion die Länge der Kurve.

4.3.1 Motion by curvature

Im L_2 Produkt muss der Ausdruck $LENGTH(C_{\Delta t}(v)) + \frac{1}{2\Delta t} \int_{C_0} v^2$ über alle v minimiert werden. Das Ergebnis entspricht (fast) der Krümmung der Funktion $C_{\Delta t}(v)$. Dies führt (nach dem oben beschriebenen Verfahren) zu einer Kurve, deren normale Geschwindigkeit der Krümmung der Kurve zu dieser Zeit am jeweiligen Punkt entspricht:

$v = \kappa$ oder bei gewichtetem L^2 Produkt: $v = M\kappa$ (zu 'motion by curvature' siehe auch Kapitel 4/ Jans Vortrag).

Solche Bewegungen treten bei Grenzflächenbewegungen auf, bei denen sich die bulk energy (Energie, verursacht durch Kräfte, die auf das ganze Volumen wirken, also z.B. Gravitation im Gegensatz zur Oberflächenspannung) nicht ändert und die Geschwindigkeit der Grenzfläche hauptsächlich durch die Mobilität beschränkt wird.

4.3.2 Surface diffusion

Das H^{-1} Produkt (mit der der Länge der Kurve als Energiefunktion) liefert als optimale Geschwindigkeit (fast) $-\Delta_{C_0}\kappa$, wobei κ die Krümmung von $C_{\Delta t}$ ist. Diese Grenzflächenbewegung ist eine Art Oberflächendiffusion, bei der die durch die Kurve eingeschlossene Fläche konstant bleibt.

Man könnte sich auch vorstellen, beliebige positive Linearkombinationen von L_2 und H^{-1} zu betrachten und so weitere Arten von Oberflächenbewegungen zu erhalten.

4.3.3 Motion by weighted mean curvature

Bei den vorangegangenen Beispielen sind wir davon ausgegangen, dass die Oberflächenenergiedichte für alle Teile der Kurve gleich ist. Als Energiefunktion haben wir die Länge der Kurve verwendet. Wenn man den Einfluss ungleichmäßiger Oberflächenenergien mit einbringen will, so muss man die Zunahme der Oberfläche noch mit der Oberflächenenergiedichte gewichten und dann über alle Geschwindigkeiten des Gewichteten Terms minimieren. In diesem Fall spricht man von 'motion by weighted mean curvature'. Diese hat die Form $v = M\kappa_\gamma$ wobei κ_γ die mit der Oberflächenenergie gewichtete, mittlere Krümmung ist. Möchte man bulk energy Änderungen bei der Bewegung berücksichtigen, so muss man die Energiefunktion ändern. Das innere Produkt beschreibt nur die Kinetik und hat keinen Einfluss auf mögliche Energieänderungen.

4.3.4 Wulff Formen

Wie schon mehrfach erwähnt, versucht ein System immer den Zustand kleinst möglicher Energie zu erreichen. In diesem Zusammenhang macht es Sinn, zu einer Oberflächenenergiefunktion ϕ folgende Definition einzuführen:

$W = \{x \in R^3 : x \cdot u \leq \phi(u) \text{ für jeden Einheitsvektor } u \in R^3\}$. Dies ist die sogenannte Wulff-Form (Wulff shape). Eine grundlegende Eigenschaft der Wulff-Form ist, dass $\phi(\delta W) \leq \phi(\delta K)$ wenn K ein Körper mit dem gleichen Volumen wie W ist. W hat also für sein Volumen die kleinste Oberflächenenergie. Man nennt die Oberflächenenergie elliptisch, falls ihre Wulff-Form glatt und gleichmäßig konvex ist. Man nennt sie kristallin, falls ihre Wulff-Form ein Polyeder ist.

4.3.5 Beispiel Seifenblasen

Ein wichtiger Teil der geometrischen Maßtheorie beschäftigt sich mit Partitionsproblemen. Dies bedeutet zu gegebenen Volumen V_1, V_2, \dots, V_N eine Einteilung des Gebietes K^0 in Regionen K^1, K^2, \dots, K^N zu finden. Hierbei muss häufig ein Term der Form

$$\sum_{0 \leq i < j \leq N} \phi^{i,j}(\delta K^i \cap \delta K^j)$$

minimiert werden. Dabei hängen die verschiedenen Oberflächenenergie-Integranden $\phi^{i,j}$ von den verschiedenen möglichen Grenzflächen $\delta K^i \cap \delta K^j$ ab. Um die Minimalisierung wirklich ausrechnen zu können müssen einige, bestimmte Vorderungen gemacht werden.

In einem mathematischen Modell für Seifenblasen(gefüge) sind die Oberflächenenergien

alle proportional zur Oberfläche. Daher kann man verwenden, dass $\phi^{i,j}(v) = |v|$ für alle i, j und v . In diesem Fall vereinfacht sich der zu minimierende Term zu

$$\frac{1}{2} \sum AREA(\delta K^i)$$

Dies ist vollständig analog zur vorherigen Betrachtung vom Rand der Kurve (in 2D) als Oberflächenenergie. Die für Seifenblasen zutreffende Bewegung gehorcht dem 'motion by curvature' Gesetz (mit einer Art Randbedingung).

Bei allen möglichen Zusammensetzungen von Seifenblasengefügen können sich die Seifenoberflächen nur auf zwei mögliche Arten treffen: Entweder drei Oberflächen treffen sich entlang einer glatten Kurve in einem Winkel von jeweils 120° oder vier solcher Kurven treffen sich in einem Punkt in einem (tetraedischen) Winkel von $\cos^{-1}(-1/3) \approx 109^\circ$ und vereinigen so sechs Oberflächen. Diese Ergebnisse waren zwar schon Mitte des 19. Jh. bekannt, wurden aber erst 1974 als Konsequenz der Oberflächenminimierung bewiesen.

Die Wulff-Form einer einzelnen Seifenblase ist eine Sphäre. Treffen sich zwei Seifenblasen, so behalten sie ihre äußere Sphärenform bei und die 'Trennwand' im Innern ist wiederum eine Späre. Dabei treffen sich die Oberflächen immer in einem Winkel von 120° . Dieses Problem ist als 'Double Bubble problem' bekannt geworden und wurde erst im Jahre 2000 bewiesen.

4.4 Berücksichtigung der bulk energy

Als nächstes schauen wir uns einmal Fälle an, bei denen die Oberflächenenergie unstetig oder nicht differenzierbar ist. Betrachten wir beispielsweise ein Material, das aus verschiedenen Teilchen (Körnern) besteht (oder in verschiedenen Aggregatzuständen vorliegt) und bei dessen Bewegung das Material in den Körnern (oder den Phasen) nicht erhalten bleibt. Die Gesamtenergie dieses Systems setzt sich zusammen aus der Summe der Grenzflächenenergien und den bulk energies der Phasen:

$$F = \sum_{a,b} \int_{\vec{x} \in S_{ab}} \gamma_{ab}(\vec{n}_{ab}(\vec{x})) dA + \sum_a \int_a F_a dV$$

Der gradient flow einer solchen Oberfläche mit einem entsprechend der Mobilität gewichteten L_2 Produkt führt zu einer Normalengeschwindigkeit von

$$v = M(\kappa_\gamma + \Delta F)$$

Dabei ist M eine Mobilitätsfunktion, κ_γ die gewichtete, mittlere Krümmung und ΔF die bulk energy pro Volumen der Phase hinter der Oberfläche minus die bulk energy pro Volumen der Phase vor der Oberfläche.

4.5 Eckige Wulff-Formen

Wie oben erklärt, betragen die Winkel an Dreifachverbindungen von Seifenblasen immer 120° . Da für keine Oberfläche eine bestimmte Richtung bevorzugt ist (die Wulff-Form der Seifenblase ist ja ein Kreis), teilt sich der gesamte Raumwinkel von 360° bei Dreifachverbindungen gleichmäßig auf. Legt man die Position einer Grenzfläche fest, so sind auch die anderen beiden Grenzflächen eindeutig festgelegt. Ist die Wulff-Form eines Stoffes aber

beispielsweise ein reguläres Achteck, so gibt es ausgezeichnete, energetisch gleichwertige Raumrichtungen und somit drei verschiedene Gleichgewichtspositionen, (wenn man ein Segment festhält):



Abbildung 5: Wulff-Form: Achteck

Die Anzahl an Gleichgewichtspositionen für Dreifachverbindungen wird sogar noch höher, wenn die Wulff-Formen der drei Oberflächen regelmäßige Sechsecke sind.

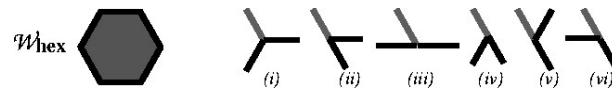


Abbildung 6: Wulff-Form: Sechseck

Der Grund dafür ist, dass bei diesen eckigen Wulff-Formen mehrere Winkel Minima der Grenzflächenenergie-Winkel Funktion sind. Daher können geometrisch verschiedene, aber energetisch gleiche Formen auftreten.

Im Allgemeinen kann man auch hier eine Variationsformulierung nutzen, um vorherzusagen, wie sich eine Konfiguration bewegt. Dabei muss auch hier die oben angegebene Energiefunktion mit einem passenden Skalarprodukt benutzt werden.

Gibt es Dreifachverbindungen, so könnte man die Bewegung des Trippelpunktes beschreiben. Man schaut sich an, welche Energieänderungen auftreten, wenn man den Punkt (x_n, y_n) in einem Zeitintervall Δt zu einem Punkt (x_{n+1}, y_{n+1}) bewegt. Nun spielen die Energieänderungen aller drei Grenzflächen S_i eine Rolle. Wieder kann man die Energieänderung bestimmen und den dann resultierenden Term minimieren. Eine weitere Möglichkeit ist, dass sich eine Grenzfläche an einem Trippelpunkt weiterbewegt und so die Art des Trippelpunktes ändert. Dies nennt man Einführen kleiner Segmente.

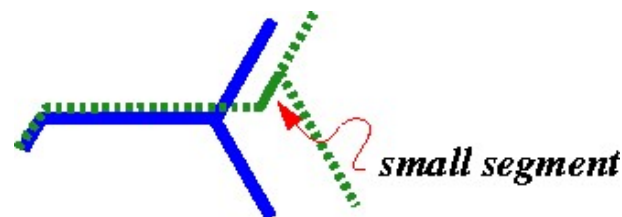


Abbildung 7: Einführen kleiner Segmente

Auch hier kann die Bewegung mittels einer Variationsformulierung berechnet werden. Es tritt allerdings eine Nebenbedingung auf, ohne die diese Art von Bewegung nicht realisiert werden kann.

Man kann beweisen, dass das Einführen von mehr als einem Segment nie zu einer weiteren Energieminderung führen kann. Nun muss man die Bewegung eines Trippelpunktes insgesamt bestimmen, indem man schaut, ob die Nebenbedingung zum Einführen

kleiner Segmente für eine der Grenzflächen erfüllt werden kann. Ist dies der Fall, so wird die dazugehörige Bewegung ausgeführt, sonst kann das Verfahren ohne Einfügen eines Segmentes angewandt werden. Kann die Bedingung für alle Grenzflächen erfüllt werden, so ist die gewählte Formulierung des Problems falsch/nicht geeignet um die Bewegung des Trippelpunktes zu bestimmen.

4.6 Innere Produkte als Volumenintegrale

In allen beschriebenen Verfahren, wurde für das innere Produkt über die Oberfläche der Kurve integriert. Es kann allerdings Fälle geben, bei denen dieses Verfahren nicht mehr anwendbar ist - z.B. wenn Singularitäten auftreten. Um solche Schwierigkeiten zu vermeiden, könnte man auf die Idee kommen, statt des Flächenintegrals ein Volumenintegral über von der Kurve eingeschlossene Flächen zu verwenden. (Eine Dimension höher sind Singularitäten Nullmengen?).

Um ein solches Verfahren umzusetzen, muss man sich folgende Frage stellen: Wenn ich ein Anfangsvolumen hab und zu einem anderen Volumen übergehen möchte, wie groß ist der Abstand der beiden Mengen? Um ein Maß für die Entfernung zweier Mengen voneinander zu haben, verwendet man häufig die symmetrische Differenz. Sie ist definiert als:

$$K \Delta L = (L - K) \cup (K - L)$$

Also die Vereinigung des Teils von L der nicht in K liegt mit dem Teil von K der nicht in L liegt. Zwei Mengen sind also nah beieinander, falls sie bis auf kleine Teile Deckungsgleich sind.

Man kann folgende (für das L^2 Produkte relevante) Relation zeigen:

$$\frac{1}{\Delta t} \int_{K_0 \Delta K} \text{dist}(x, C_0) dx \approx \frac{1}{2\Delta t} \int_{C_0} v^2$$

Statt über alle Geschwindigkeiten v zu minimieren, kann nun über alle möglichen Volumen von K minimiert werden. Einigen Entwicklungen können auf diese Weise trotz gewisser Singularitäten fortgeführt werden.

5 Zusammenfassung

Die Interpretation eines inneren Produkts als Möglichkeit zur Beschreibung von Bewegungen in einer Variationsformulierung ist keine neue Theorie der Physik, sondern eher Hilfsmittel eines verallgemeinerten Konzepts, mit dem sich Bewegungsgleichungen herleiten lassen. Das vorgestellte Variationsprinzip lässt sich auch für nichtstetige Energien anwenden und ist zur Beschreibung von Oberflächen zum Teil deutlich einfacher als Systeme von Differentialgleichungen. Ein weiterer Vorteil ist die klare Trennung von Kinetik und Thermodynamik. Alle Kinetik ist im inneren Produkt enthalten, während die Thermodynamik in der Energiefunktion steckt. So können beide Teile getrennt voneinander variiert werden. Die vielfältigen Anwendungen zeigen, dass dieses Verfahren von großer praktischer Bedeutung ist.

6 Quellen

- (1) 'Optimal Geometry in Equilibrium and Growth' Fred Almgren, Jean E. Taylor
- (2) 'Variational Methods for Microstructural Evolution' W. Craig Carter, Jean E. Taylor, J.W.Cahn
- (3) 'Surface motion due to surface energy reduction' Jean E. Taylor