Notizen zum Q-Tensor-Modell

Ingo Nitschke

11. April 2016

(Beachte Notations- und Operatordefinitionen im Appendix)

1 Q-Tensor Fakten

Q-Tensoren auf Oberflächen $\mathcal{S}$ (ohne Rand) sind Tensoren 2. Stufe, d.h. $\mathcal{Q}(\mathcal{S}) \subset \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S}) \simeq \mathsf{T}\mathcal{S} \otimes \mathsf{T}\mathcal{S}$. Es gilt

$$\mathcal{Q}(\mathcal{S}) := \left\{ \mathbf{q} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S}) \middle| \mathrm{Tr}\mathbf{q} = 0, \mathbf{q}^T = \mathbf{q} \right\} \tag{1}$$

$$= \left\{ \mathbf{q} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S}) \middle| \mathbf{q} : \mathbf{g} = \mathbf{q} : \mathbf{E} = 0 \right\} . \tag{2}$$

Der Raum $\mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S})$ lässt sich orthogonal zerlegen in

$$\mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S}) = \mathcal{Q}(\mathcal{S}) \cup \mathcal{Q}^{\perp}(\mathcal{S}) \text{ mit} \tag{3}$$

$$\mathcal{Q}(\mathcal{S}) \cap \mathcal{Q}^{\perp}(\mathcal{S}) = \{\mathcal{O}\} \text{ und} \tag{4}$$

$$\mathcal{Q}(\mathcal{S}) : \mathcal{Q}^{\perp}(\mathcal{S}) = 0 \,, \tag{5}$$

wobei

$$\mathcal{Q}^{\perp}(\mathcal{S}) = \mathrm{Span}_{\mathbb{R}} \left\{ \mathbf{g}, \mathbf{E} \right\} = \mathbb{R}\mathrm{SO}(\mathsf{T}\mathcal{S}) \tag{6}$$

ist der zweidimensionale $\mathbb{R}$-Vektorraum über alle (Oberflächen-)Drehungen und

$$\mathcal{Q}(\mathcal{S}) = \mathrm{Span}_{\mathbb{R}} \left\{ \mathbf{M}, *\mathbf{M} \right\} = \mathbb{R}(\mathrm{O}(\mathsf{T}\mathcal{S}) \setminus \mathrm{SO}(\mathsf{T}\mathcal{S})) \tag{7}$$

ist der zweidimensionale $\mathbb{R}$-Vektorraum über alle (Oberflächen-)Drehspiegelungen $\mathbf{M}$ und $*\mathbf{M}$. Für die Basistensoren gilt $\|\mathbf{g}\| = \|\mathbf{E}\| = \|\mathbf{M}\| = \|*\mathbf{M}\| = \sqrt{2}$ und alle vier Basistensoren sind orthogonal bzgl. dem Doppelpunktprodukt ":". (Im Gegensatz zu $\mathcal{Q}^{\perp}(\mathcal{S})$ bildet $\mathcal{Q}(\mathcal{S})$ mit der Tensormultiplikation "$\cdot$" keine multiplikative Gruppe, da das neutrale Element fehlt.)

Eine orthogonale Projektion $\pi_{\mathcal{Q}} : \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S}) \to \mathcal{Q}(\mathcal{S})$ ergibt sich dementsprechend durch

$$\pi_{\mathcal{Q}}(\mathbf{t}) = \mathbf{t} - \frac{\mathbf{t} : \mathbf{g}}{2}\mathbf{g} - \frac{\mathbf{t} : \mathbf{E}}{2}\mathbf{E} = \frac{1}{2}\left(\mathbf{t} + *\mathbf{t}*\right) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{t} + \mathbf{t}^T - (\mathrm{Tr}\mathbf{t})\mathbf{g}\right) . \tag{8}$$

Es lässt sich zeigen, dass für alle $\mathbf{q} \in \mathcal{Q}(\mathcal{S})$

$$\Delta\mathbf{q} = \Delta^{\mathrm{Gd}}\mathbf{q} + \Delta^{\mathrm{Rr}}\mathbf{q} = 2\pi_{\mathcal{Q}}(\Delta^{\mathrm{Gd}}\mathbf{q}) = 2\pi_{\mathcal{Q}}(\Delta^{\mathrm{Rr}}\mathbf{q}) \tag{9}$$

gilt. Für Q-Tensoren $\mathbf{q} \in \mathcal{Q}(\mathcal{S})$ ist die Rotation und Divergenz zu einander Hodgedual (orthogonal und gleichlang), d.h. $* \operatorname{rot} \mathbf{q} = \operatorname{div} \mathbf{q}$ und somit $\|\operatorname{rot} \mathbf{q}\| = \|\operatorname{div} \mathbf{q}\|$.

2 Q-Tensor-Modell

Ausgehend von einem freien Energiefunktional auf $\mathcal{Q}(\mathcal{S})$

$$F[\mathbf{q}] = \int_{\mathcal{S}} f[\mathbf{q}, \operatorname{Grad} \mathbf{q}]\mu \tag{10}$$

stellen wir folgende Mindestanforderungen an die Energiedichte f:

- f soll Koordinatenunabhängig sein (Kovarianzprinzip/Forminvarianz), d.h. jeder Koordinatenwechsel ändert nichts an das ”Wirken” von f. Somit ist f eine ”physikalisch sinnvolle” Abbildung.
- f soll gerade sein, d.h. $f[\mathbf{q}, \operatorname{Grad} \mathbf{q}] = f[-\mathbf{q}, -\operatorname{Grad} \mathbf{q}]$
- f soll positiv definit sein, d.h. $f \geq 0$

Wir zerlegen die Energiedichte zu

$$f[\mathbf{q}, \operatorname{Grad} \mathbf{q}] = f_{\mathrm{id}}[\mathbf{q}] + f_{\mathrm{exc}}[\operatorname{Grad} \mathbf{q}]\,, \tag{11}$$

so dass f_{id} (alle linear unabhängigen) Kontraktionen in $\mathbf{q}$ bis zur 4. Ordnung enthält und f_{exc} (alle linear unabhängigen) Kontraktionen in $\operatorname{Grad} \mathbf{q}$ bis zur 2. Ordnung enthält. Außerdem sollen an f_{id} und f_{exc} die selben Mindestanforderungen wie an f gestellt sein. Wir legen fest

$$f_{\mathrm{exc}}[\operatorname{Grad} \mathbf{q}] := \frac{C}{2}\left(\|\operatorname{div} \mathbf{q}\|^2 + \|\operatorname{rot} \mathbf{q}\|^2\right) \tag{12}$$

$$= C\,\|\operatorname{div} \mathbf{q}\|^2 = C\,\|\operatorname{rot} \mathbf{q}\|^2 \tag{13}$$

$$= \frac{C}{2}\left(\|\operatorname{Grad} \mathbf{q}\|^2 - 2\mathcal{K}\,\|\mathbf{q}\|^2\right)\,, \tag{14}$$

wobei die 2. Zeile aus $* \operatorname{rot} \mathbf{q} = \operatorname{div} \mathbf{q}$ (s.o.) folgt und die 3. Zeile eine (schwache) Folgerung aus der Weizenböck-Identität

$$\Delta\mathbf{q} = \Delta^{\mathrm{dG}}\mathbf{q} - 2\mathcal{K}\mathbf{q} \tag{15}$$

für Q-Tensoren $\mathbf{q} \in \mathcal{Q}(\mathcal{S})$ ist. Ableiten bzgl. dem L^2 Skalarprodukt über $\mathcal{Q}(\mathcal{S})$

$$\langle \mathbf{s}, \mathbf{t} \rangle_{L^2(\mathcal{Q}(\mathcal{S}))} := \int_{\mathcal{S}} \mathbf{s} : \mathbf{t}\mu \qquad (\mathbf{s}, \mathbf{t} \in \mathcal{Q}(\mathcal{S})) \tag{16}$$

ergibt für alle $\mathbf{t} \in \mathcal{Q}(\mathcal{S})$

$$\left\langle \frac{\delta F_{\mathrm{exc}}}{\delta \mathbf{q}}, \mathbf{t} \right\rangle_{L^2(\mathcal{Q}(\mathcal{S}))} = \langle -C\Delta \mathbf{q}, \mathbf{t} \rangle_{L^2(\mathcal{Q}(\mathcal{S}))} \,. \tag{17}$$

Weiterhin sei

$$f_{\mathrm{id}}[\mathbf{q}] := \frac{k_1}{2}\mathrm{Tr}\mathbf{q}^2 + \frac{k_2}{2}\mathrm{Tr}\mathbf{q}^4 = \frac{k_1}{2}\mathrm{Tr}\mathbf{q}^2 + \frac{k_2}{4}(\mathrm{Tr}\mathbf{q}^2)^2 \tag{18}$$

$$= \frac{\|\mathbf{q}\|^2}{2}\left(k_1 + \frac{k_2}{2}\|\mathbf{q}\|^2\right) \,. \tag{19}$$

Die Zweite Zeile begründet sich aus der Symmetrie von $\mathbf{q}$. Zu beachten sei hierbei, dass für alle $\mathbf{q} \in \mathcal{Q}(\mathcal{S})$ und $n \in \mathbb{N}$ gilt $\mathrm{Tr}\mathbf{q}^{2n+1} = 0$. Ableiten ergibt

$$\left\langle \frac{\delta F_{\mathrm{id}}}{\delta \mathbf{q}}, \mathbf{t} \right\rangle_{L^2(\mathcal{Q}(\mathcal{S}))} = \left\langle \left(k_1 + k_2\|\mathbf{q}\|^2\right)\mathbf{q}, \mathbf{t} \right\rangle_{L^2(\mathcal{Q}(\mathcal{S}))} \tag{20}$$

für alle $\mathbf{t} \in \mathcal{Q}(\mathcal{S})$. Setzen wir

$$\left\langle \frac{\delta F}{\delta \mathbf{q}}, \mathbf{t} \right\rangle_{L^2(\mathcal{Q}(\mathcal{S}))} = \langle -\partial_t \mathbf{q}, \mathbf{t} \rangle_{L^2(\mathcal{Q}(\mathcal{S}))} \tag{21}$$

erhalten wir covarianten Differentialgleichungen für $\mathbf{q} \in \mathcal{Q}(\mathcal{S})$:

$$\partial_t \mathbf{q} - C\Delta\mathbf{q} + \left(k_1 + k_2\|\mathbf{q}\|^2\right)\mathbf{q} = \mathcal{O} \in \mathcal{Q}(\mathcal{S}) \,. \tag{22}$$

3 Diskussion

- $f_{\mathrm{exc}} = \frac{C}{2}\left(\|\mathrm{div}\,\mathbf{q}\|^2 + \|\mathrm{rot}\,\mathbf{q}\|^2\right) = \frac{C}{2}\left(\|\mathrm{Grad}\,\mathbf{q}\|^2 - 2\mathcal{K}\|\mathbf{q}\|^2\right)$ versus $f_{\mathrm{exc}} = \frac{C}{2}\|\mathrm{Grad}\,\mathbf{q}\|^2$; Ein Kompromiss könnte $f_{\mathrm{exc}} = \frac{C}{2}\|\mathrm{Grad}\,\mathbf{q}\|^2 - \frac{C_{24}}{2}\mathcal{K}\|\mathbf{q}\|^2$ sein. Wäre das sinnvoll? Wie beeinflusst der 0te-Ordnungsterm die Lösung im Verhältnis zu f_{id}?
- Parameterwahl $C > 0, k_1 < 0, k_2 > 0(, C_{24} \geq 0)$.
- Gleichungsreduktion:
  - Nutze Spurfreiheit und Symmetrie der Differentialgleichung oben. (Nachteil: Komponentenweisebetrachtung ist i.A. nicht Koordinatenunabhängig)
  - $[\partial_t \mathbf{q} - C\Delta\mathbf{q} + \left(k_1 + k_2\|\mathbf{q}\|^2\right)\mathbf{q}] \cdot \mathbf{p} = \mathcal{O} \in \mathcal{T}^{(1)}(\mathcal{S})$ mit Tangentialvektor $\mathbf{p} \in \mathcal{T}^{(1)}(\mathcal{S})$. (Vorteil: Koordinatenunabhängig; Im diskreten könnte man für $\mathbf{p}$ Kantenvektoren nutzen.)
- Q-Tensor-Ansatz:
  - Nutze Spurfreiheit und Symmetrie zur Reduktion der Q-Tensorkoordinaten. (Nachteil: Koordinatenabhängig)

- Nutze Vektorraumstruktur von $\mathcal{Q}(\mathcal{S})$, d.h. $\mathbf{q} = q_1\mathbf{M} + q_2(*\mathbf{M})$. (führt evtl. "nur" zu zwei skalarwertigen Problemen; im diskreten könnte man für $\mathbf{M}$ die Spiegelungen am Kantenvetor nehmen, somit wäre $*\mathbf{M}$ die Spiegelung an der Dualkante)
- Nutze freies Tensorprodukt: $\mathbf{q} = 2\pi_{\mathcal{Q}}(\rho \otimes \mathbf{p}) = \rho \otimes \mathbf{p} - (*\rho) \otimes (*\mathbf{p})$ mit beliebig aber fest gewählten $\rho \in \mathcal{T}^{(1)}(\mathcal{S})$ und vektorwertigen Freiheitsgrad $\mathbf{p} \in \mathcal{T}^{(1)}(\mathcal{S})$. (Nachteil: u.U. komplexe Gleichungen je nach Wahl von ρ; Es könnte wieder für ρ der Kantenvektor im diskreten gewählt werden.)

4 Appendix

4.1 Notation

- $\simeq$ bedeutet Gleichheit bis auf die Höhe der Indizes. (semantisch gleich)
- $\mathbf{g} = \{g_{ij}\}$ metrischer Tensor.
- $|\mathbf{g}|$ Determinante des metrischen Tensors
- $\mu = \sqrt{|\mathbf{g}|} dx^i \wedge dx^j$ Volumenform (2-Form)
- $\mathbf{E} = \{E_{ij}\} = \sqrt{|\mathbf{g}|}\varepsilon_{ij} = \mu(\partial_i, \partial_j)$ Levi-Civita-Tensor (ε_{ij} Levi-Civita-Symbole).
- $\left\{\Gamma_{ij}{}^k\right\} = \left\{\frac{1}{2}g^{kl}\left(\partial_i g_{jl} + \partial_j g_{il} - \partial_l g_{ij}\right)\right\}$ Christoffel-Tensor
- $\mathcal{K}$ Gaußsche Krümmung

4.2 Operationen

- Tensorprodukt (1-Punktkontraktion) von $\mathbf{t}, \mathbf{s} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S})$:

$$[\mathbf{t} \cdot \mathbf{s}]_{ij} = t_{ik}s^k{}_j \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S}) \tag{23}$$

- Doppelpunktprodukt (2-Punktkontraktion) von $\mathbf{t}, \mathbf{s} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S})$:

$$\mathbf{t} : \mathbf{s} = t_{ij}s^{ij} \in \mathbb{R} \tag{24}$$

- Hodgedualer 2-Tensor (in der ersten Komponente) von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S})$:

$$*\mathbf{t} = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S}) \qquad \Rightarrow *\mathbf{t} : \mathbf{t} = 0 \tag{25}$$

- Transponierter Tensor $\mathbf{t}^T \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S})$:

$$\left[\mathbf{t}^T\right]_{ij} = t_{ji} \simeq t^{ji} \tag{26}$$

(Vorsicht: Niemals Indizes unterschiedlicher Höhe tauschen!)

- Spur (Trace) von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S})$:

$$\mathrm{Tr} t = t_i^{\ i} = \mathbf{t} : \mathbf{g} \in \mathbb{R} \tag{27}$$

- (Frobenius) Norm von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(n)}(\mathcal{S})$:

$$\|\mathbf{t}\|^2 = \mathbf{t} \overset{(n)}{\vdots} \mathbf{t} = t_{i_1 \dots i_n} t^{i_1 \dots i_n} \tag{28}$$

- Gradient von $\mathbf{p} \in \mathcal{T}^{(1)}(\mathcal{S}) \simeq \mathsf{T}\mathcal{S}$:

$$[\mathrm{Grad}\, \mathbf{p}]_{ij} = [\partial \mathbf{p} - \Gamma \cdot \mathbf{p}]_{ij} = p_{i|j} = \partial_j p_i - \Gamma_{ji}^{\ \ k} p_k \tag{29}$$

- Gradient von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S})$:

$$[\mathrm{Grad}\, \mathbf{t}]_{ijk} = t_{ij|k} = \partial_k t_{ij} - \Gamma_{ki}^{\ \ l} t_{lj} - \Gamma_{kj}^{\ \ l} t_{il} \tag{30}$$

- Gradient von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(3)}(\mathcal{S})$:

$$[\mathrm{Grad}\, \mathbf{t}]_{ijkl} = t_{ijk|l} = \partial_l t_{ijk} - \Gamma_{li}^{\ \ m} t_{mjk} - \Gamma_{lj}^{\ \ m} t_{imk} - \Gamma_{lk}^{\ \ m} t_{ijm} \tag{31}$$

- Divergenz von $\mathbf{p} \in \mathcal{T}^{(1)}(\mathcal{S}) \simeq \mathsf{T}\mathcal{S}$:

$$\mathrm{div}\, \mathbf{p} = \mathrm{Tr}(\mathrm{Grad}\, \mathbf{p}) = (\mathrm{Grad}\, \mathbf{p}) : \mathbf{g} = p_i^{\ |i} \tag{32}$$

- Divergenz (in der zweiten/letzten Komponente) von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S})$:

$$[\mathrm{div}\, \mathbf{t}]_i = [(\mathrm{Grad}\, \mathbf{t}) : \mathbf{g}]_i = t_{ij}^{\ \ |j} \tag{33}$$

- Divergenz (in der dritten/letzten Komponente) von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(3)}(\mathcal{S})$:

$$[\mathrm{div}\, \mathbf{t}]_{ij} = [(\mathrm{Grad}\, \mathbf{t}) : \mathbf{g}]_{ij} = t_{ijk}^{\ \ \ |k} \tag{34}$$

- Divergenz (in der letzten Komponente) von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(n)}(\mathcal{S})$:

$$[\mathrm{div}\, \mathbf{t}]_{i_1 \dots i_{n-1}} = [(\mathrm{Grad}\, \mathbf{t}) : \mathbf{g}]_{i_1 \dots i_{n-1}} = t_{i_1 \dots i_n}^{\ \ \ \ \ \ |i_n} \tag{35}$$

- (Stufen) reduzierende Rotation (in der letzten Komponente) von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S})$:

$$[\mathrm{rot}\, \mathbf{t}]_i = -\,[(\mathrm{Grad}\, \mathbf{t}) : \mathbf{E}]_i = [((*\,\mathrm{Grad})\mathbf{t}) : \mathbf{g}]_{ij} = E_{kj} t_i^{\ j|k} \tag{36}$$

- (Stufen) reduzierende Rotation (in der letzten Komponente) von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(n)}(\mathcal{S})$:

$$[\mathrm{rot}\, \mathbf{t}]_{i_1 \dots i_{n-1}} = -\,[(\mathrm{Grad}\, \mathbf{t}) : \mathbf{E}]_{i_1 \dots i_{n-1}} = [((*\,\mathrm{Grad})\mathbf{t}) : \mathbf{g}]_{i_1 \dots i_{n-1}} \tag{37}$$

$$= E_{k i_n} t_{i_1 \dots i_{n-1}}^{\ \ \ \ \ \ \ \ \ i_n|k} \tag{38}$$

- (Stufen) erweiternde Rotation von $\mathbf{p} \in \mathcal{T}^{(1)}(\mathcal{S}) \simeq \mathsf{T}\mathcal{S}$:

$$[\operatorname{Rot} \mathbf{p}]_{ij} = [(\operatorname{Grad} \mathbf{p}) \cdot \mathbf{E}]_{ij} = [(* \operatorname{Grad})\mathbf{p}]_{ij} = E_{kj} p_i{}^{|k} \tag{39}$$

- (Stufen) erweiternde Rotation von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(n)}(\mathcal{S})$:

$$\begin{aligned} [\operatorname{Rot} \mathbf{t}]_{i_1 \ldots i_{n+1}} &= [(\operatorname{Grad} \mathbf{t}) \cdot \mathbf{E}]_{i_1 \ldots i_{n+1}} = [(* \operatorname{Grad})\mathbf{p}]_{i_1 \ldots i_{n+1}} && (40) \\ &= E_{k i_{n+1}} t_{i_1 \ldots i_n}{}^{|k} && (41) \end{aligned}$$

- Grad-div-Laplace von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S})$:

$$\left[\Delta^{\mathrm{Gd}} \mathbf{t}\right]_{ij} = [\operatorname{Grad} \operatorname{div} \mathbf{t}]_{ij} = t_i{}^k{}_{|k|j} \tag{42}$$

- Rot-rot-Laplace von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S})$:

$$\left[\Delta^{\mathrm{Rr}} \mathbf{t}\right]_{ij} = [\operatorname{Rot} \operatorname{rot} \mathbf{t}]_{ij} = t_{ij|k}{}^{|k} - t_{ik|j}{}^{|k} \tag{43}$$

- div-Grad-Laplace von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S})$:

$$\left[\Delta^{\mathrm{dG}} \mathbf{t}\right]_{ij} = [\operatorname{div} \operatorname{Grad} \mathbf{t}]_{ij} = t_{ij|k}{}^{|k} \tag{44}$$

- Laplace-Operator von $\mathbf{t} \in \mathcal{T}^{(2)}(\mathcal{S})$:

$$\Delta \mathbf{t} = \Delta^{\mathrm{Gd}} \mathbf{t} + \Delta^{\mathrm{Rr}} \mathbf{t} \overset{i.A.}{\neq} \Delta^{\mathrm{dG}} \mathbf{t} \tag{45}$$