

Morphometrie von Mustern

Quermaße erfassen Inhalt, Form und Zusammenhang materieller Strukturen.

Herbert Wagner

Die integralgeometrischen Quermaße – auch bekannt als Minkowski-Funktionale – wurden erstmals als morphologische Observable bei der Suche nach Spuren der Dunklen Materie verwendet. Inzwischen sind sie beispielsweise auch in der Statistischen Physik als wichtiges Werkzeug für die morphometrische Analyse materieller Strukturen anerkannt.

Dieser Artikel stellt Quermaße mit ihren Eigenschaften und ihrer anschaulichen geometrischen und topologischen Interpretation vor. Als Beispiel dient ihre Anwendung bei einem Test des aktuellen Standardmodells der kosmischen Strukturbildung, den ich zusammen mit dem Testergebnis kurz vorstellen möchte.

Die autonome Aggregation der Materie in der Natur erzeugt eine Vielfalt räumlicher Muster auf Längenskalen, die von molekularen bis zu kosmischen Distanzen reichen. Schon der visuelle Eindruck dieser Muster kann wichtige Informationen über den Aufbau, die Evolution und gegebenenfalls die Funktionalität der abgebildeten Struktur vermitteln. Ein Beispiel ist das Röntgenbild des DNA-Moleküls, das Rosalind Franklin 1952 aufgenommen hat (Abb. 1). Die X-Form dieses Laue-Diagramms ist die Signatur eines helikalen Moleküls. Aus den fehlenden Bragg-Reflexen 4. Ordnung kann man schließen, dass das Gerüst des Moleküls aus zwei komplementären, gegeneinander um 180° verdrehten helikalen Strängen aufgebaut ist. Das Laue-Bragg-Muster bestätigt die DNA-Struktur, die Crick und Watson mittels Optimierung eines Analogmodells aufdeckten. Das Resultat lieferte den erhofften quantitativen Informationsgewinn aus dem Blickwinkel der Stereochemie. Wissenschaftlich bedeutsamer und folgenreicher war jedoch eine unerwartete semantische Information, die aus der Einsicht über die erkennbare Verbindung von Form und Funktion folgt und die in dem berühmten Satz von Crick und Watson aus dem Jahr 1953 dokumentiert ist: „It has not escaped our notice that the specific pairing we have postulated immediately suggests a possible copying mechanism for genetic material.“ Das Franklinsche Röntgenbild markiert die Geburt der Molekulargenetik.

Die Morphometrie mittels Röntgenlicht ist parameterabhängig. Ihre räumliche Auflösung struktureller Motive wird durch die Energie der Strahlung begrenzt. Für eine objektive und reproduzierbare Analyse von

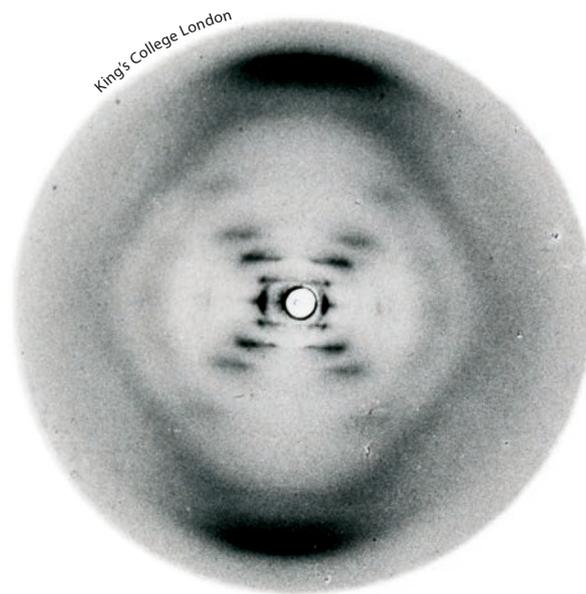


Abb. 1 Rosalind Franklin nahm 1952 dieses Röntgenbild eines DNA-Moleküls auf, das die Geburt der Molekulargenetik markiert.

Mustern sind quantitative Messgrößen nötig, die nicht von der Größe der in den Mustern dargestellten Objekte abhängen, um typische strukturelle Motive z. B. mit Modellsimulationen vergleichen und diskriminieren zu können. Diese Maße gibt es mit den aus der Integralgeometrie stammenden Minkowski-Funktionalen (Quermaße) bereits. Sie bilden eine wohldefinierte, vollständige und skalenfreie Familie von morphologischen Ordnungsparametern.

Im Folgenden werde ich die formalen Aspekte von Mustern und Quermaßen beschreiben und die morphometrische Anwendung der Quermaße auf großräumige kosmische Strukturen als Beispiel illustrieren.

KOMPAKT

- Die Quermaße bilden eine vollständige Familie morphologischer Observabler für Muster materieller Strukturen.
- Sie sind als Inhalts- und Krümmungsmaße anschaulich interpretierbar und lassen sich effizient und robust implementieren.
- Zu ihrer Anwendung sind keine statistischen Annahmen erforderlich. Die Quermaße bewerten die morphometrisch relevante Information, die als Korrelationen in den Mustern steckt.
- Ihre Sensitivität für Korrelationen beliebig hoher Ordnung ist in der Praxis eine der nützlichsten und wichtigsten Eigenschaften der Quermaße.

Prof. Dr. Herbert Wagner, Theoretische Physik, LMU München, Theresienstr. 37, 80333 München – Preisträgerartikel anlässlich der Verleihung der Max-Planck-Medaille 2016 auf der Jahrestagung der DPG in Regensburg

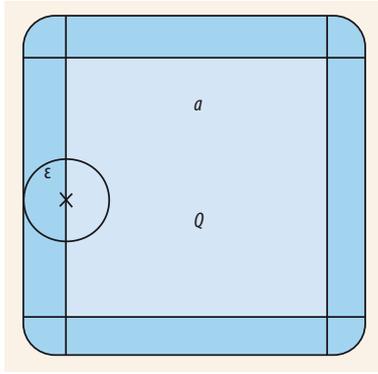


Abb. 2 Das Volumen $V_2(Q_\epsilon)$ eines Quadrats

Muster und Quermaße

Die beobachtbaren Muster in den Bildern materieller Strukturen¹⁾ setzen sich mosaikartig aus Bauelementen (z. B. Pixel, Voxel oder Körner) zusammen, die wir als d -dimensionale, konvexe, beschränkte und abgeschlossene Teilmengen des Euklidischen Raums \mathbb{R}^D beschreiben können, wobei in der Regel gilt: $0 \leq d \leq D \leq 3$. Im älteren Jargon der Integralgeometrie heißen diese Bauelemente *Eikörper*, um ihre Konvexität hervorzuheben. Die Menge aller endlichen Vereinigungen von Eikörpern im \mathbb{R}^D bildet den so genannten Polykonvexing \mathcal{P} ; die „polykonvexen Körper“ $P \in \mathcal{P}$ werden als Muster interpretiert. \mathcal{P} stellt demnach den Konfigurationsraum der Muster dar.

Um diese Muster $P \in \mathcal{P}$ morphometrisch zu vermessen, greifen wir auf die Quermaße der Integralgeometrie zurück. $\mathcal{K}^d \subset \mathcal{P}$ bezeichne die Menge der d -dimensionalen Eikörper in \mathbb{R}^d mit $0 \leq d \leq D$. Zu jedem $K \in \mathcal{K}^d$ können wir einen parallelen Eikörper K_ϵ mit dem Volumen $V_d(K_\epsilon)$ konstruieren: K_ϵ enthält alle Punkte $x \in \mathbb{R}^d$, die höchstens den Abstand ϵ von K haben (Abb. 2). Der Satz von Steiner besagt: $V_d(K_\epsilon)$ ist ein Polynom in ϵ vom Grade $d + 1$ mit

$$V_d(K_\epsilon) = \sum_{v=0}^d \binom{d}{v} W_v(K) \epsilon^v.$$

Die reellwertigen Funktionale $W_v: \mathcal{K}^d \rightarrow \mathbb{R}$ definieren

1) Mit „materiellen Strukturen“ sind stets räumlich-materielle Strukturen gemeint.

2) Die Volumina ω_d der d -dimensionalen Einheitskugeln sind: $\omega_0 = 1$, $\omega_1 = 2$, $\omega_2 = \pi$ und $\omega_3 = 4\pi/3$.

die $d + 1$ Quermaße für Eikörper $K \in \mathcal{K}^d$.

Für das Quadrat $Q \in \mathbb{R}^2$ in Abb. 2 folgt nach kurzer Rechnung

$$V_2(Q_\epsilon) = W_0(Q) + 2W_1(Q) \epsilon + W_2(Q) \epsilon^2 = F(Q) + U(Q) \epsilon + \pi \chi(Q) \epsilon^2$$

mit der Fläche $W_0(Q) = V_2(Q) = F(Q) = a^2$, dem Umfang $W_1(Q) = U(Q)/2 = 2a$ und der Euler-Charakteristik $\chi(Q) = 1$.

Für einen Würfel K in \mathbb{R}^3 mit der Kantenlänge a findet man

$$V_3(K_\epsilon) = a^3 + 6a^2 \epsilon + 3\pi a \epsilon^2 + \frac{4\pi}{3} \epsilon^3,$$

mit dem Volumen $W_0(K) = V(K) = a^3$, der Oberfläche $3W_1(K) = F(K) = 6a^2$, der integralen mittleren Krümmung $3W_2(K) = H(K) = 3\pi a$ und der integralen Gaußschen Krümmung $W_3(K) = \omega_3 \chi(K) = 1$.²⁾ Dieses Resultat gilt für beliebige glatte Eikörper in $d = 3$, weil sie topologisch äquivalent zur Kugel sind und sich ihre Oberflächen stetig differenzierbar auf die Einheitskugel S^2 abbilden lassen.

Der Hadwigersche Satz

Die Quermaße sind definiert als morphometrische Kennzahlen für Inhalte und Krümmungen von Eikörpern $K \in \mathcal{K}^d$. Können diese Quermaße als morphometrische Koordinaten für polykonvexe Muster $P \in \mathcal{P}$ dienen? Die Antwort ist Ja, denn die Quermaße sind additiv fortsetzbar aufgrund ihrer Konvexität:

$$W_v(K_1 \cup K_2) = W_v(K_1) + W_v(K_2) - W_v(K_1 \cap K_2)$$

für $K_{1,2} \in \mathcal{K}^d$. Die Funktionale $W_v(K_1 \cup K_2)$ mit $v = 0, 1, \dots, d$ sind wohldefiniert, weil der Durchschnitt zweier Eikörper wieder ein Eikörper ist.

Mit einem bekannten Induktionsschluss von zweifacher auf n -fache Vereinigung von Eikörpern $\mathcal{P} \ni P(n) = \bigcup_{i=1}^n K_i$ folgt

$$W_v(K_1 \cup \dots \cup K_n) = \sum_i W_v(K_i) - \sum_{i < j} W_v(K_i \cup K_j) + \dots + (-1)^{n-1} W_v(K_1 \cap K_2 \cap \dots \cap K_n). \quad (1)$$

Auch hier sind alle Durchschnitte wieder konvex. Das Resultat (1) zeigt, dass die anschaulich interpretierbaren Quermaße auch zur Analyse polykonvexer Muster räumlicher Strukturen verwendbar sind.

Es stellt sich die Frage, ob es außer den Quermaßen noch weitere Observable gibt, die für eine vollständige morphometrische Analyse polykonvexer Muster erforderlich wären? Die Antwort gibt der Satz von Hadwiger auf der Basis dreier Kriterien, denen jede morphometrische Observable als Funktional $\Phi: \mathcal{P} \ni P \rightarrow \Phi(P) \in \mathbb{R}$ genügen soll:

- **Additivität:** $\Phi(P_1 \cup P_2) = \Phi(P_1) + \Phi(P_2) - \Phi(P_1 \cap P_2)$ für alle polykonvexen Muster $P_{1,2} \in \mathcal{P}$.
- **Bewegungsinvarianz:** $\Phi(gP) = \Phi(P)$ für alle Elemente

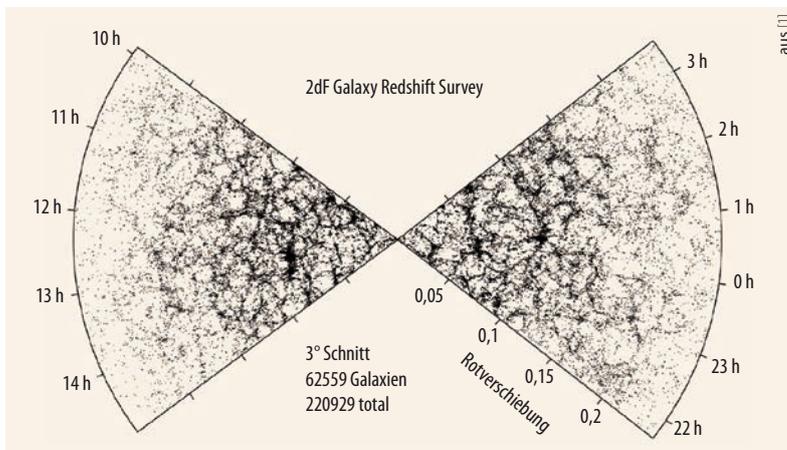


Abb. 3 Das Two-degree-Field Galaxy Redshift Survey (2dFGRS) wurde zwischen 1997 und 2002 mit dem Australian Astronomical Observatory im infraroten

Licht aufgenommen und enthält Daten aus bis zu 2,5 Milliarden Lichtjahren Entfernung, was einer Rotverschiebung von bis zu 0,3 entspricht.

g der Gruppe \mathcal{G} der Bewegungen (Translationen und Rotationen) im euklidischen Raum \mathbb{R}^D .

■ **Bedingte Stetigkeit:** $\Phi(K_i) \rightarrow \Phi(K)$ für jede konvergente Folge³⁾ $K_i \rightarrow K$ von Eikörpern, wobei $K_i, K \in \mathcal{K}^d \subset \mathcal{P}$ mit $0 \leq d \leq D$.

Der Schweizer Mathematiker Hugo Hadwiger bewies 1957 den verblüffenden Satz: Auf dem Polykonvexring in \mathbb{R}^D ist *jedes* additive, bewegungsinvariante und bedingt stetige Funktional $\Phi: \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$ darstellbar als Linearkombination der $D + 1$ Quermaße

$$\Phi(P) = \sum_{\nu=1}^D c_\nu W_\nu(P) \text{ mit reellen Zahlen } c_\nu.$$

Zu den polykonvexen Mustern gehören auch solche, die sich in Kristallgitter einbetten lassen und durch endliche Vereinigung von 0-Polytopen (Punkte), 1-Polytopen (Kanten), regulären Polygonen und Polyedern erzeugt werden. Die Quermaße bilden auch für diese diskreten Muster eine vollständige Familie morphometrischer Observablen im Sinne des Hadwigerschen Satzes, wobei aber die Bewegungen auf die diskreten Symmetrietransformationen des Gitterbettes zu beschränken sind.

Die Koeffizienten c_ν mit $\nu = 0, \dots, D$ im Hadwigerschen Satz sind frei wählbar. Man kann daher die Quermaße W_ν mit geeigneten Faktoren versehen, um z. B. integralgeometrische Formeln zu vereinfachen, die zur Berechnung der Quermaße dienen. Die in der Literatur am häufigsten verwendeten Versionen sind

$$\hat{V}_{D-\nu} := \binom{D}{\nu} V_\nu = \binom{D}{\nu} \frac{\omega_D}{\omega_{D-\nu}} M_\nu = \binom{D}{\nu} \frac{1}{\omega_\nu} W_\nu.$$

Die „intrinsic Volumina“ $\hat{V}_\mu(P)$ mit $\mu = 0, \dots, D$ hängen nur von der Dimension d des Musters $P \in \mathcal{P}$ ab und $\hat{V}_\mu = 0$ für $\mu \geq D - d$, also z. B. für $d = 2, D = 3$: $\hat{V}_0 = \chi, \hat{V}_1 = H/\pi, \hat{V}_2 = F/2$ und $\hat{V}_3 = 0$.

Eine unmittelbare Folgerung aus dem Hadwigerschen Satz ist die kinematische Hauptformel

$$\int_{\mathcal{G}} dg M_\mu(A \cap gB) = \sum_{\nu=0}^{\mu} \binom{\mu}{\nu} M_\nu(A) M_{\mu-\nu}(B),$$

mit $A, B \in \mathcal{P}$ und $\mu = 0, \dots, D$, die eine zentrale Rolle bei der morphometrischen Anwendung von Quermaßen spielt. Durch die Bewegung $g \in \mathcal{G}$ des (Probe-)Körpers B wird das Muster A morphometrisch abgetastet. Durch die Integration über die Gruppe \mathcal{G} werden die *lokalen* Teile zum *globalen* Wert $M_\mu(A)$ mit $\mu = 0, \dots, D$ additiv zusammengefügt.

Der nächste Abschnitt illustriert die Anwendung der Quermaß-Morphometrie auf die beobachtete Hierarchie von Mustern in der Galaxienverteilung.

Großräumige kosmische Strukturen

Der Planck-Satellit lieferte im Laufe der letzten Jahre sehr präzise Daten über die Anisotropien der kosmischen Mikrowellen-Hintergrundstrahlung (CMB). Diese deutet zusammen mit einer anomalen Rotverschiebung im Spektrum von Supernovae darauf

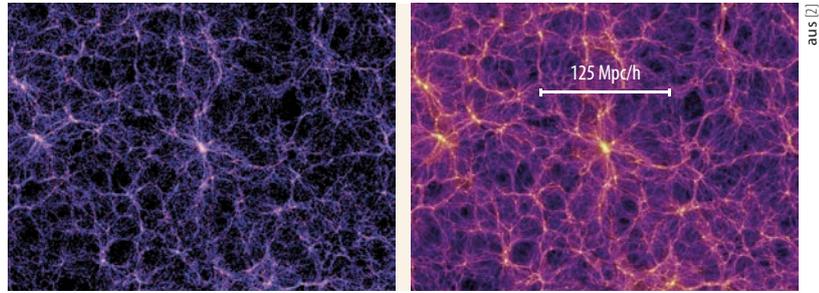


Abb. 4 In einem Λ CDM-Modell simuliert man zunächst die Verteilung der Dunklen Materie (links) und erzeugt auf diese Weise eine Galaxienverteilung (rechts).

hin, dass der Masseninhalt des heutigen Universums nahezu durch Dunkle Materie und Dunkle Energie ausgeschöpft wird. Für die beobachtbare leuchtende (baryonische) Materie verbliebe nur ein Anteil von etwa fünf Prozent.

Im gegenwärtig favorisierten dynamischen Modell der kosmischen Evolution wird die Dunkle Materie als eine Staubwolke modelliert, welche die Galaxien und Galaxienhaufen als Halo umhüllt. Die Dunkle Energie wird als positive kosmologische Konstante (Λ) parametrisiert, die gravitativ abstoßend wirkt. Mit diesem Standardmodell (Lambda Cold Dark Matter, Λ CDM) wird die kosmische Evolution als gravitativer Kollaps auf dem Hintergrund der Hubble-Expansion beschrieben, wobei die CMB-Anisotropien als die Keime der Strukturbildung gelten. Diese Keime sind Dichtefluktuationen, die durch ein stochastisches Gauß-Feld von Temperaturfluktuationen $\Delta T/T = \pm 10^{-5}$ relativ zur Temperatur $T \approx 6 \times 10^3$ K des CMB-Planck-Spektrums markiert werden.

Die zweiteilige Abb. 3 zeigt Stichproben der großräumigen Verteilung der Galaxien nördlich und südlich der Ebene der Milchstraße. Das Punktmuster veranschaulicht die heute beobachtbare Verteilung der leuchtenden Materie, wie sie sich im Laufe der kosmischen Evolution aus den CMB-Dichtefluktuationen entwickelte. Dieses globale Muster ist sowohl räumlich

3) Konvergenz bezüglich der Hausdorff-Metrik K^d

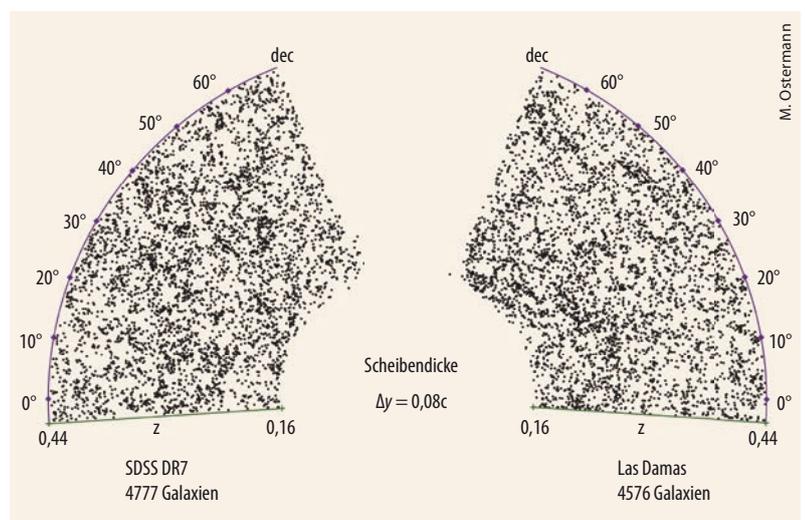


Abb. 5 Die im Sloan Digital Sky Survey (SDSS) beobachtete Galaxienverteilung (links) ist dem Ergebnis einer Las Damas-Simulation (LD) des Λ CDM-Modells (rechts) nach der Volumenlimitierung gegenübergestellt.

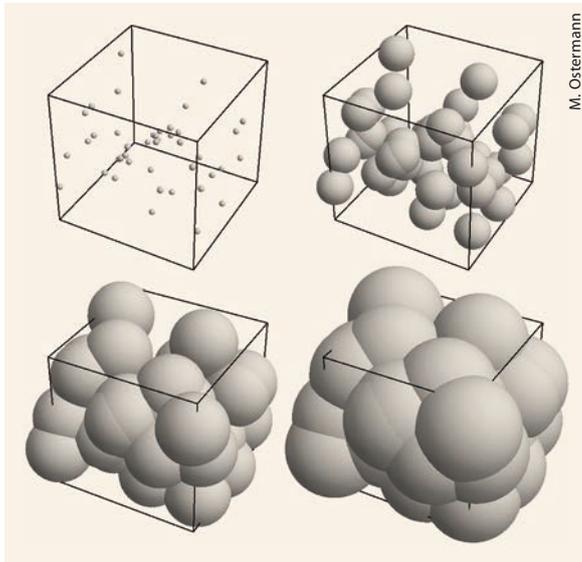


Abb. 6 Kugeln mit unterschiedlich großen Radien R werden Poisson-verteilt in einem Volumen angeordnet.

als auch zeitlich inhomogen, denn einerseits nimmt die Anzahl der sichtbaren Galaxien mit zunehmender Rotverschiebung ab, d. h. mit zunehmender Entfernung vom Beobachter, weil dabei die scheinbare Leuchtkraft abnimmt; andererseits werden bei höherer Rotverschiebung die Galaxien auch immer jünger.

Um aus diesen Rohdaten homogene Stichproben herauszufiltern, die eine morphologische Vermessung ermöglichen, muss der Galaxienkatalog „volumenlimitiert“, d. h. hinsichtlich Leuchtkraft und Rotverschiebung sortiert werden.

Für einen Test des kosmologischen Standardmodells liegt es nahe, die beobachteten materiellen Strukturmuster mit den Mustern zu vergleichen, die mittels großräumiger numerischer Simulation des Λ CDM-Modells erzeugt werden. Ein direkter morphometrischer Vergleich der beiden Mustertypen ist jedoch nicht möglich (Abb. 4 links). Beobachtet wird naturgemäß nur die leuchtende Materie, simuliert dagegen nur die nicht beobachtbare Dunkle Materie. Erst die astrophysikalisch begründbare Annahme, dass lokale Verdichtungen im kosmischen Gewebe der Dunklen Materie die Halos von Galaxien markieren, ermöglicht eine plausible Identifizierung einer Galaxienverteilung (Abb. 4 rechts).

Das linke Punktmuster in Abb. 5 beschreibt eine volumenlimitierte Galaxienverteilung aus einem Katalog des Sloan Digital Sky Surveys (SDSS-Galaxien); das rechte Punktmuster zeigt ein ebenfalls volumenlimitiertes Ensemble von Galaxien, die in einer Las Damas-Simulation des Λ CDM-Modells, wie oben beschrieben, identifiziert wurden (LD-Galaxien). Um die beiden Karten anhand der Quermaße zu vergleichen, haben Alexander Wiegand, Thomas Buchert und Matthias Ostermann [3] – einem bewährtem Vorschlag folgend [4, 5] – die beiden Punktmuster zu polykonvexen Mustern konvertiert, indem sie Kugeln mit Radius R über die Punkte stülpten und die so erzeugten Booleschen Modelle mit allen vier Quermaßen „tomographisch“ analysierten, wobei der Kugelradius als diagnostischer Parameter diente (Abb. 6).

Die Abb. 7 zeigt den berechneten Verlauf der Quermaßdichten als Funktion des Kugeldurchmessers

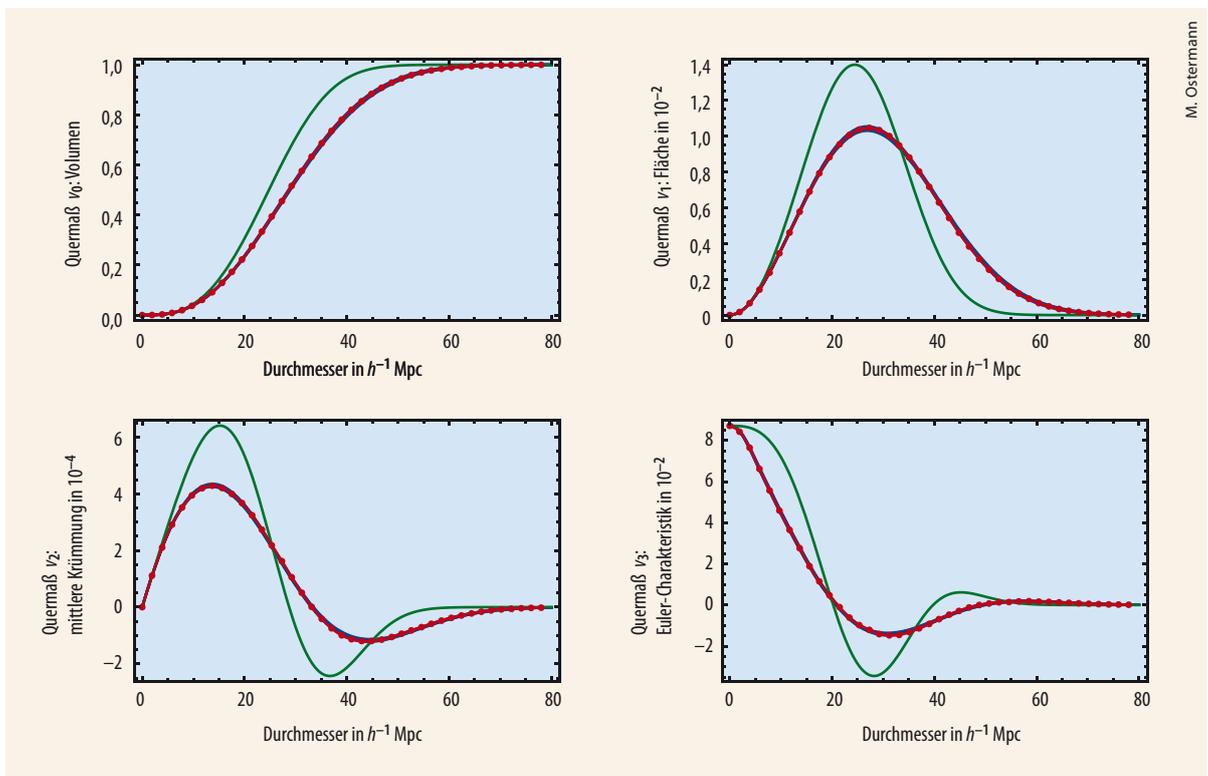


Abb. 7 Die vier Dichten der Quermaße Volumen, Fläche, mittlere Krümmung und Euler-Charakteristik sind für ver-

schiedene Kugeldurchmesser $2R$ aufgetragen. Während die Werte für die beobachteten SDSS-Galaxien (rot) und die

simulierten LD-Galaxien (blau) gut übereinstimmen, weichen Poisson-verteilte Kugeln (grün) deutlich davon ab.

v_{μ}^{SDSS} (rot) der SDSS-Galaxien und $v_{\mu}^{\text{LD}}(R)$ (blau) der LD-Galaxien. Die grüne Kurve reproduziert den exakt bekannten Verlauf der Quermaßdichten von Poisson-verteilten Kugeln [6].

Die Quermaßdichten $v_{\mu}^{\text{SDSS}}(R)$ und $v_{\mu}^{\text{LD}}(R)$ sind Mittelwerte über eine Anzahl von zufällig ausgewählten Subensembles der SDSS- bzw. der LD-Galaxien in **Abb. 5**. Aus Formel (1) ist ersichtlich, dass in den Quermaßdichten morphometrisch relevante Informationen über Korrelationen beliebig hoher Ordnung stecken.

Der Unterschied zwischen Poisson-verteilten Kugeln und den beobachteten bzw. simulierten Galaxien verdeutlicht den Einfluss der Korrelationen, die sich im Laufe der kosmischen Strukturbildung aus der ursprünglichen Normalverteilung der Keime entwickelten. Die augenscheinlich gute Übereinstimmung beobachteter und simulierter Quermaßdichten spricht für das Λ CDM-Modell. Wiegand et al. finden allerdings bei ihrer Fehleranalyse deutliche Unterschiede in den Schwankungen zwischen den Quermaßdichten der SDSS- und der LD-Subensembles [3], die es noch aufzuklären gilt.

Die beschriebene Morphometrie kommt vielfältig zum Einsatz: Quermaße dienen auch als thermodynamische Ordnungsparameter bei Phasenumwandlungen in Mikroemulsionen [7]. Aus der Rolle der Euler-Charakteristik in der Perkolations-theorie lässt sich eine analytisch sehr einfache, aber erstaunlich genaue Relation herleiten, um den kritischen Schwellenwert des Perkolationsübergangs für eine größere Anzahl zweidimensionaler Gitter abzuschätzen [8]. Die Minkowski-Funktionale finden in der Statistischen Physik zahlreiche aktuelle Anwendungen [9].

*

Mein Dank gilt Klaus Mecke, der mir zeigte, welches physikalische Potenzial in der Integralgeometrie mit ihren Quermaßen für eine produktive Zusammenarbeit zwischen Theorie und Experiment steckt. Der Dank schließt Martin Kerscher ein für seine wegwei-

senden Anwendungen der Quermaße in der Kosmologie sowie für sein Engagement zusammen mit Thomas Buchert, dort diese Quermaße als morphometrische Spektroskopie zu propagieren. Martin Kerscher danke ich besonders für seine Hilfsbereitschaft bei der Aufgabe, einen lesbaren Text aus meinen handschriftlichen Notizen anzufertigen. Matthias Ostermann danke ich für die Anfertigung der **Abbildung 5**.

Literatur

- [1] *M. M. Colless et al.*, MNRAS **328**, 1039 (2001)
- [2] *V. Springel et al.*, Nature **435**, 629 (2005)
- [3] *A. Wiegand, T. Buchert und M. Ostermann*, MNRAS **443**, 241 (2014)
- [4] *K. Mecke, T. Buchert und H. Wagner*, Astron. Astrophys. **288**, 697 (1994)
- [5] *M. Kerscher et al.*, MNRAS **284**, 37 (1997)
- [6] *K. Mecke und H. Wagner*, J. Stat. Phys. **64**, 843 (1991)
- [7] *C. N. Likos, K. Mecke und H. Wagner*, J. Chem. Phys. **102**, 9350 (1995)
- [8] *R. A. Neher, K. Mecke und H. Wagner*, J. Stat. Mech. P01011 (2008)
- [9] *K. Mecke* in: Lecture Notes in Physics, Vol. 554 (2000), *K. Mecke und D. Stoyan* (Hrsg.), S. 111

DER AUTOR

Herbert Wagner studierte Physik in München und Hamburg und wurde 1963 an der Technischen Universität bei Wilhelm Brenig promoviert. Danach war er Mitarbeiter am Max-Planck-Institut in München und Research Associate an der Cornell University (USA). 1970 erhielt er einen Ruf auf einen Lehrstuhl für Theoretische Physik an der Universität zu Köln verbunden mit einer Stelle als Direktor am Institut für Festkörperforschung im Forschungszentrum Jülich. Von 1976 bis zu seiner Emeritierung 2003 hatte er einen Lehrstuhl für Theoretische Physik an der LMU in München inne.

