

An approach to selection theory for dendritic growth enabling the treatment of general bulk equations

(Ein Zugang zur Selektionstheorie für dendritisches Wachstum, der die Behandlung von allgemeinen Volumengleichungen ermöglicht)

von Dipl.-Phys. Thomas Fischaleck

Zusammenfassung

Strukturell instabile dynamische Systeme, also Systeme, deren Lösungen diskontinuierlich von etwaigen infinitesimalen Modifikationen des Systems abhängen, sind im Allgemeinen nicht zur Modellierung physikalischer Vorgänge geeignet. Bisweilen finden sich diese Systeme trotzdem in der Physikkultur. Dies kann vorkommen, wenn ein System aufgrund innerer Symmetrien interessante exakte Lösungen besitzt und diese Lösungen bestimmte Teilaspekte realer Vorgänge widerspiegeln, auch wenn das Modell als Ganzes “unphysikalisch” ist. Typischerweise besitzen diese strukturell instabilen Systeme eine ganze Familie von Lösungen, aber nur eine davon korrespondiert mit experimentellen Beobachtungen. Die Identifizierung des physikalischen Mechanismus, der hinter der Bestimmung dieser speziellen Lösung steht, nennt man ein *Selektionsproblem*.

Die Selektionsmechanismen, die in dieser Dissertation betrachtet werden, basieren alle auf einer kleinen Störung eines ungestört strukturell instabilen Systems. Gewöhnliche Störungstheorie stellt sich für diese Probleme als ungeeignet heraus. Da jede algebraische Störungsordnung nur triviale Informationen liefert, muss man auf sogenannte *Jenseits-aller-Ordnungen-Techniken* ausweichen.

Mathematische Methoden zur Untersuchung dynamischer Systeme, deren strukturelle Stabilität nur auf exponentiell kleine Beiträge beruht, gibt es nur wenige und alle haben nur einen sehr eingeschränkten Anwendungsbereich. Eine der nützlicheren Strategien ist die asymptotische Anpassung in der komplexen Ebene, eine Methode, die von Kruskal und Segur in den 1980iger Jahren entwickelt, aber erst später publiziert wurde [1].

Kruskal und Segur entwickelten ihre Methode anhand einer nichtlinearen gewöhnlichen Differentialgleichung, dem sogenannten geometrischen Modell des Kristallwachstums. Wenig später wurde die Methode auf realistischere physikalische Probleme angewendet: Combescot et.al. [2] wendeten die Methode auf die Selektion der Saffman-Taylor-Finger an, einem Problem aus der Theorie der viskosen Fingerbildung. Ben Amar et.al. [3] wendeten die Methode auf die Selektion der Ivantsov-Nadel-Kristalle an, einem Problem aus der Theorie des Kristallwachstums.

Aus mathematischer Sicht sind sowohl die viskose Fingerbildung als auch das Nadelkristallwachstum freie Randwertprobleme. Sie werden modelliert mittels partieller Differentialgleichungen mit Randbedingungen auf einem a priori unbekanntem Rand. Die Feldgleichungen der bisher behandelten Probleme sind linear und wohlbekannt: Die

Laplace-Gleichung und die Diffusionsgleichung. Die Einfachheit der Gleichungen ist bedeutsam. Damit die Kruskal-Segur-Methode angewendet werden kann, muss man das Problem erst einmal als eine einzelne Integrodifferentialgleichung für den unbekanntem Rand umformulieren. Für interessantere Feldgleichungen ist dies im Allgemeinen nicht möglich. Da eine Reihe von physikalischen Experimenten nicht realistisch mittels einfacher und linearer Feldgleichungen modelliert werden kann, ist die Überwindung dieser Einschränkung der Kruskal-Segur-Methode von Interesse.

In dieser Dissertation präsentieren wir ein Programm für die Ausweitung des Anwendungsbereichs der Kruskal-Segur-Methode. Wir beschäftigen uns nicht mit einzelnen Integrodifferentialgleichungen, sondern manipulieren direkt die ursprünglichen Feldgleichungen. Die Methode, die wir dafür verwenden, ist eine Variante des asymptotischen Dekompositionsschemas, das von Zauderer [4] bereits vor 30 Jahren entwickelt wurde. Das Zaudererschema scheint unter Physikern nicht sehr bekannt zu sein. Bisher wurde das Schema nur auf Probleme angewendet, die man auch mit der intuitiv viel leichter zugänglichen Mehrskalenmethode [5] lösen kann. Kombiniert man jedoch das Zaudererschema mit der Kruskal-Segur-Methode, kommt dadurch eine Klasse von Problemen in Reichweite, auf die jede Methode für sich alleine nicht direkt anwendbar wäre.

Ein wichtiges Beispiel ist das Kristallwachstum unter konvektiven Strömungen. Da reine Diffusion in terrestrischen Experimenten nicht realisierbar ist, mussten bisher Kristallwachstumsexperimente auf Spaceshuttlemissionen [6] durchgeführt werden. Nur so können thermische Konvektionseffekte effektiv unterdrückt werden. In Modellen für terrestrische Experimente muss man die oben angeführte lineare Diffusionsgleichung auf die nichtlinearen Konvektions-Diffusionsgleichungen verallgemeinern. In dieser Arbeit zeigen wir, wie man mithilfe des Zauderer-Schemas dieses Problem angehen kann. Da das Wachstum letztlich die Eigenschaften eines Kristalls mitbestimmt, und dieses Wachstum in der Regel auf der Erde stattfindet, ist dieses Thema von einem gewissen materialwissenschaftlichen Interesse. Neben der Konvektion zeigen wir auch wie man den Einfluss eines thermischen Widerstands an der Grenzfläche in der Formulierung mitberücksichtigen kann.

Da das gesamte Programm auf einer freien Randwertproblemdarstellung beruht, wird auch das Kristallwachstum ohne Konvektion, d.h. nur die Diffusionsgleichung als Feldgleichung, von Grund auf neu behandelt. Wir reproduzieren wichtige Gleichungen, die in der Literatur im Rahmen der Integralformulierung gewonnen wurden. Ohne den Umweg über die Integrodifferentialgleichung ist die Ableitung dieser Ergebnisse wesentlich vereinfacht.

Die Kruskal-Segur-Methode wird mit dem Zaudererschema kombiniert, um exponentiell kleine Beiträge zu studieren, ohne die betrachteten Modellsysteme strukturell instabil wären. Üblicherweise fehlt uns für diesen Anwendungsbereich fast jegliche physikalische Intuition. Zum einen, weil strukturell instabile Systeme schlichtweg unphysikalisch sind, zum anderen weil exponentiell kleine Effekte anderen Ursachen folgen wie die intuitiveren algebraischen Ordnungen. Wir können schlecht einschätzen welche Parameter für ein Experiment bedeutsam sind und welche eher unwichtig. Um intui-

tive Einsichten zu erleichtern, werden im Rahmen dieser Arbeit sogenannte Kruskal-Newton-Diagramme¹ eingeführt. Mithilfe dieser Diagramme kann man beispielsweise ohne Rechnung leicht einsehen, dass ein thermischer (Kapitza) Widerstand die Selektion ganz wesentlich beeinflusst, obwohl Kapitza-Widerstände an sich als nahezu irrelevant und praktisch nicht messbar gelten (von superfluidem Helium abgesehen).

Der Text ist von Anfang an auf die Darstellung mathematischer Methoden mit breiter Anwendbarkeit ausgelegt. Wir demonstrieren die Methoden daher zunächst auch an illustrativen Beispielen. Wir erläutern die Kruskal-Segur-Methode anhand einer mehrparametrischen gewöhnlichen Differentialgleichung, die bestimmte Aspekte realer Systeme simuliert. Die Zaudererdekomposition wird im Rahmen der linearen Stabilitätsanalyse einer ebenen Front eingeführt. Cross-overs im Skalenverhalten wird anhand der Nullstellenasymptotik von Polynomen erläutert. Das Prinzip maximaler Balance wird graphisch gedeutet. Kruskal-Newton-Diagramme vereinfachen die Stokesglättung.

Durch die Verfügbarkeit neuer mathematischer Methoden in der Selektionstheorie kommen auch diejenigen (strukturell noch instabilen) Basissysteme ins Rampenlicht für die bisher keine rigorose Selektionstheorie möglich war. Wir betrachten daher auch die Lösungsfamilien, die beim Nadelkristallwachstum mit Konvektion (aber isothermer Grenzfläche) auftreten. Wir erläutern den Gültigkeitsgrenzen der verschiedenen Strömungsmodelle und bestimmen auch eine neue lokal-selbstähnliche Lösungsfamilie mit erweitertem Gültigkeitsbereich.

Literatur

- [1] M. D. Kruskal and H. Segur, *Stud. Appl. Math.* **85**, 129 (1991).
- [2] R. Combescot, T. Dombre, V. Hakim, Y. Pomeau, and A. Pumir, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2036 (1986).
- [3] M. Ben Amar and Y. Pomeau, *Europhys. Lett.* **2**, 307 (1986).
- [4] E. Zauderer, *Siam. Appl. Math.* **35**, 575 (1978).
- [5] J. D. Cole, *Perturbation Methods in Applied Mathematics*, Blaisdell, Waltham, MA, 1968.
- [6] M. E. Glicksman and S. P. Marsh, The Dendrite. In *Handbook of Crystal Growth*, Vol. 1 (ed. D.T.J. Hurle), North-Holland (1993), p. 1075.

¹Der Name wurde von Roscoe B. White ausgewählt, als Tribut an den kürzlich verstorbenen Mathematiker Martin Kruskal.