

Bachelorarbeit aus der Physik

**Aktives Phasenfeldkristall-Modell
für biologische Systeme**

vorgelegt von **Dominik Geyer**

am **10. Januar 2018**



Betreuer: Prof. Dr. Michael Schmiedeberg

Professur für Theoretische Physik
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

Abstract

Im Zuge dieser Arbeit soll das aktive Phasenfeldkristall-Modell erläutert und auf biologische Systeme angewendet werden. Insbesondere werden numerische Berechnungen durchgeführt, um den Phasenübergang von Flüssigkeit zu Kristall am Computer zu simulieren.

Außerdem soll auf die explizite Implementierung und die auftretenden numerischen Schwierigkeiten eingegangen werden.

Danksagung

Mein Dank gilt Herrn Prof. Dr. Schmiedeberg, Professor für weiche kondensierte Materie und Jamming an der FAU Erlangen-Nürnberg, für das Ermöglichen dieser Bachelorarbeit.

Ebenfalls danke ich meinen Betreuern Miriam Martinsons und Benedikt Decker für die geduldige Beantwortung aller Fragen.

Besonderer Dank gilt meiner Forschungsgruppe, die mir stets hilfsbereit zur Seite stand. Das wöchentliche Gruppenfrühstück ermöglichte mir spannende Einblicke in die aktuelle Forschung.

Meine Kommilitonen am Department Physik sorgten für eine tolle, entspannte und kollegiale Arbeitsatmosphäre. Vielen Dank dafür!

Zuletzt möchte ich noch meiner Familie und meinen Freunden für die tatkräftige Unterstützung danken.

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.

Erlangen, den 10. Januar 2018,

.....
Dominik Geyer

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	V
1. Motivation	1
2. Grundlagen	2
2.1. Modellierung des Systems	2
2.1.1. Aktives Phasenfeldkristall-Modell	2
2.1.2. Phasenfeld-Modell	5
2.1.3. Toner–Tu Modell	7
2.2. Numerische Berechnung	9
2.2.1. Implementierung	9
2.2.2. Diskretisierung	11
3. Numerische Ergebnisse	14
3.1. Analyse des Ordnungsparameters ψ	14
3.1.1. Ergebnisse des Phasenfeldkristall-Modells	14
3.1.2. Fehlerquelle Datenformat reziproker Raum	17
3.2. Analyse des Falls $C_4 = 0$	19
3.2.1. Ergebnisse aus der Literatur	19
3.2.2. Aktives Phasenfeldkristall-Modell	20
4. Zusammenfassung	24
Literaturverzeichnis	25

Abbildungsverzeichnis

1.0.1.	A: Pinguinkolonie in der Antarktis, B: Gelbe und weiße Flecken im Gesicht ermöglichen Identifizierung einzelner Tiere C: kollektive Bewegung angedeutet durch rote Pfeile [1]	1
2.2.2.	Kosinus-Schwingung mit Wellenlänge $\lambda_x = 10$ und $\lambda_y = 5$ ergibt nach einer Fourier-Transformation [11] in den reziproken Raum einen Peak bei $k_x = \frac{2\pi}{10} \approx 0,628$ und $k_y = \frac{2\pi}{5} \approx 1,257$. Um die Übersichtlichkeit zu gewährleisten wurde nur Quadrant I geplottet.	12
3.1.3.	Zwei-dimensionales Phasendiagramm aus [2]. Zur der Berechnung wurde eine Monomodennäherung benutzt [2].	14
3.1.4.	Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschrift aus Gleichung 3.1.2 mit $r = -0,2$ und $\psi = 0,05$. Zu sehen ist eine Teilchendichteverteilung im direkten Raum und deren Fourier-Transformierte, dabei erkennt man deutlich die Streifenphase und den Offset.	15
3.1.5.	Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschrift aus Gleichung 3.1.2 mit $r = -0,2$ und $\psi = 0,1$. Zu sehen ist eine Teilchendichteverteilung im direkten Raum und deren Fourier-Transformierte, dabei erkennt man deutlich die Streifenphase und den Offset.	16
3.1.6.	Verlauf des freien Energiefunktionales aus Gleichung 3.1.1 - links Streifenphasen, rechts Dreiecksphase	16
3.1.7.	Aufgrund der Maschinengenauigkeit entsteht eine Symmetriebrechung im reziproken Raum. Zu sehen sind unphysikalischen Peaks, die durch Aufschaukeln der Symmetriebrechung entstehen.	17
3.1.8.	Anwachsen der unphysikalischen Peaks (lila Kurve) und der Symmetriebrechung sprich der Differenz zwischen Quadrant I und IV (grüne Kurve). Links ist zeitlicher Verlauf des Realteils rechts der des Imaginärteils, wobei die logarithmische Auftragung zu beachten ist.	18
3.2.9.	Verschiedenen Phasen des Ordnungsparameterfeldes. $\bar{\psi}$ und r sind konstant. v_0 wird von a nach d schrittweise erhöht. e) und f) zeigt ein zu b) und c) inverse Struktur [6].	19
3.2.10.	Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschriften Gleichung 3.2.3 mit $v_0 = 0,1$. Zu sehen ist ein ruhende Kristall im direkten Raum (links) und reziproken Raum (rechts).	20

3.2.11. Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschriften Gleichung 3.2.3 mit $v_0 = 0,15$. Zu sehen ist ein sich auflösende Kristallstruktur im direkten Raum (links). Dies wird besonders deutlich bei den Peaks im reziproken Raum (rechts).	21
3.2.12. Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschriften Gleichung 3.2.3 mit $v_0 = 0,175$. Zu sehen ist ein mobiler Kristall im direkten Raum (links) und reziproken Raum (rechts).	21
3.2.13. Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschriften Gleichung 3.2.3 mit $v_0 = 0,19$. Zu sehen ist eine Streifenphase im direkten Raum (links) und reziproken Raum (rechts), da der große Eigenantrieb keine Kristallbildung zu lässt.	22
3.2.14. Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschriften Gleichung 3.2.3 mit $v_0 = 0,15$ bzw. $v_0 = 0,175$. Zu sehen ist die inverse Struktur von Abbildung 3.2.11 (links) und Abbildung 3.2.12 (rechts) begründet durch die Symmetrie der Bewegungsgleichungen.	22
3.2.15. Zeitlicher Verlauf der freien Energie im Fall Abbildung 3.2.12 mit $v_0 = 0,175$. Zu sehen ist ein Plateau zwischen $t = 500$ und $t = 800$, welches nicht dem Gleichgewichtszustand entspricht.	23

1. Motivation

Kristalle stellen eine besondere Klasse von kondensierter Materie da. Ihr periodischer Aufbau aus Atomen oder Molekülen vereinfacht die Behandlung von physikalischen Phänomenen beziehungsweise macht die Betrachtung bestimmter Phänomene erst möglich. Aber nicht nur auf atomarer Ebene sind Kristalle interessant, sondern auch in biologischen Systeme lassen sich kristalline Strukturen finden.

Um diese Behauptung begründen zu können, ist es notwendig biologische Systeme zu modellieren und die Resultate dieser Modelle zu überprüfen. Bevor im Rahmen dieser Arbeit ein solches Modell, das aktive Phasenfeldkristall-Modell [6, 8], vorgestellt wird, soll die Ausgangslage skizziert werden.

Die Schwierigkeit bei biologischen Systemen genauso wie bei Festkörpern ist, dass es eine große Anzahl an zu erfassenden Objekten gibt. Eine Möglichkeit zur theoretischen Beschreibung bietet die Vielteilchentheorie. Betrachtet man die Dynamik eines Vielteilchensystemes, muss eine große Anzahl an einzelnen Bewegungsgleichungen gelöst werden. Da dies sehr aufwendig sein kann, geht man zu Modellen über, die nicht das Finden einer elementaren Lösung jeder einzelnen Bewegungsgleichung benötigen. Ein Beispiel für ein Vielteilchensystem, indem das Finden dieser elementaren Lösung schwierig ist, ist eine Pinguinkolonie, vgl. Abbildung 1.0.1 aus [1].

Im weiteren Verlauf werden wir sehen, dass sich eine Pinguinkolonie gut als Anschauung für ein biologisches System eignet, auf das das aktive Phasenfeldkristall-Modell angewendet werden kann. Denn zum Einen lässt sich die Dynamik der Pinguine auf zwei Dimensionen reduzieren, und zum Anderen besteht die Möglichkeit einzelne Tiere in der Kolonie eindeutig zu identifizieren. Das ermöglicht es die Position der Tiere über einen langen Zeitraum hinweg exakt zu bestimmen [1]. Die Fragen, welche sich nun stellen, sind die folgenden. Wie lässt sich die Bewegung der Tiere oder allgemein die Bewegung in biologischen Systemen beschreiben? Wann bilden sich periodische Strukturen aus und ist das aktive Phasenfeldkristall-Modell dazu in der Lage, diese richtig zu modellieren?

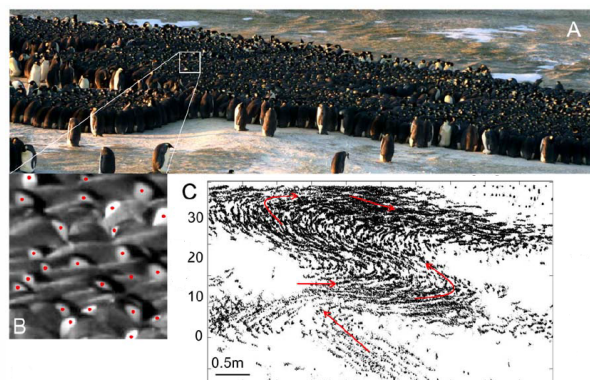


Abbildung 1.0.1: A: Pinguinkolonie in der Antarktis, B: Gelbe und weiße Flecken im Gesicht ermöglichen Identifizierung einzelner Tiere C: kollektive Bewegung angedeutet durch rote Pfeile [1]

2. Grundlagen

Im Folgenden sollen die theoretischen Grundlagen erörtert werden, die nötig sind, um das physikalische System zu verstehen, zu modellieren und anschließen mit einem Computer zu simulieren.

Dies wird in zwei Schritten erfolgen. In Abschnitt 2.1 wird die Modellierung des Systems begründet, und in Abschnitt 2.2 wird auf die numerische Simulation eingegangen.

2.1. Modellierung des Systems

Um mobile und ruhende Kristalle in einem aktiven System zu modellieren kann ein aktives Phasensfeldkristall-Modell (PFK) genutzt werden.

Ziel soll es sein, die Dynamik von Objekten mit eigenem Antrieb korrekt zu beschreiben. Die Art und Weise, in welcher sich diese Objekte anordnen, ist hierbei von besonderem Interesse und stellt den Bezug zur Kristallstruktur dar. Von den Objekten fordert man, dass sie gleichartig und in ausreichender Zahl vorhanden sind. Ein Beispiel für ein mögliches aktives System, das so modelliert werden kann, ist eine Pinguinkolonie.

Um ein grundlegendes Verständnis des PFK-Modells zu vermitteln, wird die Modellierung in drei Schritte aufgeteilt. Zuerst wird in Abschnitt 2.1.1 das aktive Phasensfeldkristall-Modell formal eingeführt. Anschließend wird zur Veranschaulichung des PFK-Modells in Abschnitt 2.1.2 das Phasensfeld-Modell beschrieben und in Abschnitt 2.1.3 das Toner-Tu Modell erörtert.

2.1.1. Aktives Phasensfeldkristall-Modell

Grundlage für das aktive Phasensfeldkristall-Modell bildet die Landau-Theorie [12]. Grundsätzlich werden mit der Landau-Theorie Phasenübergänge modelliert. Die Theorie beruht auf der polynomiellen Entwicklung einer freien Energie $\mathcal{F}(\phi)$ als Funktion eines Parameters ϕ , dem sogenannten Ordnungsparameter. Der Ordnungsparameter dient zur Beschreibung des Phasenübergangs [12]. Ziel ist es das System durch ein solches Energiefunktional zu modellieren und anschließend die Minima des Funktionals zu finden.

Es wird davon ausgegangen, dass das Energiefunktional $\mathcal{F}(\phi)$ von der Form

$$\tilde{\mathcal{F}}(\phi, \vec{P}) = \tilde{\mathcal{F}}_{PFC}(\phi) + \tilde{\mathcal{F}}_P(\vec{P}) + \tilde{\mathcal{F}}_{WW}(\phi, \vec{P}) \quad (2.1.1)$$

ist. Das bedeutet, dass das Funktional aus drei Teilen aufgebaut ist, einem für die Translation $\tilde{\mathcal{F}}_{PFC}$, einem für die Polarisation $\tilde{\mathcal{F}}_P$ und einem für die Wechselwirkung $\tilde{\mathcal{F}}_{WW}$. Bevor auf die einzelnen Terme eingegangen wird, kann mithilfe der Brownschen Dynamik [9] das

aktive Phasenfeldkristall-Modell für biologische System konstruiert werden. Die folgenden analytischen Ausführungen bzgl. des PFK-Modells sind angelehnt an [6] und werden hier im Zusammenhang mit unserer Fragestellung wiedergegeben.

Um die Brownsche Dynamik verwenden zu können, definieren wir eine Teilchendichte-Verteilung $\rho(\vec{r}, \hat{u}, t)$ abhängig von einem Ortsvektor \vec{r} und der Zeit t und eine effektive Geschwindigkeit v der Teilchen in Richtung eines Einheitsvektors \hat{u} . Wird von einer überdämpften Brownschen Bewegung ausgegangen, erhält man die Bewegungsgleichung [6]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\vec{r}, \hat{u}, t)}{\partial t} &= D \nabla \cdot \left(\beta \rho(\vec{r}, \hat{u}, t) \nabla \frac{\delta \tilde{\mathcal{F}}}{\delta \rho(\vec{r}, \hat{u}, t)} \right) \\ &+ D_r \partial_\phi \left(\beta \rho(\vec{r}, \hat{u}, t) \partial_\phi \frac{\delta \tilde{\mathcal{F}}}{\delta \rho(\vec{r}, \hat{u}, t)} \right) \\ &- \nabla \cdot \left(v \rho(\vec{r}, \hat{u}, t) \hat{u} \right) \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

mit der inversen thermischen Energie $\beta = (k_B T)^{-1}$ und der räumlichen Diffusionskonstante D , wobei angenommen wurde, dass die Diffusion isotrop ist. Die Rotationsdiffusion D_r soll konstant sein [6]. Bemerkenswert hier ist, dass der letzte Term der Summe von der Geschwindigkeit des Teilchen abhängt. Auf diese Tatsache wird später noch näher eingegangen.

Um das hier verwendete Energiefunktional $\tilde{\mathcal{F}}$ näher zu spezifizieren sind mehrere Schritte notwendig.

Zuerst definieren wir eine mittlere Dichte $\bar{\rho}$ und die lokale Abweichung ϕ_1 von dieser. Im weiteren Verlauf, so wie bei allen numerischen Berechnungen, muss die mittlere Dichte konstant sein. Anderfalls würde die Massenerhaltung verletzt. Integration über die Orientierung \hat{u} liefert uns die Anpassung der lokalen Dichteverteilung $\bar{\rho} \phi_1(\vec{r}, t)$ und das erste Richtungsmoment $\bar{\rho} \vec{P}(\vec{r}, t)$ gemäß [6] zu

$$\bar{\rho} = \frac{1}{V \Omega} \int_{V, \Omega} \rho(\vec{r}, \hat{u}, t) d\vec{r} d\hat{u}, \quad (2.1.3)$$

$$\bar{\rho} \phi_1(\vec{r}, t) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \rho(\vec{r}, \hat{u}, t) d\hat{u} - \bar{\rho}, \quad (2.1.4)$$

$$\bar{\rho} \vec{P}(\vec{r}, t) = \frac{d}{\Omega} \int_{\Omega} \rho(\vec{r}, \hat{u}, t) d\hat{u}, \quad (2.1.5)$$

wobei V das räumliche Volumen des Systems und Ω die Oberfläche der Einheitskugel ist. Außerdem wollen wir uns im Folgenden auf Dimension $d = 2$ beschränken. Noch zu erwähnen ist, dass der Vektor \vec{P} die Polarisation darstellt, auf die später in Abschnitt 2.1.3 noch eingegangen wird.

Als nächstes wird die Teilchendichteverteilung $\rho(\vec{r}, \hat{u}, t)$ mit Hilfe von Annahme über Wechselwirkungen approximiert, sodass nach [6]

$$\rho(\vec{r}, \hat{u}, t) \approx \bar{\rho} + \bar{\rho} \phi_1(\vec{r}, t) + \bar{\rho} \hat{u} \vec{P}(\vec{r}, t) + \dots, \quad (2.1.6)$$

und in Gleichung 2.1.2 eingesetzt. Weitere Umformungen liefern schließlich Bewegungsgleichungen für $\bar{\rho}\phi_1(\vec{r}, t)$ und $\bar{\rho}\vec{P}(\vec{r}, t)$ [6]:

$$\partial_t(\bar{\rho}\phi_1) = \frac{\beta D \bar{\rho}}{2\pi} \nabla^2 \frac{\delta \tilde{\mathcal{F}}}{\delta(\bar{\rho}\phi_1)} - \frac{v}{2} \nabla(\bar{\rho}\vec{P}) \quad (2.1.7)$$

$$\partial_t(\bar{\rho}\vec{P}) = \frac{\beta D \bar{\rho}}{\pi} \nabla^2 \frac{\delta \tilde{\mathcal{F}}}{\delta(\bar{\rho}\vec{P})} - \frac{\beta D_r \bar{\rho}}{\pi} \frac{\delta \tilde{\mathcal{F}}}{\delta(\bar{\rho}\vec{P})} - v \nabla(\bar{\rho}\phi_1). \quad (2.1.8)$$

Unter Berücksichtigung, dass wir ein Energiefunktional definieren wollen, wählen wir unseren Ordnungsparameter $\phi = \bar{\phi} + \phi_1$. Mit einer weiteren Umformung erhält man für eine überdämpfte Brownsche Dynamik folgende Diffusionsgleichungen [8]

$$\partial_t \phi = \nabla^2 \frac{\delta \tilde{\mathcal{F}}}{\delta \phi} - v_0 \nabla \vec{P}, \quad (2.1.9)$$

$$\partial_t \vec{P} = \nabla^2 \frac{\delta \tilde{\mathcal{F}}}{\delta \vec{P}} - D_r \frac{\delta \tilde{\mathcal{F}}}{\delta \vec{P}} - v_0 \nabla \phi, \quad (2.1.10)$$

wobei man berücksichtigen sollte, dass die von v_0 abhängigen Terme den Eigenantrieb des Teilchens modellieren. $v_0 = const. \neq 0$ beschreibt nicht die effektive Geschwindigkeit des Teilchens, sondern mit welcher es sich selbst antreibt [6, 8]. Bei einer Dynamik ohne Eigenantrieb wäre $v_0 = 0$, also die letzten beiden Terme der Diffusionsgleichungen nicht vorhanden.

In den folgenden Abschnitt 2.1.2 und Abschnitt 2.1.3 soll nun plausibel gemacht werden, dass

$$\tilde{\mathcal{F}}_{PFC}(\phi) = \int_{\Omega} d^2r \left\{ \frac{\phi}{2} [a\Delta T + \lambda(q_0^2 + \nabla^2)^2] \phi + u \frac{\phi^4}{4} \right\}, \quad (2.1.11)$$

$$\tilde{\mathcal{F}}_P(\vec{P}) = \int_{\Omega} d^2r \left\{ \frac{1}{2} C_1 \vec{P}^2 + \frac{1}{4} C_4 [\vec{P}^2]^2 \right\} \quad (2.1.12)$$

gilt, wobei dort auf die Konstanten eingegangen wird. Mit diesen Energiefunktionalen lassen sich die Bewegungsgleichungen für die Felder ϕ und \vec{P} zu einem Gleichungssystem zusammenfassen. Um das Energiefunktional zu minimieren muss das so gefundene Gleichungssystem gelöst werden, was in unserem Fall numerisch geschehen wird. Das zu lösende Gleichungssystem im Fall des aktiven Phasenfeldkristall-Modells lautet

$$\partial_t \phi = \nabla^2 \left\{ [a\Delta T + \lambda(q_0^2 + \nabla^2)^2 + 3\bar{\phi}^2] \phi + 3\bar{\phi} \phi^2 + u \phi_1^3 \right\} - v_0 \nabla \cdot \vec{P}, \quad (2.1.13)$$

$$\partial_t \vec{P} = \nabla^2 (C_1 \vec{P} + C_4 (\vec{P}^2) \vec{P}) - D_r (C_1 \vec{P} + C_4 (\vec{P}^2) \vec{P}) - v_0 \nabla \phi. \quad (2.1.14)$$

2.1.2. Phasenfeld-Modell

Zuerst soll das Energiefunktional $\tilde{\mathcal{F}}_{PFC}(\phi)$ aus Gleichung 2.1.11 näher erläutert werden. Dazu betrachten wir ein Phasenfeld-Modell. Ziel ist das durch die Landau-Theorie gefundene Funktional innerhalb der kontinuierlichen Feld-Theorie zu verstehen.

Die kontinuierliche Feld-Theorie bildet die Grundlage für das Modellieren von elastischen und plastischen Verformungen, offenen Oberflächen und multipler Kristallausrichtungen in Nicht-Gleichgewichtsprozessen. Um topologische Defekte zu modellieren, welche die physikalisch relevanten Felder im Kristall wie zum Beispiel Konzentration, Dichte und Magnetismus beschreiben, werden Phasenfelder benutzt [4].

Ausgangspunkt der Landau-Theorie für ein allgemeines Phasenfeld-Modell, das die Dynamik des Kristallwachstums und die elastischen beziehungsweise plastischen Verformungen eines Kristalls richtig modelliert, ist das freie Energiefunktional [5]

$$\tilde{\mathcal{F}}_{PF}(\phi) = \int_{\Omega} d\vec{r} \left\{ f(\phi) + \frac{\phi}{2} G(\nabla^2)\phi \right\}. \quad (2.1.15)$$

Dieses Energiefunktional erfüllt die gewünschten Eigenschaften an den Phasenübergang. Um dies zu zeigen und um die Funktion $f(\phi)$ und das Funktional $G(\nabla)$ näher zu bestimmen, wird im Verlauf des Abschnittes eine lineare Stabilitätsanalyse durchgeführt [2].

Fasst man ϕ als Teilchendichteverteilung auf, wie das bei uns der Fall ist, spricht man von einem Phasenfeldkristall-Modell [2]. Nachdem wir an den Phasenübergang von Flüssigkeit zur Kristallstruktur in biologischen Systemen interessiert sind, werden wir im Folgenden den Strukturfaktor betrachten.

Die Bewegungsgleichung eines allgemeinen Phasenfeldkristall-Modells unter der Voraussetzung, dass Ω konstant ist und somit ϕ ein konservatives Feld ist, lautet [2]

$$\partial_t \phi = \Gamma \nabla^2 \frac{\delta \tilde{\mathcal{F}}_{PF}}{\delta \phi} \quad (2.1.16)$$

mit einer phänomenologischen Konstante Γ . Wird eine lineare Stabilitätsanalyse durchgeführt, erhält man gemäß [2]

$$\partial_t \phi = \Gamma \nabla^2 [f^{(2)} + G(\nabla^2)]\phi, \quad (2.1.17)$$

wobei $f^{(2)}$ die Näherung von $f(\phi)$ im Rahmen der Stabilitätsanalyse ist. Zum besseren Verständnis der weiteren Umformungen wird die Variable

$$\hat{\omega}_q \equiv f^{(2)} + G(q^2) \quad (2.1.18)$$

definiert.

Mittels Fourier Transformation lässt sich eine Lösung einer speziellen Variante der Dynamik des Systems herleiten [2], so dass

$$\hat{\phi}(\vec{q}, t) = e^{-q^2 \hat{\omega}_q \Gamma t} \hat{\phi}(\vec{q}, 0) + e^{-q^2 \hat{\omega}_q \Gamma t} \int_0^t e^{q^2 \hat{\omega}_q \Gamma t'} \eta(\vec{q}, t') dt', \quad (2.1.19)$$

wobei \vec{q} der Wellenvektor und $\hat{\phi}$ die Fourier-Transformierte von ϕ ist. Durch weiteres Umformen erhält man schließlich eine Gleichung, die den Strukturfaktor $S(k, t) \equiv \langle |\delta\hat{\rho}|^2 \rangle$ in Abhängigkeit von der Zeit und der Mode beschreibt [2]

$$S(q, t) = e^{-2q^2\hat{\omega}_q\Gamma t} S(q, 0) + \frac{k_B T}{\hat{\omega}_q} (1 - e^{-q^2\hat{\omega}_q\Gamma t}). \quad (2.1.20)$$

Es wurden weitere Annahme getroffen, auf die nicht näher eingegangen werden soll, vgl. [2]. Das Wesentliche in Gleichung 2.1.20 ist, dass der richtige Phasenübergang beschrieben wird. Denn ist $\hat{\omega}_q > 0$, so wird der Strukturfaktor im Gleichgewichtszustand $S_{liq}^{eq}(q) = S(q, \infty) = \frac{k_B T}{\hat{\omega}_q}$ konstant. Das bedeutet, es liegt eine Flüssigkeit vor. Ist $\hat{\omega}_q < 0$, kann sich für bestimmte Moden q im Gleichgewichtszustand $t = \infty$ eine Kristallstruktur ausbilden [2]. Das in Gleichung 2.1.15 definierte freie Energiefunktional modelliert also den gewünschten Phasenübergang.

Um nun weitere Eigenschaften des Kristalls wie zum Beispiel Symmetrie der Einheitszelle oder seine Elastizität zu modellieren, müssen die Funktion $f(\phi)$ und $G(\nabla^2)$ konkretisiert werden. Dabei wird die Gleichung 2.1.18 im Auge behalten und von messbaren physikalischen Größen abhängig gemacht, da diese den Punkt des Phasenüberganges festlegt. Die Funktion $G(q)$ im reziproken beziehungsweise $G(\nabla^2)$ im direkten Raum und $f^{(2)}$ werden folgendermaßen gewählt [2]

$$G(q) = \frac{k_B T}{S_{liq}^{eq}(q)} - f^{(2)} \quad (2.1.21)$$

$$G(\nabla^2) = \lambda(q_0^2 + \nabla^2)^2 \quad (2.1.22)$$

$$f^{(2)} = a(T - T_m) = a\Delta T \quad (2.1.23)$$

mit den Parameter $a\Delta T$ für die thermischen Energien, die Elastizitätskonstante λ und der Basislänge q_0 . Auf die explizite Verwendung der Variablen wird später noch ausführlich eingegangen werden [2, 6].

Wichtig an dieser Stelle ist, dass eine Grenztemperatur T_m eingeführt wird, an der der Phasenwechsel stattfindet. Aus dem Gleichungssystem ist unschwer zu erkennen, dass $T > T_m$ impliziert $\hat{\omega}_q > 0$, also eine Flüssigkeit entsteht, da ein konstanter Strukturfaktor eine Gleichverteilung der Dichte impliziert und für $T < T_m$ der Fall $\hat{\omega}_q < 0$ gilt. Weil sich im letzteren Fall für bestimmte Moden q Kristalle bilden können, spricht man daher von einer Monomodennäherung.

Durch das so gewählte Gleichungssystem kann nun aus dem freien Energiefunktional $\tilde{\mathcal{F}}_{PF}(\phi)$ in Gleichung 2.1.15 das in Gleichung 2.1.11 verwendete Energiefunktional $\tilde{\mathcal{F}}_{PFC}$ hergeleitet werden. Beachtet werden sollte auch, dass sich keine Quasikristalle bilden können, da $\tilde{\mathcal{F}}_{PFC}$ nur von einer Längeneinheit q_0 abhängt. Für Quasikristalle sind zwei Längeneinheiten nötig, damit die Translationssymmetrie gebrochen werden kann. Für die Modellierung biologischer Systeme im Rahmen des aktiven Phasenfeldkristall-Modells genügt eine Längeneinheit.

2.1.3. Toner–Tu Modell

Nachdem das Energiefunktional für die Translation ausführlich erklärt wurde, soll eine Motivation für das Energiefunktional $\tilde{\mathcal{F}}_P(\vec{P})$ in Gleichung 2.1.12 und das Wechselwirkungsfunktional gegeben werden. Dazu wird kurz, ohne in die technischen Details zu gehen, das Toner-Tu Modell [3] vorgestellt, damit man eine Anschauung bekommt, was es mit Polarisation \vec{P} , Orientierung \hat{u} und den eigenen Antrieb v_0 der Teilchen im biologischen System auf sich hat.

Das XY-Modell [7] ist eine Verallgemeinerung des Ising-Modells aus der statistischen Physik. Wird dieses auf zweidimensionale Dynamik in Strukturen, die langreichweitige Korrelationen besitzen, angewendet, wie sie in biologischen Systemen vorliegt, erhält man das Toner-Tu Modell [3].

Das Toner-Tu Modell kann unter anderem dazu genutzt werden um den Flug einer Vogelschar zu modellieren. Als Ausgangspunkt hier stehen die kontinuierlichen Bewegungsgleichungen [3]

$$\delta_t \vec{v} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = \alpha \vec{v} - \beta |\vec{v}|^2 \vec{v} - \nabla P + D_L \nabla (\nabla \cdot \vec{v}) + D_1 \nabla^2 \vec{v} + D_2 (\vec{v} \cdot \nabla)^2 \vec{v} + \vec{f}, \quad (2.1.24)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v} \rho) = 0 \quad (2.1.25)$$

mit den Diffusionskonstanten D_1 , D_2 und D_L . Während die linke Seite der Gleichung 2.1.24 eine gewöhnliche Konvektionsableitung ist, erkennt man in Gleichung 2.1.25 eine Diffusionsgleichung. Die Variablen α bzw. β sorgen dafür, dass das Geschwindigkeitsvektorfeld \vec{v} lokal nicht null wird. Wäre das der Fall, könnten, anschaulich betrachtet, die Vögel in der Luft stehen bleiben. Zusätzlich modelliert $\alpha > 0$ beziehungsweise $\alpha < 0$ den Phasenübergang von einem ungeordneten Zustand in einen geordneten Zustand. Für ausführlichere Erklärungen siehe [3].

Sowohl im Toner-Tu Modell als auch im aktiven Phasenfeldkristall-Modell treten eine Reihe von Analogien auf. Der gleiche Phasenübergang soll modelliert werden. Im Vergleich zum Geschwindigkeitsvektorfeld \vec{v} betrachten wir ein Polarisationsfeld \vec{P} mit Objekten, deren Eigenantrieb v_0 auch nie null wird. In beiden Modellen stellt die Diffusion einen zentralen Bestandteil dar. Nicht zuletzt ist die simulierte Vogelschar auch ein biologisches System, welches durch unser aktives Phasenfeldkristall-Modell beschrieben werden soll. Dadurch ist die Tatsache gerechtfertigt, dass die Resultate des Toner-Tu Modells auch vom aktiven Phasenfeldkristall-Modell richtig wiedergeben werden.

Besonders für die Kristallbildung ist ein Resultat wichtig, dass sich bereits im zweidimensionalen ein stabiler, geordneter Zustand finden lässt, der eine spontane Symmetriebrechung hat [3]. Das bedeutet es ist sinnvoll in biologischen Systeme nach Kristall- beziehungsweise Quasikristallbildung zu suchen. Geschieht dies mit Hilfe der Landau Theorie, soll ein

möglichst einfaches Funktional gewählt werden. Die Landau Theorie impliziert gemäß [8]

$$\tilde{\mathcal{F}}_P(\vec{P}) = \int_{\Omega} d\vec{r} \frac{1}{2} C_1 \vec{P}^2 + \frac{1}{4} C_4 (\vec{P}^2)^2. \quad (2.1.26)$$

Dabei sollte man beachten, dass die möglichen Minima nicht bei $\vec{P} = 0$ liegen, denn sonst wird der Phasenübergang nicht richtig modelliert.

Der thermische Startzustand des Systems ist grundsätzlich unabhängig vom thermischen Gleichgewichtszustand $t = \infty$. Allerdings gilt das bei numerischer Berechnung nicht immer. Bei einem schlecht gewählten Startzustand können numerische Instabilitäten auftreten. Für den Fall $C_1 < 0$ und $C_4 > 0$ wäre der Startwert $\vec{P} = 0$ der Simulation schlecht gewählt, weil es eine nach oben geöffnete Parabel mit einem Sattelpunkt bei null ist. Daraus folgt, dass die numerische Berechnung an dieser Stelle instabil ist.

Wie bereits angedeutet, wird das Funktional in Verbindung mit der thermischen Stabilität des Systems gebracht. Um dies zu erläutern werden die Parameter C_1 und C_4 näher betrachtet. Weil $C_4 < 0$ eine nach unten geöffnete Variable impliziert, wird das System instabil, deshalb wird im weiteren Verlauf $C_4 \geq 0$ gewählt.

Nun gibt es mehrere Fälle, in denen das aktive Phasenfeldkristall-Modell untersucht werden kann [8]. Hier soll der Fall $C_1 > 0$ und $C_4 = 0$ behandelt werden, denn in diesen treten die meisten verschiedenen Strukturen auf, die jeweils durch eine unterschiedliche Eigengeschwindigkeit v_0 der Teilchen getrennt werden [8].

Bevor das aktive Phasenfeldkristall-Modell anhand von numerischen Berechnungen diskutiert wird, wird explizite Implementierung erörtert. Da dieses Modell speziell auf die Dynamik und das Wachstum von Kristallstrukturen ausgelegt ist, wird das Energiefunktional immer bezüglich eines periodischen Feldes minimiert werden.

2.2. Numerische Berechnung

Bei einer numerischen Berechnung sind einige technische und konzeptionelle Hindernisse zu beachten, die zum einen am aktiven Phasenfeldkristall-Modell und zum anderen ganz allgemein diskutiert werden sollen.

Es werden zwei Verfahren zur Implementierung des Modells vorgestellt und ihre Vor- und Nachteile diskutiert.

2.2.1. Implementierung

Bei jeder numerischen Berechnung muss beachtet werden, dass der Computer keine physikalischen Einheiten kennt, deshalb müssen alle Variablen dimensionslos gemacht werden. Es empfiehlt sich natürliche Einheiten zu definieren. In diesen Fall werden alle Längeneinheiten in einen Vielfachen der charakteristischen Längeneinheit q_0^{-1} der Phasenfeld-Kristallstruktur gemessen, auf die in Abschnitt 2.2.2 noch genauer eingegangen wird.

Das Ganze geschieht durch Reskalierung, weshalb neue Variablen definiert werden. Nach [2, 6] ergeben sie sich zu

$$\vec{x} = \vec{r}q_0, \quad \psi = \phi \sqrt{\frac{u}{\lambda q_0^4}}, \quad r = \frac{a\Delta T}{\lambda q_0^4}, \quad \tau = \lambda q_0^6 t, \quad \mathcal{F} \equiv \frac{\tilde{\mathcal{F}}}{\mathcal{F}_0} = \tilde{\mathcal{F}} \frac{u}{\lambda^2 q_0^6}. \quad (2.2.27)$$

Somit ergeben sich aus Gleichung 2.1.11, Gleichung 2.1.12, Gleichung 2.1.13 und Gleichung 2.1.14 die Gleichungen [8]:

$$\mathcal{F} = \int_{\Omega} d^2x \left\{ \frac{\psi}{2} \left[r + (1 + \nabla^2)^2 \right] \psi + \frac{\psi^4}{4} \right\} + \left\{ \frac{C_1}{2} \vec{P}^2 + \frac{C_4}{4} [\vec{P}^2]^2 \right\} \quad (2.2.28)$$

$$\partial_{\tau} \psi = \nabla^2 \left\{ \left[r + (1 + \nabla^2)^2 + 3\bar{\psi}^2 \right] \psi + 3\bar{\psi} \psi^2 + \psi^3 \right\} - v_0 \nabla \cdot \vec{P} \quad (2.2.29)$$

$$\partial_{\tau} \vec{P} = \nabla^2 \left\{ C_1 \vec{P} + C_4 [\vec{P}^2] \vec{P} \right\} - D_r \left\{ C_1 \vec{P} + C_4 [\vec{P}^2] \vec{P} \right\} - v_0 \nabla \psi \quad (2.2.30)$$

Die Schwierigkeit besteht darin die Bewegungsgleichungen numerisch zu lösen. Dazu kann das explizite Euler-Verfahren oder die semi-implizite Methode verwendet werden.

Explizites Euler-Verfahren

Das explizite Euler-Verfahren [10] definiert die Iterationsvorschriften

$$\begin{aligned} \psi_{n+1} &= \psi_n + h \cdot \partial_{\tau} \psi(\tau_n, \psi_n), \\ \vec{P}_{n+1} &= \vec{P}_n + h \cdot \partial_{\tau} \vec{P}(\tau_n, \vec{P}_n) \end{aligned} \quad (2.2.31)$$

für ein $n \in \mathbb{N}_0$ und ein $h \in \mathbb{R}_{>0}$, welches die Schrittweite bestimmt.

Semi-Implizite Methode

Um die semi-implizite Methode [10] anzuwenden, muss in den reziproken Raum transformiert werden, denn nur da lassen sich die weiter unten beschriebenen Umformungen durchführen. Wie in Abschnitt 2.2.2 noch erklärt wird, transformieren die Gradienten ∇^2 zu $-k^2$, einer reellwertigen Konstanten. Um leichter rechnen zu können, wird die reellwertige Konstante $\omega = r + (1 - k^2)^2 + 3\bar{\psi}^2$ definiert. Für die Dichteverteilung erhält man die Iterationsvorschrift

$$\begin{aligned}
 \partial_\tau \psi &= \frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{h} = -k^2 \{ \omega \psi_{n+1} + 3\bar{\psi} \psi_n^2 + \psi_n^3 \} - v_0 i \vec{k} \cdot \vec{P} \\
 &\Leftrightarrow \psi_{n+1} - \psi_n = -k^2 \omega \psi_{n+1} h - k^2 \{ 3\bar{\psi} \psi_n^2 + \psi_n^3 \} h - v_0 h i \vec{k} \cdot \vec{P} \\
 &\Leftrightarrow \psi_{n+1} (1 + k^2 \omega h) = \psi_n - k^2 \{ 3\bar{\psi} \psi_n^2 + \psi_n^3 \} h - v_0 h i \vec{k} \cdot \vec{P} \\
 &\psi_{n+1} = \frac{\psi_n - k^2 \{ 3\bar{\psi} \psi_n^2 + \psi_n^3 \} h - v_0 h i \vec{k} \cdot \vec{P}}{(1 + k^2 \omega h)}
 \end{aligned} \tag{2.2.32}$$

Mit analoger Rechnung ergibt sich für die Polarisierung die Iterationsvorschrift

$$\begin{aligned}
 \partial_\tau \vec{P} &= \frac{\vec{P}_{n+1} - \vec{P}_n}{h} = -k^2 \{ C_1 \vec{P}_{n+1} + C_4 [\vec{P}_n^2] \vec{P}_n \} - D_r \{ C_1 \vec{P}_{n+1} + C_4 [\vec{P}_n^2] \vec{P}_n \} - v_0 i \vec{k} \psi \\
 &\Leftrightarrow \vec{P}_{n+1} = \frac{\vec{P}_n - (k^2 C_4 h + D_r C_4 h) [\vec{P}_n^2] \vec{P}_n - v_0 h i \vec{k} \psi}{1 + k^2 C_1 h + D_r C_1 h} \\
 &\Leftrightarrow \vec{P}_{n+1} = \frac{\vec{P}_n - \gamma_4 [\vec{P}_n^2] \vec{P}_n - v_0 h i \vec{k} \psi}{\gamma_1},
 \end{aligned} \tag{2.2.33}$$

wobei $\gamma_1 = 1 + k^2 C_1 h + D_r C_1 h$ und $\gamma_4 = k^2 C_4 h + D_r C_4 h$ reellwertige Konstanten sind. Beachte, dass im Komplexen $z^3 = \bar{z} \cdot z \cdot \bar{z}$ ist.

Diese Iterationsvorschriften lassen sich zum Beispiel in der Programmiersprache C++ implementieren und damit die Bewegungsgleichungen numerisch lösen. Methodisch betrachtet werden durch die Simulation Minima des Energiefunktionales gesucht. Das bedeutet, dass die freie Energie und die Polarisationsenergie monoton fallende Funktionen sind, bis sie im Gleichgewichtszustand konstant werden. Steigt die Energie zu irgendeinem Zeitpunkt, kann das daran liegen, dass die Simulation über das gefundene Minimum hinausgelaufen ist. Dies wird durch einen klein genug gewählten Zeitschritt h verhindert.

Der entscheidende Vorteil der semi-impliziten Methode gegenüber des expliziten Euler-Verfahrens ist, dass die Schrittweite h wesentlich größer gewählt werden kann und somit

Rechenaufwand gespart wird, ohne über das Minimum hinauszulaufen. Ein Nachteil hingegen ist, dass Potenzen wie ψ^2 oder \vec{P}^3 nicht im reziproken Raum berechnet werden können und somit in jedem Iterationsschritt zwei Fourier-Transformation pro Bewegungsgleichung nötig sind.

Der große Vorteil des aktiven Phasenfeldkristall-Modells ist, dass das Minimieren des Energiefunktionales automatisch die elastische Energie und die Symmetrieeigenschaften des periodischen Feldes erfasst. Dadurch werden alle Eigenschaften, die durch die Symmetrie entstehen, wie zum Beispiel Relationen zwischen elastischen Konstanten, deckungsgleiche Seitengitter, Randenergien und viele Weitere, automatisch richtig modelliert. Bemerkenswert ist auch, dass das Modell nur in der Zeit mittelt, nicht aber im Raum [2].

Bevor die numerische Berechnung gestartet werden kann, ist es notwendig sich Gedanken über die Diskretisierung zu machen.

2.2.2. Diskretisierung

Wie bereits angedeutet, ist die Fourier-Transformation das zentrale Werkzeug, um die Bewegungsgleichungen zu lösen. Es soll die „Fastest Fourier Transform in the West“ [11] (FFTW) benutzt werden, dazu sind in C++ die Pakete `<rfftw.h>` und `<fftw.h>` nötig. Bei der Verwendung sind zwei Dinge zu beachten: die Auflösung sowohl im direkten Raum als auch im reziproken Raum und das Datenformat, in welchen der Computer die Daten abspeichert. Besonders letzteres kann anfällig für numerische Fehler sein, wie sich in Abschnitt 3.1.2 noch zeigen wird.

Die Auflösung Δx im direkten Raum und die Auflösung Δk im reziproken Raum müssen so gewählt werden, dass Strukturen in beiden Räumen erkennbar sind, vgl. Abbildung 2.2.2, dabei ist

$$\Delta x = \frac{L_{max}}{N_x}, \quad \Delta k = \frac{2\pi}{L_{max}}, \quad k_{max} = \frac{2\pi}{\Delta x} \quad (2.2.34)$$

mit der Boxlänge L_{max} im direkten Raum und der Boxlänge k_{max} im reziproken Raum. Die Anzahl an Stützstellen N_x sollte am besten eine Zweier-Potenz sein, denn dann wird die Fourier-Transformation besonders schnell errechnet.

Da der Computer dimensionslos rechnet, sind durch das Festlegen einer Längeneinheit bereits alle anderen Längeneinheiten bestimmt. Weil wir bereits die Basislänge q_0 als Längeneinheit festgelegt haben, ist die Boxlänge L_{max} ein Vielfaches dieser und damit ist der Einfluss von q_0 auf den Rand der Box zu beachten. Weil q_0^{-1} die charakteristische Länge der kristallinen Struktur ist, kann durch ein geschickt gewähltes q_0 eine bestimmte Mode unterstützt werden und so die Bildung eines Kristalls begünstigt werden. Andererseits wird vor Allem durch ein schlecht gewähltes q_0 die Bildung eines Musters verhindert. In unserem Fall wird $q_0 = 1$ gewählt.

Das Datenformat, in welchem der Computer die Daten abspeichert, hängt von der ver-

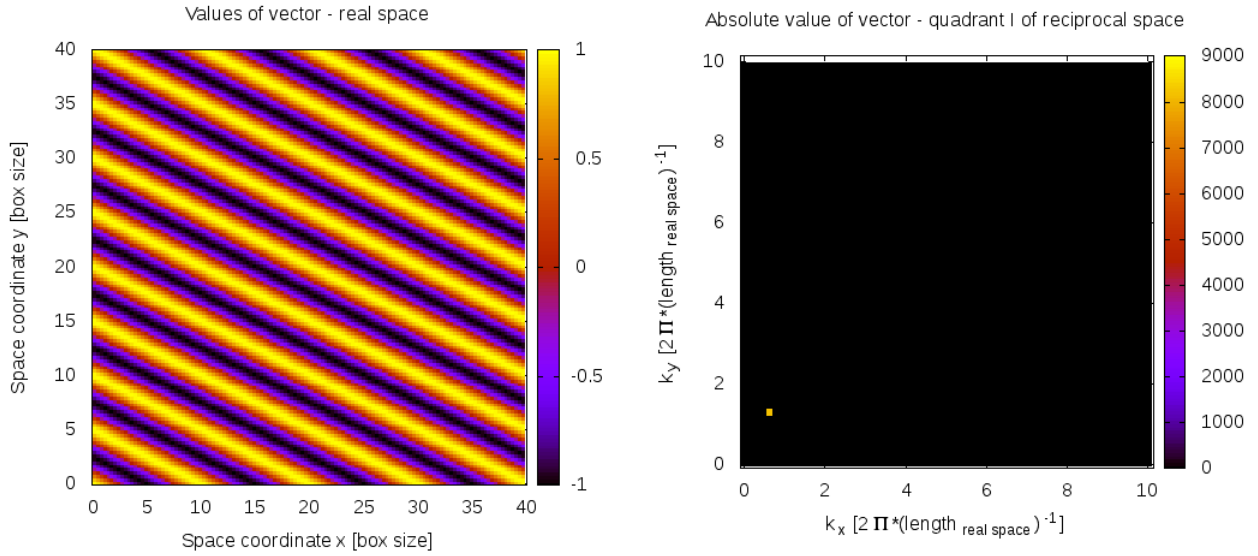


Abbildung 2.2.2: Kosinus-Schwingung mit Wellenlänge $\lambda_x = 10$ und $\lambda_y = 5$ ergibt nach einer Fourier-Transformation [11] in den reziproken Raum einen Peak bei $k_x = \frac{2\pi}{10} \approx 0,628$ und $k_y = \frac{2\pi}{5} \approx 1,257$. Um die Übersichtlichkeit zu gewährleisten wurde nur Quadrant I geplottet.

wendeten Fourier-Transformation ab. Hier wird eine diskrete, zwei-dimensionale, reell zu komplex, in-place Transformation verwendet [11]. Das bedeutet, die Datenpunkte im reziproken Raum sind komplexe Zahlen z . Der Realteil $Re(z)$ eines Datenpunktes im reziproken Raum entspricht den Kosinus-Schwingungen im direkten Raum und der Imaginärteil $Im(z)$ eines Datenpunktes entspricht den Sinus-Schwingungen im direkten Raum. Weil der reziproke Raum bestimmte Symmetrieeigenschaften erfüllen muss, werden nur die Quadranten I und IV ausgegeben. Die Quadranten II und III sind das komplex konjugierte von diesen. Zu beachten ist außerdem, dass zuerst der erste Quadrant bei $k_x = 0$ und $k_y = 0$ beginnend abgespeichert wird und danach die Datenpunkte des vierten Quadranten bei $k_x = 0$ und $k_y = -k_{max}$ anfangen.

Die erste und letzte Spalte der Ausgabe enthalten redundante Information, da die komplexen Zahlen der ersten und letzten Spalte des Quadranten I das komplex konjugierte von den Zahlen der ersten und letzten Spalte des Quadranten IV sein müssen. Wird diese Symmetriebedingung nicht erfüllt, berechnet die FFTW für die Transformation in den direkten Raum Mittelwerte aus den ersten und vierten Quadranten:

$$Re(z)_{eff} = \frac{Re(z)_I - Re(z)_{IV}}{2} \quad (2.2.35)$$

$$Im(z)_{eff} = \frac{Im(z)_I + Im(z)_{IV}}{2} \quad (2.2.36)$$

Die unterschiedlichen Vorzeichen bei der Berechnung von $Re(z)_{eff}$ und $Im(z)_{eff}$ sind dem Datenformat geschuldet.

Zum Schluss der theoretischen Grundlagen soll noch die besondere Rolle des Wellenvektors \vec{k} verdeutlicht werden. Durch die Fourier-Transformation entspricht die Ableitung bzw. der Gradient $\vec{\nabla}$ im direkten Raum einem Multiplizieren von $i\vec{k}$ im reziproken Raum und $\vec{\nabla}^2 = -\vec{k}^2 = -(k_x^2 + k_y^2)$ mit $k_{x,y}$ den Einträgen des Wellenvektors in x- beziehungsweise y-Richtung. Wie bereits in Abschnitt 2.2.1 erwähnt wurde, macht dies die Umformungen, die für die semi-implizite Methode nötig sind, erst möglich. Da es sich im reziproken Raum um komplexe Zahlen handelt, ist unbedingt darauf zu achten, dass das Multiplizieren der imaginären Einheit i auch implementiert ist.

3. Numerische Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Berechnungsergebnisse mit den Vorhersagen des Modells verglichen. Zusätzlich werden auftretende numerische Fehler analysiert und eine Lösung zur Vermeidung dieser aufgezeigt.

3.1. Analyse des Ordnungsparameters ψ

Grundsätzlich ist es empfehlenswert sein Programm stufenweise zu implementieren und regelmäßig zu testen, damit eventuelle Fehler frühzeitig erkannt werden. Deshalb wird im Folgenden zuerst der Ordnungsparameter ψ unabhängig von \vec{P} diskutiert.

3.1.1. Ergebnisse des Phasenfeldkristall-Modells

Es sollen die numerischen Ergebnisse der Monomodennäherung [2] überprüft werden, die erwarteten Ergebnisse sind in einem zwei-dimensionalen Phasendiagramm in Abbildung 3.1.3 aufgetragen.

Abbildung 3.1.3: Zwei-dimensionales Phasendiagramm aus [2]. Zur der Berechnung wurde eine Monomodennäherung benutzt [2].

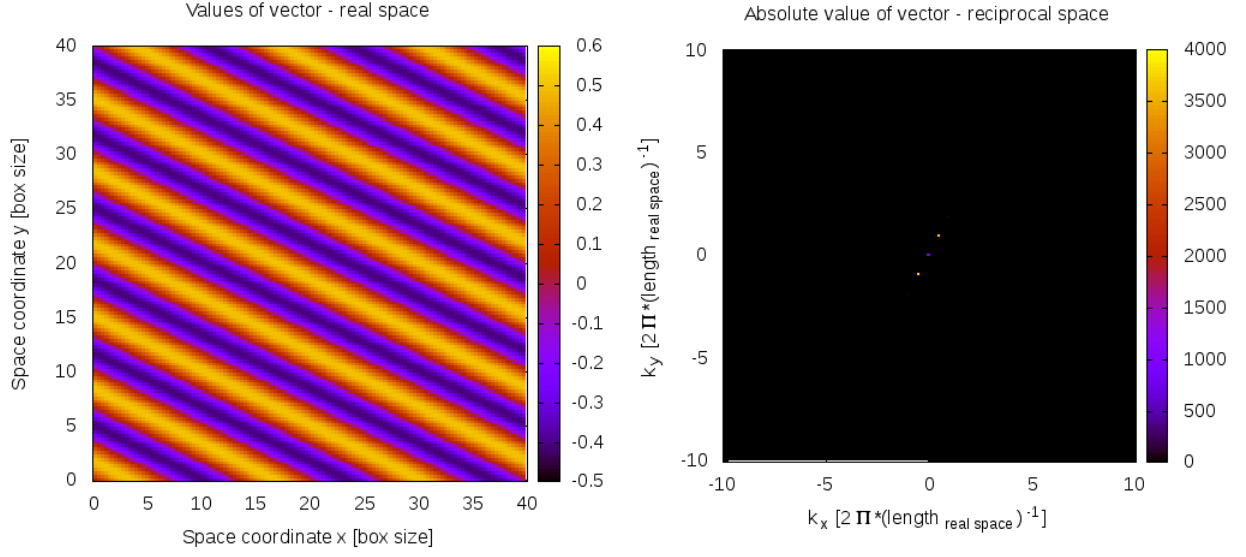


Abbildung 3.1.4: Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschrift aus Gleichung 3.1.2 mit $r = -0,2$ und $\bar{\psi} = 0,05$. Zu sehen ist eine Teilchendichteverteilung im direkten Raum und deren Fourier-Transformierte, dabei erkennt man deutlich die Streifenphase und den Offset.

Hierzu wurden die Gleichungen

$$\mathcal{F}_{PFC} = \int_{\Omega} d^2x \left\{ \frac{\psi}{2} \left[r + (1 - k^2)^2 \right] \psi + \frac{\psi^4}{4} \right\} \quad (3.1.1)$$

$$\Rightarrow \psi_{n+1} = \frac{\psi_n - k^2 \{ 3\bar{\psi}\psi_n^2 + \psi_n^3 \} h}{(1 + k^2\omega h)}. \quad (3.1.2)$$

in C++ implementiert. Zu beachten ist, dass grundsätzlich im reziproken Raum gerechnet wird, außer zur Berechnung von ψ^2 und ψ^3 ist eine Hin- und Rücktransformation in den direkten Raum notwendig. Des Weiteren sollte um Rechenzeit zu sparen die reellwertige Konstante $1/(1 + k^2\omega h)$ nicht in jedem Iterationsschritt neu berechnet werden.

Die Iterationsvorschrift wurde erfolgreich implementiert, die Ergebnisse sind exemplarisch für die Streifenphase in Abbildung 3.1.4 und für die Dreiecksphase in Abbildung 3.1.5 zu sehen. Man erkennt jeweils deutlich die verschiedenen Phasen im direkten Raum und ihre Symmetrieeigenschaften im reziproken Raum. Ebenso ersichtlich ist der Offset von $\bar{\psi}$ als Peak beim Ursprung des reziproken Raums. Damit die Strukturen in beiden Räumen gut sichtbar sind, wurde als Auflösung $\Delta x, y = \frac{L_{max,x,y}}{N_{x,y}} \approx 0,313$ und $\Delta k_{x,y} = \frac{2\pi}{\Delta x,y} \approx 0,157$ gewählt. Um die Ergebnisse vergleichbarer zu machen, wird dies im weiteren Verlauf beibehalten.

Das Phasendiagramm lässt sich gut durch Variation der Parameter r und $\bar{\psi}$ nachbilden,

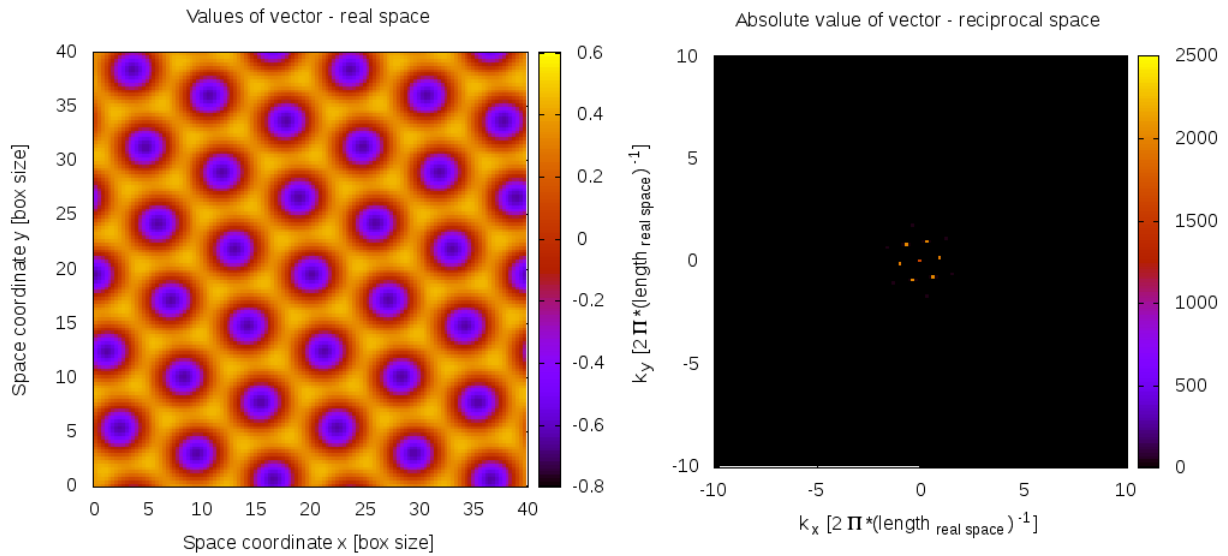


Abbildung 3.1.5: Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschrift aus Gleichung 3.1.2 mit $r = -0,2$ und $\psi = 0,1$. Zu sehen ist eine Teilchendichteverteilung im direkten Raum und deren Fourier-Transformierte, dabei erkennt man deutlich die Streifenphase und den Offset.

wobei zu beachten ist, dass nur der schematische Verlauf übereinstimmt, da hier keine Monomodennäherung, wie in der Literatur [2] angegeben, verwendet wird. Bevor die aufgetretenden, numerischen Instabilitäten betrachtet werden, wird noch der Verlauf der freien Energie diskutiert. Dazu wurde zusätzlich zur Iterationsvorschrift die Gleichung 3.1.1 implementiert.

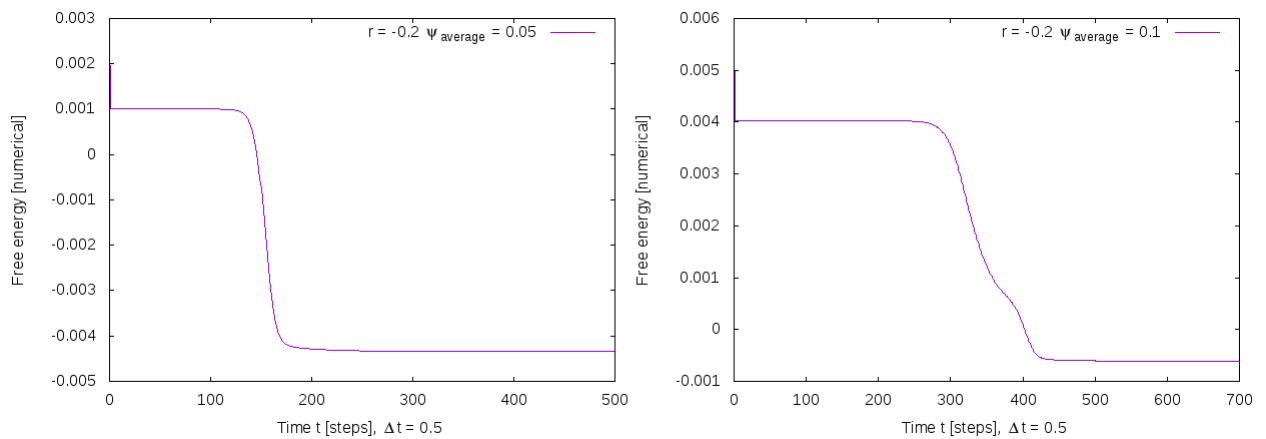


Abbildung 3.1.6: Verlauf des freien Energiefunktionales aus Gleichung 3.1.1 - links Streifenphasen, rechts Dreiecksphase

Wie bereits erläutert, wird das Energiefunktional minimiert. Das heißt, die Kurve muss monoton fallend sein, bis sie im Gleichgewichtszustand konstant wird, gut zu erkennen in Abbildung 3.1.6. Es kann eine gewisse Zeit dauern, bis die richtige Mode gefunden ist. Außerdem kann die Simulation eine bestimmte Zeit in einer Phase hängen, bevor sie eine energetisch günstigere Phase findet. Dieser Fall ist im rechten Teil der Abbildung 3.1.6 schematisch sichtbar am Wendepunkt der Kurve bei ca. $t = 390$.

3.1.2. Fehlerquelle Datenformat reziproker Raum

Besondere Schwierigkeiten bereitet das Datenformat des reziproken Raums. Wie bereits in Abschnitt 2.2.2 erklärt, müssen bestimmte Symmetrien eingehalten werden. Werden diese aufgrund der Maschinengenauigkeit gebrochen, kann es zu unphysikalischen Peaks im reziproken Raum kommen, wie in Abbildung 3.1.7 zu sehen ist.

Die insgesamt vier Peaks treten in der ersten Spalte d.h. bei $k_x = 0$ auf, explizit im Realteil bei $k_y = \pm 1,09956$ mit unterschiedlichen Vorzeichen und im Imaginärteil bei $k_y = \pm 0,942478$ mit gleichen Vorzeichen. Das ist der Grund, warum sie bei einer Fourier Transformation in den direkten Raum nicht bemerkbar sind.

Das Problem wird gelöst, indem man rechtzeitig, den ganzen Raum einmal hin und rück transformiert, da die Fourier-Transformation automatisch eine Mittelwertbildung durchführt. Nachdem der richtige Zeitpunkt von der Wahl des Zeitschrittes h abhängt, ist die bessere Alternative in jeden Iterationsschritt die Symmetrie der ersten und letzten Spalte zu überprüfen und bei Abweichungen diese wieder her zu stellen. Letzteres wurde hier getan.

Zur Fehleranalyse wurde in Abbildung 3.1.8 das Anwachsen der unphysikalischen Peaks geplottet. Nachdem in den restlichen Graphiken immer der Betrag der komplexen Zahlen aufgetragen ist, kann hier der Realteil links und der Imaginärteil rechts einzeln betrachtet werden. Es werden nun für jeden

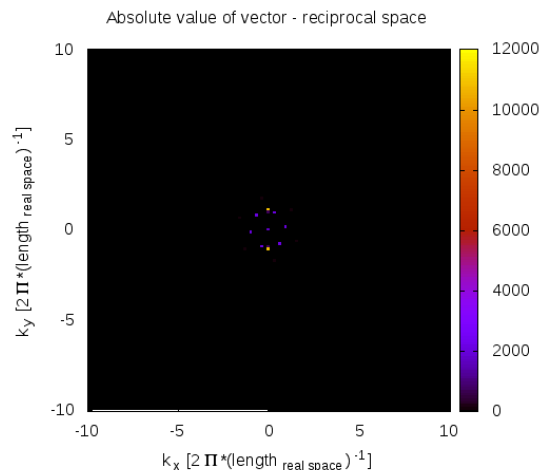


Abbildung 3.1.7: Aufgrund der Maschinengenauigkeit entsteht eine Symmetriebrechung im reziproken Raum. Zu sehen sind unphysikalische Peaks, die durch Aufschaukeln der Symmetriebrechung entstehen.

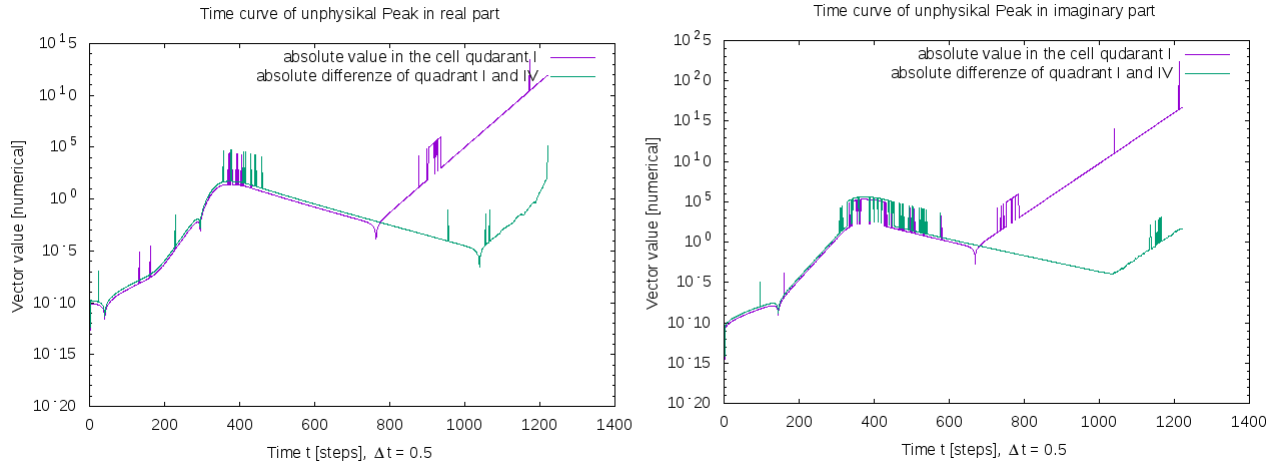


Abbildung 3.1.8: Anwachsen der unphysikalischen Peaks (lila Kurve) und der Symmetriebrechung sprich der Differenz zwischen Quadrant I und IV (grüne Kurve). Links ist zeitlicher Verlauf des Realteils rechts der des Imaginärteils, wobei die logarithmische Auftragung zu beachten ist.

Iterationsschritt der Wert des Datenpunktes in Quadrant I (lila Kurven) und die Differenz der Datenpunkte zwischen Quadrant I und IV (grüne Krueve) gezeigt. Die Differenz ist somit die Symmetriebrechung, die nach den Anforderungen des Datenformats nicht auftreten dürfte.

Eine theoretische Erklärung für die unphysikalischen Peaks und eine Erklärung, warum sich ein Fehler, der aufgrund der Maschinengenauigkeit immer passieren kann, so aufschaukelt, muss ich an dieser Stelle leider schuldig bleiben.

Es kann nur die Aussage getroffen werden, dass die Peaks auch bei Variation der Auflösung und des Zeitschrittes auftreten. Außerdem bleibt der direkte Raum aufgrund der Implementierung der Fourier-Transformation für lange Zeit unverändert und das obwohl sich die Peaks ab einem gewissen Zeitpunkt beginnen auf den Rand ausbreiten.

Nachdem das Problem, wie breits beschrieben wurde, durch etwas Rechenaufwand gelöst werden kann, sollen im Folgenden die Polarisation \vec{P} mit aufgenommen werden.

3.2. Analyse des Falls $C_4 = 0$

Im Rahmen dieser Arbeit soll sich bei der Analyse des Modells auf den Fall $C_4 = 0$ beschränkt werden. Damit das System nicht instabil wird und die numerischen Ergebnisse mit der Literatur [6, 8] vergleichbar sind, wird im Folgenden $C_1 = 0, 2$ gewählt.

3.2.1. Ergebnisse aus der Literatur

In Abbildung 3.2.9 ist zu sehen, wie sich der Eigenantrieb mit der Antriebsgeschwindigkeit v_0 der Teilchen auf das Kristallmuster auswirkt. Während $\bar{\psi}$ und r konstant bleiben, wird v_0 schrittweise erhöht. In Teil a bis d erkennt man, dass die sechszählige Struktur schrittweise verschwindet und zu einem Streifenmuster wird.

Unterschiede in der Teilchendichteverteilung ψ werden durch den Farbverlauf ausgedrückt, während das Polarisationsvektorfeld \vec{P} an ausgewählten Punkten durch Pfeile eingezeichnet ist. Anhand der großen blauen Pfeile ist zu erkennen, wie die ruhenden Kristalle in Teil a schrittweise zu mobilen Kristallen in Teil b und c und schließlich zu einem Streifenmuster in Teil d werden. Das Ganze wird auch in der inversen Struktur beobachtet, wie in Teil e und f zu sehen ist. Dazu muss bei der numerischen Berechnung nur das Vorzeichen des Parameter $\bar{\psi}$ geändert werden. Das ist der Fall, weil Gleichung 2.1.13 und Gleichung 2.1.14 invariant unter der Transformation $\bar{\psi} \rightarrow -\bar{\psi}$ und $\vec{P} \rightarrow -\vec{P}$ sind [6].

Abbildung 3.2.9: Verschiedenen Phasen des Ordnungparameterfeldes. $\bar{\psi}$ und r sind konstant. v_0 wird von a nach d schrittweise erhöht. e) und f) zeigt ein zu b) und c) inverse Struktur [6].

3.2.2. Aktives Phasensfeldkristall-Modell

Die in Abschnitt 3.2.1 beschriebene Abbildung 3.2.9 entspricht den physikalischen Erwartungen, denn mit größerem Eigenantrieb v_0 der Teilchen ist ein Aufbrechen der Kristallstruktur wahrscheinlicher. Im Folgenden werden die numerischen Ergebnisse des aktiven Phasensfeldkristall-Modells erörtert, dazu wurden die Iterationsvorschriften

$$\psi_{n+1} = \frac{\psi_n - k^2 \{3\bar{\psi}\psi_n^2 + \psi_n^3\}h - v_0 h i\vec{k} \cdot \vec{P}_n}{(1 + k^2 \omega h)}, \quad (3.2.3)$$

$$\vec{P}_{n+1} = \frac{\vec{P}_n - v_0 h i\vec{k}\psi_n}{\gamma_1}$$

in C++ implementiert. Dabei sind die Konstant $\bar{\psi} = -0,1$ und $r = -0,2$. Die Geschwindigkeit v_0 wird variiert. Auch die inverse Struktur, welche durch die Symmetrie der Bewegungsgleichungen gefordert wurde, ist gefunden worden.

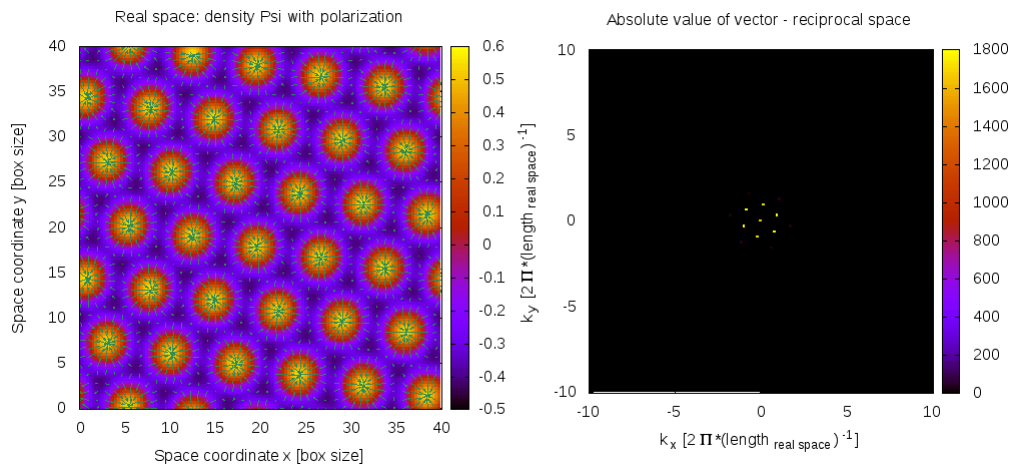


Abbildung 3.2.10: Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschriften Gleichung 3.2.3 mit $v_0 = 0,1$. Zu sehen ist ein ruhende Kristall im direkten Raum (links) und reziproken Raum (rechts).

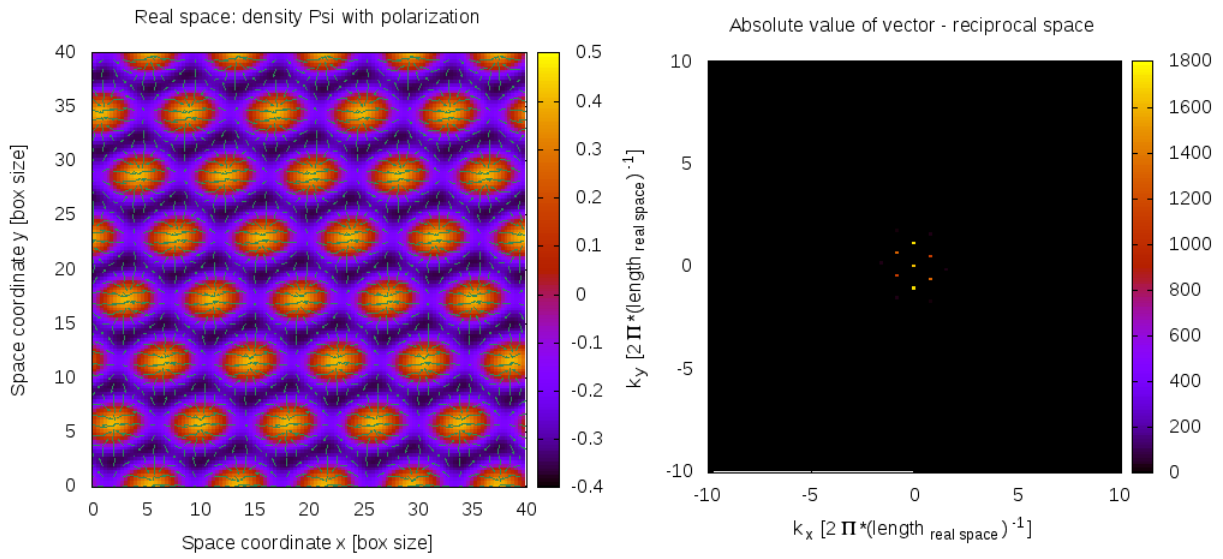


Abbildung 3.2.11: Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschriften Gleichung 3.2.3 mit $v_0 = 0, 15$. Zu sehen ist ein sich auflösende Kristallstruktur im direkten Raum (links). Dies wird besonders deutlich bei den Peaks im reziproken Raum (rechts).

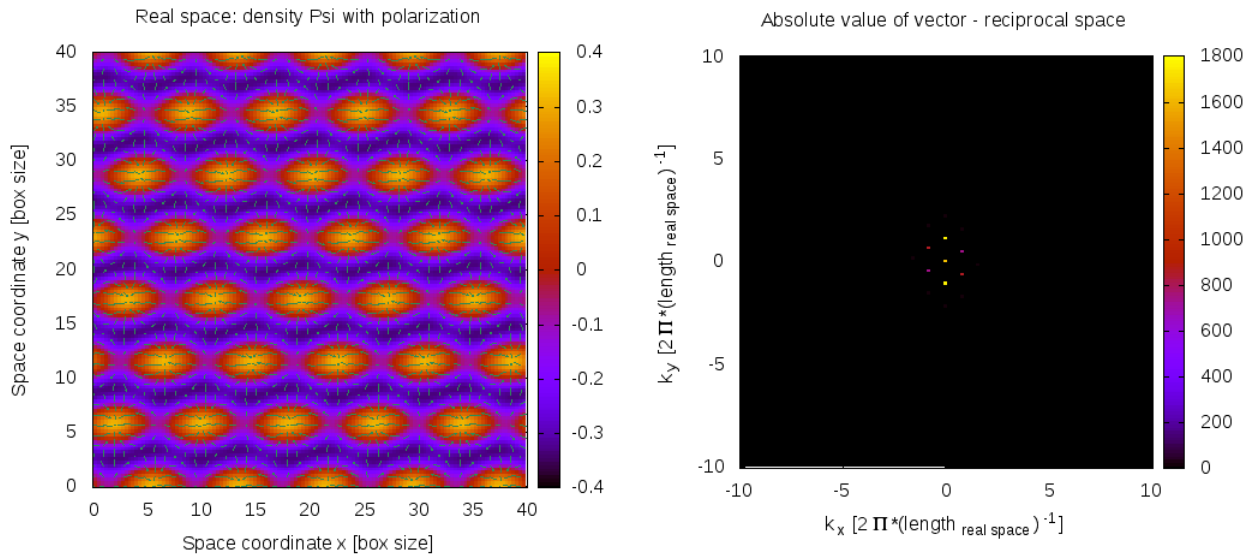


Abbildung 3.2.12: Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschriften Gleichung 3.2.3 mit $v_0 = 0, 175$. Zu sehen ist ein mobiler Kristall im direkten Raum (links) und reziproken Raum (rechts).

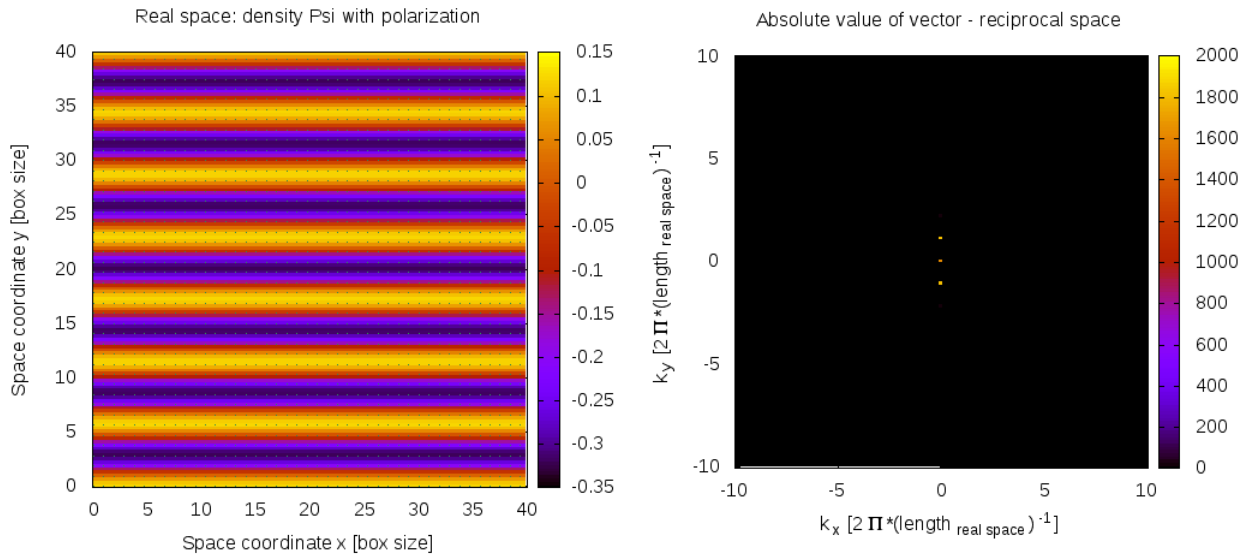


Abbildung 3.2.13: Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschriften Gleichung 3.2.3 mit $v_0 = 0, 19$. Zu sehen ist eine Streifenphase im direkten Raum (links) und reziproken Raum (rechts), da der große Eigenantrieb keine Kristallbildung zu lässt.

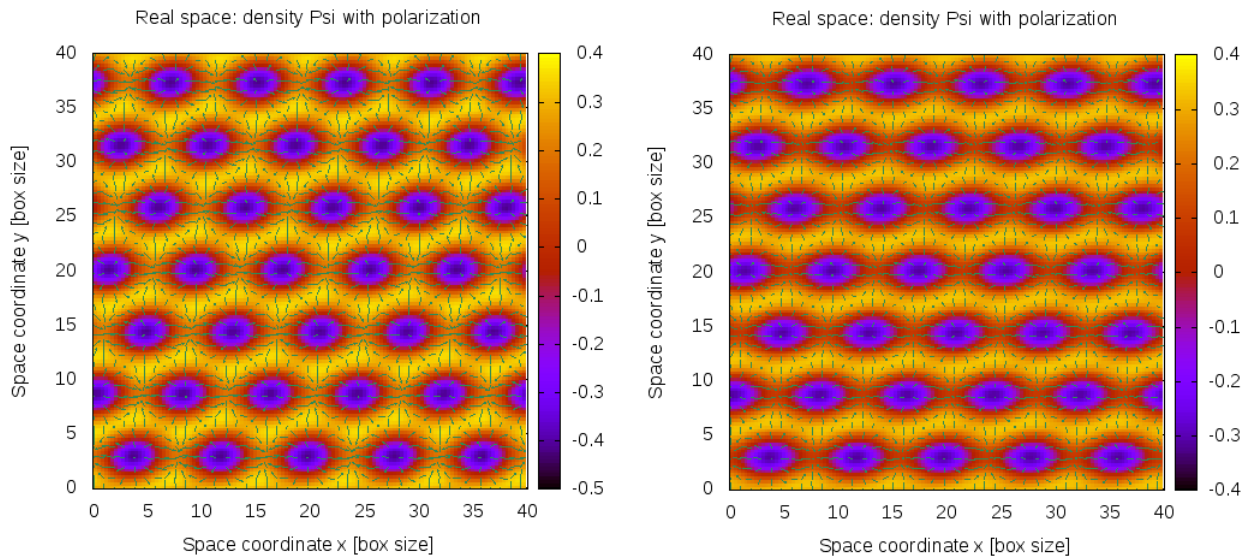


Abbildung 3.2.14: Numerische Ergebnisse der Iterationsvorschriften Gleichung 3.2.3 mit $v_0 = 0, 15$ bzw. $v_0 = 0, 175$. Zu sehen ist die inverse Struktur von Abbildung 3.2.11 (links) und Abbildung 3.2.12 (rechts) begründet durch die Symmetrie der Bewegungsgleichungen.

Zum Abschluss soll auf eine weitere mögliche Fehlerquelle hingewiesen werden. Wie bereits mehrfach erwähnt, wird das Energiefunktional minimiert und muss damit monoton fallend sein. Im Gleichgewichtszustand ist es schließlich konstant. Dass nicht zu früh von einem Gleichgewichtszustand ausgegangen werden darf, zeigt der Energieverlauf in Abbildung 3.2.15 im Fall $v_0 = 0,175$. Bricht man die numerischen Berechnung bei Erreichen des Plateaus von ungefähr $t = 500$ bis $t = 800$ ab, wird der Gleichgewichtszustand nicht gefunden.

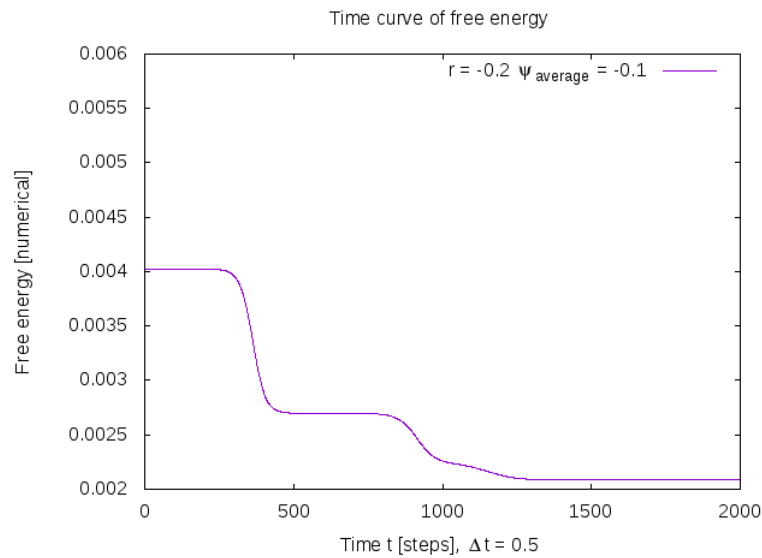


Abbildung 3.2.15: Zeitlicher Verlauf der freien Energie im Fall Abbildung 3.2.12 mit $v_0 = 0,175$. Zu sehen ist ein Plateau zwischen $t = 500$ und $t = 800$, welches nicht dem Gleichgewichtszustand entspricht.

4. Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war es biologische Systeme mithilfe des aktiven Phasenfeldkristall-Modells zu modellieren. Dabei wurde die Frage, wann sich kristalline Strukturen ausbilden, in den Vordergrund gestellt.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass Objekte mit Eigenantrieb durch das aktive Phasenfeldkristall-Modell richtig modelliert werden und der Phasenübergang von Flüssigkeit zum Kristall korrekt erfasst wird. Zusätzlich dazu stimmen die numerischen Berechnungen sehr gut mit der schon vorhandenen Literatur überein. Unter Berücksichtigung einiger numerischer Schwierigkeiten bietet das Modell eine gute Möglichkeit die Dynamik von biologischen Systemen zu beschreiben.

Um die Beschreibung von biologischen Systemen zu präzisieren kann über Modifikationen des Modells nachgedacht werden.

Literatur

- [1] **D. P. Zitterbart, B. Wienecke, J. P. Butler, B. Fabry** *Coordinated Movements Prevent Jamming in an Emperor Penguin Huddle* PLoS ONE 6(6) e20260. doi:10.1371/journal.pone.0020260 **2011**
- [2] **K. R. Elder, M. Grant** *Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals* Physical Review E 70, 051605 **2004**
- [3] **J. Toner, Y. Tu** *Long-Range Order in a Two-Dimensional Dynamical XY Model: How Birds Fly Together* Physical Review Letters 75, 4326 **1995**
- [4] **R. Gonzalez-Cinca, et al.** *Phase-field models in interfacial pattern formation out of equilibrium* cond-mat/030508 **2003**
- [5] **K. R. Elder, M. Katakowski, M. Haataja, M. Grant** *Modeling Elasticity in Crystal Growth* Physical Review Letters 88, 245701 **2002**
- [6] **A. M. Menzel, T. Ohta, H Löwen** *Active crystals and their stability* Physical Review E 89, 022301 **2014**
- [7] **J.M. Kosterlitz, D. J. Thouless** *Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems* J. Phys. C 6, 1181 **1973**
- [8] **A. M. Menzel, H. Löwen** *Traveling and Resting Crystals in Active Systems* Physical Review Letters PRL 110, 055702 **2013**
- [9] **H. H. Wensink, H. Löwen** *Aggregation of self-propelled colloidal rods near confining walls* Physical Review E78, 031409 **2008**
- [10] **M. Hermann** *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen, Anfangs- und Randwertprobleme* Oldenbourg Verlag **2004**
- [11] **M. Frigo, S. G. Johnson** *Fastest Fourier Transform in the West* <http://www.fftw.org/>, http://www.fftw.org/fftw3_doc/Multi_002dDimensional-DFTs-of-Real-Data.html#Multi_002dDimensional-DFTs-of-Real-Data **1997**
- [12] **W. Nolting** *Grundkurs Theoretische Physik Statistische Physik* ISBN 978-3-642-25392-8 **2001**