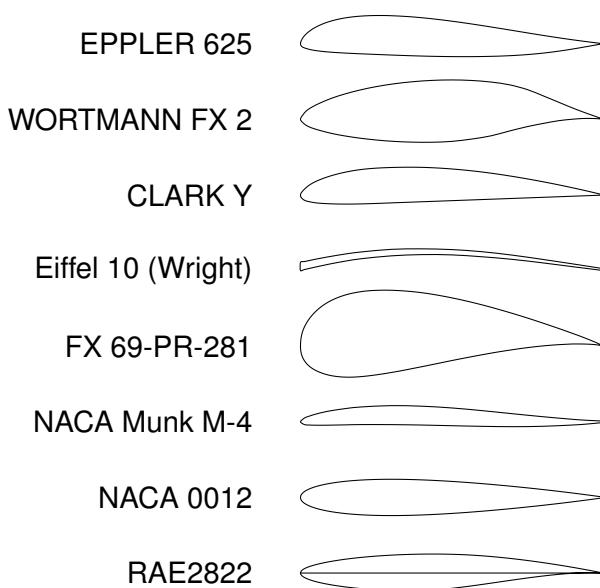


Shapes and Geometry

Stephan Schmidt



Inhaltsverzeichnis

1 Einführung	1
1.1 Was ist Formoptimierung?	1
1.2 Anwendungsgebiete	1
1.3 Beispiele	3
1.4 Topologie-Optimierung	4
2 Optimierungsgrundlagen	5
2.1 Definitionen und Übersicht	5
2.1.1 Optimalitätsbedingungen	5
2.2 Optimierung bei PDEs	9
2.2.1 Erst Diskretisieren, dann Optimieren	9
2.2.2 Die Finite Differenzen Diskretisierung	10
2.2.3 Erst ableiten, dann diskretisieren	12
2.3 Formoptimierungsprobleme	15
2.4 Lösungsansätze	15
2.4.1 Diskreter Ansatz	15
2.4.2 Analytischer Ansatz	18
3 Differentialgeometrie	19
3.1 Grundbegriffe	19
3.2 Integration auf Untermannigfaltigkeiten	27
4 Formsensitivitäten	32
4.1 Deformation einer Menge	32
4.2 Hadamard-Formel für Volumen-Zielfunktionale	38
4.3 Hadamard-Formel für Oberflächenintegrale	41

4.3.1	Formableitung für Geometrische Größen	44
4.3.2	Formableitungen für allgemeine Randfunktionale	51
4.4	Formableitungen und PDEs	56
4.4.1	Ableitungskonzepte und Randbedingungen	56
4.4.2	Shape Calculus und der Lagrange-Formalismus	60
4.5	Formableitungen höherer Ordnung	64
4.5.1	Randdarstellung	64
4.5.2	Volumendarstellung	65
5	Anwendungen	66
5.1	Fluid-Dynamik	66
5.1.1	Massenerhaltung	66
5.1.2	Impulserhaltung	68
5.1.3	Energieerhaltung	74
5.1.4	Entdimensionalisierung und Maßstabsrechnung	77
5.2	Formoptimierung und Fluide	78
5.2.1	Ableitungen erster Ordnung	78
5.2.2	SQP-Methoden	85
5.2.3	Der Shape Hessian für das Stokes Problem	87
5.2.4	Konsistente Adjungierte Iteration und One-Shot	94
6	Gittergeneration und -deformation	99
6.1	Strukturierte Gitter	99
6.1.1	Algebraische Gitter: Lofting, Coons Patch und Transfinite Interpolation	99
6.1.2	Elliptische Gitter und Mesh Deformation	108
6.1.3	Strukturierte Gitter und HPC	111
6.2	Unstrukturierte Gitter	113
6.2.1	Voronoi Tesselation und Delaunay Gitter	113
6.2.2	Optimale Delaunay Triangulierungen und bestes Point Spacing	119

1

Einführung

1.1 Was ist Formoptimierung?

Formoptimierung beschäftigt sich mit Problemen, bei denen die Unbekannte nicht durch eine Menge von Parametern oder Funktionen gegeben ist, sondern durch Struktur und Form eines geometrischen Objektes. Da der hinter dem Problem stehende physikalische Prozess oft durch partielle Differentialgleichungen beschrieben wird, ist die Formoptimierung sehr eng verwandt mit der Optimierung bei PDEs. Derartige Probleme sind oft in der Praxis anzutreffen:

1.2 Anwendungsgebiete

- Fluid-Dynamik
 - Flugzeugformoptimierung
 - aerodynamische Autos
 - Schiffsschrauben
 - Rohrverbindungen, Pipelines
- Lineare Elastizität
 - Brückenformen
 - Kranhaken
 - tragende Bauteile
 - Motorenkomponenten
 - Statik

- Bilderkennung / Bildregistrierung
- Medizin
 - Schaufelform von Blutpumpen
 - Implantate für Blutgefäße
 - Diagnosehilfen

1.3 Beispiele

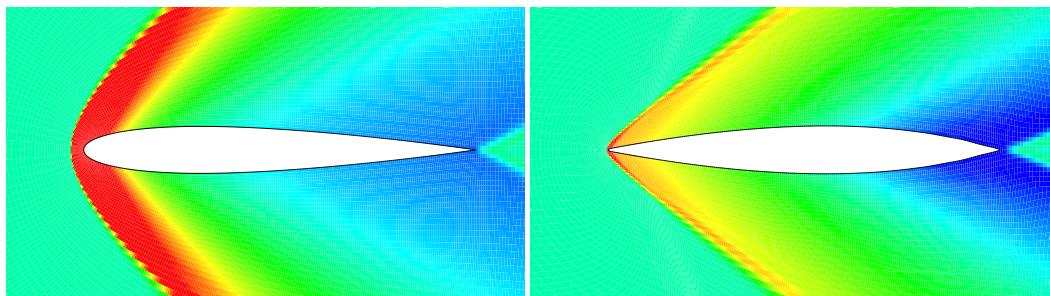


Abbildung 1.1: Optimierte Flügelprofil für Mach 2,0.

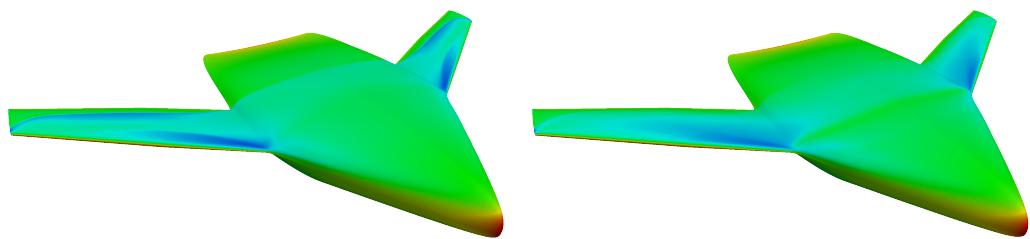


Abbildung 1.2: Optimierte VELA-Flugzeug.

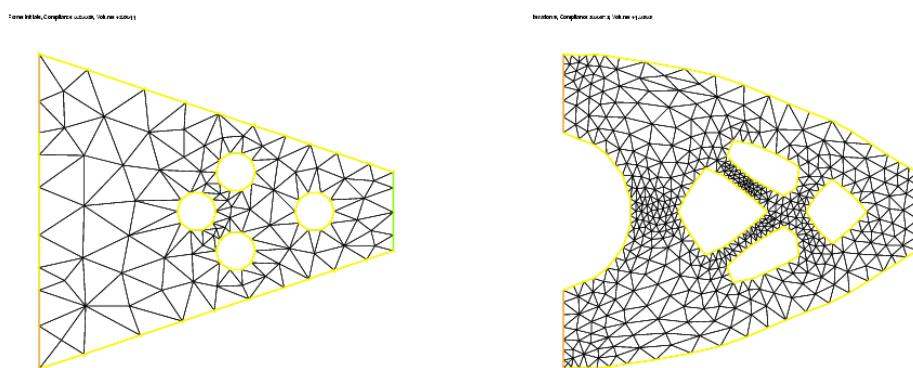


Abbildung 1.3: Optimierter Kranhaken, <http://www.cmap.polytechnique.fr/~optopo/index.php>.

1.4 Topologie-Optimierung

Bei der Formoptimierung wird nicht explizit die Anzahl und Lage von Löchern mitberücksichtigt. Gerade im Bereich der linearen Elastizität und Strukturmechanik ist dieses jedoch oft wünschenswert, allerdings benötigt man dann eine Sensitivitätsinformation bzgl. einer Weg- oder Hinzunahme von Löchern. Vergleiche auch Abbildung 1.3 und Abbildung 1.4.

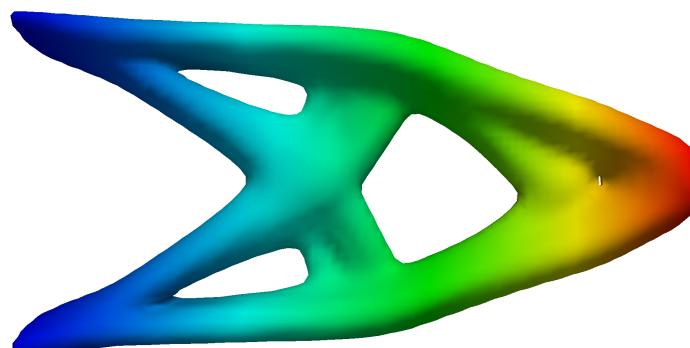


Abbildung 1.4: Cantilever Optimierung, einmal nur äußere Form und einmal mit variabler Anzahl an Löchern.

2

Optimierungsgrundlagen

2.1 Definitionen und Übersicht

2.1.1 Optimalitätsbedingungen

Bevor Formoptimierungsprobleme definiert werden zunächst eine Kurzübersicht über allgemeine beschränkte Optimierungsprobleme:

Definition 2.1 (Unbeschränktes Optimierungsproblem). Für eine Funktion $J : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ wird die Aufgabe

$$\min J(q)$$

ein (unbeschränktes) Minimierungsproblem genannt. Wird angenommen, dass J hinreichend oft stetig differenzierbar ist, also $J \in C^2(\mathbb{R}^n)$, gilt die notwendige Optimalitätsbedingung, d.h. für q^* lokales Minimum gilt

$$\nabla J(q^*) = 0. \quad (2.1)$$

Außerdem ist dann die Hesse-Matrix positiv semi-definit

$$v^T \text{Hess } J(q^*) v \geq 0 \quad \forall v \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}, \quad (2.2)$$

wobei $\text{Hess } J(q)$ die Hesse-Matrix ist,

$$\text{Hess } J(q) := \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 J(q)}{\partial q_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 J(q)}{\partial q_1 \partial q_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 J(q)}{\partial q_n \partial q_1} & \cdots & \frac{\partial^2 J(q)}{\partial q_n^2} \end{bmatrix}.$$

Gilt (2.2) mit $>$ statt nur \geq , d.h. die Hesse-Matrix ist positiv definit, so ist die Bedingung hinreichend für ein lokales Minimum.

Definition 2.2 (Beschränktes Optimierungsproblem). Für $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ und $c : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ ist durch

$$\begin{aligned} & \min f(q) \\ & \text{unter } c(q) = 0 \end{aligned}$$

ein beschränktes Optimierungsproblem gegeben. Ist q^* ein regulärer Punkt bzgl. c , d.h. $Dc(q^*)$ hat vollen Rang, und lokale Lösung des Optimierungsproblems, dann gibt es eine “adjungierte Variable” $\xi \in \mathbb{R}^m$, so dass für die Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L}(q, \xi) := f(q) - \xi^T c(q)$$

gilt

- a) $\nabla_q \mathcal{L}(q^*, \xi) = 0$ “Karush-Kuhn-Tucker Bedingung”
- b) $v^T \text{Hess}_q \mathcal{L}(q^*, \xi)v \geq 0 \quad \forall v \in \text{Kern } Dc(q^*)$

Beweis. Es sei q^* lokale Lösung, d.h. es gibt eine Umgebung U um q^* , so dass

$$f(q^*) \leq f(q) \quad \forall q \in M := \{q \in \mathbb{R}^n : c(q) = 0\} \cap U$$

Betrachte Weg $\gamma : (-\epsilon, \epsilon) \rightarrow M$ mit $\gamma(0) = q^*$, dann gilt

$$\begin{aligned} & \Rightarrow \phi(t) := f(\gamma(t)) \text{ besitzt lokales Minimum bei } t=0 \\ & \Rightarrow 0 = \phi'(0) = Df(\gamma(0))\dot{\gamma}(0) = Df(q^*)\dot{\gamma}(0) = (\nabla f(q^*), \dot{\gamma}(0)) \end{aligned}$$

Da γ beliebig war, gilt

$$\nabla f(q^*) \in (T_{q^*} M)^\perp = [\text{Kern}(Dc(q^*))]^\perp = \text{Bild}(Dc(q^*)^T),$$

d.h. der Gradient steht senkrecht auf M am Punkt q^* . Weil der Gradient somit auch im Bildraum liegt, gibt es ein $\xi \in \mathbb{R}^m$ mit

$$\nabla f(q^*) = Dc(q)^T \xi \quad \Rightarrow 0 = \nabla f(q^*) - Dc(q^*)^T \xi = \nabla_q \mathcal{L}(q^*, \xi)$$

Für Wege γ gilt ferner mit der Abkürzung $v := \dot{\gamma}(0)$ und $L(q) := \xi^T \cdot c(q)$:

$$0 \leq \phi''(0) = \frac{d^2}{dt^2} \Big|_{t=0} f(\gamma(t)) = v^T \text{Hess } f(q^*)v + Df\ddot{\gamma}(0).$$

Wegen $0 = \nabla_q \mathcal{L}(q^*) = \nabla_q f(q^*) - \nabla L(q^*, \xi)$ folgt somit

$$0 \leq v^T \text{Hess } \mathcal{L}(q^*, \xi)v \quad \forall v \in \text{Kern}(Dc(q^*))$$

□

Der obige Satz lässt sich auch auf allgemeine Banachräume verallgemeinern, siehe z.B. Zeidler: Applied functional analysis, Springer 1995.

Theorem 2.3 (Hinreichende Optimalitätsbedingungen). Für das Optimierungsproblem aus 2.2 gelte wieder, dass q^* ein regulärer Punkt mit $c(q^*) = 0$ ist. Ferner gelte für ein $\alpha > 0$:

- a) $\nabla \mathcal{L}(q^*, \xi) = 0$ für ein $\xi \in \mathbb{R}^m$
- b) $v^T \text{Hess}_q \mathcal{L}(q^*, \xi)v > \alpha \|v\|^2 \quad \forall v \in \text{Kern}(Dc(q^*))$

Dann ist q^* striktes lokales Minimum.

Beweis. Annahme: q^* ist kein striktes lokales Minimum. Dann gilt: Für jede Umgebung U gibt es eine Folge (q_k) in M ,

$$q_k \in M := \{q \in \mathbb{R}^n : c(q) = 0\} \cap U$$

mit $q_k \neq q^*$ und $q_k \rightarrow q^*$ aber mit $f(q_k) \leq f(q^*)$. Wir setzen

$$s_k := \frac{q_k - q^*}{\|q_k - q^*\|}, \quad \delta_k := \|q_k - q^*\|.$$

Die Folge (s_k) bleibt somit in der Einheitskugel und ist daher beschränkt. Im \mathbb{R}^n ist die Einheitskugel kompakt (gilt nur in endlich vielen Dimensionen). Also gibt es eine konvergente Teilfolge $s_{k'} \rightarrow s^*$ mit $\|s^*\| = 1$.

Wir zeigen nun, dass s^* die Voraussetzung b) nicht erfüllt. Zunächst gilt $s^* \in \text{Kern}(Dc(q^*))$, denn mit Taylorreihe folgt:

$$0 = c_i(q_{k'}) - c_i(q^*) = Dc_i(q^*)\delta_{k'} s_{k'} + \frac{\delta_{k'}^2}{2} D^2 c_i(\tilde{q}_{k'}, s_{k'}) \quad (2.3)$$

In der Grenze gilt dann

$$\Rightarrow 0 = Dc_i(q^*)s^* \quad \forall i = 1, \dots, n. \quad (2.4)$$

Für $q_{k'}$ gilt nun

$$0 \geq f(q_{k'}) - f(q^*) = (\nabla f(q^*), \delta_{k'} s_{k'}) + \frac{\delta_{k'}^2}{2} (s_{k'}, \text{Hess } f(\tilde{q}_{k'}) s_{k'}) \quad (2.5)$$

Wir multiplizieren (2.4) mit ξ und bauen dieses in (2.5) ein:

$$\begin{aligned} 0 &\geq \delta_{k'} \left(\nabla f(q^*) - \sum_{i=1}^n \xi_i \nabla c_i(q^*), s_{k'} \right) \\ &+ \frac{\delta_{k'}^2}{2} \left(s_{k'}, \left[\text{Hess } f(\tilde{q}_{k'}) - \sum_{i=1}^n \xi_i \text{Hess } c_i(\tilde{q}_{k'}, i) \right] s_{k'} \right) \end{aligned}$$

Der erste Teil dieses Ausdrucks ist genau

$$\nabla f(q^*) - \sum_{i=1}^n \xi_i \nabla c_i(q^*) = \nabla \mathcal{L}(q^*, \xi) = 0$$

und der zweite Teil ist genau

$$\left(s_{k'}, \left[\text{Hess } f(\tilde{q}_{k'}) - \sum_{i=1}^n \xi_i \text{Hess } c_i(\tilde{q}_{k',i}) \right] s_{k'} \right) = (s^*, \text{Hess } \mathcal{L}(q^*, \xi) s^*).$$

Damit steht s^* im Widerspruch zur Voraussetzung b). \square

Ein besonders wichtiger Sonderfall liegt vor, wenn sich die Unbekannte der Optimierung in einen Zustand und eine Steuerung teilen lässt, also $q \rightsquigarrow (u, q)$. Dieser Fall ist typisch für Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen. Die Gleichungsbeschränkung $c(u, q) = 0$ besagt dann, dass zu einer gegebenen Steuerung q , z.B. die Heizleistung am Rand, der korrekte physikalische Zustand u gefunden wird, z.B. die Temperaturverteilung im Inneren.

Definition 2.4 (Separability Framework). Für $(u, q) \in U \times Q$ ist ein beschränktes Optimierungsproblem mit Separability Framework gegeben durch

$$\begin{aligned} & \min_{(u,q)} f(u, q) \\ & \text{unter } c(u, q) = 0, \quad \exists (D_u c)^{-1} \end{aligned}$$

dann gilt für $U = \mathbb{R}^{n_1}$ und $Q = \mathbb{R}^{n_2}$:

$$\begin{aligned} v \in \text{Kern}(Dc(u, q)) &= \left\{ \begin{bmatrix} -(D_u c)^{-1} D_q c \\ I \end{bmatrix} \beta : \beta \in Q \right\} \\ \Rightarrow (v, \text{Hess}_{(u,q)} \mathcal{L}(u^*, q^*, \xi) v) &= \left(\begin{bmatrix} -(D_u c)^{-1} D_q c \\ I \end{bmatrix} \beta, \text{Hess}_{(u,q)} \mathcal{L}(u^*, q^*, \xi) \begin{bmatrix} -(D_u c)^{-1} D_q c \\ I \end{bmatrix} \beta \right) \\ &= (\beta, B\beta) \end{aligned}$$

mit

$$B := \begin{bmatrix} -(D_u c)^{-1} D_q c \\ I \end{bmatrix}^T \text{Hess}_{(u,q)} \mathcal{L}(u^*, q^*, \xi) \begin{bmatrix} -(D_u c)^{-1} D_q c \\ I \end{bmatrix}$$

als ‘‘reduzierte Hesse-Matrix’’. Des Weiteren liefert die Nebenbedingung $c(u, q) = 0$ eine implizite Funktion, d.h. über den Satz über implizite Funktionen kann $u = u(q)$ aufgefasst werden. Dann gilt

$$\text{Hess}_q f(u(q), q) = B$$

und für den Gradienten ergibt sich

$$\begin{aligned}\nabla_q^{\text{total}} f(u(q), q) &= \nabla_q^{\text{partiell}} f(u, q) - (D_q c)^T (D_u c)^{-T} \nabla_u^{\text{partiell}} f(u, q) \\ &= \nabla_q f(u, q) - (D_q c)^T \xi, \text{ mit } (D_u c)^T \xi = \nabla_u f(u, q)\end{aligned}\quad (2.6)$$

Damit ergibt sich ein Gleichungssystem, welches die optimale Lösung charakterisiert:

$$\nabla_u f(u, q) - (D_u c)^T (u, q) \xi = 0 \text{ adjungierte Gleichung, regulär in } \xi \quad (2.7)$$

$$\nabla_q f(u, q) - (D_q c)^T (u, q) \xi = 0 \text{ Optimalitätsbedingung oder "Design"} \quad (2.8)$$

$$c(u, q) = 0 \text{ Zustandsgleichung} \quad (2.9)$$

2.2 Optimierung bei PDEs

Der Thematik “Optimierung bei partiellen Differentialgleichungen” kann man sich von zwei Seiten nähern. Zum einen kann man die PDE zunächst diskretisieren und sich danach mit der Optimierung des Problems im \mathbb{R}^n beschäftigen. Andererseits kann man auch zunächst die notwendigen Optimalitätsbedingungen im Funktionsraum ermitteln und danach das Optimalitätssystem diskretisieren und lösen. Unter gewissen Umständen erzeugen beide Ansätze das gleiche System, jedoch ist dies nicht immer der Fall. Insbesondere in der Formoptimierung unterscheiden sich beide Ansätze sehr deutlich.

2.2.1 Erst Diskretisieren, dann Optimieren

Bisher haben wir nur Optimalitätsbedingungen im \mathbb{R}^n betrachtet. Wird die PDE zunächst diskretisiert, kann mit dem bisherigen Kenntnisstand das Optimierungsproblem schon gelöst werden. Beispielhaft gehen wir auf das Standardproblem aus J. L. Lions *Optimal Control of Systems governed by PDE*, Springer 1971 ein.

Es sei $\Omega = [0, 1]^2$ das Einheitsquadrat und $z \in L^2(\Omega)$ gegebene Messdaten und $f \in L^2(\Omega)$ eine vorgegebene Heizleistung. Wir betrachten das Problem die Heizleistung durch q in Ω so zu modifizieren, so dass die Temperaturverteilung u die Daten z möglichst gut trifft:

$$\min_{(u,q)} \frac{1}{2} \int_{\Omega} (u(x) - z(x))^2 \, dx + \frac{\alpha}{2} \int_{\Omega} q^2(x) \, dx \quad (2.10)$$

unter

$$\begin{aligned}-\Delta u &= f + q && \text{in } \Omega \\ u &= 0 && \text{auf } \partial\Omega\end{aligned}$$

Der zweite Term der Zielfunktion stellt für ein gegebenes $\alpha > 0$ einen Regularisierungsterm da, auf dessen Notwendigkeit später kurz eingegangen wird. Eine Lösung ist in Abbildung 2.1 dargestellt.

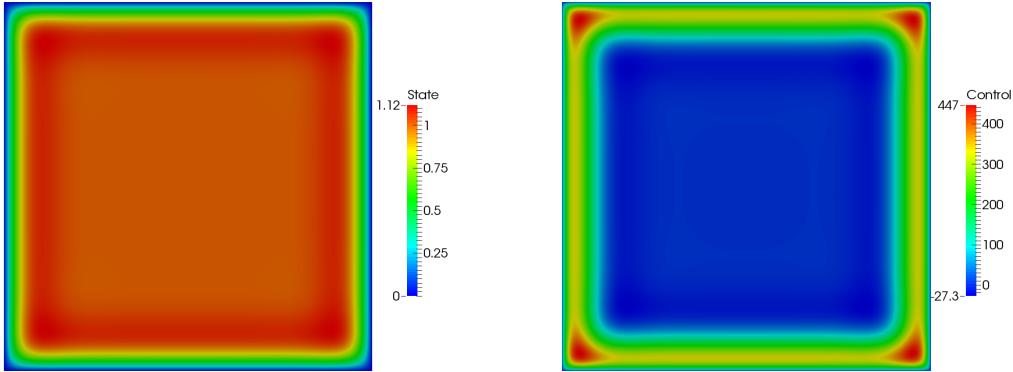


Abbildung 2.1: Zustand u und Steuerung q als Lösung von (2.10) für $z \equiv 1$, $f \equiv 0$ und $\alpha = 10^{-6}$ auf einem 250×250 Gitter.

2.2.2 Die Finite Differenzen Diskretisierung

Definition 2.5 (Finite Differenzen Diskretisierung). Wir betrachten die Poisson-Gleichung im Einheitsquadrat $\Omega = [0, 1]^2$:

$$\begin{aligned} -\Delta u(x) &= f(x) \text{ in } \Omega \\ u(x) &= u_0(x) \text{ auf } \partial\Omega \end{aligned}$$

Das Gebiet Ω wird durch ein reguläres Gitter diskretisiert,

$$\Omega_h := \{(x_i, y_j) \in \Omega : x_i = i \cdot h, y_j = j \cdot h, i, j = 1, \dots, N-1\}$$

bei fester Gitterweite $h = 1/N$. Der Laplace-Operator

$$\Delta = \sum_{i=1}^2 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$$

kann dann durch finite Differenzen approximiert werden, es gilt (1D):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) &\approx \frac{\frac{u(x+h) - u(x)}{h} - \frac{u(x) - u(x-h)}{h}}{h} \\ &= \frac{1}{h^2} (u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)) \\ &=: \Delta_h u \end{aligned}$$

und analog in 2D:

$$\begin{aligned}\Delta u(x, y) &\approx \frac{1}{h^2}(u(x+h, y) + u(x-h, y) + u(x, y+h) + u(x, y-h) - 4u(x, y)) \\ &=: \Delta_h u\end{aligned}$$

Bei lexikographischer Ordnung $u_{i,j} \rightsquigarrow u_k$ mit $k = (N-1) \cdot (j-1) + i$ ergibt sich

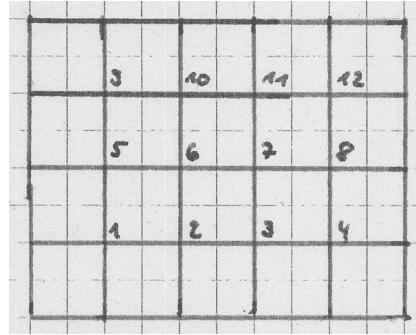


Abbildung 2.2: Ein reguläres 2D-Gitter mit lexikographischer Ordnung

dann eine Matrix-Darstellung von Δ_h , welche in 2D die Gestalt

$$\Delta_h = -\frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} T & I & & \\ I & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & I \\ & & I & T \end{bmatrix} \quad \text{mit } T = \begin{bmatrix} -4 & 1 & & \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ & & 1 & -4 \end{bmatrix}$$

hat.

Damit können wir Problem (2.10) als endlich dimensionales Optimierungsproblem auffassen und lösen.

$$\min_{(u,q)} \frac{1}{2h^2} \sum_{i=1}^N (u_i - z_i)^2 + \frac{\alpha}{2h^2} \sum_{i=1}^N q_i^2 \quad (2.11)$$

unter

$$\begin{aligned}-\Delta_h u &= f + q && \text{in } \Omega \\ u &= 0 && \text{auf } \partial\Omega\end{aligned}$$

Die Lagrange-Funktion ist durch

$$\mathcal{L}(u, q, \xi) = \frac{1}{h^2} \sum_{i=1}^N (u_i - z_i)^2 + \frac{\alpha}{2h^2} \sum_{i=1}^N q_i^2 - \xi^T (\Delta_h u + f + q)$$

gegeben. Nullsetzen der Ableitungen der Lagrange-Funktion liefert folgendes Gleichungssystem, welches nach (u, q, ξ) gelöst werden muss:

$$\begin{bmatrix} \tilde{I} & 0 & \Delta_h^T \\ 0 & \alpha\tilde{I} & I^T \\ \Delta_h & I & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u \\ q \\ -\xi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{I}z \\ 0 \\ f \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

wobei $\tilde{I} := \frac{1}{h^2} I$ die um die Gitterweite skalierte Einheitsmatrix ist. (Beweis: Übung?)

2.2.3 Erst ableiten, dann diskretisieren

Bevor der kontinuierliche Ansatz diskutiert wird, müsste eigentlich eine Version von Definition 2.4 mit den dort erwähnten Optimalitätsbedingungen für Funktionsräume betrachtet werden, welches jedoch an dieser Stelle zu weitreichend ist. Es gelten jedoch ähnliche Optimalitätsbedingungen: Für $c : X \rightarrow Y$ ist die Lagrange-Funktion durch

$$\mathcal{L}(u, q, \xi) := f(u, q, \xi) - (\xi, c(u, q))_Y$$

gegeben und die notwendigen Optimalitätsbedingungen sind

$$\nabla_u f(u, q) - C_u^{\text{ad}}(u, q)\xi = 0 \quad (2.13)$$

$$\nabla_q f(u, q) - C_q^{\text{ad}}(u, q)\xi = 0 \quad (2.14)$$

$$c(u, q) = 0 \quad (2.15)$$

gegeben. Dabei bezeichnet C^{ad} den adjungierten Operator, definiert durch

$$(v, Cw)_Y = (C^{\text{ad}}v, w)_X$$

Wir kehren zum Beispielproblem (2.10) zurück und betrachten die notwendigen Optimalitätsbedingungen formal im Funktionsraum. Diese Betrachtungen sind formal, weil wir zunächst die Existenz eines Minimum nicht betrachtet haben. Die Lagrange-Funktion ist durch

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(u, q, \xi, \xi_b) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} (u(x) - z(x))^2 \, dx + \frac{\alpha}{2} \int_{\Omega} q^2(x) \, dx \\ &\quad + (\xi, -\Delta u - f - q)_{\Omega} + (\xi_b, u)_{\partial\Omega} \\ &= \frac{1}{2}(u - z, u - z)_{\Omega} + \frac{\alpha}{2}(q, q)_{\Omega} + (\xi, -\Delta u - f - q)_{\Omega} + (\xi_b, u)_{\partial\Omega} \end{aligned}$$

gegeben. Dabei bezeichnet $(., .)$ das L^2 -Skalarprodukt. Um die notwendigen Optimalitätsbedingungen zu erhalten wird dieses Funktional nun nach allen Argumenten differenziert und jeweils gleich Null gesetzt. Der Gauß'sche Integralsatz ist dabei von großer Wichtigkeit.

Theorem 2.6 (Divergenztheorem, Gauß'scher Integralsatz). Es sei Ω mit stückweise differenzierbarem Rand Γ . Falls F ein stetig differenzierbares Vektorfeld in einer Umgebung von Ω ist, dann gilt folgende Gleichheit

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} F \, dA = \int_{\Gamma} \langle F, n \rangle \, dS.$$

Beweis. Der Ausdruck ergibt sich sofort durch mehrdimensionale partielle Integration: Seien u und v stetig differenzierbar auf $\bar{\Omega}$, dann gilt

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x_i} v \, dx = \int_{\Gamma} uv n_i \, ds - \int_{\Omega} u \frac{\partial v}{\partial x_i} \, dx \quad (2.16)$$

Siehe auch Proposition 7.6.1 und Theorem 13.1.2 in [1]. \square

Wird die partielle Integration doppelt angewandt (siehe auch Green'sches Theorem), so ergibt sich hier:

$$(\xi, \Delta u)_{\Omega} = (\Delta \xi, u)_{\Omega} + \int_{\partial\Omega} \left(\xi \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial \xi}{\partial n} \right) \, ds.$$

Damit ergibt sich insbesondere für die Lagrange-Funktion

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(u, q, \xi, \xi_b) &= \frac{1}{2}(u - z, u - z)_{\Omega} + \frac{\alpha}{2}(q, q)_{\Omega} + (-\Delta \xi, u)_{\Omega} \\ &\quad - \int_{\partial\Omega} \left(\xi \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial \xi}{\partial n} \right) \, ds - (\xi, f + q)_{\Omega} + (\xi_b, u)_{\partial\Omega} \end{aligned}$$

Stören in Richtung u : Sei \tilde{u} beliebige Störung von u :

$$\begin{aligned} 0 &= \left. \frac{d}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} \mathcal{L}(u + \epsilon \tilde{u}, q, \xi, \xi_b) \\ &= (u - z, \tilde{u})_{\Omega} + (-\Delta \xi, \tilde{u})_{\Omega} - \int_{\partial\Omega} \left(\xi \frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} - \tilde{u} \frac{\partial \xi}{\partial n} \right) \, ds + (\xi_b, \tilde{u})_{\partial\Omega} \end{aligned}$$

- Wähle \tilde{u} so, dass $\frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} = 0$, dann muss gelten damit die Ableitung verschwindet:

$$\begin{aligned} u - z - \Delta \xi &= 0 \text{ in } \Omega, \text{ d.h. } -\Delta \xi = -(u - z) \\ \frac{\partial \xi}{\partial n} + \xi_b &= 0 \text{ auf } \partial\Omega \end{aligned}$$

- Wähle $\tilde{u} = 0$ in $\partial\Omega$, dann muss gelten damit die Ableitung verschwindet:

$$\xi = 0 \text{ auf } \partial\Omega$$

- Die letzte Gleichung liefert

$$\xi_b = -\frac{\partial \xi}{\partial n} \text{ auf } \partial\Omega$$

und gibt damit den Wert für ξ_b vor, da die Gleichung oben für ξ schon definiert ist.

Stören in Richtung q : Sei \tilde{q} eine beliebige Störung von q :

$$\begin{aligned} 0 &= \left. \frac{d}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} \mathcal{L}(u, q + \epsilon \tilde{q}, \xi, \xi_b) \\ &= \alpha(q, \tilde{q})_\Omega - (\xi, \tilde{q})_\Omega. \end{aligned}$$

Als notwendige Optimalitätsbedingung ergibt sich dann:

$$\alpha q - \xi = 0 \text{ in } \Omega.$$

Stören in Richtung ξ : Hier ist nichts zu tun, es ergibt sich direkt wieder die Nebenbedingung.

Insgesamt erhalten wir

- Die Zustandsgleichung:

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f + q && \text{in } \Omega \\ u &= 0 && \text{auf } \partial\Omega \end{aligned} \tag{2.17}$$

- Die adjungierte Gleichung:

$$\begin{aligned} -\Delta \xi &= -(u - z) && \text{in } \Omega \\ \xi &= 0 && \text{auf } \partial\Omega \end{aligned} \tag{2.18}$$

- Die Design Gleichung:

$$\alpha q - \xi = 0 \quad \text{in } \Omega \tag{2.19}$$

in Matrix-Schreibweise ergibt sich

$$\begin{bmatrix} I & 0 & -\Delta \\ 0 & \alpha I & -I \\ -\Delta & -I & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u \\ q \\ \xi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z \\ 0 \\ f \end{pmatrix}, \tag{2.20}$$

welches eine ganz ähnliche Struktur wie (2.12) aufweist.

2.3 Formoptimierungsprobleme

Ein Formoptimierungsproblem ist gegeben durch

Definition 2.7 (Formoptimierungsproblem). Es sei $\Omega \subset D$ eine abgeschlossene Menge mit $\Gamma \subset \partial\Omega$ und $J : \mathcal{P}(D) \rightarrow \mathbb{R}$ ein reellwertiges Funktional. Ferner bezeichnet Γ den variablen Teil des Randes von Ω und \mathcal{P} die Potenzmenge. Ein Formoptimierungsproblem ist dann gegeben durch

$$\min_{\Gamma} J(\Omega).$$

Analog ist ein beschränktes Formoptimierungsproblem gegeben durch

$$\begin{aligned} & \min_{(u, \Gamma)} J(u, \Omega) \\ & \text{unter } c(u, \Omega) = 0. \end{aligned}$$

Struktur und Form des zu optimierenden geometrischen Objekts wird also durch eine Menge beschrieben. Im Vergleich zum klassischen Optimierungsproblem übernimmt also die Menge Ω bzw. Teile Γ des Randes $\partial\Omega$ die Rolle der Design-Variablen.

Das folgende Beispiel beschreibt das Formoptimierungsproblem eine Menge größten Volumens mit vorgegebenen Mindestumfang zu finden:

Beispiel 2.8 (Isoperimetrisches Problem oder “Dido-Problem”).

$$\begin{aligned} & \min_{\Gamma} f(\Gamma) := - \int_{\Omega} 1 \, dA \\ & \text{unter } c(\Gamma) := \int_{\Gamma} 1 \, dS = \text{const.} \end{aligned}$$

Wenn Ω keine Löcher hat und $\Gamma = \partial\Omega$, dann ist die Lösung ein Kreis (Bewiesen von F. Edler 1882 für die Ebene). Ist nur ein Teil des Randes $\partial\Omega$ von Ω variable, so ist eine analytische Lösung schwer zu finden.

Existenzaussagen über optimale Mengen Ω^* sind im Allgemeinen sehr schwer und meist nur für akademische Beispiele durchführbar.

2.4 Lösungsansätze

2.4.1 Diskreter Ansatz

Eine entsprechende Diskretisierung des Randes wandelt das Formoptimierungsproblem in ein klassisches Optimierungsproblem um:

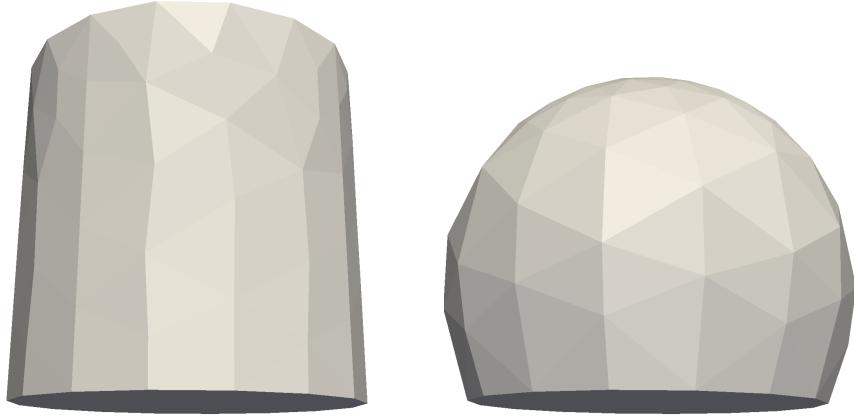


Abbildung 2.3: Numerische Lösung des Dido-Problems mit vorgegebener gerader Bodenfläche: Morph eines Zylinders in ein tropfenförmiges Gebiet gleichen Volumens mit kleinster Oberfläche.

Bemerkung 2.9 (Fläche eines ebenen Polygons). Die von einem einfachen Polygonzug, d.h. keine Selbstdurchdringung und in 2D wie in Abbildung 2.9 dargestellt, der Form

$$\Gamma = \{(\overline{x_1^i, x_2^i}, (x_1^{i+1}, x_2^{i+1}) : i = 0, \dots, n, (x_1^0, x_2^0) = (x_1^n, x_2^n)\}$$

umschlossene Fläche ist gegeben durch

$$A = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_1^i x_2^{i+1} - x_1^{i+1} x_2^i).$$

Beweis. Siehe ‘‘Gaußsche Trapezformel’’. □

Beispiel 2.10 (Isoperimetrisches Problem diskret). Wird der Rand durch den einfachen Polygonzug Γ wie oben beschrieben, so lässt sich das Problem diskret darstellen als

$$\begin{aligned} \min_{(x_1^i, x_2^i)} J(x_1^i, x_2^i) &:= -\frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} x_1^i x_2^{i+1} - x_1^{i+1} x_2^i \\ \text{unter } &\sum_{i=0}^{n-1} \|(x_1^i - x_1^{i+1}, x_2^i - x_2^{i+1})\|_2 = \text{const}, \end{aligned}$$

was sich einfach nach x_1^i und x_2^i differenzieren lässt. Einfacher Polygonzug meint, dass sich die Kanten nicht kreuzen, was der diskreten Form einer Jordan-Kurve entspricht.

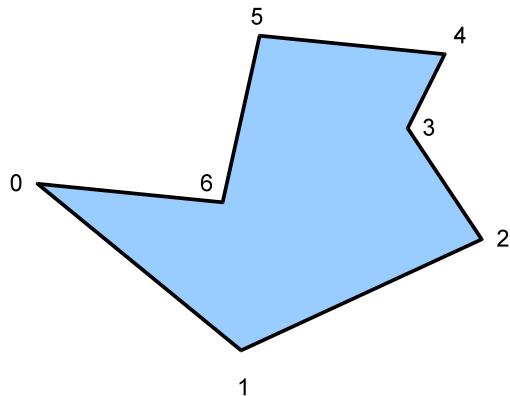


Abbildung 2.4: Ein einfacher Polygonzug

Der diskrete Ansatz ist im allgemeinen nicht mehr einfach durchführbar, wenn eine partielle Differentialgleichung als Nebenbedingung vorliegt. Ein diskretes Formoptimierungsproblem lässt sich allgemein darstellen durch eine Kette wie in Abbildung 2.5.

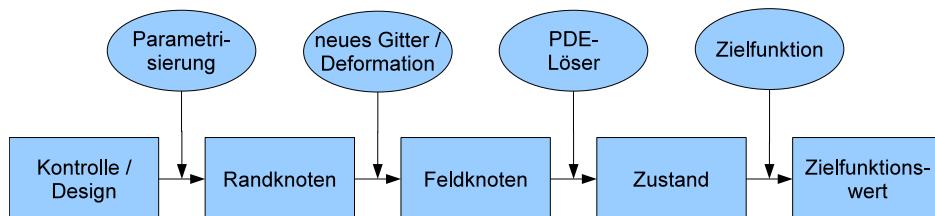


Abbildung 2.5: Optimierungskette bei diskreter Deformation der Form

- Ableiten jedes Teils für sich und Verknüpfung durch Kettenregel erzeugt Speicherplatzproblem
Jacobi-Matrix "Zustand nach Feldknoten" ist groß und dicht besetzt!
 - Ableiten der gesamten Kette erzeugt Komplexitätsproblem
Teilergebnisse nicht speicherbar
 - Finite Differenzen
extreme Laufzeit bei feiner Auflösung der Shape
Gitterdeformation sehr zeitaufwändig und muss für jeden Design-Parameter durchgeführt werden
- Algorithmisches/Automatisches Differenzieren, evtl. später

2.4.2 Analytischer Ansatz

Es soll zuerst das Formoptimierungsproblem abgeleitet werden, und danach erst diskretisiert werden.

- neue Art der Differential-Rechnung
- Ableiten nach Mengen
- Stichwort: Shape Sensitivity Analysis
- analytisches Ausnutzen der Problemstruktur ermöglicht sehr effiziente Programme
- SQP-Verfahren und höhere Ableitungen aktuelle Forschung!
- Benötigt Grundbegriffe der Differenzialgeometrie

3

Differenzialgeometrie

3.1 Grundbegriffe

Definition 3.1 (Immersion). Es sei V eine offene Teilmenge von \mathbb{R}^d . Eine Funktion $h : V \rightarrow \mathbb{R}^m$ mit $m > d$ heißt Immersion, falls $h \in C^\infty$ und $\text{rank}(Dh(\xi)) = d$ für alle $\xi \in V$.

Definition 3.2 (Untermannigfaltigkeit des \mathbb{R}^m , Parametrisierung, Karte, Co-Dimension). Eine Menge $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ wird d -dimensionale Untermannigfaltigkeit des \mathbb{R}^m genannt, falls für jedes $x \in \Omega$ eine offene Umgebung $U(x) \subset \mathbb{R}^m$ und eine injektive Immersion $h : V \rightarrow \mathbb{R}^m$ mit $V \subset \mathbb{R}^d$ offen und stetiger Umkehrabbildung $h^{-1} : h(V) \rightarrow V$ existiert, so dass

$$h(V) \subset U \cap \Omega.$$

Außerdem wird h (lokale) Parametrisierung, h^{-1} Kartenabbildung und das Tupel $(h^{-1}, h(V))$ Karte genannt, d.h. $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^m$ wird gegeben durch $x = h(\xi_1, \dots, \xi_d)$ für $(\xi_1, \dots, \xi_d) \in V \subset \mathbb{R}^d$. Außerdem heißt $m - d$ die Co-Dimension von Ω .

Beispiel 3.3 (Sphere). Untermannigfaltigkeiten lassen sich meist nicht durch nur eine Karte darstellen:

$$\begin{aligned} S^2 &:= \{x \in \mathbb{R}^3 : \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} - 1 = 0\} \\ &= \{x \in \mathbb{R}^3 : x_3 = \pm \sqrt{1 - x_1^2 - x_2^2}, \| (x_1, x_2) \|_2^2 \leq 1\} \end{aligned}$$

stellt die 2-Sphere dar, eine 2-dimensionale Untermannigfaltigkeit des \mathbb{R}^3 . Die Sphere kann z.B. durch 6 Karten beschrieben werden (Achtung: U aus Definition 3.2 muss offen sein):

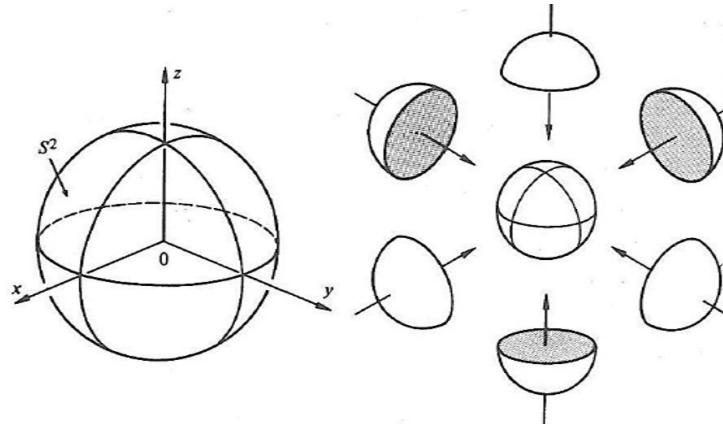


Abbildung 3.1: Die Sphäre S^2 parameterisiert über 6 Karten

$$S^2 = \bigcup_{i=1}^6 K_i$$

wobei K_i gegeben sind durch die Nord-, Süd-, West-, Ost-, Vorne- und Hintenhalbkugeln. Hierbei muss es sich jedoch nicht zwingend auch um einen Minimal-Atlas handeln, d.h. es besteht kein Anspruch daran, dass sich die Sphere nicht auch mit weniger Karten beschreiben lässt.

Definition 3.4 (Atlas). Für eine Untermannigfaltigkeit Ω des \mathbb{R}^m wird die Menge aller Karten, die Ω überdecken, Atlas A genannt, d.h.

$$A := \bigcup_{\alpha \in I} \{(h_\alpha^{-1}, U_\alpha)\},$$

wobei I eine Indexmenge ist.

Definition 3.5 (C^k -Untermannigfaltigkeit, C^k -Atlas). Es sei Ω eine Untermannigfaltigkeit mit Atlas A . Zwei Elemente des Atlas definieren dann zwei offenen Umgebungen $U_1 = h_1(V_1)$ und $U_2 = h_2(V_2)$ auf Ω . Der Durchschnitt $U_1 \cap U_2$, falls nicht leer, ermöglicht dann den Vergleich zweier Parametrisierungen. Insbesondere definiert

$$\varphi_{1 \rightarrow 2} : V_1 \cap h_1^{-1}(U_1 \cap U_2) \rightarrow V_2 \cap h_2^{-1}(U_1 \cap U_2) : \varphi_{1 \rightarrow 2}(\xi) := h_2^{-1}(h_1(\xi))$$

die Kartenwechselabbildung oder Übergangsabbildung, grob gesagt eine "standard" Abbildung vom \mathbb{R}^d nach \mathbb{R}^d .

Die Untermannigfaltigkeit Ω heißt dann C^k -Untermannigfaltigkeit, falls alle Übergangsabbildungen $\varphi_{i \rightarrow j}$ mit $i, j \in I$ k -mal differenzierbar sind. Der Atlas A heißt dann auch C^k -Atlas. Die Glattheit eines Objektes Ω ist damit an die Wahl des Atlas A geknüpft!

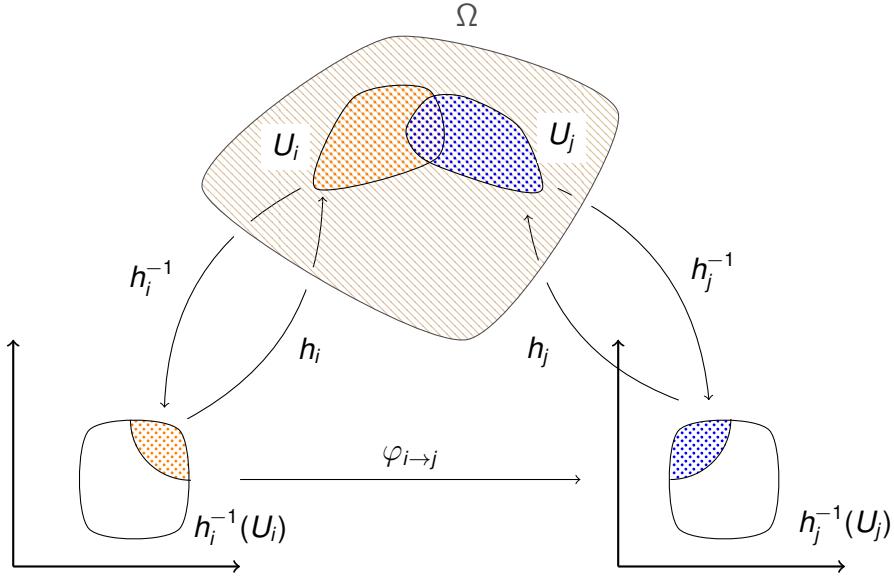


Abbildung 3.2: Das Konzept des Kartenwechsels

Beispiel 3.6 (Das Quadrat als C^∞ -Mannigfaltigkeit). Wie oben erwähnt, wird die Glattheit eines Objektes über einen bestimmten Atlas A bestimmt. Durch geschickte Wahl von A kann so z.B. das Quadrat zu einer C^∞ -Untermannigfaltigkeit werden: Es sei $I = (-1, 1) \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall. Dann definieren

$$h_1(\xi) = \begin{cases} (0, -\xi)^T, & \text{falls } \xi \in (-1, 0] \\ (\xi, 0)^T, & \text{falls } \xi \in (0, 1) \end{cases} \quad h_2(\xi) = \begin{cases} (1, -\xi)^T, & \text{falls } \xi \in (-1, 0] \\ (-\xi + 1, 0)^T, & \text{falls } \xi \in (0, 1) \end{cases}$$

die untere Hälfte eines Quadrates. Dabei haben wir folgende Überlappung:

$$\begin{aligned} (0, 1) \times \{0\} &= h_1((0, 1)) =: U_1 \text{ und} \\ (0, 1) \times \{0\} &= h_2((0, 1)) := U_2 \end{aligned}$$

Damit ist also ebenfalls $U_1 \cap U_2 = (0, 1) \times \{0\}$. Für $x \in U_1 \cap U_2$ gilt also der zweite Fall in h_2 . Damit kann die Umkehrfunktion bestimmt werden:

$$h_2^{-1}(x) = -x_1 + 1 \text{ für } x \in (0, 1) \times \{0\} = U_1 \cap U_2.$$

Auf dem Teilintervall $\xi \in (0, 1)$ gilt nach h_1 aber auch

$$h_1(\xi) = (\xi, 0)^T$$

und damit ineinander eingesetzt

$$\varphi_{1 \rightarrow 2}(\xi) = h_2^{-1}(h_1(\xi)) = h_2^{-1}(\xi, 0) = -\xi + 1.$$

Der Kartenwechsel ist C^∞ . Die obere Hälfte des Quadrates analog durch Spiegelung.

Bemerkung 3.7 (Oberfläche/Rand einer Untermannigfaltigkeit). Eine d -dimensionale Untermannigfaltigkeit mit Rand ist gegeben, wenn für alle Karten des zugehörigen Atlas A gilt

$$h_\alpha^{-1}(U_\alpha) \subset H$$

mit $H = \{\xi \in \mathbb{R}^d : \xi_d \geq 0\}$. Genauso wie die Glattheit oben ist also auch die Eigenschaft berandet zu sein wieder fest mit dem Atlas verbunden. D.h. im Folgenden wird für $x = h(\xi_1, \dots, \xi_{d-1}, \xi_d)$ auf Ω angenommen, dass das Innere durch $\xi_d > 0$ und der Rand $\partial\Omega$ durch $\xi_d = 0$ gegeben ist. Der Rand $\partial\Omega$ ist seinerseits also wieder eine Untermannigfaltigkeit, welche parameterisiert wird durch $x = h(\xi_1, \dots, \xi_{d-1}, 0)$. Oftmals schreiben wir auch Γ statt $\partial\Omega$. Außerdem wird die Kurzschreibweise $h(\xi, 0)$ anstelle von $h(\xi_1, \dots, \xi_{d-1}, 0)$ benutzt, um Γ einfach zu bezeichnen.

Definition 3.8 (Tangentialraum). Für $x = h(\xi)$ auf Ω definieren wir die Tangentialebene in x an Ω als

$$T_x\Omega := \text{span}(Dh(\xi)).$$

Nach der Konvention, dass der Rand einer Untermannigfaltigkeit durch eine Null in der letzten Komponente parameterisiert wird, ergibt sich analog die Tangentialebene an den Rand durch

$$T_x\Gamma := \text{span}(\{Dh(\xi, 0)e_i : i = 1, \dots, d-1\}),$$

wobei mit e_i die Einheitsvektoren im \mathbb{R}^d bezeichnet werden. Nach Definition 3.1 herrscht auch hier wieder Vollrang. Anders gesagt: Wir schmeißen einfach die letzte Spalte weg.

Beachte: Nach Definition 3.2 und 3.1 ist h bereits C^∞ und Dh hat maximalen Rang. Ebenfalls ist h^{-1} auch stetig. In der Literatur wird in diesem Setting Ω oftmals auch als “regulär” oder “reguläre Fläche” bezeichnet.

Theorem 3.9. Der Tangentialraum $T_x\Omega$ ist auch gegeben durch

$$T_x\Omega = \{\tau \in \mathbb{R}^m : \exists \epsilon > 0 \exists \gamma : (-\epsilon, \epsilon) \rightarrow \Omega : \gamma(0) = x \text{ und } \dot{\gamma}(0) = \tau\}.$$

Genauer gesagt ist das eine alternative Definition. Zusammen mit 3.8 erhalten wir also eine Beziehung zwischen Kurven auf der Oberfläche und den Spalten von Dh : Für jeden Tangentialvektor gibt es eine Kurve in Ω , deren Geschwindigkeit (also Ableitung) gerade genau dem Tangentialvektor entspricht und umgekehrt.

Beweis. Wir zeigen nur \subset . Es sei $\tau \in \text{span}(Dh(\xi))$. Dann gibt es ein $Y \in \mathbb{R}^d$ mit $\tau = Dh(\xi)Y$, da Y genau als Linearkombination der Spalten von $Dh(\xi)$ darstellbar ist. Beachte: $Dh(\xi) \in \mathbb{R}^{m \times d}$ mit Vollrang. Wir definieren $\gamma(t) := h(\xi + tY)$. Dann gibt es ein $\epsilon > 0$, so dass $\xi + tY$ in V ist für $|t| < \epsilon$. Damit ist γ auf $(-\epsilon, \epsilon)$ definiert und liegt immer in der Karte V mit Parameterisierung $x = h(\xi)$. Es gilt also

$$\gamma(0) = h(\xi) = h^{-1}(h(x)) = x \quad \text{und} \quad \dot{\gamma}(0) = \frac{dh(\xi + tY)}{dt} \Big|_{t=0} = Dh(\xi)Y = \tau$$

□

Definition 3.10 (Push Forward). Es seien Ω_1 und Ω_2 reguläre Untermannigfaltigkeiten und $f : \Omega_1 \rightarrow \Omega_2$. Dann heißt die Abbildung

$$d_x f : T_x \Omega_1 \rightarrow T_{f(x)} \Omega_2, \quad d_x f(\tau) = \left. \frac{d(f \circ \gamma)}{dt} \right|_{t=0} \in T_{f(x)} \Omega_2$$

das Differential von f in x in Richtung τ . Hierbei ist γ wieder so, dass $\gamma(0) = x$ und $\dot{\gamma}(0) = \tau$. So eine Kurve γ existiert nach Theorem 3.9.

Beweis. Damit die Definition wohlgestellt ist, muss eigentlich noch gezeigt werden, dass die $d_x f(\tau)$ unabhängig von γ sind, wenn mehrere γ für ein τ in Frage kommen. Das ist aber ein Standardresultat in der Literatur und eher technisch zu beweisen. □

Bemerkung 3.11 (Tangentielle Jacobimatrix, Differenzierbare Funktionen auf Ω). Wenn Ω eine Untermannigfaltigkeit des \mathbb{R}^d ist, dann gilt nach den vorherigen Überlegungen, dass $T_x \Omega = \text{span}(Dh(\xi))$ mit maximalem Rang und damit Basis des $T_x \Omega$. Wir können annehmen, dass $\{\tau_1, \dots, \tau_d\}$ eine Orthonormalbasis des $T_x \Omega$, welche sich z.B. über den Gram-Schmidt-Prozess herstellen lässt. Da $f \in C^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^k)$ im ganz \mathbb{R}^d außerhalb von Ω definiert ist, kann jetzt der push forward auch über die klassische Jacobi Matrix $D_x f(x)$ dargestellt werden

$$d_x f(\tau_i) = \left. \frac{d(f \circ \gamma_i(t))}{dt} \right|_{t=0} = D_x f(x) \dot{\gamma}_i(0) = D_x f(x) \tau_i. \quad (3.1)$$

Es sei also $v \in T_x \Omega$. Aufgrund der Orthonormalität der Basis kann v sehr einfach in dieser Basis angegeben werden

$$v = \sum_{i=1}^d \langle v, \tau_i \rangle \tau_i.$$

Aufgrund der Linearität des Push Forwards und der oben dargestellten Verbindung zur klassischen Jakobi Matrix erhalten wir dann

$$d_x f(v) = \sum_{i=1}^d \langle v, \tau_i \rangle d_x f(\tau_i) = \sum_{i=1}^d \langle v \tau_i \rangle D_x f(x) \tau_i = \sum_{i=1}^d D_x f(x) \tau_i \tau_i^T v,$$

zumindest, falls wir das standard Skalarprodukt $\langle v, w \rangle = v^T w$ benutzen. Wir können diese lineare Abbildung der Richtung v jetzt als Jacobi Matrix $D_\Omega f(x)$ interpretieren, welche auf v wirkt, d.h. wir assoziieren

$$D_\Omega f(x)v := d_x f(v)$$

mit der Matrix

$$D_\Omega f(x) = \sum_{i=1}^d D_x f(x) \tau_i \tau_i^T \in \mathbb{R}^{k \times d}. \quad (3.2)$$

Definition 3.12 (Vektor-Feld). Es sei $D \subset \mathbb{R}^m$ offen. Eine (differenzierbare) Abbildung $V : D \rightarrow \mathbb{R}^m$ wird (differenzierbares) Vektor-Feld genannt.

Lemma 3.13 (Einheitsnormalenfeld auf Γ). Für eine reguläre Oberfläche $\Gamma = \partial\Omega$ ist die Normale an der Stelle $x = h(\xi, 0)$ auf Γ gegeben durch

$$n(x) = \frac{Dh(\xi, 0)^{-T} e_d}{\|Dh(\xi, 0)^{-T} e_d\|}.$$

Beweis. Der Tangentialraum ist durch

$$T_x \Gamma = \text{span}(\{Dh(\xi, 0)e_i, i = 1, \dots, d - 1\})$$

gegeben. Insbesondere ist dann eine nicht-normierte Tangentenrichtung von der Form $\tau_i := Dh(\xi, 0)e_i$, da die Spalten eine Basis bilden. Damit gilt

$$\begin{aligned} \langle \tau_i, Dh(\xi, 0)^{-T} e_d \rangle &= \langle Dh(\xi, 0)e_i, Dh(\xi, 0)^{-T} e_d \rangle \\ &= \langle Dh(\xi, 0)^{-1}Dh(\xi, 0)e_i, e_d \rangle \\ &= \langle e_i, e_d \rangle \\ &= 0 \quad \forall i = 1, \dots, d - 1, \end{aligned}$$

womit der Ausdruck für die Normale auf Vektoren aus dem Tangentialraum senkrecht steht. Die Behauptung folgt nach Normierung. \square

Beispiel 3.14. Abbildung 3.3 zeigt das VELA-Flugzeug mit seinem äußeren Normalenfeld.

Bemerkung 3.15. (Tangentielle Differentialoperatoren auf Oberflächen)

Wir haben in Definition 3.11 zweiter Teil schon gesehen, dass sich differenti-algeometrische Ausdrücke in die klassische Welt der Differentiation im reellen zurück holen lassen, wenn die Funktionen überall in \mathbb{R}^d definiert und diff'bar sind, also "extrinsische" Größen sind.

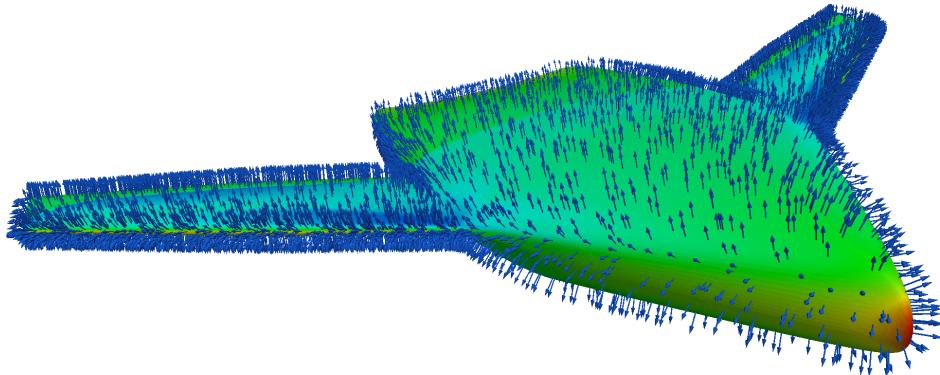


Abbildung 3.3: VELA-Flugzeug mit Normalenfeld.

Falls $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^k$ und falls $\Gamma \subset \mathbb{R}^d$ eine reguläre Oberfläche der Co-Dimension 1 ist, gilt insbesondere, dass man für jeden Punkt $x \in \Gamma$ eine orthonormale(!) Basis des \mathbb{R}^d der Form $\{n, \tau_1, \dots, \tau_{d-1}\}$ erhält. Ein beliebiger Vektor $v \in \mathbb{R}^d$ lässt sich dann in dieser Basis darstellen als

$$v = \langle v, n \rangle n + \sum_{i=1}^{d-1} \langle v, \tau_i \rangle \tau_i.$$

Die Richtungsableitung von f in Richtung v an x ergibt sich dann mithilfe der klassischen Jakobi Matrix als

$$\begin{aligned} D_x f(x)v &= \langle v, n \rangle D_x f(x)n + \sum_{i=1}^{d-1} \langle v, \tau_i \rangle D_x f(x)\tau_i \\ &= D_x f(x)nn^T v + \sum_{i=1}^{d-1} D_x f(x)\tau_i\tau_i^T v. \end{aligned}$$

Für den Fall der $d - 1$ dimensionalen regulären Oberfläche in \mathbb{R}^d liefert Gleichung (3.2) nach wie vor die tangentiale Jacobi Matrix

$$D_\Gamma f(x) = \sum_{i=1}^{d-1} D_x f(x)\tau_i\tau_i^T \in \mathbb{R}^{k \times d}.$$

Wir setzen beides zusammen und erhalten also

$$D_x f(x)v = D_x f(x)nn^T v + D_\Gamma f(x)v.$$

Wir interpretieren dieses lineare Funktional wieder als Matrix und sehen durch einfaches Umstellen, dass in dem Setting einer $d - 1$ dimensionale Oberfläche $\Gamma \subset \mathbb{R}^d$ die tangentiale Jacobi Matrix nichts anderes ist, als die klassische, volle Jakobi Matrix $D_x f(x)$, minus den Normalenanteil

$$D_\Gamma f(x) = D_x f(x) - D_x f(x) n n^T. \quad (3.3)$$

Definition 3.16 (Tangentialgradient, Tangentialdivergenz, Krümmung, Tangential-Laplace). In dem Setting wie oben können wir alle weiteren Differentialoperatoren auf Oberflächen als die orthogonale Projektion des bekannten “klassischen” Differentialoperators in den Tangentialraum verstehen.

Der Tangentialgradient einer Funktion $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ ist dann gegeben durch

$$\nabla_\Gamma f := \sum_{i=1}^{d-1} \langle \nabla f, \tau_i \rangle \tau_i = \nabla f - \langle \nabla f, n \rangle n \in \mathbb{R}^{d-1}.$$

Die Tangentialdivergenz eines Vektorfeldes g wird durch

$$\operatorname{div}_\Gamma g := \sum_{i=1}^{d-1} \langle Dg \tau_i, \tau_i \rangle = \operatorname{div} g - \langle Dgn, n \rangle \in \mathbb{R}$$

definiert. Diese Definitionen sind unabhängig von der Wahl der Basis des Tangentialraums, so lange es eine Orthonormalbasis ist. Des Weiteren wird die Krümmung κ als die Tangentialdivergenz des Einheitsnormalenfeldes

$$\kappa := \operatorname{div}_\Gamma n.$$

definiert. Außerdem wird der tangentiale Laplace-Operator, oftmals auch Laplace-Beltrami-Operator genannt, durch

$$\Delta_\Gamma u := \operatorname{div}_\Gamma \nabla_\Gamma u = \Delta u - \kappa \frac{\partial u}{\partial n} - \frac{\partial^2 u}{\partial n^2} \quad (3.4)$$

definiert. Damit gilt

$$\kappa n = -\Delta_\Gamma X,$$

wobei X die Punkte auf Γ bezeichnet, also die Identitätsabbildung von Γ in sich selber (Beweis Übung).

Lemma 3.17. Tangentialgradient und Tangentialdivergenz verhalten sich zueinander wie ihre gewöhnlichen Gegenstücke, d.h. für eine differenzierbare skalare Funktion f und ein differenzierbares Vektorfeld V gilt

$$\operatorname{div}_\Gamma fV = \langle \nabla_\Gamma f, V \rangle + f \operatorname{div}_\Gamma V.$$

Beweis. Man sieht leicht, dass

$$\left\langle V \frac{\partial f}{\partial \tau_i}, \tau_i \right\rangle = \sum_{j=1}^{d-1} V^j \frac{\partial f}{\partial \tau_i} \tau_i^j = \left\langle \frac{\partial f}{\partial \tau_i} \tau_i, V \right\rangle,$$

wobei hier obere Indices die Vektorkomponenten bezeichnen. Desweiteren gilt

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_\Gamma fV &= \sum_{i=1}^{d-1} \left\langle \frac{\partial fV}{\partial \tau_i}, \tau_i \right\rangle = \sum_{i=1}^{d-1} \left\langle V \frac{\partial f}{\partial \tau_i}, \tau_i \right\rangle + f \left\langle \frac{\partial V}{\partial \tau_i}, \tau_i \right\rangle \\ &= \langle \nabla_\Gamma f, V \rangle + f \operatorname{div}_\Gamma V. \end{aligned}$$

□

Lemma 3.18. Es sei Ω eine Co-dim 1 Untermannigfaltigkeit mit Rand Γ . Für eine differenzierbare skalare Funktion f und ein differenzierbares Vektorfeld V gilt die folgende Eigenschaft am Rand

$$\operatorname{div} fV = f \operatorname{div} V + \frac{\partial f}{\partial n} \langle V, n \rangle + \langle \nabla f, V_\Gamma \rangle,$$

wobei

$$V_\Gamma := \sum_{i=1}^{d-1} \langle V, \tau_i \rangle \tau_i$$

die Tangenzialkomponente von V bezeichnet.

Beweis.

$$\begin{aligned} \operatorname{div} fV &= f \operatorname{div} V + \langle \nabla f, V \rangle = f \operatorname{div} V + \left\langle \frac{\partial f}{\partial n} n + \sum_{i=1}^{d-1} \frac{\partial f}{\partial \tau_i} \tau_i, V \right\rangle \\ &= f \operatorname{div} V + \frac{\partial f}{\partial n} \langle V, n \rangle + \langle \nabla f, V_\Gamma \rangle. \end{aligned}$$

□

3.2 Integration auf Untermannigfaltigkeiten

Definition 3.19 (Integral auf Untermannigfaltigkeiten). Es sei Ω eine d -dimensionale kompakte Untermannigfaltigkeit des \mathbb{R}^m mit endlichem Atlas

$$\Omega \subset \bigcup_{j=1}^J h_j(M_j),$$

so dass $\Omega_j := h_j(M_j)$. Ferner existiere eine entsprechende Partition der Eins, d.h.

$$\sum_{j=1}^I r_j(x) = 1,$$

wobei r_j unendlich oft stetig differenzierbar ist mit kompakten Träger $\subset \Omega_j$ für alle j . Das Integral über Ω wird dann definiert als

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} g \, d\Omega &:= \sum_{j=1}^I \int_{\Omega_j} gr_j \, d\Omega := \sum_{j=1}^I \int_{M_j} g(h_j(s))r_j(h_j(s))\sqrt{\det(Dh_j^T Dh_j)(s)} \, ds \\ &=: \int_M g(h(s))\sqrt{\det(Dh^T Dh)(s)} \, ds, \end{aligned} \tag{3.5}$$

wobei Dh_j die Jacobi-Matrix von h_j ist.

Definition 3.20 (Minor, Adjunkte, Cofaktor-Matrix). Für eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ wird der ij-Minor

$$[A]_{ij} \in \mathbb{R}^{m-1 \times m-1}$$

definiert als die Matrix, welche durch Streichen der i -ten Zeile und j -ten Spalte entsteht. Die Cofaktor-Matrix bzw. die Adjunkte $M(A)$ ist dann durch

$$M(A) := [(-1)^{i+j} \det([A]_{ij})]_{ij} \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

gegeben. Die Einträge der Cofaktor-Matrix sind also die Unterdeterminanten von A . Für eine invertierbare Matrix A gilt dann nach der Cramer'schen Regel

$$M(A) = \det(A)A^{-T}.$$

Bemerkung 3.21. In der Literatur ist oft die Cofaktor-Matrix im Vergleich zur Definition 3.20 transponiert angegeben.

Lemma 3.22 (Integral auf der Oberfläche einer Untermannigfaltigkeit). Es sei Ω wie in Definition 3.19. Das Integral über die Oberfläche bzw. den Rand von Ω ist dann durch

$$\int_{\partial\Omega} g \, dS = \int_{B_0} g(h(s))|\det Dh(s)|\|(Dh(s))^{-T} e_d\|_2 \, ds \tag{3.6}$$

gegeben, wobei $B_0 = \{\xi \in \mathbb{R}^d : \|\xi\| \leq 1, \xi_d = 0\}$ der Schnitt des d -dimensionalen Einheitskreises mit der $\xi_d = 0$ Hyperebene ist. Außerdem stellt e_d den d -ten Einheitsvektor dar.

Beweis. Sei $B := \{\xi \in \mathbb{R}^d : \|\xi\| \leq 1\} \subset \mathbb{R}^d$ der Einheitskreis im \mathbb{R}^d . Der Einheitskreis wird durch einen Schnitt mit der $\xi_d = 0$ Hyperebene in die drei Teile

$$\begin{aligned} B_+ &:= \{\xi \in B : \xi_d > 0\} \\ B_- &:= \{\xi \in B : \xi_d < 0\} \\ B_0 &:= \{\xi \in B : \xi_d = 0\} \end{aligned}$$

aufgeteilt. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit kann angenommen werden, dass das Innere von Ω_j durch

$$\text{int } \Omega_j = h_j(B_+)$$

gegeben ist. Der Rand wird durch

$$\partial\Omega_j = h_j(B_0)$$

als gegeben angenommen, d.h. $\partial\Omega_j = \{h_j(\xi, 0) : (\xi, 0) := (\xi_1, \dots, \xi_{d-1}, 0) \in B_0\}$. Zur Berechnung der Integrals über die Oberfläche ist es somit notwendig, die Integrationsdichte

$$\det(Dh_j^T Dh_j)$$

des Volumenintegrals aus Definition 3.19 auf die $(\xi, 0)$ -Hyperebene zu projizieren, d.h. die letzte Zeile und die letzte Spalte werden gestrichen. Dies führt auf den dd -Minor $[Dh_j^T Dh_j]_{dd}$ von $Dh_j^T Dh_j$. Entsprechend der Definition der Cofaktor-Matrix ist die Determinante des dd -Minor gerade der m_{dd} -Eintrag der Cofaktor-Matrix $M(Dh_j^T Dh_j)$. Damit wird die entsprechende Integrationsdichte auf der Oberfläche gegeben durch

$$\begin{aligned} \sqrt{m_{dd}} &= \sqrt{e_d^T M(Dh_j^T Dh_j) e_d} = \sqrt{e_d^T M(Dh_j^T) M(Dh_j) e_d} \\ &= \sqrt{\|M(Dh_j) e_d\|_2^2} = \|M(Dh_j) e_d\|_2 = |\det(Dh_j)| \|Dh_j^{-T} e_d\|_2, \end{aligned} \tag{3.7}$$

wobei in der letzten Zeile die Eigenschaft $M(A) = \det(A)A^{-T}$ benutzt wurde. Damit ist das Oberflächenintegral gegeben durch

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega} g \, dS &:= \sum_{j=1}^{\ell} \int_{\partial\Omega_j} gr_j \, dS \\ &= \sum_{j=1}^{\ell} \int_{B_0} gr_j(h_j(s)) |\det Dh_j| \| (Dh_j)^{-T} e_d \|_2 \, ds \\ &= : \int_{B_0} g(h(s)) |\det Dh| \| (Dh)^{-T} e_d \|_2 \, ds, \end{aligned}$$

wobei $s = (\xi, 0) = (\xi_1, \dots, \xi_{d-1}, 0)$.

□

Bemerkung 3.23 (Alternative Darstellung). Da $M(A) = \det(A)A^{-T}$ gilt, kann das Randintegral auch durch

$$\int_{\partial\Omega} g \, dS = \int_{B_0} g(h(s)) \|M(Dh(s))e_d\|_2 \, ds$$

dargestellt werden. Analog ist die äußere Normale auch durch

$$n(x) = \frac{M(Dh(\xi, 0))e_d}{\|M(Dh(\xi, 0))e_d\|_2}$$

gegeben.

Beispiel 3.24 (Oberfläche der Sphäre). Wir berechnen die Oberfläche der Sphäre mit Radius r_0 . Einmal als 2-dimensionale Untermannigfaltigkeit nach Definition 3.19 und einmal als Rand bzw. Oberfläche der Kugel als 3-dimensionale Untermannigfaltigkeit nach Definition 3.22.

Als 3-dimensionale Untermannigfaltigkeit ist die Kugel K mit Radius r_0 gegeben durch die Parametrisierung (vgl. „Kugelkoordinaten“)

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \sin \theta \cos \varphi \\ r \sin \theta \sin \varphi \\ r \cos \theta \end{pmatrix} =: h(\theta, \varphi, r),$$

mit $\theta \in [0, \pi]$, $\varphi \in [0, 2\pi]$ und $r \in [0, r_0]$. Für festes r_0 ist die Oberfläche S der Kugel über die Parametrisierung $x = \tilde{h}(\theta, \varphi) := h(\theta, \varphi, r_0)$ gegeben. Wir berechnen den Oberflächeninhalt von S über Definition 3.19 aus

$$\int_S 1 \, dS = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} 1 \sqrt{\det(D\tilde{h}^T D\tilde{h})} \, d\theta \, d\varphi.$$

Es gilt

$$D\tilde{h}(\theta, \varphi) = \begin{bmatrix} r_0 \cos \theta \cos \varphi & -r_0 \sin \theta \sin \varphi \\ -r_0 \sin \theta \sin \varphi & r_0 \sin \theta \cos \varphi \\ -r_0 \sin \theta & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow D\tilde{h}^T D\tilde{h} = \begin{bmatrix} r_0^2 & 0 \\ 0 & r_0^2 \sin^2 \theta \end{bmatrix}$$

(beachte: $\sin^2 + \cos^2 = 1$) und damit $\sqrt{\det(D\tilde{h}^T D\tilde{h})} = r_0^2 \sin \theta$. Damit gilt

$$\int_S 1 \, dS = \int_0^\pi \int_0^\pi r_0^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi = r_0^2 \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} 1 \, d\varphi = 4\pi r_0^2.$$

Über den Ansatz als Rand der Kugel ergibt sich

$$Dh(\theta, \varphi, r) = \begin{bmatrix} r \cos \theta \cos \varphi & -r \sin \theta \sin \varphi & \sin \theta \cos \varphi \\ -r \sin \theta \sin \varphi & r \sin \theta \cos \varphi & \sin \theta \sin \varphi \\ -r \sin \theta & 0 & \cos \theta \end{bmatrix}.$$

Wir führen diesen Ausdruck jetzt auf den Fall oben zurück: Man sieht leicht: Für einen Punkt x auf der Oberfläche gilt

$$Dh^T Dh = \begin{bmatrix} D\tilde{h}^T D\tilde{h} & * \\ * & * \end{bmatrix}.$$

Der Block oben links stimmt also mit eben überein. Wir erhalten das selbe Ergebnis wie oben, wenn wir die Determinante des dd -Minors $[Dh^T Dh]_{33}$ von $Dh^T Dh$ benutzen. Wie in Gleichung (3.7) ist das genau $e_d^T M(Dh^T Dh)e_d$ und wir erhalten ebenfalls die Fläche $4\pi r_0^2$ mit gleicher Rechnung.

4

Formsensitivitäten

4.1 Deformation einer Menge

Es wird analytisch der Gradient bezüglich einer Variation in der Form gesucht. Dazu wird zunächst eine Familie bijektiver Abbildungen $T_t : (t, x) \mapsto T_t(x)$ definiert:

Definition 4.1 (Deformierte Untermannigfaltigkeit). Es sei $T_t : (t, x) \mapsto T_t(x)$ mit $t \in \mathbb{R}$ eine Familie von bijektiven Abbildungen. Ferner sei Ω eine abgeschlossene Untermannigfaltigkeit mit Rand Γ . Eine deformierte Untermannigfaltigkeit Ω_t ist dann gegeben durch

$$\Omega_t := T_t(\Omega) = \{T_t(x_0) : x_0 \in \Omega\}.$$

Einem Punkt $x \in \Gamma$ auf dem Rand der ursprünglichen Mannigfaltigkeit, welcher durch $x = h(\xi, 0)$ parametrisiert ist, entspricht dann der Punkt x_t auf der deformierten Oberfläche Γ_t von Ω_t . Der deformierte Punkt wird dann durch

$$x_t = T_t(h(\xi, 0)) =: h^t(\xi, 0)$$

parametrisiert. Die Familie bijektiver Abbildungen $T_t(x) := T(t, x)$ soll dabei folgende Eigenschaften haben:

1. $\forall x \in \mathbb{R}^n, T(., x) \in C([0, \tau], \mathbb{R}^n)$ gilt:
 $\exists c > 0, \forall x, y \in \mathbb{R}^n : \|T(., x) - T(., y)\|_{C[0,\tau]} \leq c|x - y|.$
2. $x \mapsto T_t(x) := T(t, x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ ist bijektiv.
3. $\forall x \in \mathbb{R}^n, T^{-1}(., x) \in C^0([0, \tau], \mathbb{R}^n)$ gilt
 $\exists c > 0, \forall x, y \in \mathbb{R}^n : \|T^{-1}(., x) - T^{-1}(., y)\|_{C[0,\tau]} \leq c|x - y|.$

Wie genau die Deformation statt findet verbirgt sich also in der Wahl der T_t . Häufig wird die “Perturbation of Identity” und die “Speed Method” angewendet.

Definition 4.2 (Perturbation of Identity). Wird $T_t[V]$ als

$$T_t[V](x) = x + tV(x)$$

gewählt, wobei V ein differenzierbares Vektorfeld ist, so spricht man auch von der “Perturbation of Identity”.

Lemma 4.3. Die Perturbation of Identity erfüllt die Axiome 1.-3. aus Definition 4.1.

Beweis. Übungsblatt 2 □

Definition 4.4 (Speed Method). Es sei V eine Familie von Vektorfeldern, so dass $\forall x \in \mathbb{R}^n, V(., x) \in C^0([0, \tau], \mathbb{R}^n)$. Ferner gelte

$$\exists c > 0 \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n : \|V(., x) - V(., y)\|_{C^0[0, \tau]} \leq c|x - y|.$$

Dann wird bei der “Speed Method” die Familie von bijektiven Abbildungen T_t gewählt als

$$T_t[V](x) := f(t, x),$$

wobei $f(t, x)$ die Lösung der Differenzialgleichung

$$\frac{df}{dt} = V(t, x), \quad f(0, x) = x$$

ist. Falls V nicht auch von t abhängt, so wird das Vektorfeld auch als autonom bezeichnet.

Lemma 4.5. Die Speed Method erfüllt die Axiome 1.-3. aus Definition 4.1.

Beweis. Zu 1: Es sei $\hat{t} \in [0, \tau]$ beliebig und $x, y \in \mathbb{R}^n$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \|T(\hat{t}, x) - T(\hat{t}, y)\| &= \|T(\hat{t}, x) - T(0, x) + T(0, x) - T(0, y) + T(0, y) - T(\hat{t}, y)\| \\ &\leq \|T(\hat{t}, x) - T(0, x) + T(0, y) - T(\hat{t}, y)\| + \|T(0, x) - T(0, y)\| \\ &= \left\| \int_0^{\hat{t}} \frac{\partial T}{\partial t}(s, x) \, ds + \int_{\hat{t}}^0 \frac{\partial T}{\partial t}(s, y) \, ds \right\| + \|T(0, x) - T(0, y)\| \\ &= \left\| \int_0^{\hat{t}} \frac{\partial T}{\partial t}(s, x) - \frac{\partial T}{\partial t}(s, y) \, ds \right\| + \|x - y\| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left\| \int_0^{\hat{t}} V(s, x) - V(s, y) \right\| + \|x - y\| \\
&\leq \int_0^{\hat{t}} \|V(s, x) - V(s, y)\| ds + \|x - y\| \\
&\leq c \|x - y\| \hat{t} + \|x - y\| \\
&\leq c \|x - y\| \tau + \|x - y\| \leq (c\tau + 1) \|x - y\|.
\end{aligned}$$

Zu 2: Genau wie bei Wronski-Matrizen (vgl. Numerik-II Skript oder Analysis) gilt bei der Speed Method

$$(T_s \circ T_t)(x) = T_{s+t}(x).$$

Damit ist die Inverse durch

$$(T_{-t} \circ T_t)(x) = T_0(x) = x,$$

d.h.

$$T_t^{-1}(x) = T_{-t}(x)$$

gegeben. Eigenschaft 3 folgt analog zu Eigenschaft 1 aufgrund der speziellen Form von T_t^{-1} . \square

Bemerkung 4.6. Falls das Vektorfeld V autonom ist, kann man bei der Speed Method die Umkehrung sehr einfach angeben: $T_t^{-1} = T_{-t}$. Das gilt aber weder bei der Perturbation of Identity, noch bei der Speed Method mit nicht-autonomen Vektorfeld.

Lemma 4.7. Die Perturbation of Identity kann in die Speed Method überführt werden.

Beweis. Eine geeignete ODE für die Speed Method kann durch Differenzieren von T_t gewonnen werden:

$$V_{\text{SM}}(t, x) := \frac{\partial T}{\partial t} (t, T_t^{-1}(x)). \quad (4.1)$$

\square

Bemerkung 4.8. Im nicht-autonomen Fall gilt die Umkehrung von Lemma 4.7 im Allgemeinen nicht: Es sei eine Perturbation of Identity gegeben durch

$$T_t(x) = x + tV_{\text{PI}}(x).$$

Analog zu Gleichung (4.1) erhält man dann

$$V_{SM}(t, x) = V_{PI}(T_t^{-1}(x)).$$

Damit gilt zwar $V_{SM}(0, x) = V_{PI}(x)$, aber

$$\frac{\partial V_{SM}}{\partial t} \Big|_{t=0} = -DV_{PI} \cdot V_{PI}. \quad (4.2)$$

Damit kann man sich bei der Herleitung der Sensitivitäten erster Ordnung auf die Perturbation of Identity beschränken, da diese in die Speed Method überführt werden kann. Bei höheren Ableitungen ergeben sich jedoch durch den Beschleunigungsterm (4.2) unterschiedliche Ausdrücke je nach Ansatz.

Bemerkung 4.9. Im Gegensatz zur Perturbation of Identity ermöglicht die Speed Method eine Analyse gerade dann, wenn Punkte auf dem Rand entlang krummliniger Trajektorien verschoben werden. Lässt man alle Punkte des Randes Γ entlang des Randes selber wandern, so findet keine Veränderung der Form statt, und der Gradient soll verschwinden. Hierauf basiert das Hadamard-Theorem, welches später erörtert wird.

Definition 4.10 (Formdifferenzierbarkeit, Formableitung, Shape Derivative). Es sei $D \subset \mathbb{R}^d$ offen und $\Omega \subset D$ messbar. Ferner sei V ein stetiges Vektorfeld. Ein Funktional J wird formdifferenzierbar an Ω genannt, falls der Grenzwert

$$dJ(\Omega)[V] := \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{J(\Omega_t) - J(\Omega)}{t}, \quad \Omega_t := T_t(\Omega)$$

für alle Richtungen V existiert und falls die Abbildung $V \mapsto dJ(\Omega)[V]$ linear und stetig ist. Der Ausdruck $dJ(\Omega)[V]$ wird auch Formableitung oder Shape Derivative von J an Ω in Richtung V genannt.

Bemerkung 4.11. Das Vektorfeld V bei der Formoptimierung spielt die selbe Rolle wie die Richtung bei einer klassischen Richtungsableitung einer Funktion $f : H \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\frac{df(x)}{dv} := \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + tv) - f(x)}{t}.$$

Das ist besonders offensichtlich bei der Perturbation of Identity, wo gilt

$$\Omega_t := \{x_0 + tV(x_0) : x_0 \in \Omega\}.$$

Der Ausdruck

$$J(\Omega_t) = J(\{x_0 + tV(x_0) : x_0 \in \Omega\})$$

ist damit völlig analog zum Ausdruck $f(x+tv)$ der klassischen Richtungsableitung. Bei einem klassischen Problem wird nun der Gradient als der Riesz-Representant der Richtungsableitung definiert:

$$\frac{df(x)}{dv} = \langle \nabla f, v \rangle \quad \forall v \in H.$$

Den analogen Übergang von Richtungsableitung auf den Gradienten für Form-optimierungsprobleme liefert das Hadamard-Theorem.

Theorem 4.12 (Hadamard Theorem). Es sei J formdifferenzierbar wie in Definition 4.10. Dann gilt

$$dJ(\Omega)[V] = dJ(\Gamma)[\langle V, n \rangle n]$$

für alle Vektorfelder $V \in C^k(\bar{D}; \mathbb{R}^d)$ mit $\Omega \subset D$.

Beweis. Die folgende Beweisskizze ist [11] entlehnt. Für weitere Details, insbesondere auf Einbettungen in den geometrischen Gesamtkontext wird auf [6] verwiesen. Im Folgenden wird die Speed Method vorausgesetzt mit $V(x) := V(0, x)$ und es sei

$$F(\Omega) := \{V \in C^k(\bar{D}; \mathbb{R}^d) : \langle V, n \rangle = 0 \text{ on } \Gamma\}.$$

Für $x \in \Gamma$ und $V \in F(\Omega)$ folgt damit $V(x) \in T_x \Gamma$. Da ein tangenzialer Geschwindigkeitsvektor V die Form nicht ändert, vergleiche auch Abbildung 4.1, ist Γ global invariant in Bezug auf Transformationen $T_t[V]$ mit $V \in F(\Omega)$. Damit gilt

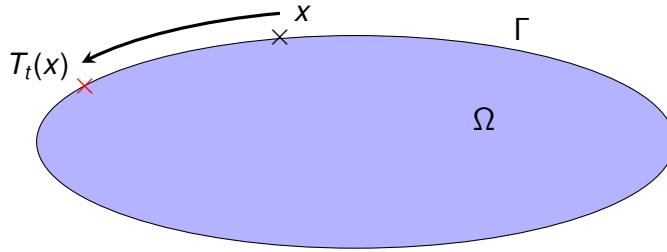


Abbildung 4.1: Eine Verschiebung entlang der Tangente bei der Speed-Method bewirkt keine Änderung der Form.

$\Omega_t = \Omega$, was bedeutet, dass $dJ(\Omega)[V] = 0$. Die abgeschlossene Menge $F(\Omega)$ liegt damit im Kern der linearen, stetigen Abbildung

$$V \mapsto dJ(\Omega)[V].$$

Unter zu Hilfe nahme der Äquivalenzrelation

$$V_1 \sim V_2 \Leftrightarrow \langle V_1|_{\Gamma} - V_2|_{\Gamma}, n \rangle = 0$$

kann die Menge zulässiger Störungsrichtungen in den Quotientenraum

$$C^k(\Gamma) := C^k(\bar{D}; \mathbb{R}^d)/F(\Omega)$$

faktorisiert werden. Die kanonische Abbildung $\iota : V \mapsto [V]$ ist surjektiv. Damit gilt

$$dJ(\Gamma)[.] = dJ(\Omega)[\iota(.)]$$

ist äquivalent zu $dJ(\Omega)[V] = dJ(\Gamma)[\langle V, n \rangle n]$. \square

Bemerkung 4.13. Nach Quelle [11] besagt das Hadamard Theorem in allgemeiner Form die Existenz einer skalaren Distribution

$$g(\Gamma) \in \mathcal{D}^{-k}(\Gamma),$$

so dass der Formgradient $G(\Omega) \in \mathcal{D}^{-k}(\Omega, \mathbb{R}^d)$ durch

$$G(\Omega) = \gamma_{\Gamma}^*(g \cdot n)$$

gegeben ist, wobei γ_{Γ}^* der adjugierte Spur-Operator auf Γ ist. Hier wird jedoch immer angenommen, dass $G(\Omega)$ eine integrierbare Funktion ist, d.h. Ω hat stückweise glatte Ränder. Damit kann die Formrichtungsableitung dann ausgedrückt werden als

$$dJ(\Omega)[V] = \int_{\Gamma} \langle V, gn \rangle dS = \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle g dS.$$

Oftmals wird dann mit Standardskalarprodukt

$$(a, b) = \int_{\Gamma} \langle a, b \rangle dS$$

von g bzw. gn als Formgradient gesprochen. Die Notwendigkeit für stückweise glatte Ränder kann z.B. in Gleichung (4.8) gesehen werden.

Die weitere Vorgehensweise um numerisch Formoptimierungsprobleme zu lösen besteht nun darin, für allgemeine Probleme den Formgradiennten g herzuleiten und anschließend ein gradientenbasiertes Optimierungsverfahren zu benutzen, für das g diskretisiert wird. Die Form wird dann in der Optimierung durch Updates der Gestalt

$$\Gamma_{i+1} = \{x + \langle V(x), n(x) \rangle n(x) g(x) : x \in \Gamma_i\} \quad (4.3)$$

verändert. Da g analytisch bekannt ist, sind keine Abhängigkeiten von der Diskretisierung des Gebietes, d.h. dem Rechennetz, gegeben. Somit ist die obige Update-Formel (4.3) numerisch extrem effiziente auszuwerten. Gleichzeitig wird die maximale Anzahl an Freiheitsgraden nutzbar.

Da die Einheitsnormale n sich mit der Form von Iteration zu Iteration ändert, haben Updates von der obigen Gestalt den interessanten Nebeneffekt, dass die Form Γ_i aus Iteration i nur relativ als Deformation der Form Γ_{i-1} aus Iteration $i-1$ gegeben ist und nicht als absolute Änderung der Initialform Γ_0 .

4.2 Hadamard-Formel für Volumen-Zielfunktionale

Werden Formfunktionale vom Typ

$$J(\Omega) = \int_{\Omega} f \, dA$$

betrachtet, dann ist die Integrationsformel aus Definition 3.19 wesentlich überschaubarer als die für Oberflächenzielfunktionale. Nach dieser Definition 3.19 kann das Integral über das deformierte Gebiet Ω_t wieder auf die ursprüngliche Form Ω zurück gespielt werden.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_t} f \, dA &= \int_{\Omega} f(T_t(x)) \sqrt{\det DT_t^T DT_t(x)} \, dA(x) \\ &= \int_{\Omega} f(T_t(x)) |\det DT_t(x)| \, dA(x). \end{aligned}$$

Die bijektive Abbildung T_t soll richtungserhaltend auf Γ sein, d.h. $\det DT_t(x) \geq 0$ für alle $x \in \Omega$. Damit entfällt im Folgenden der Absolutbetrag um die Determinante. Um den obigen Ausdruck nun nach t zu differenzieren wird die Ableitung der Determinanten benötigt.

Lemma 4.14 (Ableitung der Determinanten). Es sei

$$\begin{aligned} A : \mathbb{R} &\rightarrow \mathbb{R}^{n \times n} \\ t &\mapsto A(t) \end{aligned}$$

eine matrixwertige Funktion auf \mathbb{R} mit differenzierbaren Komponentenfunktionen. Außerdem sei $A(t)$ invertierbar auf einem Intervall. Die Ableitung der Determinanten ist dann durch

$$\frac{d(\det(A(t)))}{dt} = \text{tr}(A'(t)A^{-1}(t)) \det A(t).$$

gegeben.

Beweis. Es bezeichne a_i die Spalten der Matrix, d.h. $A(t) = [a_1, \dots, a_n]$. Die Leibniz-Formel zur Berechnung der Determinanten liefert

$$\begin{aligned} \frac{d(\det(A(t)))}{dt} &= \frac{d}{dt} \sum_{\sigma} s(\sigma) a_{1\sigma(1)} \cdot \dots \cdot a_{n\sigma(n)} \\ &= \sum_{\sigma} s(\sigma) (a'_{1\sigma(1)} \cdot a_{2\sigma(2)} \cdot \dots \cdot a_{n\sigma(n)} + \dots \\ &\quad \dots + a_{1\sigma(1)} \cdot \dots \cdot a_{n-1,\sigma(n-1)} \cdot a'_{n,\sigma(n)}) \\ &= \sum_{i=1}^n \det(a_1, \dots, a_{i-1}, \frac{da_i}{dt}, a_{i+1}, \dots, a_n). \end{aligned}$$

Für eine Matrix $A(t)$ mit $A(t_0) = I$ gilt damit

$$\left. \frac{d \det(A(t))}{dt} \right|_{t=t_0} = \sum_{i=1}^n a'_{ii}(t_0) = \text{tr}(A'(t_0)).$$

Mit Hilfe von $B(t) := A(t)A^{-1}(t_0) \Rightarrow B(t_0) = I$ erhält man

$$\begin{aligned} \left. \frac{d (\det(A(t)) \det(A^{-1}(t_0)))}{dt} \right|_{t=t_0} &= (\det(B))'(t_0) \\ &= \text{tr}(B'(t_0)) = \text{tr}(A'(t_0)A^{-1}(t_0)). \end{aligned} \tag{4.4}$$

Desweiteren ergibt sich mit der Produktregel

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=t_0} (\det(A(t)) \det(A^{-1}(t_0))) &= \left(\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \det(A(t)) \right) \det(A^{-1}(t_0)) \\ &\quad + \det(A(t_0)) \left(\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=t_0} \det(A^{-1}(t_0)) \right) \\ &= \left(\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \det(A(t)) \right) \det(A^{-1}(t_0)). \end{aligned} \tag{4.5}$$

Wird Gleichung (4.4) und (4.5) zusammengenommen, so erhält man

$$\frac{d}{dt} \det(A(t)) = \text{tr}(A'(t)A^{-1}(t)) \det(A(t)).$$

□

Lemma 4.15 (Ableitung der Deformationsdeterminante). Die Ableitung der bei der Perturbation of Identity auftretenden Determinante ist durch

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \det DT_t(x) = \text{div } V(x) \tag{4.6}$$

gegeben.

Beweis. Mit Lemma 4.14 erhält man

$$\frac{d}{dt} \det A(t) = \text{tr} \left(\frac{dA(t)}{dt} A(t)^{-1} \right) \det A(t).$$

Da $DT_0(x) = I$ gilt

$$\frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \det DT_t(x) = \text{tr} \left(\frac{dDT_t(x)}{dt} \Big|_{t=0} \right) = \text{tr}(DV(x)) = \text{div } V(x).$$

□

Lemma 4.16 (Hadamard-Formel für Volumenzielfunktionale). Für ein Volumenzielfunktional $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, welches weder von einer PDE noch von der Form Ω selber abhängt, d.h.

$$J(\Omega) = \int_{\Omega} f \, dA,$$

ist der Formgradient durch

$$dJ(\Omega)[V] = \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle f \, dS$$

gegeben.

Beweis. Nach Definition gilt

$$\begin{aligned} dJ(\Omega)[V] &:= \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} J(\Omega_t) := \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \int_{\Omega_t} f(x) \, dA(x) \\ &= \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \int_{\Omega} f(T_t(x)) \det(DT_t(x)) \, dA(x). \end{aligned}$$

Vertauschung von Differentiation und Integration sowie Anwenden von Lemma 4.15 führt zu

$$\begin{aligned} dJ(\Omega)[V] &= \int_{\Omega} \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} f(T_t(x)) \det(DT_t(x)) \, dA(x) \\ &= \int_{\Omega} \langle \nabla f(x), V(x) \rangle + f(x) \text{div } V(x) \, dA(x). \end{aligned} \tag{4.7}$$

Mit Kettenregel rückwärts gilt

$$dJ(\Omega)[V] = \int_{\Omega} \text{div}(f(x)V(x)) \, dA(x).$$

Das Randintegral erhält man nun durch Anwendung des Divergenztheorems 2.6, wofür die stückweise glatten Ränder benötigt werden

$$dJ(\Omega)[V] = \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle f \, dS. \quad (4.8)$$

□

4.3 Hadamard-Formel für Oberflächenintegrale

Die Hadamard-Formel für Oberflächenintegrale ist deutlich komplexer als die für Gebietsintegrale. Wird Gleichung (3.5) mit Gleichung (3.6) verglichen, dann fällt auf, dass die komplexere Integrationsdichte neue Ausdrücke beim Ableiten verursachen wird. Außerdem hängen Oberflächenzielfunktionale oft von geometrischen Größen wie der äußeren Normalen n ab, welche dann ebenfalls differenziert werden müssen.

Lemma 4.17 (Gestörtes Oberflächenintegral). Das Oberflächenintegral über den gestörten Rand Γ_t ist durch

$$\int_{\Gamma_t} g \, d\Gamma_t = \int_{\Gamma} g(T_t(x)) \|M(DT_t(x))n(x)\|_2 \, d\Gamma(x)$$

gegeben, wobei sich n auf die Einheitsnormale des ungestörten Randes Γ bezieht.

Beweis. Der gestörte Rand Γ_t wird durch

$$h^t(\xi, 0) := T_t(h(\xi, 0)) \quad (4.9)$$

beschrieben. Gemäß Bemerkung 3.23 ist das Oberflächenintegral dann durch

$$\int_{\partial\Omega_t} g \, dS_t = \int_{B_0} g(h^t(s)) \|M(Dh^t(s))e_d\|_2 \, ds$$

gegeben. Die Kettenregel liefert

$$Dh^t(\xi, 0) = D[T_t(h(\xi, 0))] = DT_t(h(\xi, 0))Dh(\xi, 0) \quad (4.10)$$

und

$$\begin{aligned} M(Dh^t(\xi, 0)) &= M(DT_t(h(\xi, 0))Dh(\xi, 0)) \\ &= M(DT_t(h(\xi, 0)))M(Dh(\xi, 0)). \end{aligned}$$

Mit der alternativen Darstellung der Normalen gilt

$$\begin{aligned}\|M(Dh^t(s))e_d\|_2 &= \|M(DT_t(h(\xi, 0)))M(Dh(\xi, 0))e_d\|_2 \\ &= \|M(DT_t(h(\xi, 0)))\| \|M(Dh(\xi, 0))e_d\|_2 \|n(h(\xi, 0))\|_2 \\ &= \|M(Dh(\xi, 0))e_d\|_2 \|M(DT_t(h(\xi, 0)))n(h(\xi, 0))\|_2.\end{aligned}$$

Somit erhält man

$$\begin{aligned}\int_{\partial\Omega_t} g \, dS_t &= \int_{B_0} g(T_t(h(s))) \|M(DT_t(h(s)))n(h(s))\|_2 \|M(Dh(s))e_d\|_2 \, ds \\ &= \int_{\partial\Omega} g(T_t(x)) \|M(DT_t(x))n(x)\|_2 \, d\Gamma(x),\end{aligned}$$

wobei wieder $s = (\xi, 0)$ und $x = h(s)$ gilt. \square

Bemerkung 4.18 (Alternative Darstellung). Aufgrund der Definition der Cofaktormatrix kann das gestörte Oberflächenintegral auch als

$$\begin{aligned}\int_{\partial\Omega_t} g \, dS_t &= \int_{\partial\Omega} g(T_t(x)) \|M(DT_t(x))n(x)\|_2 \, d\Gamma(x) \\ &= \int_{\partial\Omega} g(T_t(x)) |\det DT_t(x)| \|DT_t(x)^{-T} n(x)\|_2 \, d\Gamma(x)\end{aligned}$$

geschrieben werden. Da angenommen wird, dass die Deformationsabbildung T_t richtungserhaltend ist, kann $\det DT_t > 0$ für die weiteren Überlegungen angenommen werden.

Lemma 4.19 (Ableitung der inversen Matrix). Es sei $A(t) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ eine Matrix mit differenzierbaren Komponentenfunktionen, so dass $A(t)^{-1}$ für ein gewisses Intervall $I \subset \mathbb{R}$ existiert. Die Ableitung der inversen Matrix bzgl. t ist dann durch

$$\frac{d}{dt} A(t)^{-1} = -A(t)^{-1} \frac{dA(t)}{dt} A(t)^{-1}$$

gegeben.

Beweis. Es sei $a_{ij}(t)$ die Komponentenfunktionen von $A(t)$ und $a^{ik}(t)$ diejenigen von $A(t)^{-1}$. D.h.

$$\begin{aligned}\delta_{ik} &= \sum_{j=1}^m a_{ij}(t) a^{jk}(t) \\ \Rightarrow 0 &= \sum_{j=1}^m \frac{da_{ij}(t)}{dt} a^{jk}(t) + a_{ij}(t) \frac{da^{jk}(t)}{dt} \\ \Rightarrow 0 &= \frac{dA(t)}{dt} A(t)^{-1} + A \frac{dA(t)^{-1}}{dt}.\end{aligned}$$

□

Lemma 4.20 (Vorläufige Formableitung für Oberflächenfunktionale). Es sei $g \in C(T(\Gamma))$, wobei $T(\Gamma)$ eine tubulare Umgebung von Γ ist, so dass ∇g auf Γ definiert ist. Die vorläufige Formableitung für Oberflächenfunktionale ist dann durch

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} \int_{\Gamma_t} g \, dS_t &= \int_{\Gamma} \langle \nabla g, V \rangle + g \cdot (\operatorname{div} V - \langle DVn, n \rangle) \, dS \\ &= \int_{\Gamma} \langle \nabla g, V \rangle + g \operatorname{div}_{\Gamma} V \, dS \end{aligned}$$

gegeben.

Beweis. Es wird wieder Perturbation of Identity angenommen. Die alternative Darstellung aus Bemerkung 4.18 führt zu

$$\begin{aligned} &\frac{d}{dt}\Big|_{t=0} \int_{\partial\Omega_t} g \, dS_t \\ &= \int_{\partial\Omega} \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} (g(T_t(x)) \det DT_t(x) \| (DT_t(x))^{-T} n(x) \|_2) \, d\Gamma(x). \end{aligned}$$

Desweiteren gilt

$$\gamma(t) := DT_t^{-T} n = ((I + tDV)^T)^{-1} n,$$

welches in

$$\frac{d}{dt}\Big|_{t=0} \|\gamma(t)\|_2 = \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} \left(\sum_{i=1}^d \gamma_i(t)^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\|\gamma(0)\|_2} \left(\gamma^T(0) \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} \gamma(t) \right)$$

resultiert. Gemäß Lemma 4.19 erhält man

$$\begin{aligned} \gamma(0) &= n \\ \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} \gamma(t) &= -I^{-1} \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} (I + tDV)^T I^{-1} n \\ &= -DV^T n. \end{aligned}$$

Damit gilt

$$\frac{d}{dt}\Big|_{t=0} \|\gamma(t)\|_2 = -n^T DV^T n = -\langle DVn, n \rangle.$$

Mit Hilfe von $\det DT_0 = \det I = 1$ und der Produktregel kann der obige Ausdruck in

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} \int_{\partial\Omega_t} g \, dS_t &= \int_{\partial\Omega} \left[\frac{d}{dt}\Big|_{t=0} (g(T_t) \det DT_t) \right] - g \cdot \langle DVn, n \rangle \, dS \\ &= \int_{\partial\Omega} \langle \nabla g, V \rangle + g \cdot (\operatorname{div} V - \langle DVn, n \rangle) \, dS \\ &= \int_{\partial\Omega} \langle \nabla g, V \rangle + g \cdot \operatorname{div}_\Gamma V \, dS \end{aligned}$$

überführt werden, wobei Gleichung (4.6) für die Determinante wieder benutzt wurde. Die Aussage des Lemma folgt mit Bemerkung 3.15. \square

4.3.1 Formableitung für Geometrische Größen

Bevor die Herleitung der Hadamard-Formel für Oberflächenfunktionale beendet wird, wird die Formableitung für geometrische Ausdrücke ermittelt, d.h. der Integrand f oder g hängt seinerseits von der Geometrie ab. Typische Abhängigkeiten sind z.B. durch eine PDE oder die äußere Normale n gegeben. Die Formableitung der äußeren Normalen wird nicht nur für viele oft anzutreffenden Zielfunktionen oder PDE-Nebenbedingungen, wie ein Laplace-Problem mit Neumann-Rändern, benötigt, sondern auch, um die Formableitung für Oberflächenfunktionale mit Hilfe der tangenzialen Stokes-Formel abzuschließen.

Dazu führen wir zunächst den Begriff der lokalen (shape) Ableitung und der Materialableitung ein:

Definition 4.21 (Material-Ableitung, lokale Ableitung). Es sei u_t die Lösung einer PDE auf dem gestörten Gebiet $\Omega_t = T_t[V](\Omega)$. Ferner sei $x_t := T_t(x)$ die Verschiebung des Punktes x . Die Material-Ableitung wird dann als die totale Ableitung

$$du[V](x) := \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} u_t(x_t)$$

definiert. Falls für ein geeignetes Intervall I für alle $t \in I$ gilt $x \in \Omega_t \cap \Omega$, wird die lokale Formsensitivität als die Ableitung definiert, bei der die Auswertungsstelle nicht mitverschoben wird:

$$u'[V](x) := \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} u_t(x). \quad (4.11)$$

Bemerkung 4.22. Durch die Kettenregel können beide Ableitungsbegriffe ineinander überführt werden:

$$du[V] = u'[V] + DuV. \quad (4.12)$$

Da Gleichung (4.11) nur für $x \in \Omega_t \cap \Omega$ für $t \in I$ sinnvoll ist, wird im Folgenden Gleichung (4.12) als Definition für die lokale Ableitung aufgefasst wenn $\Omega_t \cap \Omega = \emptyset$ gilt.

Lemma 4.23 (Materialableitung und Ortsableitungen). Die Materialableitung kann nicht mit einer Ortsableitung vertauscht werden. Es gilt insbesondere

$$\begin{aligned} d(Du)[V] &= D(du[V]) - DuDV \\ d(\operatorname{div} u)[V] &= d(\operatorname{tr}(Du))[V] = \operatorname{div}(du[V]) - \operatorname{tr}(DuDV) \end{aligned}$$

und damit analog auch sofort falls das Standardskalarprodukt benutzt wird

$$d(\nabla u)[V] = \nabla(du[V]) - (DV)^T \nabla u \quad (4.13)$$

und mit Produktregel:

$$\begin{aligned} d\langle \nabla u, \nabla \xi \rangle [V] &= \langle d\nabla u[V], \nabla \xi \rangle + \langle \nabla u, d\nabla \xi[V] \rangle \\ &= \langle \nabla du[V], \nabla \xi \rangle + \langle \nabla u, \nabla d\xi[V] \rangle - \langle \nabla u, (DV + DV^T) \nabla \xi \rangle \end{aligned} \quad (4.14)$$

Beweis. Direkte Rechnung mit der Definition und Produktregel rückwärts

$$\begin{aligned} d(Du)[V] &= (Du)'[V] + D(Du)V = D(u'[V]) + D(DuV) - DuDv \\ &= D(u'[V] + DuV) - DuDV = D(du[V]) - DuDV \end{aligned}$$

Der Teil für den div -Operator folgt sofort, da Materialableitung und tr vertauschen, weil der Spur-Operator keine Ortsableitungen enthält. \square

Wir erhalten damit nun verschiedene Darstellungsformen von Formableitungen, deren Integrand auch noch von der Geometrie abhängt, einmal mit lokalen Ableitungen und einmal mit Materialableitungen:

Lemma 4.24 (Rand- vs Volumendarstellung, Teil 1). Für Volumenintegrale, deren Integrand auch von der Geometrie abhängt ergibt sich:

$$\begin{aligned} J(\Omega_t) &= \int_{\Omega_t} f(t, x_t) \, dx_t \\ dJ(\Omega)[V] &= \int_{\Omega} f \operatorname{div} V + \langle \nabla f, V \rangle + f'[V] \, dx = \int_{\Omega} \operatorname{div}(fV) + f'[V] \, dx \\ &= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle f \, ds + \int_{\Omega} f'[V] \, dx, \end{aligned}$$

welches der sog. Randdarstellung entspricht. Analog gilt aber mit der Material-Ableitung ebenfalls:

$$dJ(\Omega)[V] = \int_{\Omega} f \operatorname{div} V + \langle \nabla f, V \rangle + f'[V] \, dx = \int_{\Omega} f \operatorname{div} V + df[V] \, dx, \quad (4.15)$$

welches der Volumen-Darstellung entspricht.

Für Randfunktionale ergibt sich analog mit lokalen und Material-Ableitungen:

$$\begin{aligned} J(\Gamma_t) &= \int_{\Gamma_t} g(t, s_t) \, ds_t \\ dJ(\Gamma)[V] &= \int_{\Gamma} g \operatorname{div}_{\Gamma} V + \langle \nabla g, V \rangle + g'[V] \, ds \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$= \int_{\Gamma} g \operatorname{div}_{\Gamma} V + dg[V] \, ds \quad (4.17)$$

$$= \int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma}(gV) + \langle V, n \rangle Dgn + g'[V] \, ds. \quad (4.18)$$

Es stellt sich die Frage, ob wir ebenfalls eine “Randdarstellung” (also Darstellung in der Form $\langle V, n \rangle g$) der Formableitung von Randfunktionalen finden können. Dazu müssen wir erst die Formableitung der Normalen genauer untersuchen.

Beweis. Kettenregel □

Lemma 4.25 (Einheitsnormale auf gestörtem Gebiet). Die Einheitsnormale auf dem gestörten Gebiet Ω_t ist durch

$$n_t(T_t(x)) = \frac{(DT_t(x))^{-T} n(x)}{\|(DT_t(x))^{-T} n(x)\|_2}$$

gegeben.

Beweis. Nach Lemma 3.13 ist die Einheitsnormale auf dem gestörten Gebiet

$$n_t(x) = \frac{Dh^t(\xi, 0)^{-T} e_d}{\|Dh^t(\xi, 0)^{-T} e_d\|}.$$

Gemäß Gleichung (4.9) und (4.10) gilt

$$\begin{aligned} n_t(T_t(x)) &= \frac{(DT_t(h(\xi, 0)))^{-T} (Dh(\xi, 0))^{-T} e_d}{\|(DT_t(h(\xi, 0)))^{-T} (Dh(\xi, 0))^{-T} e_d\|} \\ &= \frac{(DT_t(x))^{-T} n(x)}{\|(DT_t(x))^{-T} n(x)\|}, \end{aligned}$$

wobei Lemma 3.13 erneut auf dem ungestörten Gebiet angewendet wurde. □

Lemma 4.26 (Vorläufige Formableitung der Einheitsnormalen). Die vorläufige Formableitung der Einheitsnormalen ist durch

$$dn[V](x) := \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} n_t(T_t(x)) = \langle n, (DV(x))^T n(x) \rangle n(x) - (DV(x))^T n(x)$$

gegeben.

Beweis. Da $DT_0(x) = I$ vereinfacht sich die Quotientenregel zu

$$\begin{aligned} dn[V](x) &:= \left(\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} [(DT_t(x))^{-T} n(x)] \right) \\ &\quad - n(x) \left(\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \|(DT_t(x))^{-T} n(x)\|_2 \right). \end{aligned}$$

Mit Lemma 4.19 kann die obige Gleichung in

$$dn[V](x) = -(DV(x))^T n(x) - n(x) \left(\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \|(DT_t(x))^{-T} n(x)\|_2 \right)$$

umgeformt werden. Für einen Vektor $v(t)$ mit differenzierbaren Komponentenfunktionen gilt mit der Kettenregel

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \|v(t)\|_2 = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \left(\sum_i v_i(t)^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{\langle v(0), v'(0) \rangle}{\|v(0)\|_2}.$$

Mit $v(t) = (DT_t(x))^{-T} n(x)$ gilt dann $v(0) = n(x)$ und durch Lemma 4.19 erhält man $v'(0) = -(DV(x))^T n(x)$, womit dann

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \|DT_t(x)^{-T} n(x)\|_2 = -\langle n(x), (DV(x))^T n(x) \rangle$$

folgt, was den gewünschten Ausdruck liefert. \square

Unglücklicherweise entspricht Lemma 4.26 noch nicht der Hadamard-Form und zusätzliche Umformungen mit der tangentialen Jacobi-Matrix aus Definition 3.11 werden benötigt.

Lemma 4.27. Die Formableitung der Normalen ist äquivalent durch

$$dn[V] = -(D_\Gamma V)^T n$$

gegeben.

Beweis. Unter der Annahme, dass das Vektorfeld V auch in einer tubularen Umgebung existiert gilt nach (3.3)

$$D_\Gamma V = DV - DVn n^T.$$

Genauso gilt auch nach Lemma 4.26.

$$(D_\Gamma V)^T n = (DV)^T n - n(DVn)^T n = -dn[V].$$

□

Lemma 4.28. Die Formableitung der äußeren Normalen $dn[V]$ an einem Punkt x liegt im Tangenzialraum $T_x\Omega$.

Beweis.

$$\begin{aligned} \langle dn[V], n \rangle &= \langle -(D_\Gamma V)^T n, n \rangle \\ &= \langle -(DV)^T n + n(DVn)^T n, n \rangle \\ &= -((DV)^T n)^T n + (n(DVn)^T n)^T n \\ &= -n^T DVn + n^T (DVn) \\ &= 0. \end{aligned}$$

□

Bemerkung 4.29. Per Definition liegt die tangenziale Jacobi-Matrix der äußeren Normalen $n(x)$ an einem Punkt x im Tangenzialraum $T_x\Gamma$. Damit gilt aber insbesondere

$$\vec{0} = \nabla_\Gamma 1 = \nabla_\Gamma \langle n(x), n(x) \rangle = 2(D_\Gamma n(x))^T n(x)$$

oder anders ausgedrückt $n \in \text{Kern}\{(D_M n)^T\}$.

Damit kann nun im folgenden Lemma 4.30 die Formableitung der Normalen weiter umgeformt werden.

Lemma 4.30. Für ein Vektorfeld \tilde{V} senkrecht zum Rand Γ , d.h. $\tilde{V}(x) = \alpha(x)n(x)$ für $\alpha(x)$ skalar, gilt im Standardskalarprodukt

$$dn[\tilde{V}] = -\nabla_\Gamma \langle \tilde{V}, n \rangle.$$

Beweis. Denn:

$$\nabla_\Gamma \langle \tilde{V}, n \rangle = (D_\Gamma (\tilde{V}^T n))^T = (n^T D_\Gamma \tilde{V} + \tilde{V}^T D_\Gamma n)^T = (D_\Gamma \tilde{V})^T n + (D_\Gamma n)^T \tilde{V}$$

und falls $\tilde{V}(x) = \alpha(x)n(x)$ ist, gilt nach Bemerkung 4.29 automatisch $(D_\Gamma n)^T \tilde{V} = 0$. Damit folgt die Behauptung direkt aus Lemma 4.27. □

Die weitere Vorgehensweise ist nun, die vorläufige Formableitung aus Lemma 4.20 auf das Divergenztheorem aus Lemma 2.6 anzuwenden. Hierfür werden jedoch gewisse Ableitungen in Normalenrichtung benötigt, so dass die betrachtete Funktion auch in einer tubularen Nachbarschaft von Γ existieren muss. Unglücklicherweise trifft dies für die äußere Normale n erstmal nicht zu, so dass zunächst eine sinnvolle Fortsetzung der äußeren Normalen in das Gebiet gefunden werden muss.

Bemerkung 4.31. Werden Funktionale der Gestalt

$$J(g, \Gamma) = \int_{\Gamma} g(\varphi, n) dS$$

betrachtet, wobei

$$\begin{aligned} g : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d &\rightarrow \mathbb{R} \\ (\varphi, \psi) &\mapsto g(\varphi, \psi) \end{aligned}$$

eine hinreichend glatte Funktion ist, so benötigt die vorläufige Formableitung für Oberflächenfunktionale, Lemma 4.20, die Existenz der Ableitung $\langle \nabla g(\varphi, \psi), V \rangle$. Für den Ausdruck $g(\varphi, n)$ ist dies jedoch nicht direkt gegeben und eine differenzierbare unitäre Fortsetzung \mathcal{N} der äußeren Normalen n in eine tubulare Umgebung von Γ wird benötigt. Genau wie in Bemerkung 4.29 soll diese Fortsetzung die Eigenschaft

$$0 = D 1 = D (\mathcal{N}(x)^T \mathcal{N}(x)) = 2 (D\mathcal{N}(x))^T \mathcal{N}(x)$$

im Gebiet Ω haben, siehe auch [11].

Oft wird diese Fortsetzung \mathcal{N} als der normalisierte Gradient der vorzeichenbehafteten Abstandsfunktion $\nabla b / \|\nabla b\|$ gewählt. Siehe auch Abbildung 4.2. Die tangenziale Stokes-Formel wird nun dazu benutzt, eine partielle Integration auf dem Rand durchzuführen, wodurch dann die Hadamard-Form für Randintegrale ermittelt werden kann.

Lemma 4.32 (Tangenziale Stokes-Formel). Es sei $\Gamma = \partial\Omega$ so, dass das Divergenz-Theorem anwendbar ist. Ferner sei g eine reellwertige differenzierbare Funktion auf Γ und v eine differenzierbare vektorwertige Funktion ebenfalls auf Γ . Dann gilt

$$\int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma} gv dS \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Gamma} g \operatorname{div}_{\Gamma} v + \langle \nabla_{\Gamma} g, v \rangle dS = \int_{\Gamma} \kappa g \langle v, n \rangle dS.$$

Es gilt also insbesondere

$$\int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma} F dS = \int_{\Gamma} \langle F, n \rangle \kappa dS. \quad (4.19)$$

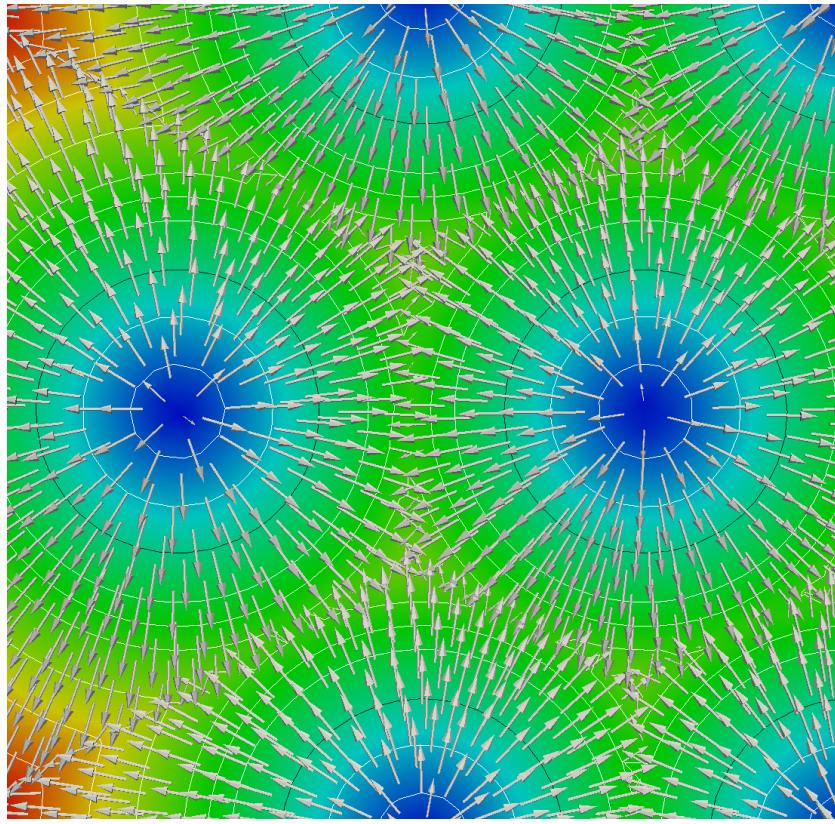


Abbildung 4.2: Keise (schwarze Linie) mit dazugehöriger vorzeichenbehafteter Abstandsfunktion (farbig). Isolinien der Abstandsfunktion in weiß. Die Pfeile sind der Gradient der Abstandsfunktion und können als Fortsetzung der Normalen betrachtet werden.

Beweis. Wird die Hadamard-Formel für Gebietsintegrale, Lemma 4.16, auf die linke Seite des Divergenztheorems, Lemma 2.6, und die vorläufige Formel für Randfunktionale aus Lemma 4.20 auf der rechten Seite angewendet, so entsteht der Ausdruck (Beachte, F ist unabhängig von der Geometrie, also $F'[V] = 0$)

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \operatorname{div} F \, dS \\
 & \stackrel{(4.16)}{=} \int_{\Gamma} \langle \nabla \langle F, \mathcal{N} \rangle, V \rangle + \langle F, n \rangle (\operatorname{div}_{\Gamma} V) + \langle F, n'[V] \rangle \, dS \\
 & = \int_{\Gamma} \langle (DF)^T \mathcal{N} + (D\mathcal{N})^T F, V \rangle + \langle F, n \rangle (\operatorname{div}_{\Gamma} V) + \langle F, n'[V] \rangle \, dS
 \end{aligned}$$

$$\stackrel{(4.12)}{=} \int_{\Gamma} \langle (DF)^T \mathcal{N}, V \rangle + \langle F, n \rangle (\operatorname{div}_{\Gamma} V) + \langle F, dn[V] \rangle dS.$$

Wird $V = \mathcal{N}$ gewählt und Lemma 4.27 angewendet, so erhält man

$$\int_{\Gamma} \langle n, n \rangle \operatorname{div} F dS = \int_{\Gamma} \langle (DF)^T \mathcal{N}, \mathcal{N} \rangle + \langle F, n \rangle (\operatorname{div}_{\Gamma} \mathcal{N}) + \langle F, dn[n] \rangle dS,$$

da $(D_{\Gamma} \mathcal{N})^T \mathcal{N} = 0$ (\mathcal{N} ist normiert entlang der Oberfläche) folgt $0 = dn[n]$ und damit:

$$\int_{\Gamma} \operatorname{div} F dS = \int_{\Gamma} \langle DFn, n \rangle + \langle F, n \rangle \kappa dS.$$

Da $\operatorname{div}_{\Gamma} F = \operatorname{div} F - \langle DFn, n \rangle$ kann man $\langle DFn, n \rangle$ auf beiden Seiten subtrahieren und es entsteht der Ausdruck

$$\int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma} F dS = \int_{\Gamma} \langle F, n \rangle \kappa dS.$$

und den gewünschten Ausdruck erhält man durch Wahl von $F := gv$ für einen Skalar g und einen Vektor v . \square

Bemerkung 4.33 (Schwache Form des Tangential-Laplace). Durch Wahl von

$$v := \nabla_{\Gamma} u, \quad g := w$$

in Lemma 4.32 sieht man sofort, dass sich der tangentiale Laplace-Operator auch schwach darstellen lässt durch

$$\int_{\Gamma} -w \Delta_{\Gamma} v dS = \int_{\Gamma} \langle \nabla_{\Gamma} w, \nabla_{\Gamma} v \rangle dS.$$

Durch Wahl von $w = 1$ sieht man weiter, dass das Integral über den Tangential-Laplace verschwinden muss, allerdings nur für den Fall $\Gamma = \partial\Omega$. Wird Γ als eigenständige Oberfläche ohne Inneres oder z.B. mit Löchern betrachtet, so gilt dies natürlich im Allgemeinen nicht mehr.

4.3.2 Formableitungen für allgemeine Randfunktionale

Mit Hilfe der tangenzialen Stokes Formel kann der vorläufige Gradient aus Lemma 4.20 jetzt in die Hadamard-Form gebracht werden.

Lemma 4.34 (Hadamard Formel für Randfunktionale). Für eine Funktion $g : \mathbb{R} \times T(\Gamma) \rightarrow \mathbb{R}$, für welche $\frac{\partial g}{\partial n}$ existiert, ist die Formableitung des Randzielfunktionalen

$$J(\Omega_t) := \int_{\Gamma_t} g(t, s_t) \, ds_t$$

durch

$$dJ(\Omega)[V] = \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \left[\frac{\partial g}{\partial n} + \kappa g \right] + g'[V] \, ds$$

gegeben. Hierbei bezeichnet $\kappa = \operatorname{div}_{\Gamma} n$ wieder die tangenziale Divergenz der Normalen, d.h. die additive Krümmung von Γ .

Beweis. Ausgehend von Gleichung (4.18) haben wir

$$dJ(\Omega)[V] = \int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma}(gV) + \langle V, n \rangle Dgn + g'[V] \, ds.$$

mit Lemma 4.32 und Gleichung (4.19) haben wir dann

$$dJ(\Omega)[V] = \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle [Dgn + \kappa g] + g'[V] \, ds,$$

was der gesuchten Aussage entspricht. \square

Bemerkung 4.35 (Minimalfläche). In der Differentialgeometrie wird eine Untermannigfaltigkeit Γ als Minimalfläche bezeichnet, wenn diese eine kritische Fläche bzgl. der Oberfläche ist, also wenn für das Minimierungsproblem

$$\min_{\Gamma} J(\Gamma) := \int_{\Gamma} 1 \, dS$$

der Gradient verschwindet. Nach Lemma 4.34 gilt hier

$$\begin{aligned} dJ(\Gamma)[V] &= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \left[\frac{\partial 1}{\partial n} + 1 \cdot \kappa \right] \, dS \\ &= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \kappa \, dS. \end{aligned}$$

Damit sieht man wieder, dass $dJ(\Gamma)[V] = 0 \Leftrightarrow \kappa = 0$, was der Charakterisierung von Minimalflächen aus der Differentialgeometrie entspricht.

Lemma 4.36 (Hadamard Form für Formableitungen mit Normalen). Es sei das Randzielfunktional

$$J(g, \Gamma) := \int_{\Gamma} g(u, n) \, ds$$

gegeben, wobei g eine hinreichend glatte Funktion ist. Die Formableitung von diesem Randzielfunktional ist dann in der Volumendarstellung durch

$$dJ(g, \Gamma)[V] = \int_{\Gamma} g(u, n) \operatorname{div}_{\Gamma} V + dg(u, n)[V] \, ds$$

und in der Randdarstellung für V in Normalenrichtung durch

$$\begin{aligned} dJ(g, \Gamma)[V] &= \\ &\int_{\Gamma} \langle V, n \rangle [\partial_1 g D u n + \kappa (g - \partial_2 g n)] + \operatorname{div}_{\Gamma} (\partial_2 g(u, n))^T + \partial_1 g(u, n) u'[V] \, ds \end{aligned}$$

gegeben. Dabei bezeichnet ∂_1 und ∂_2 jeweils die partielle Ableitung nach dem ersten oder zweiten Argument. Diese Schreibweise ist hier hilfreich, weil ansonsten mit der Schreibweise $\frac{\partial g(u, n)}{\partial n}$ nicht klar ist, ob die partielle Ableitung nach dem zweiten Argument oder die Ortsableitung in Normalenrichtung $Dg(u, n)n$ gemeint ist.

Beweis. Der Ausdruck hier ist eine Verallgemeinerung von 4.32. Während in 4.32 der Integrand $g(u, n) = \langle F, n \rangle$ vorlag mit $F'[V] = 0$, also F unabhängig von der Geometrie, beschäftigen wir uns jetzt mit einem allgemeinen Integranden g . Der Ausdruck in Volumen-Formulierung folgt direkt mit Gleichung (4.17).

Für die Randformulierung betrachten wir wieder \mathcal{N} als Fortsetzung der Normalen n in eine tubulare Nachbarschaft. Außerdem erfülle $V = \langle V, n \rangle n$. Mit Lemma 4.34 gilt dann:

$$\begin{aligned} dJ(g, \Gamma)[V] &= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle [\langle \nabla g(u, \mathcal{N}), n \rangle + \kappa g(u, n)] + \\ &\quad + g(u, \mathcal{N})'[V] \, ds. \end{aligned}$$

Wir berechnen die einzelnen Terme per Kettenregel:

$$dJ(g, \Gamma)[V] = \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle [\partial_1 g D u n + \partial_2 g D \mathcal{N} n + \kappa g] + \partial_1 g u'[V] + \partial_2 g \mathcal{N}'[V] \, ds$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle [\partial_1 g D u n + \kappa g] + \partial_1 g u' [V] + \partial_2 g d \mathcal{N}[V] \, ds \\
&\stackrel{4.30}{=} \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle [\partial_1 g D u n + \kappa g] + \partial_1 g u' [V] - \partial_2 g \nabla_{\Gamma} \langle V, n \rangle \, ds \\
&\stackrel{4.32}{=} \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle [\partial_1 g D u n + \kappa (g - \partial_2 g n)] + \partial_1 g u' [V] + \operatorname{div}_{\Gamma} \partial_2 g^T \, ds
\end{aligned}$$

□

Beispiel 4.37. Zwei oft angetroffene Zielfunktionen, die auch von der äußeren Normalen abhängen, sind

$$\begin{aligned}
J_1(u, \Gamma) &:= \int_{\Gamma} \langle u, n \rangle \, dS \\
J_2(v, \Gamma) &:= \int_{\Gamma} \langle \nabla v, n \rangle \, dS.
\end{aligned}$$

Hierbei ist u ein Vektor und v ist eine skalare Größe. Die Zielfunktion J_1 entspricht z.B. der Oberflächenreibung in einem viskosen Fluid und J_2 entspricht dem Strömungswiderstand aufgrund des Druckunterschiedes. Mit der Notation aus Lemma 4.36 erhält man für J_1

$$\begin{aligned}
g(u, n) &= \langle u, n \rangle \\
\partial_1 g &= n^T \\
\partial_2 g &= u^T
\end{aligned}$$

Damit lässt sich die Formableitung angeben als

$$\begin{aligned}
dJ_1(u, \Gamma)[V] &= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle [n^T D u n + \kappa (u^T n - u^T n) + \operatorname{div}_{\Gamma} u] \, dS \\
&= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle [\langle D u n, n \rangle + \operatorname{div}_{\Gamma} u] \, dS \\
&= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \operatorname{div} u \, dS.
\end{aligned}$$

Dies kann man auch sofort sehen, da gilt

$$J_1 = \int_{\Gamma} \langle u, n \rangle \, dS = \int_{\Omega} \operatorname{div} u \, dA$$

und hierauf kann direkt die Volumen-Form angewendet werden.

Für J_2 erhält man $g(v, n) = Dvn$ und wir müssen für diesen Fall den Ausdruck $\partial_1 g Dun$ bestimmen. Es gilt:

$$\frac{d}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=0} g(v + \epsilon \tilde{v}, n) = \frac{d}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=0} D(v + \epsilon \tilde{v})n = D\tilde{v}n.$$

Also: $\partial_1 g \tilde{v} := D_v g \tilde{v} = D\tilde{v}n$ und damit

$$\partial_1 g Dvn := D_v g (Dvn) = D(Dvn)n = n^T D^2 vn + Dv D\mathcal{N}n = n^T D^2 vn \quad (4.20)$$

falls die Normale konstant in Normalenrichtung fortgesetzt wird, d.h. $D\mathcal{N}n = 0$. Wir erhalten also

$$\begin{aligned} dJ_2(v, \Gamma)[V] &= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle [n^T D^2 vn + \kappa (\langle \nabla v, n \rangle - Dvn) + \operatorname{div}_{\Gamma} \nabla v] dS \\ &= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \left[\langle D^2 vn, n \rangle + \operatorname{div}_{\Gamma} \left(\nabla_{\Gamma} v + \frac{\partial v}{\partial n} n \right) \right] dS \\ &= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \left[\langle D^2 vn, n \rangle + \kappa \frac{\partial v}{\partial n} + \operatorname{div}_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} v \right] dS \\ &\stackrel{(3,4)}{=} \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \Delta v dS. \end{aligned}$$

Alternativ lässt sich dies auch sofort sehen, da gilt

$$\int_{\Gamma} \langle Dv, n \rangle dS = \int_{\Omega} \Delta v dx$$

und hierauf lässt sich einfach die Volumen-Formulierung des Shape Derivatives anwenden.

Beispiel 4.38. Ein weiteres wichtiges Feld für 4.36 ist die Behandlung von Neumann-Randbedingungen in schwacher Form als partieller Ableitung nach der Form. D.h. für gegebene hinreichend glatte Funktion $u : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ und u ändert sich nicht falls Ω zu $\Omega_{\epsilon} \subset \mathcal{D}$ deformiert wird, sei

$$J(u, \Omega, \xi_b) := \int_{\Gamma} \xi_b \left(\frac{\partial u}{\partial n} - u_b \right) dS = \int_{\Gamma} \langle \xi_b \nabla u, n \rangle dS + \int_{\Gamma} -\xi_b u_b dS =: J_a + J_b$$

Wir betrachten den vorderen Teil. Hier ist

$$g(u, \xi_b, n) = \xi_b Dun.$$

Der Zustand ist also vektorwertig mit den Komponenten (u, ξ) und wir müssen Nachdifferenzieren. Für die Ableitungen gilt

$$\begin{aligned} D_u g(u, \xi_b, n) D u n &\stackrel{(4.20)}{=} \xi_b n^T D^2 u n \\ D_{\xi_b} g(u, \xi_b, n) D \xi_b n &= D u n D \xi_b n \\ \partial_2 g(u, \xi_b, n) &= \xi_b D u \end{aligned}$$

wird alles wie in 4.36 zusammen gefügt, so ergibt sich für den ersten Teil

$$\begin{aligned} dJ_a[V] &= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \left[\frac{\partial u}{\partial n} \frac{\partial \xi_b}{\partial n} + \xi_b \frac{\partial^2 u}{\partial n^2} + \operatorname{div}_{\Gamma} (\xi_b \nabla u) \right] dS \\ &\stackrel{3.15}{=} \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \operatorname{div} (\xi_b \nabla u) dS = \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle [\langle \nabla \xi_b, \nabla u \rangle + \xi_b \Delta u] dS \end{aligned}$$

und mit beiden Teilen also

$$\begin{aligned} dJ[V] &= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \left[\operatorname{div} (\xi_b \nabla u) - \frac{\partial(\xi_b u_b)}{\partial n} - \kappa \xi_b u_b \right] dS \\ &= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \left[\langle \nabla \xi_b, \nabla u \rangle + \xi_b \Delta u - \frac{\partial(\xi_b u_b)}{\partial n} - \kappa \xi_b u_b \right] dS. \end{aligned}$$

Vergleiche auch mit 4.37 für $\xi_b \equiv 1$ und $u_b \equiv 0$. Da u als unabhängig von der Deformation von Ω angesehen wurde, haben wir hier im Prinzip die “außere Ableitung” bestimmt. Vergleiche ebenfalls mit Lemma 4.42, wo die “innere Ableitung” bestimmt wird.

4.4 Formableitungen und PDEs

4.4.1 Ableitungskonzepte und Randbedingungen

Der nächste Schritt ist nun, eine PDE-Zustandsgleichung zu betrachten. Insbesondere wird jetzt also die Sensitivität einer PDE-Lösung bezüglich einer Variation des Gebiets benötigt, auf dem die PDE definiert ist. Wird die Form geändert, so verändert sich der Wert $u(x)$ einer PDE $c(u, \Omega) = 0$ zum einen durch eine Transformation der Auswertungsstelle x als auch deswegen, weil sich das Gebiet im allgemeinen verändert.

Bemerkung 4.39 (Rand- vs Volumendarstellung, Teil 2). Zusammenfassend mit Lemma 4.24 haben wir folgende Formulierungen in Rand- und Volumendarstellung für Formableitungen:

Für ein Volumenintegral gilt:

$$\begin{aligned}
 J(\Omega_t) &= \int_{\Omega_t} f(t, x_t) \, dx_t \\
 dJ(\Omega)[V] &= \int_{\Omega} f \operatorname{div} V + \langle \nabla f, V \rangle + f'[V] \, dx = \int_{\Omega} \operatorname{div}(fV) + f'[V] \, dx \\
 &= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle f \, ds + \int_{\Omega} f'[V] \, dx \\
 &= \int_{\Omega} f \operatorname{div} V + \langle \nabla f, V \rangle + f'[V] \, dx = \int_{\Omega} f \operatorname{div} V + df[V] \, dx.
 \end{aligned}$$

Für Randfunktionale ergibt sich analog mit lokalen und Material-Ableitungen:

$$\begin{aligned}
 J(\Gamma_t) &= \int_{\Gamma_t} g(t, s_t) \, ds_t \\
 dJ(\Gamma)[V] &= \int_{\Gamma} g \operatorname{div}_{\Gamma} V + \langle \nabla g, V \rangle + g'[V] \, ds = \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \left[\frac{\partial g}{\partial n} + \kappa g \right] + g'[V] \, ds,
 \end{aligned}$$

was der Randdarstellung nach Lemma 4.34 entspricht. Analog als “Volumendarstellung” mit Materialableitungen:

$$dJ(\Gamma)[V] = \int_{\Gamma} g \operatorname{div}_{\Gamma} V + \langle \nabla g, V \rangle + g'[V] \, ds = \int_{\Gamma} g \operatorname{div}_{\Gamma} V + dg[V] \, ds. \quad (4.21)$$

Auch hier liefern die unterschiedlichen Ansätze in der Praxis wieder Ausdrücke, die sich so unähnlich sehen, dass man diese nicht spontan vergleichen geschweige denn umformen könnte. Vergleicht man aber (4.15) mit (4.21), so fällt auf, dass in dieser Form quasi kein Unterschied mehr besteht zwischen dem Fall “Volumenintegral” und “Randintegral”, was wir auch schon in Beispiel 3.24 gesehen haben! Man muss nicht mehr zwischen Rand- und Volumenintegral unterscheiden!

Wie oben beschrieben entwickeln wir für verschiedene typische Randbedingungen (Dirichlet, Neumann und Slip) sowohl eine Formel zur Bestimmung der resultierenden lokalen Ableitung und zur Bestimmung der resultierenden Materialableitung: Wird die Randbedingung einer PDE formal linearisiert, so erhält man gewöhnlich einen Ausdruck für die Material-Ableitung. Wir werden den Lagrange-Formalismus zweimal betrachten: Einmal mit Materialableitungen und einmal mit lokalen Ableitungen. Für letzteres brauchen wir die lokale Formsensitivität. Damit können wir wieder beide Formulierungen (Rand und Volumen) aus Lemma 4.24 und Bemerkung 4.39 benutzen:

Lemma 4.40 (Lokale Ableitung der Dirichlet Randbedingung). Es sei der Zustand u als die Lösung einer PDE mit Dirichlet-Randbedingung

$$u = u_b \quad \text{auf } \partial\Omega$$

gegeben, wobei u_b nicht von der Geometrie von Ω abhängt, d.h. unabhängig von z.B. der äußeren Normalen. Die lokale Formableitung unter einem Verschiebungsfeld V ist dann durch die Lösung von

$$\begin{aligned} u'[V] &= \langle V, n \rangle \frac{\partial(u_b - u)}{\partial n} \quad \text{auf } \Gamma \\ u'[V] &= 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \setminus \Gamma \end{aligned}$$

gegeben, wobei Γ hier nur der variable Teil des Randes $\partial\Omega$ ist.

Beweis. Wird von beiden Seiten der Dirichlet Randbedingung die Material-Ableitung genommen, so erhält man

$$du[V] = du_b[V] \quad \text{auf } \Gamma.$$

Nach Definition 4.21 erhält man

$$\begin{aligned} u'[V] + \langle \nabla u, V \rangle &= du[V] = du_b[V] = \langle \nabla u_b, V \rangle \\ \Rightarrow u'[V] &= \langle \nabla(u_b - u), V \rangle, \end{aligned}$$

da u_b nicht von der Geometrie abhängt und somit $u'_b[V] = 0$ ist. Mit dem Orthogonalitätsargument $\tilde{V} := \langle V, n \rangle n$ erhält man dann

$$u'[V] = \langle V, n \rangle \left(\frac{\partial(u_b - u)}{\partial n} \right),$$

was der Aussage entspricht. \square

Lemma 4.41 (Formableitung der Slip-Randbedingung). Die Slip- oder auch Nicht-permeabilitäts-Randbedingung wird oft bei nicht-viskosen Fluiden angetroffen und besagt, dass ein Fluid der Geschwindigkeit $u \in \mathbb{R}^d$ nicht durch eine Wand fließen darf, wohl aber reibungslos entlang fließen kann. Sie ist gegeben durch

$$\langle u, n \rangle(x) = 0 \quad \text{auf } \Gamma.$$

Die lokale Formableitung ist dann als Lösung der Gleichung

$$\begin{aligned} \langle u'[V], n \rangle &= -\langle DuV, n \rangle - \langle u, dn[V] \rangle \\ &= -\langle V, n \rangle \left\langle \frac{\partial u}{\partial n}, n \right\rangle + \langle u, \nabla_\Gamma \langle V, n \rangle \rangle \end{aligned}$$

gegeben, wobei der zweite Teil wieder für Verschiebungen senkrecht zum Rand gilt. Die Hadamard-Form kann aus der tangenzialen Stokes Formel, Lemma 4.32, gewonnen werden.

Beweis. Die Herleitung erfolgt analog wie in Lemma 4.40 mit Hilfe der Produktregel und Definition 4.21 für den vektorwertigen Zustand u :

$$du[V] = u'[V] + DuV.$$

□

Lemma 4.42 (Formableitung der Neumann-Randbedingung). Es sei u die Lösung einer PDE mit Neumann-Randbedingung

$$\frac{\partial u}{\partial n} = u_b \quad \text{auf } \partial\Omega$$

Hierbei ist u_b wieder unabhängig von der Geometrie von Ω wie z.B. der äußeren Normalen n , d.h. $du_b[V] = Du_b V$. Die lokale Formableitung zu einem Verschiebungsfeld V erfüllt dann

$$\begin{aligned} \frac{\partial u'[V]}{\partial n} &= \langle \nabla u_b, V \rangle - \langle \nabla(DuV), n \rangle - \langle \nabla_\Gamma u, dn[V] \rangle \\ &= \langle V, n \rangle \left[\frac{\partial u_b}{\partial n} - \frac{\partial^2 u}{\partial n^2} \right] + \langle \nabla_\Gamma u, \nabla_\Gamma \langle V, n \rangle \rangle, \end{aligned}$$

wobei die zweite Gleichheit ein Verschiebungsfeld konstant in Normalenrichtung, $DVn = 0$, annimmt.

Beweis. Wir führen die Materialableitung auf beiden Seiten von $Dun = ub$ aus und erhalten mit Gleichung (4.12)

$$\begin{aligned} d\langle \nabla u, n \rangle [V] &= du_b[V] \\ \Rightarrow \langle d\nabla u[V], n \rangle &= du_b[V] - \langle \nabla u, dn[V] \rangle \\ \Rightarrow \langle \nabla u'[V] + \nabla(DuV), n \rangle &= du_b[V] - \langle \nabla u, dn[V] \rangle, \end{aligned}$$

Mit dem üblichen Argument $DVn = 0$ und da die Neumann-Randbedingung für $Dun = ub$ gilt, erhält man auch $\nabla u = \nabla_\Gamma u + \frac{\partial u}{\partial n} n = \nabla_\Gamma u + u_b n$ kann dann die Randbedingung als

$$\begin{aligned} \frac{\partial u'[V]}{\partial n} &= \langle V, n \rangle \left[\frac{\partial u_b}{\partial n} - \frac{\partial^2 u}{\partial n^2} \right] + \langle \nabla u, \nabla_\Gamma \langle V, n \rangle \rangle \\ &= \langle V, n \rangle \left[\frac{\partial u_b}{\partial n} - \frac{\partial^2 u}{\partial n^2} \right] + \langle \nabla_\Gamma u, \nabla_\Gamma \langle V, n \rangle \rangle + \langle u_b n, \nabla_\Gamma \langle V, n \rangle \rangle \end{aligned}$$

ausgedrückt werden. Der letzte Ausdruck verschwindet wieder, da die Vektoren senkrecht aufeinander stehen. Mit Bemerkung 4.33 kann direkt die Hadamard-Form abgelesen werden. □

4.4.2 Shape Calculus und der Lagrange-Formalismus

Oftmals ist es jedoch viel einfacher, statt explizit die linearisierten Randbedingungen zu berechnen erneut die Lagrange-Funktion aufzustellen und die Nullstelle aller partiellen Ableitungen zu suchen. Dazu betrachten wir erneut das Beispiel (2.10), dieses mal jedoch als Formoptimierungsproblem, d.h. das Gebiet Ω ist nun die Unbekannte statt einer Temperaturverteilung q . Insgesamt erhält man als Beispielproblem:

$$\min_{(u, \Omega)} \frac{1}{2} \int_{\Omega} (u(x) - z(x))^2 dx \quad (4.22)$$

unter

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f && \text{in } \Omega \\ u &= 0 && \text{auf } \partial\Omega \\ \text{Vol}(\Omega) &= V_0 && \text{in } \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Dabei ist die Volumen-Beschränkung notwendig, damit $\Omega = \emptyset$ keine triviale Lösung ist. Die Lagrange-Funktion lautet dann wieder:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(u, \Omega, \xi, \xi_b) &= \frac{1}{2} (u - z, u - z)_{\Omega} + (\xi, -\Delta u - f)_{\Omega} + (\xi_b, u)_{\partial\Omega} + \xi_v \cdot (\text{Vol}(\Omega) - V_0) \\ &= \frac{1}{2} (u - z, u - z)_{\Omega} + (-\Delta \xi, u)_{\Omega} - \int_{\partial\Omega} \left(\xi \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial \xi}{\partial n} \right) ds \\ &\quad - (\xi, f)_{\Omega} + (\xi_b, u)_{\partial\Omega} + \xi_v \cdot (\text{Vol}(\Omega) - V_0) \end{aligned}$$

Die adjungierte Gleichung als partielle Ableitung in Richtung des Zustandes u verläuft dabei völlig analog zu Gleichung (2.18).

$$\begin{aligned} -\Delta \xi &= -(u - z) && \text{in } \Omega \\ \xi &= 0 && \text{auf } \partial\Omega \\ \xi_b &= -\frac{\partial \xi}{\partial n} && \text{auf } \partial\Omega \end{aligned} \quad (4.23)$$

Randdarstellung mit lokalen Ableitungen

Für die Design-Gleichung, d.h. den reduzierten Gradienten, ergibt sich nun jedoch mit Einsetzen der Bedingungen für die Adjungierte und den Zustand

$$dJ(\Omega)[V] = \frac{\partial \mathcal{L}(u, \Omega, \xi, \xi_b)}{\partial \Omega}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \left[\frac{1}{2}(u - z)^2 + \xi_v + \xi(-\Delta u - f) + \frac{\partial(\xi_b u)}{\partial n} + \kappa(\xi_b u) \right] dS \\
&= \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \left[\frac{1}{2}z^2 + \xi_v + \frac{\partial \xi_b}{\partial n} u + \frac{\partial u}{\partial n} \xi_b \right] dS
\end{aligned}$$

Es ergibt sich also zusammenfassend wenn Zustand und Adjungierte erfüllt sind

$$dJ(\Omega)[V] = \int_{\Gamma} \langle V, n \rangle \left[\frac{1}{2}z^2 + \xi_v - \frac{\partial u}{\partial n} \frac{\partial \xi}{\partial n} \right] dS, \quad (4.24)$$

wobei ξ_v eine reelle Zahl ist und die Projektionslänge auf die Volumen-Beschränkung darstellt. Da die Design-Gleichung jedoch nicht mehr linear in Ω bzw. in Γ ist, lässt sich nun jedoch keine Analogie zu dem linearen System (2.20) einfach hinschreiben.

Volumendarstellung mit Materialableitungen

Wir beginnen wieder mit der Lagrange-Funktion nach einmaliger partieller Integration:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(u, \Omega, \xi, \xi_b) &= \frac{1}{2}(u - z, u - z)_{\Omega} + (\nabla u, \nabla \xi)_{\Omega} - (Dun, \xi)_{\partial\Omega} \\
&\quad - (\xi, f)_{\Omega} + (\xi_b, u)_{\partial\Omega} + \xi_v \cdot (\text{Vol}(\Omega) - V_0).
\end{aligned}$$

Wir erhalten die Form-Richtungsableitung

$$\begin{aligned}
d\mathcal{L}(u, \Omega, \xi, \xi_b)[V] &= \int_{\Omega} (\text{div } V) \left(\frac{1}{2}\|u - z\|^2 + \langle \nabla u, \nabla \xi \rangle - \xi f + \xi_v \right) dx \\
&\quad + \int_{\partial\Omega} (\text{div}_{\Gamma} V) (\langle Dun, \xi \rangle + \langle \xi_b, u \rangle) \\
&\quad + \int_{\Omega} d \left(\frac{1}{2}\|u - z\|^2 + \langle \nabla u, \nabla \xi \rangle - \xi f + \xi_v \right) [V] dx \\
&\quad + \int_{\partial\Omega} d (\langle Dun, \xi \rangle + \langle \xi_b, u \rangle) [V] ds
\end{aligned} \quad (4.25)$$

Wir benutzen jetzt Lemma 4.23 und insbesondere Gleichung (4.14), um in den letzten beiden Summanden alle Materialableitungen nach innen zu ziehen (be-

achte: ξ_v ist reelle Zahl):

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} d \left(\frac{1}{2} \|u - z\|^2 + \langle \nabla u, \nabla \xi \rangle - \xi f + \xi_v \right) [V] \, dx \\
&= \int_{\Omega} (u - z)(du[V] - dz[V]) + \langle \nabla du[V], \nabla \xi \rangle + \langle \nabla u, \nabla d\xi[V] \rangle \\
&\quad - \langle \nabla u, (DV + DV^T) \nabla \xi \rangle - d\xi[V]f - \xi df[V] \, dx
\end{aligned} \tag{4.26}$$

und für die Rand-Terme:

$$\begin{aligned}
& \int_{\partial\Omega} d (\langle Dun, \xi \rangle + \langle \xi_b, u \rangle) [V] \, ds \\
&= \int_{\partial\Omega} \langle d(Dun)[V], \xi \rangle + \langle Dun, d\xi[V] \rangle + \langle d\xi_b[V], u \rangle + \langle \xi_b, du[V] \rangle \, ds
\end{aligned} \tag{4.27}$$

Wir beobachten: Alle Terme in (4.26) und (4.27) mit $d\xi[V]$ bilden wieder die Zustandsgleichung in schwacher Form, nur mit $d\xi[V]$ als Testfunktion. Analog liefern wieder alle Terme mit $a[V]$ die schwache Form der adjungierten Gleichung (4.23) mit $du[V]$ als Testfunktion und Wahl $\xi_b = 0$. Sind beide erfüllt bleibt für die Formableitung noch der Ausdruck

$$\begin{aligned}
d\mathcal{L}(u, \Omega, \xi, \xi_b)[V] &= \int_{\Omega} (\operatorname{div} V) \left(\frac{1}{2} \|u - z\|^2 + \xi_v \right) \, dx \\
&\quad + \int_{\Omega} -(u - z)dz[V] - \langle \nabla u, (DV + DV^T) \nabla \xi \rangle - \xi df[V] \, dx.
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Die Ausdrücke $dz[V]$ und $df[V]$ können aus den gegeben Daten berechnet werden. Es fällt auf, dass man durch einfaches Hinsehen kaum Ähnlichkeiten zwischen Gleichung (4.28) und Gleichung (4.24) erkennen kann.

Bemerkung 4.43 ((4.24) vs (4.28)). Beim direkten Vergleich von (4.24) mit (4.28) fällt auf, dass in der Formulierung (4.28) nicht die Spur von u und ξ am Rand benötigt wird. Außerdem wird auch nicht die Normale n gebraucht. Die Regularitätsvoraussetzungen in der Formulierung (4.28) sind also niedriger als die für (4.24) und insbesondere auch leichter zu implementieren, da keine Normale gebraucht wird, welche in Ecken von Dreiecksgittern schlecht zu berechnen ist.

Ein Nachteil von (4.28) ist jedoch, dass oft in der Numerik oft der Beitrag der Volumen-Knoten nicht wirklich zu Null auf integriert wird und dadurch das Gitter schnell an Qualität verliert. Oftmals implementiert man zwar (4.28), setzt danach aber manuell die Volumen-Beträge trotzdem noch auf Null.

Bemerkung 4.44 (Diskretisierung von Materialableitungen). Bei der Diskretisierung von Materialableitungen muss man ebenfalls sehr genau überlegen, wie die Simulationssoftware aufgebaut ist. In FEniCS z.B. macht es einen großen Unterschied, ob man Ausdrücke mit “SpatialCoordinates” direkt in die Form schreibt oder erst in einen FEM-Raum Projiziert. “Function”-Objekte in FEniCS sind eigentlich die Koeffizienten, mit denen die Ansatzfunktionen gewichtet werden. Modifiziert man das Gitter, so werden automatisch die Ansatzfunktionen automatisch mit geändert. Eine solche Funktion f ist also “an das Gitter geklebt” und damit gilt $0 = df[V] = f'[V] + DfV$ im diskreten, da die Funktion immer schon automatisch “mit transportiert” wird. Das unterschiedliche Verhalten ist in Abbildung 4.3 zu sehen. Falls f die Lösung einer PDE ist, gilt natürlich im Allgemeinen $df[V] \neq 0$.

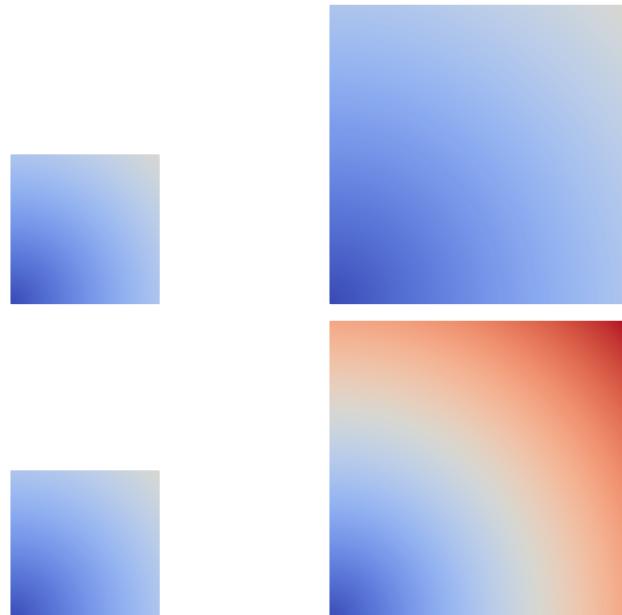


Abbildung 4.3: Die Funktion $f(x) = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$, einmal erst in den finite Element Raum projiziert (oben) und dann das Gebiet vergrößert und einmal ohne Projektion in den FEM-Raum (unten): Oben werden bei Gittervergrößerung die Werte “mitgenommen”, unten nicht.

4.5 Formableitungen höherer Ordnung

4.5.1 Randdarstellung

Richtungsableitungen höherer Ordnung sind nicht-triviale Objekte im Bereich der Formoptimierung. Generell besteht das Problem, dass ohne weiterführende Konzepte keine Symmetrie vorliegt, wie folgendes einfaches Beispiel zeigt. Wir betrachten wieder

$$J(\Omega) = \int_{\Omega} f(x) \, dx.$$

Dann ist die Formableitung durch

$$dJ(\Omega)[V] = \int_{\partial\Omega} \langle V, n \rangle f(s) \, ds = \int_{\Omega} \operatorname{div}(f(x)V(x)) \, dx = \int_{\Omega} g(x) \, dx$$

gegeben, mit $g(x) := \operatorname{div}(f(x)V(x))$. Auf diesem Term kann wieder die Volumen-Formulierung angewendet werden

$$d^2 J(\Omega)[V, W] = \int_{\partial\Omega} \langle W, n \rangle g(s) \, ds = \int_{\partial\Omega} \langle W, n \rangle \operatorname{div}(f(x)V(x)) \, ds$$

und es entsteht ein Ausdruck, welcher keine Symmetrie (Vertauschbarkeit von V und W) erwarten lässt. Wird angenommen, dass V und W "normal sind", also z.B. $V = \langle V, n \rangle n$, so erhält man

$$\langle W, n \rangle \operatorname{div}(fV) = \langle V, n \rangle \langle W, n \rangle \langle \nabla f, n \rangle + f \langle (DV)^T W, n \rangle + f \langle W, n \rangle \langle V, n \rangle \kappa.$$

Dabei wurde wieder ausgenutzt, dass $\nabla n \cdot n = (Dn)^T n = 0$ wie in Bemerkung 4.29. Damit kann der Ausdruck symmetrisiert werden, falls V und W als unabhängig voneinander betrachtet werden, in dem Sinne, dass

$$(DV)^T W = 0. \quad (4.29)$$

Dies wird oft auch als "Lie-Klammer" Bedingung in der Literatur [6] bezeichnet, da allgemein gilt

$$[V, W] := DV^T W - DW^T V.$$

In diesem Kontext bezeichnet die Lie-Klammer die Ableitung eines Vektor-Feldes V nach einem Vektorfeld W .

Man erhält dann den symmetrisierten Ausdruck

$$\begin{aligned} d^2 J_1(\Omega)[V, W] &= \int_{\partial\Omega} \langle W, n \rangle \langle V, n \rangle (\langle \nabla f, n \rangle + f \kappa) \, ds \\ &\quad + \int_{\partial\Omega} \langle W, n \rangle f'[V] + \langle V, n \rangle f'[W] \, ds + \int_{\Omega} f''[V, W] \, dx. \end{aligned} \tag{4.30}$$

Auch bei Randfunktionalen führt (4.29) zu symmetrischen Ausdrücken.

4.5.2 Volumendarstellung

Zweimaliges Anwenden der Volumen-Darstellung liefert sofort

$$d^2 J(\Omega)[V, W] = \int_{\Omega} f \operatorname{div} V \operatorname{div} W - \operatorname{tr}(D V D W) + d^2 f[V, W] \, dx, \tag{4.31}$$

wobei der Spur-Term $\operatorname{tr} D V D W$ symmetrisch unter Vertauschen von V und W ist. Eine Asymmetrie verbirgt sich höchstens im Ausdruck $d^2 f[V, W]$, diese verschwindet aber meistens, wenn man die Diskretisierung nach Bemerkung 4.44 berücksichtigt.

Ist damit die Berechnung der Formableitung in der Volumendarstellung generell einfacher? Es treten dennoch Schwierigkeiten auf: Ist das Problem hinreichend glatt, so gibt es ja dennoch eine Entsprechung zwischen Gleichung (4.30) und (4.31), d.h. der Ausdruck (4.31) hat eigentlich nur Träger am Rand. Bei naiiver Diskretisierung wird also die entstehende Hesse-Matrix immer einen sehr großen Rang-Defizit haben, wenn man nicht die Bewegungsfreiheitsgrade von V und W in Volumen entfernt.

5

Anwendungen

5.1 Fluid-Dynamik

Gegeben sei die Strömung eines Fluids, wie z.B. Wasser oder Luft. Wir betrachten eine feste Menge an Fluidteilchen, die wir im Folgenden als Teilchenpaket bezeichnen. Da sich das Teilchenpaket in der Strömung bewegt, hängt auch das von ihm bedeckte Volumen $\Omega(t)$ von der Zeit ab, welches eine weitere Anwendungsmöglichkeit für Shape Calculus liefert.

5.1.1 Massenerhaltung

Das Axiom der *Massenerhaltung* sagt aus, dass Masse weder verschwinden noch entstehen kann. Das bedeutet, dass sich die Masse des Teilchenpakets zeitlich nicht ändert. Es gilt also

$$M = \int_{\Omega(t)} \rho(t, x) \, dx = \text{konstant.} \Leftrightarrow \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho(t, x) \, dx = 0, \quad (5.1)$$

wobei $\rho(x, t)$ die Dichteverteilung des Fluids ist. Dieser Fall entspricht aber genau wieder unserer Formableitung für Volumen-Funktionale. Für den Fall der Massenerhaltung ergibt sich dann

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho(t, x) \, dx = \int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} \, dx + \int_{\partial\Omega} \rho \vec{u} \cdot \vec{n} \, dS. \quad (5.2)$$

Physikalisch entspricht das Oberflächenintegral dem Zu- bzw. Abfluss in Ω , da $\vec{u} \cdot \vec{n} \, dS = \vec{u} \cdot d\vec{S}$ den Volumenstrom aus Ω heraus darstellt, und $\rho \vec{u} \cdot \vec{n} \, dS$ deshalb den Massenstrom durch die Oberfläche $\partial\Omega$ von Ω modelliert, vgl. Abb 5.1.

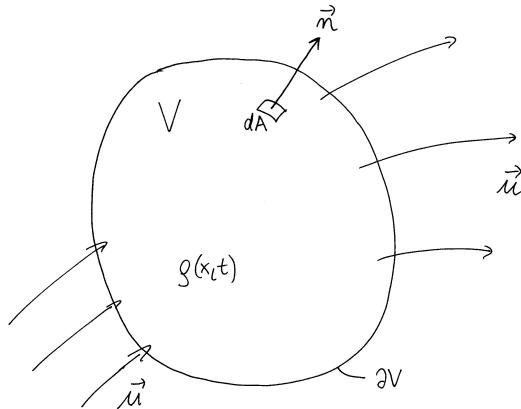


Abbildung 5.1: Massenstrom durch ein Testvolumen

Bemerkung 5.1 (Reynoldssches Transporttheorem). Die Formableitung für Volumenintegrale, Lemma 4.16, wird im Kontext der Fluid-Mechanik auch als Reynolds' Transporttheorem bezeichnet und es gilt wieder

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho(x, t) dx = \int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} dx + \int_{\partial\Omega} \rho \langle \vec{u}, \vec{n} \rangle dS,$$

wobei \vec{u} die Geschwindigkeit des Fluids ist.

Insgesamt ergibt sich aus der Massenerhaltung also

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} dx + \int_{\partial\Omega} \rho \langle \vec{u}, \vec{n} \rangle dS = 0. \quad (5.3)$$

Diese Gleichung bedeutet anschaulich, dass Zu- und Abfluß in bzw. aus dem Volumen V und die Dichteänderung in V gerade im Gleichgewicht sind. Dieses entspricht auch unserer täglichen Erfahrung, was sehr deutlich im Fall von inkompressiblen Strömungen wird, d.h. bei Strömungen von Fluiden deren Dichte konstant ist, wie z.B. Wasser. Dann vereinfacht sich (5.3) zu

$$\int_{\partial\Omega} \rho \langle \vec{u}, \vec{n} \rangle dS = 0,$$

was nichts anderes bedeutet, als dass alles, was in Ω hineinströmt, auch wieder hinausströmen muss, was sehr anschaulich bei einer einfachen Rohrströmung klar wird (vgl. Übung).

Das Divergenz-Theorem (oder die Volumen-Darstellung des Shape Derivatives) liefert weiter:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u}) \right) dx = 0, \quad (5.4)$$

woraus sich die Darstellung der *Massenerhaltungs- oder Kontinuitätsgleichung* als partielle Differentialgleichung ablesen lässt:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u}) = 0. \quad (5.5)$$

5.1.2 Impulserhaltung

Der Impuls eines starren Festkörpers ist bekanntermaßen durch das Produkt aus dessen Masse und Geschwindigkeit gegeben. Analog dazu ist der Impuls eines Teilchenpakets in einer Strömung gegeben durch

$$\vec{I} = \int_{\Omega(t)} \rho(x, t) \vec{u}(x, t) dx \quad (5.6)$$

gegeben, wobei $\Omega(t)$ wieder das mit dem Teilchenpaket mitbewegte Volumen bezeichnet.¹ Nach dem *ersten Newtonschen Axiom* ist die Änderung des Impulses eines Körpers – in unserem Fall des Teilchenpaketes – gleich der auf diesen Körper wirkenden Kraft \vec{F} :

$$\frac{d}{dt} \vec{I} = \vec{F}. \quad (5.7)$$

Mit Formdifferentiation folgt wieder für die linke Seite mit $i = 1, 2, 3$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} I_i &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho u_i dx \\ &= \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) dx + \int_{\partial\Omega} \rho u_i \vec{u} \cdot \vec{n} dS \\ &= \int_{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \operatorname{div}(\rho u_i \vec{u}) \right] dx. \end{aligned}$$

Es gilt also für die linke Seite:

$$\frac{d}{dt} I_i = \int_{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \operatorname{div}(\rho u_i \vec{u}) \right] dx$$

¹Das Integral in der Formel ist komponentenweise zu verstehen.

Wenn man möchte, kann man in diesen Ausdruck noch die Impluserhaltung einsetzen. Dann muss man sich aber vergewissern, dass diese auch wirklich gelöst wird:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} I_i &= \int_{\Omega} \left[\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial t} + u_i \sum_j \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} + \rho \sum_j u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] dx \\ &= \int_{\Omega} \underbrace{\left[u_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} \right) + \rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + \sum_j u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right]}_{=0} dx \\ &= \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla u_i \right) dx,\end{aligned}$$

wobei wir die Kontinuitätsgleichung (5.5) ausgenutzt haben.

Wir betrachten jetzt die rechte Seite, also die Kräfte \vec{F} . Die auf unser Teilchenpaket wirkende Kraft \vec{F} setzt sich aus zwei Komponenten zusammen:

- *Volumenkräften*, die in jedem Punkt des betrachteten Volumens wirken, wie beispielsweise die Erdanziehungskraft oder elektromagnetische Kraftfelder bei elektrisch leitenden Strömungen
- *Oberflächen- oder Kontaktkräften*, die nur an der Oberfläche des Volumens wirken und durch die durch Reibung bedingte Wechselwirkung des Teilchenpaketes mit dem umgebenden Fluid entstehen.

Im Fall der Volumenkräfte beschränken wir uns auf die Erdanziehungskraft. Wie bei einem starren Festkörper ist sie durch das Produkt aus Masse und Erdbeschleunigung gegeben, also

$$\vec{F}_{\Omega} = \int_{\Omega} \rho \vec{g} dx, \quad (5.8)$$

wobei \vec{g} die Erdbeschleunigung bezeichnet. Die Oberflächenkraft ergibt sich als Integral über den Spannungsvektor

$$\vec{F}_{\partial\Omega} = \int_{\partial\Omega} \vec{t} dA. \quad (5.9)$$

Der Spannungsvektor gibt an, welche Kraft pro Flächeneinheit das umgebende Fluid auf unser Teilchenpaket ausübt. Er lässt sich in drei Komponenten zerlegen, eine Druckspannung senkrecht zur Oberfläche und zwei Schubspannungen

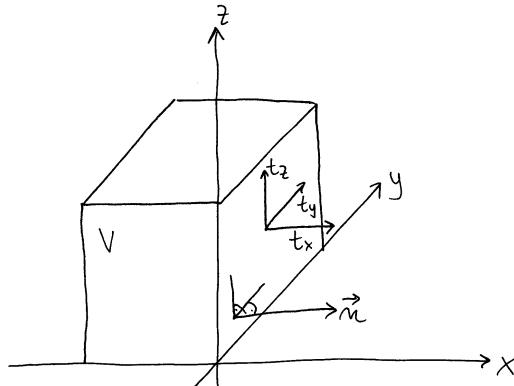


Abbildung 5.2: Der Spannungsvektor

tangential dazu (s. Abb. 5.2) und ergibt sich aus dem symmetrischen *Spannungstensor*² über

$$\vec{t} = \tau \cdot \vec{n} = \left(\sum_{j=1}^3 \tau_{ij} n_j \right)_{i=1}^3. \quad (5.10)$$

Insgesamt folgt damit aus (5.6)–(5.9), dass für $i = 1, 2, 3$ gilt

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla u_i \right) dx &= \int_{\Omega} \rho g_i dx + \int_{\partial\Omega} t_i dA \\ &= \int_{\Omega} \rho g_i dx + \int_{\partial\Omega} \sum_j \tau_{ij} n_j dA \\ &= \int_{\Omega} \rho g_i dx + \int_{\Omega} \sum_j \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} dx, \end{aligned}$$

Es gilt demnach (Impulserhaltung eingesetzt)

$$\int_{\Omega} \left[\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla u_i \right) - \rho g_i - \sum_j \frac{\tau_{ij}}{\partial x_j} \right] dx = 0 \quad \text{für } i = 1, 2, 3.$$

oder (Impulserhaltung nicht eingesetzt)

$$\int_{\Omega} \left[\left(\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u_i \vec{u}) \right) - \rho g_i - \sum_j \frac{\tau_{ij}}{\partial x_j} \right] dx = 0 \quad \text{für } i = 1, 2, 3.$$

²Die Symmetrie von τ kann aus der Drehimpulserhaltung gefolgert werden.

Wie bei der Herleitung der Kontinuitätsgleichung war das betrachtete Teilchenpaket beliebig, so dass die obige Gleichung für jedes Testvolumen Ω gelten muss, was nur erfüllt sein kann, wenn der Integrand verschwindet:

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla u_i \right) = \rho g_i + \sum_j \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad \text{für } i = 1, 2, 3$$

oder in symbolischer Schreibweise:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) = \rho \vec{g} + \operatorname{div} \tau. \quad (5.11)$$

Hierbei bezeichnet $\nabla \vec{u}$ die Transponierte der Jacobi-Matrix von \vec{u} , und die einfache Überschiebung $\vec{u} \cdot \nabla \vec{u}$ ist definiert durch

$$\vec{u} \cdot \nabla \vec{u} := \left(\sum_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} u_j \right)_i = (\nabla \vec{u})^T \vec{u}.$$

Des Weiteren ist $\operatorname{div} \tau := (\sum_j \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j})_i$ die tensorielle Divergenz. Die PDE (5.11) heißt *Impulsbilanz* und stellt das erste Newtonsche Axiom im Fall strömender Fluide in Eulerschen bwz. ortsfesten Koordinaten dar.

Um mit der Kontinuitätsgleichungen ein geschlossenes Gleichungssystem für die Unbekannten ρ und \vec{u} zu erhalten, muss der Spannungstensor als Funktion dieser Unbekannten ausgedrückt werden. Dies geschieht mit Hilfe so genannter *Materialgleichungen*, also Gleichungen, die im Rahmen der Kontinuumsphysik nicht allgemein gültig sind, sondern nur für spezielle Materialien gelten und daher meistens auch noch experimentell zu ermittelnde Materialparameter enthalten. Das weitaus wichtigste Materialgesetz zur Beschreibung des Spannungstensors in Fluiden ist das *Cauchy-Poisson-Gesetz* für *Newtonsche Fluide*:

$$\tau_{ij} = -p \delta_{ij} + \xi \sum_k \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + 2 \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{für } i, j = 1, 2, 3 \quad (5.12)$$

mit

$$\delta_{ij} := \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Des Weiteren bezeichnet die skalare Größe p den Druck im Fluid. Er ist eine weitere unbekannte Feldgröße des Fluids, für die ebenfalls ein Materialgesetz benötigt wird. Man erkennt an (5.12), dass der Druck die Wechselwirkungen zwischen Fluidteilchen im hydrostatischen Fall, d.h., wenn $\vec{u}(x, t) \equiv 0$, vollständig beschreibt. Dann gilt $\tau_{ij} = -p \delta_{ij}$ und für den Spannungsvektor gilt nach (5.10),

dass $\vec{t} = -p \vec{n}$, so dass die Oberflächenspannungen und -kräfte im Fluid senkrecht auf den Testvolumina stehen, vgl. Abb 5.2. Es handelt sich demnach um reine Druckkräfte und alle Schub- bzw. Scherkräfte entfallen im hydrostatischen Fall. Darüber hinaus sind ξ und η materialabhängige Zähigkeiten, die ihrerseits wieder Funktionen von Druck und Temperatur des Fluids sein können. Durch das Materialgesetz (5.12) wird eine große Zahl technisch relevanter Fluide sehr gut beschrieben, wie beispielsweise Luft, Wasser oder auch Mineralöle. Es gibt allerdings auch Fluide deren Verhalten sich nicht durch (5.12) beschreiben lässt, wie z.B. Blut, Ketchup, Zahnpasta oder Oobleck (mit Wasser vermischt Maisstärke, besonders leicht selber herzustellen).

Wir nehmen nun an, dass ξ und η konstant sind. Dann ergibt sich durch Umbenennung der Summationsindizes und Vertauschung der Differentiationsreihenfolge

$$\begin{aligned}\sum_j \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} &= -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \xi \left(\sum_k \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_k \partial x_i} \right) + \eta \left(\sum_j \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + \sum_j \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_j} \right) \\ &= -\frac{\partial p}{\partial x_i} + (\xi + \eta) \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_j \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) + \eta \sum_j \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2}.\end{aligned}$$

Setzt man dies unter Benutzung des *Vektor-Laplace* $\Delta \vec{u} := (\sum_j \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2})_i$ in (5.11) ein, dann erhält man die (*kompressiblen*) *Navier-Stokes-Gleichungen*

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) = \rho \vec{g} - \nabla p + (\xi + \eta) \nabla (\operatorname{div} \vec{u}) + \eta \Delta \vec{u} \quad (5.13a)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \vec{u}) = 0, \quad (5.13b)$$

wobei die zweite Gleichung gerade die Kontinumsgleichung (5.5) ist. Um daraus ein geschlossenes Gleichungssystem zu erhalten, muss man noch ein Materialgesetz für die Beziehung zwischen Druck p und Dichte ρ angeben. Der einfachste Ansatz hierfür ist der eines inkompressiblen Fluids, bei dem $\rho(x, t) = \text{konst.}$ gilt. Dann folgt aus (5.13b), dass $\operatorname{div} \vec{u} = 0$, und die kompressiblen Navier–Stokes Gleichungen vereinfachen sich zu den inkompressiblen Navier–Stokes Gleichungen. Für ein Gebiet Ω als Strömungskanal wie in Abbildung 5.3 ergibt sich damit:

Definition 5.2 (Inkompressible Navier–Stokes Gleichungen). Die inkompressi-

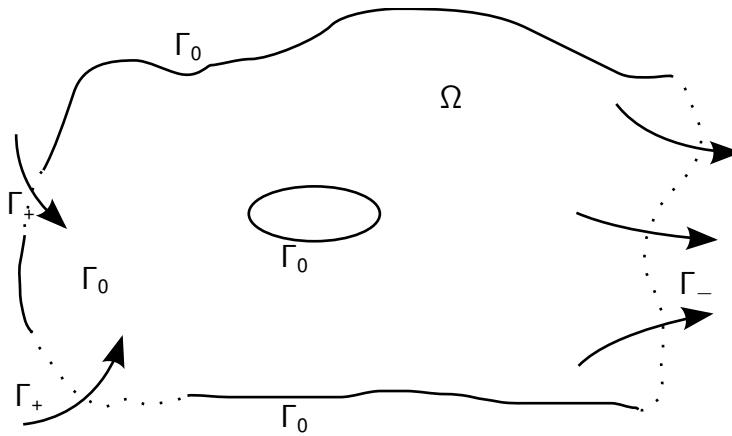


Abbildung 5.3: Ein möglicher Strömungskanal.

blen Navier–Stokes Gleichungen für ein newtonisches Fluid sind durch

$$\begin{aligned}
 & \rho \frac{\partial}{\partial t} u_i - \eta \Delta u_i + \rho u \nabla u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} p = \rho g_i \quad \text{in } \Omega \quad \forall i = 1, 2, 3 \\
 & \operatorname{div} u = 0 \\
 & u = u_+ \quad \text{auf } \Gamma_+ \\
 & p n - \eta \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad \text{auf } \Gamma_-
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

gegeben. Hierbei beschreibt $u = (u_1, u_2, u_3)^T$ den Geschwindigkeitsvektor des Fluides und p als skalare Größe den Druck. Die Dichte ρ wird als konstant sowohl in der Zeit als auch im Ort angenommen. Die Viskosität des Fluides wird durch η beschrieben. Die rechte Seite g stellt den Gravitationsvektor dar. Oft ist man nur am stationären Strömungszustand interessiert, d.h. die Strömung $(u, p)^T$ soll konstant in der Zeit sein. Damit erhält man die stationäre inkompressible Navier–Stokes Gleichung, welche in Vektorschreibweise durch

$$\begin{aligned}
 & -\eta \Delta u + \rho u \nabla u + \nabla p = \rho g \quad \text{in } \Omega \\
 & \operatorname{div} u = 0 \\
 & u = u_+ \quad \text{auf } \Gamma_+ \cup \Gamma_0 \\
 & p n - \eta \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad \text{auf } \Gamma_-
 \end{aligned} \tag{5.15}$$

gegeben ist. Im Folgen wird nicht mehr zwischen Γ_+ und Γ_0 differenziert, da beide Ränder sich durch die Wahl von $\vec{u}_+ = \vec{0}$ zusammenfassen lassen.

Je geringer die Viskosität des Fluides ist, also je kleiner η , desto stärker fällt der nicht-lineare Konvektiv-Term $u \nabla u$ ins Gewicht. In der Natur bedeutet dies

im Endeffekt das Auftreten von Turbulenz. Für sehr hohe Viskositäten wird deswegen die Gleichung oft durch Wegfallen des Konvektiv-Terms linearisiert und man erhält die sog. Stokes Gleichung. Sie wird z.b. bei der Untersuchung der Plattentektonik oder bei Gletscherbewegungen angewendet.

Definition 5.3 (Stokes Gleichung). Wird die inkompressible Navier–Stokes Gleichung durch entfernen des Konvektiv-Terms linearisiert, so spricht man von der Stokes Gleichung

$$\begin{aligned}
 -\eta \Delta u + \nabla p &= \rho g \quad \text{in } \Omega \\
 \operatorname{div} u &= 0 \\
 u &= u_+ \quad \text{auf } \Gamma_+ \\
 u &= 0 \quad \text{auf } \Gamma_0 \\
 p n - \eta \frac{\partial u}{\partial n} &= 0 \quad \text{auf } \Gamma_-.
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

Beispiel 5.4. Durch den nicht-linearen Konvektiv-Term in der Navier–Stokes Gleichung entstehen Grenzschichten und Turbulenz. Vergleiche auch die unterschiedlichen Strömungsbilder in Abbildung 5.4, 5.5 und 5.6.

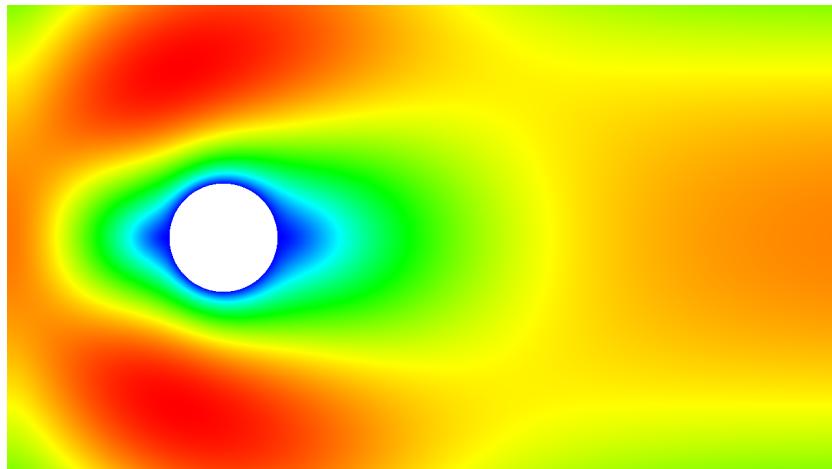


Abbildung 5.4: Umströmung eines Kreises entsprechend der Stokes Gleichung.

5.1.3 Energieerhaltung

Die Energie eines strömenden Fluids setzt sich aus zwei Bestandteilen zusammen, der *inneren Energie* E und der *kinetischen Energie* K . Die innere Energie

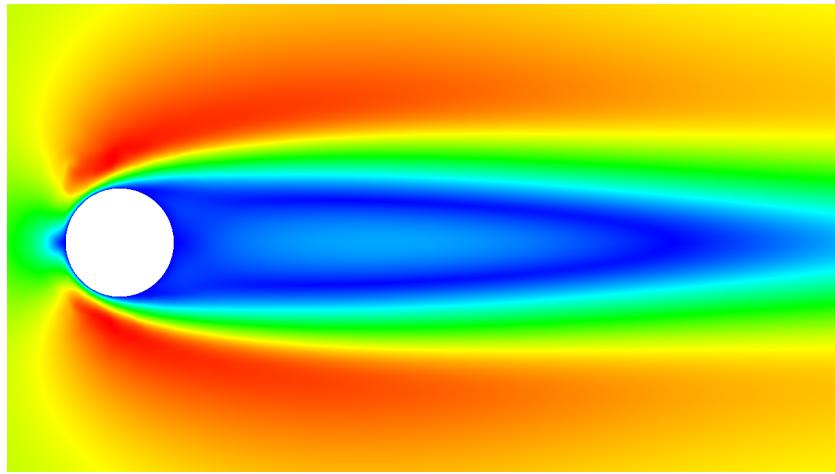


Abbildung 5.5: Umströmung eines Kreises entsprechend der Navier–Stokes Gleichung. Viskosität $\eta = \frac{1}{80}$

ist auf molekulare Bewegung im Fluid zurückzuführen, was im Rahmen der Kontinuumsphysik nicht explizit modelliert wird. Stattdessen führen wir eine innere Energie pro Masseneinheit e als neue unbekannte Feldgröße ein, aus der sich die innere Energie des betrachteten Teilchenpakets analog zu Masse und Impuls durch

$$E = \int_{\Omega(t)} e \rho dx$$

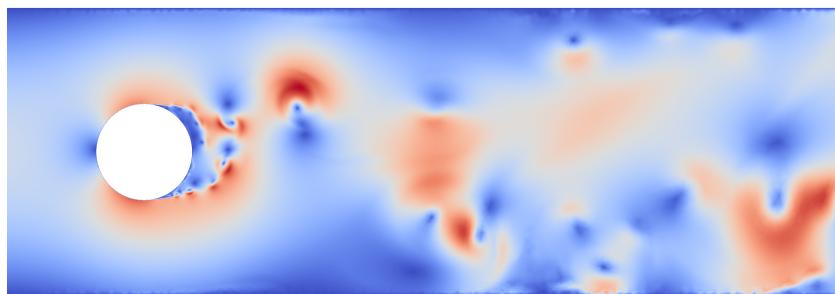


Abbildung 5.6: Der selbe Sachverhalt, aber mit $\eta = 10^{-5}$. Eine stationäre Lösung ist nicht mehr möglich.

ergibt. Analog zum starren Festkörper ist die kinetische Energie des Teilchenpaket durch

$$K = \frac{1}{2} \int_{\Omega(t)} \rho |\vec{u}|^2 dx$$

gegeben, wobei $|\cdot|$ die euklidische Norm im \mathbb{R}^3 bezeichnet.

Nach dem *Energieerhaltungssatz der klassischen Mechanik*³ ergibt sich die zeitliche Änderung der Gesamtenergie eines Körpers durch die Leistung der am Körper angreifenden Kräfte plus der zugeführten Wärmemenge, in Formeln:

$$\frac{d}{dt}(K + E) = P + \dot{Q}, \quad (5.17)$$

wobei P die Leistung der angreifenden Kräfte und \dot{Q} die zugeführte Wärmemenge bezeichnen. Die Leistung die eine Kraft auf einen Massepunkt ausübt ist durch das Produkt aus den Beträgen dieser Kraft und der Geschwindigkeit in Richtung dieser Kraft gegeben. Für unser Teilchenpaket folgt daher mit Hilfe des Satzes von Gauß:

$$\begin{aligned} P &= \int_{\Omega} \rho \sum_i u_i g_i dx + \int_{\partial\Omega} \sum_i u_i t_i dS \\ &= \int_{\Omega} \rho \sum_i u_i g_i dx + \int_{\partial\Omega} \sum_i u_i \sum_j \tau_{ij} n_j dS \\ &= \int_{\Omega} \rho \sum_i u_i g_i dx + \int_{\Omega} \sum_{ij} \frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j} dS \\ &= \int_{\Omega} (\rho \vec{u} \cdot \vec{g} + \operatorname{div}(\vec{u} \cdot \tau)) dx. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Die zugeführte Wärmemenge wiederum ergibt sich aus dem Wärmestrom \vec{q} in das Volumen V hinein, das das Teilchenpaket zum Zeitpunkt t einnimmt:⁴

$$\dot{Q} = - \int_{\partial\Omega} \vec{q} \cdot \vec{n} dS = - \int_{\Omega} \operatorname{div} \vec{q} dx. \quad (5.19)$$

Da die im Teilchenpaket gespeicherte Energie zunimmt, falls der Wärmestrom in das Gebiet Ω hinein und damit entgegen der äußeren Normalen \vec{n} gerichtet ist, geht das obige Integral mit negativem Vorzeichen in die Energiebilanz ein.

³Spezialfall des *ersten Hauptsatzes der Thermodynamik*

⁴Der Wärmestrom tangential zur Oberfläche von V spielt dabei keine Rolle, er tritt ja nicht in das Volumen ein. Daher die Multiplikation mit \vec{n} .

Darüber hinaus haben wir mit dem gleichen Argument wie im Fall von (5.8) auch in (5.18) und (5.19) das zeitabhängige Gebiet $\Omega(t)$ durch Ω ersetzt. Für die linke Seite in (5.17) liefern das Reynolds'sche Transporttheorem, der Satz von Gauß und die Kontinuitätsgleichung völlig analog (mit $|\vec{u}|^2 + e$ anstelle von u_i)

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(K + E) &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho \left(\frac{|\vec{u}|^2}{2} + e \right) dx \\ &= \int_{\Omega} \rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{|\vec{u}|^2}{2} + e \right) + \vec{u} \cdot \nabla \left(\frac{|\vec{u}|^2}{2} + e \right) \right] dx.\end{aligned}$$

Setzt man diese Gleichung zusammen mit (5.18) und (5.19) in (5.17) ein, so erhält man die Energiebilanz in integraler Form:

$$\int_{\Omega} \rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{|\vec{u}|^2}{2} + e \right) + \vec{u} \cdot \nabla \left(\frac{|\vec{u}|^2}{2} + e \right) \right] dx = \int_{\Omega} \left(\rho \vec{u} \cdot \vec{g} + \operatorname{div}(\vec{u} \cdot \tau) - \operatorname{div} \vec{q} \right) dx.$$

Auch diese Gleichung gilt wieder für beliebige Teilchenpakete, also für beliebige Volumina, woraus die *Energiebilanz* in differentieller Form folgt:

$$\rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{|\vec{u}|^2}{2} + e \right) + \vec{u} \cdot \nabla \left(\frac{|\vec{u}|^2}{2} + e \right) \right] = \rho \vec{u} \cdot \vec{g} + \operatorname{div}(\vec{u} \cdot \tau) - \operatorname{div} \vec{q}. \quad (5.20)$$

Um zusammen mit Kontinuitätsgleichung und Impulsbilanz ein geschlossenes Gleichungssystem zu erhalten ist neben dem Materialgesetz für τ ein weiteres für den Wärmestrom notwendig. Oft findet hier das Fourier-Gesetz Anwendung

$$\vec{q} = c \nabla e.$$

5.1.4 Entdimensionalisierung und Maßstabsrechnung

Wir betrachten die inkompressible Navier–Stokes Gleichung als den prototypischen Fall. Unsere bisherige Darstellung der Gleichung aus Definition 5.2 ist dabei mit physikalischen Maßeinheiten behaftet: Wenn das Gebiet Ω in Metern angegeben ist, dann ist die Geschwindigkeit u in m/s , der Druck in $N/m^2 = Pa$ und die (dynamische) Viskosität η in $kg/(ms) = Pa \cdot s$. Letzterer ist ein tabellierter Wert und kann nachgeschlagen werden und Ω als Geometrie des Problems ist vorgeben.

Unterschiedliche Skalen machen es also zunächst schwer, die Strömung in unterschiedlichen Sachverhalten wie z.B. Schiff- oder Flugzeugmodell im Experiment mit dem realen Objekt zu vergleichen. Um Vergleichbarkeit herzustellen,

werden die Gleichungen oft “entdimensionalisiert”: Man ersetzt

$$\tilde{u} := \frac{u}{U}, \quad \tilde{p} := \frac{p}{\rho U^2}, \quad \tilde{f} := f \frac{L}{U^2}$$

und benutzt neue Ableitungsoperatoren

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} := \frac{L}{U} \frac{\partial}{\partial t}, \quad \tilde{\nabla} := L \nabla$$

Dabei ist U eine Vorgegebene Referenzgeschwindigkeit (meist $\|u_+\|$ die Einströmgeschwindigkeit) und L die Referenzlänge (meist die Spannweite, der Rohrdurchmesser oder die Schiffsrumplänge). Setzt man diese Größen in die Navier–Stokes Gleichung ein, so ergibt sich ein neuer Viskositätsparameter

$$\frac{1}{Re} := \tilde{\eta} := \frac{1}{\rho UL} \eta,$$

wobei Re die Reynolds Zahl ist. Damit ergibt sich die entdimensionale Impulsgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{1}{Re} \Delta u + u \nabla u + \nabla p = f.$$

Damit lassen sich Modelle für Versuche (oder Filmaufnahmen) benutzen, so lange das Experiment so gestaltet ist, dass die Reynolds Zahl mit der tatsächlichen Anwendung übereinstimmt. Für den kompressiblen Fall gibt es weitere Kennzahlen wie z.B. die Prandtl Zahl Pr .

5.2 Formoptimierung und Fluide

5.2.1 Ableitungen erster Ordnung

Nachdem wir gesehen haben, wie die Volumen-Darstellung der Formableitung in Form des Reynolds’ Transport Theorem die typische Darstellung von Erhaltungsgleichungen liefert, formulieren wir darauf aufbauend jetzt weitere Formoptimierungsprobleme um möglichst reibungsarme Körper zu finden. Diese Probleme sind somit prototypisch für Anwendungen in der Aerodynamic, im Schiffsbau oder auch in der Medizin.

Lemma 5.5 (Energie-Dissipation). Es löse (\vec{u}, p) die inkompressiblen Navier–Stokes Gleichungen 5.2 in einem geschlossenen Gebiet mit $u = 0$ auf ganz

$\partial\Omega$ ohne Schwerkraft, d.h. $\vec{g} \equiv 0$. Dann ist die totale kinetische Energie E des Fluids zum Zeitpunkt t gegeben durch

$$E(t) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho |\vec{u}(\vec{x}, t)|^2 \, dx.$$

Außerdem gilt

$$\frac{dE(t)}{dt} = - \int_{\Omega} \eta \|\nabla \vec{u}\|^2 \, dx = - \int_{\Omega} \eta \sum_{i,j=1}^d \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)^2 \, dx \leq 0. \quad (5.21)$$

Die kinetische Energie ist also in der Zeit nur abnehmend, proportional zur inneren Reibung η . Im Kontext der Wärmeleitung wird Gleichung (5.21) auch als “Dirichlet-Energie” bezeichnet.

Beweis. Übung □

Definition 5.6 (Navier–Stokes Formoptimierungsproblem). Wir betrachten das Problem einen Körper mit einer Form zu finden, dass die Geschwindigkeit der Umwandlung von kinetischer Energie des Fluides in Wärme minimal wird. Dazu benutzen wir die Dissipationsrate aus Definition 5.5 aber nehmen an, dass sich das Störungsfeld zeitlich nicht mehr ändert. Insgesamt ergibt sich folgendes Problem:

$$\min_{(u,\Omega)} J(u, p, \Omega) := \int_{\Omega} \eta \sum_{i,j=1}^d \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)^2 \, dA \quad (5.22)$$

unter

$$\begin{aligned} -\eta \Delta u + \rho u \nabla u + \nabla p &= 0 \quad \text{in } \Omega \\ \operatorname{div} u &= 0 \\ u &= u_+ \quad \text{auf } \Gamma_+ \\ pn - \eta \frac{\partial u}{\partial n} &= 0 \quad \text{auf } \Gamma_- \\ \operatorname{Vol}(\Omega) &= V_0. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Das Gebiet Ω ist in Abbildung 5.3 dargestellt.

Im Folgenden betrachten wir das Problem ohne die Volumenbeschränkung. Damit Vorzeichenfehler weniger leicht passieren definieren wir die Lagrange-Funktion dieses mal mit “+”, welches aber auf Grund der rechten Seite 0 kein

Problem darstellt. Die Lagrange-Funktion lautet dann

$$\begin{aligned}\mathcal{L} = & \int_{\Omega} \eta \|\nabla u\|^2 \, dx + \int_{\Omega} \xi (-\eta \Delta u + \rho u \nabla u + \nabla p) \, dx + \int_{\Omega} \xi_p \operatorname{div} u \, dx \\ & + \int_{\Gamma_+} \xi_+ (u - u_+) \, ds + \int_{\Gamma_-} \xi_- \cdot \left(-\eta \frac{\partial u}{\partial n} + p n \right) \, ds\end{aligned}\quad (5.24)$$

Lemma 5.7 (Adjungierte Navier–Stokes Gleichung). Die formale adjungierte Gleichung für Problem 5.6 lautet mit der Konvention $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_d)$:

$$\begin{aligned}-\eta \Delta \xi_i + \rho \sum_{j=1}^d \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \xi_j - \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} u_j \right) - \frac{\partial \xi_p}{\partial x_i} &= 2\eta \Delta u_i \quad \text{in } \Omega \\ \operatorname{div} \xi &= 0 \\ \xi &= 0 \quad \text{auf } \Gamma_+ \\ -\eta \frac{\partial \xi}{\partial n} - \rho \langle u, n \rangle - \xi_p &= 2\eta \frac{\partial u}{\partial n} \quad \text{auf } \Gamma_-\end{aligned}\quad (5.25)$$

Beweis. Eine formale Differentiation der Lagrange-Funktion (5.24) liefert

$$\begin{aligned}D_{(u,p)} \mathcal{L}(u, p, \Omega) \cdot (u', p') &= \int_{\Omega} 2\eta \left(\sum_{i,j=1}^d \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) \, dA \\ &\quad + \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \xi_i \left[-\eta \Delta u'_i + \rho \left(\sum_{j=1}^d u'_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + u_i \frac{\partial u'_j}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right] \, dA \\ &\quad + \int_{\Omega} \xi_p \operatorname{div} u' \, dA + \int_{\Gamma_+} \xi_+ u' \, ds + \int_{\Gamma_-} \xi_- \left(-\eta \frac{\partial u'}{\partial n} + p' n \right) \, ds\end{aligned}\quad (5.26)$$

Wir betrachten die Terme jeweils einzeln. Für die Zielfunktion ergibt sich

$$\int_{\Omega} 2\eta \left(\sum_{i,j=1}^d \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) \, dA = 2\eta \sum_{i=1}^d \left[- \int_{\Omega} (\Delta u_i) u'_i \, dA + \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\partial u_i}{\partial n} \right) u'_i \, dS \right].$$

sowie für die zweiten Zeile:

$$\int_{\Omega} \sum_{i=1}^d -\eta \xi_i \Delta u'_i \, dA = \int_{\partial\Omega} \sum_{i=1}^d -\eta \left(\xi_i \frac{\partial u'_i}{\partial n} - u'_i \frac{\partial \xi_i}{\partial n} \right) \, dS + \int_{\Omega} \sum_{i=1}^d -\eta u'_i \Delta \xi_i \, dA$$

und mit der Divergenzfreiheit von u ergibt sich

$$\int_{\Omega} \rho \sum_{i,j=1}^d \xi_i u_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} dA = \int_{\partial\Omega} \rho \sum_{i,j=1}^d \xi_i u_j u'_i n_j dS - \int_{\Omega} \rho \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} u_j u'_i dA,$$

wobei sich der zweite Teil des mittleren Terms (ohne Ableitungen auf ξ_j) durch Kommutativität direkt auf die gewünschte Form bringen lässt. Die Variation im Druck p' liefert dann noch

$$\int_{\Omega} \sum_{i=1}^d \xi_i \frac{\partial p'}{\partial x_i} dA = \int_{\partial\Omega} \sum_{i=1}^d \xi_i n_i p' dS - \int_{\Omega} \sum_{i=1}^d \frac{\partial \xi_i}{\partial x_i} p' dA$$

und ein analoger Ausdruck mit ξ_p entsteht nochmals aus der Bedingung $-\operatorname{div} u = 0$. Die adjungierte Gleichung im Volumen kann direkt abgelesen werden.

Wir sammeln alle Randterme:

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma_+} \left\langle \xi_+ + 2\eta \frac{\partial u}{\partial n} + \eta \frac{\partial \xi}{\partial n} + \rho \langle u, n \rangle \xi + \xi_p n, u' \right\rangle + \left\langle \xi, -\eta \frac{\partial u'}{\partial n} + p' n \right\rangle dS \\ & + \int_{\Gamma_-} \left\langle \xi + \xi_-, -\eta \frac{\partial u'}{\partial n} + p' n \right\rangle + \left\langle 2\eta \frac{\partial u}{\partial n} + \eta \frac{\partial \xi}{\partial n} + \rho \langle u, n \rangle \xi + \xi_p n, u' \right\rangle dS, \end{aligned}$$

wobei der ξ_p Randterm aus der oben nicht behandelten Divergenzfreiheit stammt. Wir betrachten zunächst Γ_+ und sehen, dass auf Grund der $\frac{\partial u'}{\partial n}$ und p' Störung $\xi = 0$ gelten muss. Damit verschwindet das gesamte Integral über Γ_+ , falls wir dort setzen:

$$\begin{aligned} \xi &= 0 \\ \xi_+ &= -\eta \frac{\partial \xi}{\partial n} - 2\eta \frac{\partial u}{\partial n} - \xi_p n \end{aligned} \tag{5.27}$$

Analog ergibt sich für Γ_-

$$\xi_- = -\xi, \quad \eta \frac{\partial \xi}{\partial n} + \rho \langle u, n \rangle \xi + \xi_p n = -2\eta \frac{\partial u}{\partial n}.$$

□

Lemma 5.8 (Navier–Stokes Formableitung). Es sei Γ_0 der Teil von Γ_+ , auf dem $u_+ = 0$ gilt. Die formale Formableitung für das Navier–Stokes Problem 5.6 für eine Verschiebung von Γ_0 ist dann gegeben durch

$$dJ(u, p, \Omega)[V] = \int_{\Gamma_0} -\langle V, n \rangle \eta \sum_{i=1}^d \left[\frac{\partial \xi_i}{\partial n} \frac{\partial u_i}{\partial n} + \left(\frac{\partial u_i}{\partial n} \right)^2 \right] ds. \tag{5.28}$$

Dabei ist ξ die Lösung des adjungierten Problems wie in Lemma 5.7.

Beweis. Eine formale Form-Differentiation der Lagrange-Funktion (5.24) liefert

$$\begin{aligned} dJ[V] = & \int_{\Gamma_0} \langle V, n \rangle \eta \|\nabla u\|^2 \, ds + \int_{\Gamma_0} \langle V, n \rangle \xi (-\eta \Delta u + \rho u \nabla u + \nabla p) \, dx \\ & + \int_{\Gamma_0} \langle V, n \rangle \xi_p \operatorname{div} u \, dx + \int_{\Gamma_0} \langle V, n \rangle \left[\frac{\partial(\xi_+(u - u_+))}{\partial n} + \kappa(\xi_+(u - u_+)) \right] \, ds, \end{aligned}$$

da Γ_- und Γ_+ konstant sind und sich nur Γ_0 ändert. Einsetzen von $\xi = 0$, $u_+ \equiv 0$ und $u = u_+$ liefert

$$dJ[V] = \int_{\Gamma_0} \langle V, n \rangle \left[\left(\sum_{i=1}^d \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial n} \right)^2 \right) + \xi_p \operatorname{div} u + \xi_+ \frac{\partial u}{\partial n} \right] \, ds,$$

da $u = 0$ auf Γ_0 folgt, dass für Tangente τ_i gilt $\langle \nabla u, \tau_i \rangle = 0$ und damit $\nabla u = \frac{\partial u}{\partial n} n$ auf Γ_0 . Einsetzen von ξ_+ aus Gleichung (5.27) führt zu

$$dJ[V] = \int_{\Gamma_0} \langle V, n \rangle \left[-\xi_p \frac{\partial u}{\partial n} n - \eta \sum_{i=1}^d \frac{\partial \xi_i}{\partial n} \frac{\partial u_i}{\partial n} - \left(\frac{\partial u_i}{\partial n} \right)^2 + \xi_p \operatorname{div} u \right] \, ds$$

Da $\langle \nabla u, \tau_i \rangle = 0$ ergibt sich

$$\operatorname{div} u = \sum_{i=1}^d \frac{\partial u_i}{\partial \tau} \tau_i + \frac{\partial u}{\partial n} n = \frac{\partial u}{\partial n} n$$

und die ξ_p -Terme eliminieren sich. \square

Abgesehen von Anwendungen, welche hinreichend gut durch die Stokes-Gleichungen beschrieben werden (Plattentektonik, Gletscherbewegungen, ...), ist eine Betrachtung von Formoptimierung bei Stokes-Gleichungen auch deswegen interessant, weil unter gewissen Umständen der Formgradient "selbst-adjungiert" wird, d.h. man kann den Gradienten ohne Lösen eines adjungierten Problems bestimmen. Dieses Phänomen kann immer dann passieren, wenn das Simulationsproblem linear und symmetrisch ist und die Zielfunktion zur "rechten Seite" des Simulationsproblems passt. Meistens spricht man dann auch von einer Zielfunktion vom Energie-Typ.

Lemma 5.9 (Stokes Formoptimierungsproblem). Wir betrachten wieder das gleiche Setting wie in Lemma 5.6. Die Zustandsgleichung ist jetzt aber die Stokes-Gleichung, d.h. wir können in 5.6 $\rho = 0$ annehmen. Dann ist der Formgradient gegeben durch

$$dJ(u, p, \Omega)[V] = \int_{\Gamma_0} -\langle V, n \rangle \eta \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial u_i}{\partial n} \right)^2 \, ds. \quad (5.29)$$

Beweis. Es sei $\rho = 0$ konstant und (u, p) Lösung des Stokes Problems (5.16) (und damit auch von (5.15)). Dann ist $(0, -2p)$ Lösung des adjungierten Problems (5.25), da bei Stokes genau gilt $\nabla p = \eta \Delta u$. Damit fällt der Teil mit der Adjungierten ξ in (5.28) einfach weg. \square

Bemerkung 5.10 (Analytische Lösung). Die Selbstadjungiertheit des Stokes Problems vereinfacht nicht nur die numerische Implementierung, sondern bewirkt auch, dass dieses Problem eines der sehr wenigen Formoptimierungsprobleme darstellt, bei denen die analytische Lösung bekannt ist. Gemäß den Arbeiten von O. Pironneau [7, 8] ist das analytische Optimum eine Art Rugbyball mit 60° Spitzen als optimale Form. Das Stokes Problem ist damit ein sehr gutes Ausgangs-

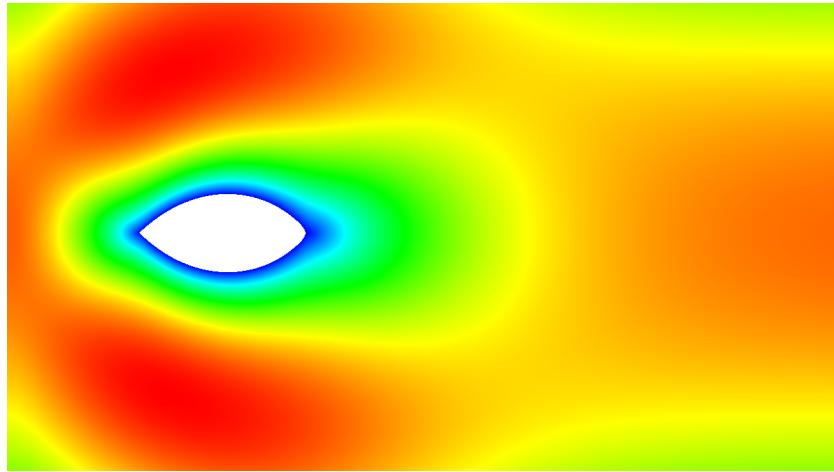


Abbildung 5.7: Berechnete optimale Form für das Stokes Problem. Vergleiche auch mit Abbildung 5.4

beispiel zur Validierung von numerischen Verfahren. Die numerische optimale Form ist in Abbildung 5.7 dargestellt.

Bemerkung 5.11. Es lässt sich nun ein einfaches Gradientenabstiegsverfahren für das Stokes-Problem direkt implementieren:

1. $k = 0$.
2. Trianguliere das Gebiet Ω mit Form Γ_0^k .
3. Löse PDE-Zustandsgleichung.
4. Für jeden Knoten auf dem Rand Γ_0^k berechne den Wert des Formgradien-
ten g . Für das Stokes Formoptimierungsproblem hier also $g(x) = -\eta \sum_{i=3}^3 \left[\frac{\partial u_i(x)}{\partial n} \right]^2$.

5. Bestimme neue Form $\Gamma_0^{k+1} = \{x + t \cdot g(x)n(x) : x \in \Gamma_0^k\}$, wobei t die Schrittweite des Gradientenverfahrens ist.
6. Rückprojektion auf Volumen-Beschränkung: $\tilde{\Gamma}_0^{k+1} = \{x + h \cdot n(x) : x \in \Gamma_0^{k+1}\}$ mit h so, dass das Volumen wieder eingehalten wird.
7. Trianguliere das neue Gebiet oder deformiere alte Triangulierung, setzte $k := k + 1$ und gehe zu 3.

Der obige Algorithmus ist nur effizient, weil die Volumen-Beschränkung von keiner PDE abhängt und deswegen eine Rückprojektion auf die Volumen-Beschränkung numerisch extrem schnell zu berechnen ist, da keine PDE in Ω gelöst werden muss. Bei komplizierteren Nebenbedingungen wie einer Beschränkung an den Auftrieb sollte ein besseres Optimierungsverfahren wie z.B. eine reduzierte SQP-Methode benutzt werden.

Der Gradient aus der ersten Iteration ist in Abbildung 5.8 dargestellt.

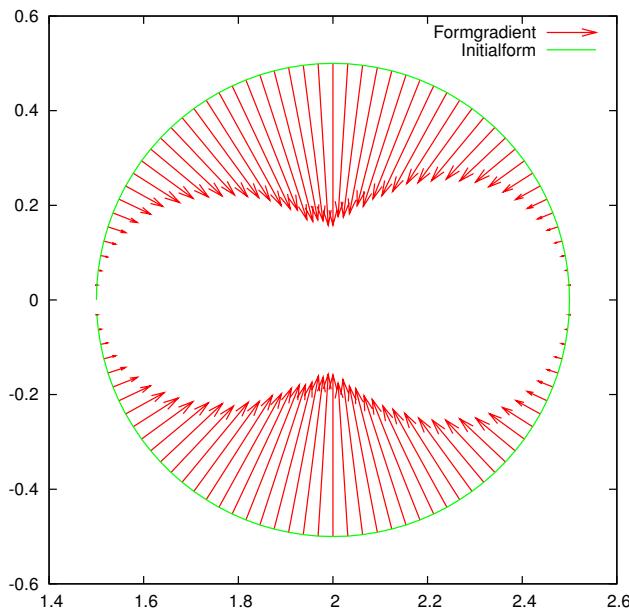


Abbildung 5.8: Kreis als Initialform mit Vektoren für den Gradientenschritt $x_{k+1} = x_k + g(x_k) \cdot n(x_k)$. Deutlich zu erkennen ist, dass ohne weitere Maßnahmen das Volumen abnehmen wird.

Bemerkung 5.12 (Optimale Navier–Stokes Form). Das optimierte Strömungshindernis für das Navier–Stokes Problem ist in Abbildung 5.9 dargestellt. Es fällt auf, dass sich keine Tropfenform einstellt, sondern viel mehr eine schiffsrumpfartige Form mit scharfer Vorderkante. Der Wirbel im Nachlauf (auch Lee-Seite genannt) ist fast vollständig verschwunden.

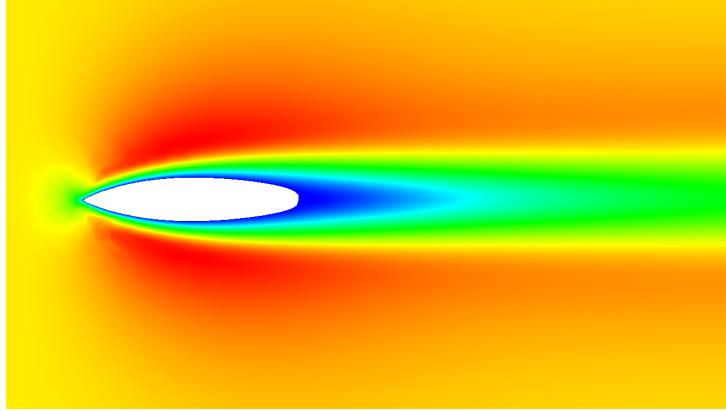


Abbildung 5.9: Berechnete optimale Form für das Navier–Stokes Problem.

5.2.2 SQP-Methoden

Wir beschäftigen uns mit der Konstruktion von Optimierungsverfahren, welche ein besseres Konvergenzverhalten aufweisen als das Gradientenabstiegsverfahren. Die kritischen Punkte sind dabei die Nullstellen des Gradienten der Lagrange-Funktion. In diesem Sinne ist ‘‘Optimierung’’ synonym zum Lösen von Nullstellenproblemen. Wird das Newton-Verfahren benutzt, um die Nullstellen des Gradienten der Lagrange-Funktion zu finden, so spricht man auch von einer exakten SQP-Methode.

Definition 5.13 (SQP-Update, Newton-Richtung). Wir kehren wieder zurück in das Separability Framework wie in Definition 2.4, aber diese mal mit weiteren Nebenbedingungen $d(u, q) = 0$, für welche die Inverse der Jacobi-Matrix nicht existieren muss. Ein typischer Vertreter dafür ist die schon oft benutzte Volumenbeschränkung. Wir betrachten also das Problem

$$\begin{aligned} & \min_{(u,q)} f(u, q) \\ & \text{unter} \\ & c(u, q) = 0 \\ & d(u, q) = 0 \end{aligned}$$

mit LICQ-Constraint Qualification

$$\{\nabla_{(u,q)} c_1, \dots, \nabla_{(u,q)} c_{n_c}, \nabla_{(u,q)} d_1, \dots, \nabla_{(u,q)} d_{n_d}\}.$$

Dann ist die Lagrange-Funktion durch

$$\mathcal{L}(u, q, \mu, \nu) := f(u, q) + \langle \mu, c(u, q) \rangle + \langle \nu, d(u, q) \rangle$$

gegeben und die notwendigen Optimalitätsbedingungen sind

$$\begin{aligned}\nabla_u \mathcal{L} &= 0 \\ \nabla_q \mathcal{L} &= 0 \\ c(u, q) &= \nabla_\mu \mathcal{L} = 0 \\ d(u, q) &= \nabla_\nu \mathcal{L} = 0.\end{aligned}$$

Soll das Newtonverfahren benutzt werden um diese Nullstelle zu finden, so ist folgendes System zu lösen

$$\begin{bmatrix} H_{uu} & H_{uq} & (D_u c)^T & (D_u d)^T \\ H_{qu} & H_{qq} & (D_q c)^T & (D_q d)^T \\ D_u c & D_q c & 0 & 0 \\ D_u d & D_q d & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Delta u \\ \Delta q \\ \Delta \mu \\ \Delta \nu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla_u \mathcal{L} \\ -\nabla_q \mathcal{L} \\ -c \\ -d \end{pmatrix}, \quad (5.30)$$

wobei

$$(u_{k+1}, q_{k+1}, \mu_{k+1}, \nu_{k+1})^T = (u_k, q_k, \mu_k, \nu_k)^T + (\Delta u, \Delta q, \Delta \mu, \Delta \nu)^T.$$

das neue Update für alle Unbekannten gleichzeitig ist und H_{**} die entsprechenden zweiten Ableitungen der Lagrange-Funktion bezeichnen.

Definition 5.14 (Reduziertes SQP). Wie schon in Definition 2.4 gesehen, ist die Hesse-Matrix B des reduzierten Problems durch

$$B := \begin{bmatrix} -C_u^{-1} C_q \\ I \end{bmatrix}^T \text{Hess}_{(u,q)} \mathcal{L}(u^*, q^*, \xi) \begin{bmatrix} -C_u^{-1} C_q \\ I \end{bmatrix}$$

gegeben. Wir nehmen deshalb in (5.30) an, dass gilt

$$\begin{bmatrix} H_{uu} & H_{uq} \\ H_{qu} & H_{qq} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & B \end{bmatrix}. \quad (5.31)$$

unter der Annahme, dass $(D_u c)^{-1}$ existiert, kann das System (5.30) nun block LU-Zerlegt werden und man erhält

$$\begin{bmatrix} B & \tilde{D}d \\ (\tilde{D}d)^T & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Delta q \\ \Delta \nu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla_q \mathcal{L} + (D_q c)^T (D_u c)^{-T} \nabla_u \mathcal{L} \\ -d + (D_u d) (D_u c)^{-1} c \end{pmatrix},$$

wobei $\tilde{D}d$ gegeben ist für allgemeines g durch

$$\tilde{D}g := (D_q g)^T - (D_q c)^T (D_u c)^{-T} (D_u g)^T. \quad (5.32)$$

Wird $\Delta\nu$ durch $\nu_{k+1} = \nu_k + \Delta\nu$ ersetzt, so erhält man weiter

$$\begin{bmatrix} B & \tilde{D}d \\ (\tilde{D}d)^T & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Delta q \\ \nu_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla_q f + (D_q c)^T (D_u c)^{-T} \nabla_u f \\ -d + (D_u d) (D_u c)^{-1} c \end{pmatrix},$$

Damit ergibt sich insgesamt

$$\begin{bmatrix} B & \tilde{D}d \\ (\tilde{D}d)^T & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Delta q \\ \nu_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\tilde{D}f \\ -d + (D_u d) (D_u c)^{-1} c \end{pmatrix}. \quad (5.33)$$

Ist die Zustandsgleichung $c(u, q) = 0$ hinreichend gut gelöst, so verschwindet der c -Term in der rechten Seite oben ebenfalls. „Zufälligerweise“ sind die \tilde{D} -Ableitungen genau unsere reduzierten Gradienten, mit denen wird die ganze Zeit schon gearbeitet haben, siehe auch Gleichung (2.6). Wir können also unsere bisherigen Gradienten alle weiter verwenden als rechte Seite von (5.33). Die Bestimmung eines Newton-Updates ist also ein weiterer Schritt nach der Berechnung des Gradienten.

5.2.3 Der Shape Hessian für das Stokes Problem

Nach Gleichung (4.30) ist die zweite Richtungsableitung für das Funktional

$$dJ(\Omega)[V] = \int_{\partial\Omega} \langle V, n \rangle f(s) \, ds$$

durch

$$d^2 J(\Omega)[V, W] = \int_{\partial\Omega} \langle W, n \rangle \langle V, n \rangle \left[\frac{\partial f}{\partial n} + \kappa f \right] + f \langle W, n \rangle \langle \nabla \alpha, n \rangle \, ds,$$

gegeben. Die Terme $\langle V, n \rangle f'[W]$, $\langle W, n \rangle f'[V]$ und $f''[V, W]$ treten nicht auf, weil wir ja schon die lokalen Ableitungen im Gradienten durch die Selbstadjungiertheit einmal entfernt haben. Für das Stokes-Problem haben wir nach (5.29)

$$f(s) = \eta \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial u_i}{\partial n} \right)^2$$

welches also zu der zweiten Richtungsableitung

$$d^2 J(u, \Omega)[V, W] = I_1 + I_2$$

mit

$$I_1 = -\eta \int_{\Gamma_0} \langle W, n \rangle \langle V, n \rangle \left[2 \left(\sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 u_i}{\partial n^2} \right) + \kappa \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial u_i}{\partial n} \right)^2 \right] \\ + \langle W, n \rangle \left(\sum_{i=1}^d \frac{\partial u_i}{\partial n} \right)^2 \frac{\partial \langle V, N \rangle}{\partial n} \\ I_2 = -\eta \int_{\Gamma_0} \langle V, n \rangle 2 \sum_{i=1}^d \frac{\partial u_i}{\partial n} \frac{\partial u'_i[W]}{\partial n} \, ds.$$

Dabei stellt I_1 den geometrischen Teil da, also die partielle Differentiation nur nach der Form, und I_2 ist der dynamische Teil, also das “nachdifferenzieren” nach der PDE. Leider können wir $\frac{\partial u'_i[W]}{\partial n}$ nicht geschlossen, d.h. als Funktion von u , angeben. Wir betrachten dazu das sogenannte “Dirichlet-to-Neumann-map”:

Definition 5.15 (Divergenzfreies Dirichlet-to-Neumann Map). Im selben Setting wie in Definition 5.6, sei der Operator S durch

$$S\psi = \frac{\partial \varphi}{\partial n} \Big|_{\Gamma_0},$$

definiert für $\psi : \Gamma_0 \rightarrow \mathbb{R}^d$ gegeben, wobei $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ und $\varphi_p : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ die Lösung des Problems

$$\begin{aligned} -\eta \Delta \varphi + \nabla \varphi_p &= 0 && \text{in } \Omega \\ \operatorname{div} \varphi &= 0 \\ \varphi &= 0 && \text{auf } \Gamma_+ \\ \varphi &= -\psi && \text{auf } \Gamma_0 \\ \varphi_p n - \eta \frac{\partial \varphi}{\partial n} &= 0 && \text{auf } \Gamma_- \end{aligned}$$

ist. Wie wir im Folgenden noch genauer sehen werden, handelt es sich hierbei um einen Pseudo-Differentialoperator. Damit können wir also in I_2 auch statt Ausrechnen der Normalenableitung auch

$$\frac{\partial u'[W]}{\partial n} =: S \langle \nabla u, W \rangle = S \frac{\partial u}{\partial n} \langle W, n \rangle.$$

einsetzen.

Bemerkung 5.16. Numerisch gesprochen meint das Anwenden dieses Operators nichts anderes, als “Löse die (linearisierte) Stokes Gleichung, aber benutze

den Input als Dirichlet-Randbedingung. Danach liefere die Normalenableitung als Lösung". Dies entspricht also ebenfalls einer direkten Simulation des linearisierten Problems für einen konkreten gegebenen Input.

Will man für die Anwendung in der Numerik ein Newton-Update bestimmen, so reicht es tatsächlich, den Effekt des Hesse-Operators auf den Gradienten der aktuellen Iterierten zu kennen. Es ist zu lösen:

$$H\nabla_S J = -\nabla J.$$

Ist das Problem nicht entartet, so ist H symmetrisch und positiv-definit. Statt die Matrix H aufzustellen und zu invertieren, bietet es sich an, das CG-Verfahren zu verwenden, da dazu die Kenntnis der Wirkung des Hessians auf einen Gradienten reicht. In dem Fall spricht man auch vom "Newton-Krylov"-Verfahren. Benutzt man algorithmisches Differenzieren, so spricht man auch von "tangent on reverse".

Statt Newton-Krylov-Verfahren zu verfolgen, untersuchen wir hier, ob es eine Möglichkeit gibt, eine geschlossene analytische Form von S zu finden. Wir suchen also

$$S\psi = \left. \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right|_{\Gamma_0} \approx \text{Elementare Funktion}(\psi),$$

wovon wieder einfach nach Diskretisieren eine gut zu invertierende Matrix entsteht. Dazu betrachten wir Operator Symbole.

Definition 5.17 (Symbol eines Operators). Wir betrachten eine (komplexe) sinusidale Funktion $\tilde{q}(x) = \hat{q}e^{i\omega x}$. Das Symbol eines Operators ist dann der Effekt des Operators auf diese Funktion. So gilt z.B.

$$H\tilde{q} = i\omega \hat{q}e^{i\omega x} = i\omega \tilde{q},$$

dann ist das Symbol durch $\Sigma(\omega) := i\omega$ gegeben und der Operator H ist ein klassischer Differentialoperator der Ordnung +1. Gilt stattdessen

$$H\tilde{q} = -\omega^2 \hat{q}e^{i\omega x} = -\omega^2 \tilde{q},$$

dann ist das Symbol $\Sigma(\omega) := -\omega^2$, welches zur klassischen Differentiation zweiter Ordnung gehört. Gilt jedoch

$$H\tilde{q} = |\omega| \hat{q}e^{i\omega x} = |\omega| \tilde{q},$$

so handelt es sich bei H um einen Pseudo-Differentialoperator der Ordnung +1.

Lemma 5.18. Der Stokes Shape-Hessian ist ein pseudo-Differentialoperator mit Symbol

$$\Sigma(\omega) := \pm \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2}$$

in 3D oder

$$\Sigma(\omega) := \pm |\omega_1|$$

in 2D.

Beweis. Wir betrachten die Strömung über eine flache Platte (manchmal spricht man dann auch von einer Poiseuille-Strömung), d.h. Ω sei durch

$$\Omega = \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 : x_3 \geq 0\}.$$

gegeben. Dann ist der Rand durch $\Gamma = \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 : x_3 = 0\}$ und die (äußere) Normale durch

$$n = (0, 0, 1)^T,$$

bestimmt. Eine (komplex-wertige) Oszillation dieser flachen Platte ist durch

$$x_3 = \alpha(x_1, x_2) := e^{i(\omega_1 x_1 + \omega_2 x_2)},$$

bestimmt, wobei i die imaginäre Einheit ist. Dann ist die Störung im Gradienten, Lemma 5.9, gegeben durch

$$\begin{aligned} \tilde{G} &:= -2\eta \sum_{k=1}^3 \frac{\partial u_k}{\partial n} \frac{\partial u'_k[\alpha]}{\partial n} \\ &= -2\eta \sum_{k=1}^3 \frac{\partial u_k}{\partial x_3} \frac{\partial u'_k[\alpha]}{\partial x_3}, \end{aligned}$$

da die flache Platte betrachtet wird. Um den Hesse-Operator zu studieren, muss die Wirkung des Operators

$$S\alpha := -2\eta \sum_{k=1}^3 \frac{\partial u_k}{\partial x_3} \frac{\partial u'_k[\alpha]}{\partial x_3}$$

auf den Input α als elementare Funktion sichtbar gemacht werden. Dazu nehmen wir an, dass die Störgrößen $u'[\alpha]$ und $p'[\alpha]$ ebenfalls oszillierend sind, also der Form

$$\begin{aligned} u'_k[\alpha] &= \hat{u}_k e^{i(\omega_1 x_1 + \omega_2 x_2)} e^{\omega_3 x_3} \\ p'[\alpha] &= \hat{p} e^{i(\omega_1 x_1 + \omega_2 x_2)} e^{\omega_3 x_3} \end{aligned}$$

entsprechen. Wir definieren dabei den zweiten Teil ohne die imaginäre Einheit i , damit später schönere Terme auftreten. Die Haftreibungsbedingung (no-slip condition) auf $x_3 = 0$ führt nun zu

$$u'_k[\alpha] = \hat{u}_k \alpha e^0,$$

welches wiederum bedeutet, dass

$$\hat{u}_k = -\frac{\partial u_k}{\partial x_3} \neq 0 \quad (5.34)$$

gelten muss. Zusätzlich zu dieser Randbedingung muss aber ebenfalls die PDE im Gebiet gelöst werden. Anwenden von Laplace Δ und Gradient ∇ auf $u'[\alpha]$ und $p'[\alpha]$ ist äquivalent zu

$$A \begin{pmatrix} \hat{u}_1 \\ \hat{u}_2 \\ \hat{u}_3 \\ \hat{p} \end{pmatrix} \alpha(x_1, x_2) e^{\omega_3 x_3} = 0,$$

wobei A durch

$$A := \begin{bmatrix} \eta(\omega_1^2 + \omega_2^2 - \omega_3^2) & 0 & 0 & i\omega_1 \\ 0 & \eta(\omega_1^2 + \omega_2^2 - \omega_3^2) & 0 & i\omega_2 \\ 0 & 0 & \eta(\omega_1^2 + \omega_2^2 - \omega_3^2) & \omega_3 \\ i\omega_1 & i\omega_2 & \omega_3 & 0 \end{bmatrix}.$$

gegeben ist. Die Lösung dieses linearen Systems mit Null als rechter Seite kann nur nicht-null sein (und damit ohne Widerspruch zur Randbedingung (5.34)) wenn die Systemmatrix A keinen Vollrang hat. Wir suchen also Werte von ω , für die die Determinante von A verschwindet.

$$\begin{aligned} \det(A) &= [\eta(\omega_1^2 + \omega_2^2 - \omega_3^2)]^2 (\omega_1^2 + \omega_2^2 - \omega_3^2) \stackrel{!}{=} 0 \\ \Rightarrow \omega_3 &= \pm \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2}. \end{aligned}$$

Damit kann ω_3 aus den Gleichungen eliminiert werden und die lokale Formableitung von u ist durch

$$\begin{aligned} u'_k[\alpha] &= -\frac{\partial u_k}{\partial x_3} \alpha e^{\pm \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2} x_3} \\ \Rightarrow \frac{\partial u'_k[\alpha]}{\partial x_3} \Big|_{x_3=0} &= \left[-\frac{\partial^2 u_k}{\partial x_3^2} \mp \frac{\partial u_k}{\partial x_3} \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2} \right] \alpha, \end{aligned}$$

gegeben. Damit ist die Wirkung des Operators S auf α charakterisiert durch

$$S = -2\eta \sum_{k=1}^3 \frac{\partial u_k}{\partial x_3} \left[-\frac{\partial^2 u_k}{\partial x_3^2} \pm \frac{\partial u_k}{\partial x_3} \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2} \right]. \quad (5.35)$$

In 2D kann angenommen werden, dass $\omega_2 \equiv 0$ und man erhält als Symbol

$$\pm|\omega_1|,$$

welches das Symbol eines pseudo-Differentialoperators der Ordnung +1 ist. Der Hessian ist damit eng verwandt mit dem sog. Dirichlet-to-Neumann map, welches nicht verwunderlich ist, da lediglich die Divergenzfreiheit hinzugekommen ist. \square

Damit dieser Ansatz funktioniert, muss man die Nullstellen des charakteristischen Polynoms der linearisierten Zustandsgleichung finden. Bei der Stokes-Gleichung gelang dies einfach, da das Polynom biquadratisch ist, d.h. von Ordnung 4, aber nur es kommen nur gerade Exponenten vor. Im Fall der Navier-Stokes Gleichungen kommen auch die ungeraden Exponenten vor, wodurch dieser Ansatz nicht mehr einfach anwendbar ist.

Beispiel 5.19. Am folgenden Beispiel kann man den Ansatz über das Symbol gut nachvollziehen. Betrachtet man einen umströmten Kreis wie in Abb. 5.4, so entspricht das Eingangssignal einer stehenden Welle, d.h. der Kreis schwankt mit Frequenz ω im Radius. Anschließend bildet man eine finite Differenz im Gradienten, einmal auf dem ursprünglichen Kreis in finiter Differenz mit dem Gradienten des geschwungenen Kreises. Da das Symbol von Ordnung +1 ist, kann man erwarten, dass die finite Differenz des Gradienten

- In der gleichen Phase wie die Oszillation des Randes ist (das Symbol ist reell)
- Bei Steigerung der Eingangsfrequenz wird die Amplitude in der finiten Differenz des Gradienten linear wachsen (das Symbol ist betragsmäßig 1)

Die Phase für $\omega_1 = 50\text{Hz}$ sieht man in Abb. 5.10 und das lineare Wachsen sieht man bei halbieren der Frequenz auf $\omega_2 = 25\text{Hz}$ in Abb. 5.11.

Ebenfalls sieht man in den Abb. 5.10 und 5.11, dass es Bereiche gibt (bei Perimeter 0, der Nasenspitze, und π , der Ablösezone hinten), an denen die Änderung des Gradienten gegenüber einer Oszillation der Form quasi Null ist. Das Newton-Update mit diesem Hesse-Operator außerhalb des Optimums wird also schlecht konditioniert sein und der Newtonschritt unter Umständen nicht hilfreich sein.

Wie oben beschrieben wird uns ein Newtonupdate für das Stokes vor gewisse Schwierigkeiten stellen. Nach der Devise "lieber zu viel Glätten als zu wenig", bietet es sich an, einen (echten) Differentialoperator der Ordnung +2 zu verwenden.

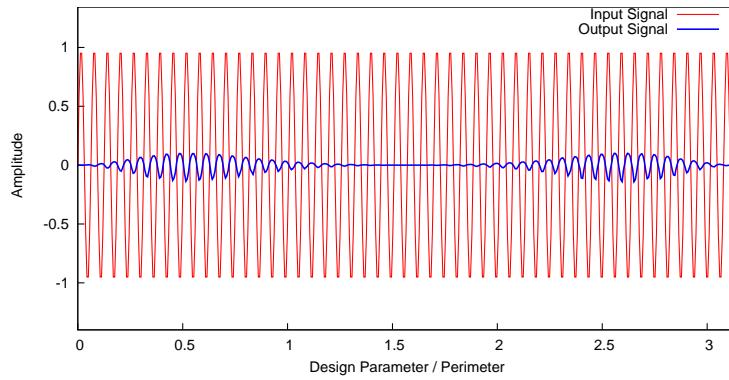


Abbildung 5.10: Eingangs- und Ausgangssignal für das Stokes Problem. Beide sind in der gleichen Phase.

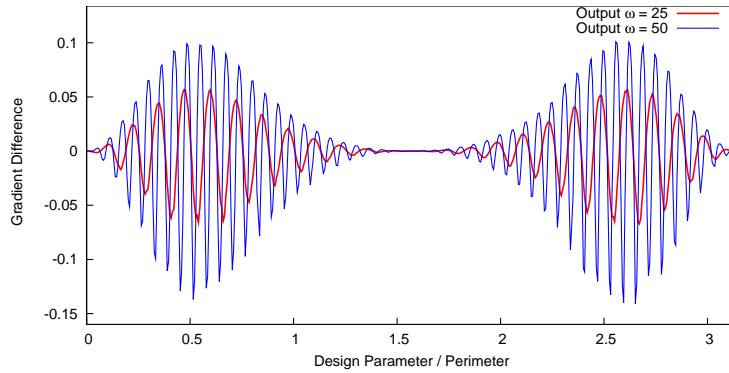


Abbildung 5.11: Wird die Eingangsfrequenz verdoppelt, so verdoppelt sich ebenfalls die Ausgangsamplitude.

Definition 5.20. (Sobolev Gradient) Wird das Newtonupdate $\nabla_S J$ durch Lösen der Gleichung

$$(-\delta \Delta_\Gamma + I) \cdot \nabla_S J = -\nabla J, \quad \delta > 0$$

gewonnen, so spricht man auch von einem “Sobolev Gradienten” (oftmals aber im Flachen mit dem gewöhnlichen Laplaceoperator). Wir haben auf einem der ersten Übungsblätter gesehen, dass dieses auch einer Interpretation des Gradienten als Riesz-Repräsentant der Richtungsableitung in H^1 entspricht, welches die Glattheit des Randes in jedem Update erhält. Deshalb wird dieses Prozedere auch als “Gradientenglättung” bezeichnet.

5.2.4 Konsistente Adjungierte Iteration und One-Shot

Wir betrachten wieder unser Standardoptimierungsproblem

$$\begin{aligned} & \underset{(u,q)}{\operatorname{minf}}(u, q) \\ & \text{unter} \\ & c(u, q) = 0 \end{aligned}$$

bisher bedeutete die Nebenbedingung $c(u, q) = 0$ immer, dass eine PDE exakt gelöst wurde um den Zustand u passend zur Steuerung q zu erhalten. Im einfachsten Fall (vgl. Übungsblatt 3) entspricht dies dem Lösen eines linearen Gleichungssystems $Ax = b$, welches z.B. in Matlab mit dem \operatorname{-Operator direkt gelöst werden kann.

Bei komplizierteren Problemen, z.B. wenn das Gleichungssystem zu groß für eine LU-Zerlegung ist und ein Krylov-Solver benutzt wird, beinhaltet die Nebenbedingung $c(u, q) = 0$ einen iterativen Prozess. Dies tritt insbesondere bei nicht-linearen Problemen wie der Navier–Stokes Gleichung (Definition 5.2) auf, da auf Grund der Nichtlinearität generell eine Iteration benötigt wird. Eine solche Iteration beschreiben wir durch eine Fixpunkt Iteration G , also

$$c(u, q) = 0 \Leftrightarrow u = G(u, q).$$

Wir betrachten also stattdessen ein Optimierungsproblem mit Fixpunktiteration, welche nach N Schritten terminiert wird:

$$\begin{aligned} & \operatorname{minf}(u_N, q) \\ & \text{unter} \\ & u_{k+1} = G(u_k, q) \quad \forall k = 0, \dots, N - 1 \end{aligned}$$

Die Lagrangefunktion ist dann durch

$$\mathcal{L} = J(u_N, q) + \sum_{k=0}^{N-1} \lambda_k^T (G(u_k, q) - u_{k+1})$$

gegeben. Damit ergeben sich zwei Fragestellungen:

- Gegeben eine Iteration $u_{k+1} = G(u_k, q)$, wie lautet die konsistente Adjungierte Iteration
- Lässt sich dieses Setting ebenfalls zur Konvergenzbeschleunigung ausnutzen?

Lemma 5.21 (Konsistente Adjungierte Iteration). Ist eine konvergente Iteration durch

$$u_{k+1} = G(u_k, q)$$

gegeben, so ist die konsistente adjungierte Iteration durch

$$\begin{aligned}\lambda_{N-1}^T &= J_u(u_N, q) \\ \lambda_{i-1}^T &= \lambda_i^T G_u(u_i, q) \quad \forall i = N-1, \dots, 0\end{aligned}$$

gegeben. Diese läuft also im Vergleich zur ursprünglichen Iteration rückwärts. Außerdem ist diese Iteration ebenfalls konvergent.

Beweis. Es sei $0 \leq i < N-1$, dann gilt

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_i} &= -\lambda_{i-1}^T + \lambda_i^T \frac{\partial}{\partial u} G(u_i, q) \stackrel{!}{=} 0 \\ \Rightarrow \lambda_{i-1}^T &= \lambda_i^T G_u(u_i, q) \\ \Leftrightarrow \lambda_{i-1} &= G_u^T(u_i, q) \lambda_i\end{aligned}$$

damit können bei bekannten λ_{N-1} nun rückwirkend die $\lambda_{N-2}, \dots, \lambda_0$ berechnet werden. Den Startwert λ_{N-1} gewinnt man aus der partiellen Ableitung nach u_N :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_N} = \frac{\partial J}{\partial u_N} - \lambda_{N-1}^T \stackrel{!}{=} 0$$

Zur Konvergenz: Wir nehmen an, die primale Iteration konvergiert. Nach dem Banach'schen Fixpunktsatz gilt dann

$$\|G_u^T\| = \|G_u\| \leq \rho(G_u) < 1,$$

d.h. der Spektralradius ist kleiner als Eins. Für die adjungierte Iteration

$$\begin{aligned}\lambda_{i-1} &= J_{u_i}(u_i, q) + G_u^T(u_i, q) \lambda_i \\ &=: N_u^T(u_i, \lambda_i, q)\end{aligned}$$

gilt dann

$$\frac{\partial N_u^T}{\partial \lambda} = G_u^T$$

und die Kontraktionsrate ist identisch. □

Bemerkung 5.22. Einige Bemerkungen:

- Die Betrachtungen oben gelten analog für Zeitabhängige Probleme statt beliebiger Fixpunktiterationen

- Die garantierte Konvergenzrate der adjungierten Iteration muss durch das Speichern aller Zustände u_i teuer erkauft werden.
- Vergleich auch mit dem Rückwärtsmodus von AD, wo ebenfalls alles gespeichert wird

Eine Abhilfe gegen die Zwang alles Speichern zu müssen ist der “Reverse Accumulation” Ansatz [3].

Definition 5.23 (Reverse Accumulation). Wir nehmen Konvergenz der primalen Iteration an. Es sei also u^* so, dass $u^* = G(u^*, q)$ erfüllt ist. Bei endlich vielen Iterierten wird entsprechend $u^* = u_{k+1}$ die letzte Iterierte verwendet. Dann gilt

$$R(u^*, q) := G(u^*, q) - u^* = 0 \quad (5.36)$$

und die adjungierte Iteration wird zu

$$\lambda_{i-1} = J_u(u^*, q) + G_u^T(u^*, q)\lambda_i =: N_u^T(u^*, \lambda_i, q).$$

Damit entfällt die Notwendigkeit die primalen Zustände zu speichern, allerdings ist die Konvergenz nicht mehr garantiert [3]. Wir haben somit versteckt in unserer iterativen Betrachtung die analytische $c(u, q) = 0$ Annahme wieder eingeführt. Analog kann der reduzierte Gradient dann durch

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} &= J_q(u^*, q) + (\lambda^*)^T \frac{\partial}{\partial q} (G(u^*, q) - u^*) \\ &=: N_q(u^*, \lambda^*, q) \end{aligned}$$

gegeben.

Definition 5.24 (Nested Iteration und One-Shot). In der bisher dargestellten Vorgehensweise erhält man verschachtelte (“nested”) Iterationen: Eine äußere Optimierungsiteration und zwei wiederholt aufgerufene innere Schleifen zur Berechnung von u und λ . Dieses wird auch in Abb. 5.12 dargestellt.

Die inneren Schleifen machen diese Iteration sehr langsam. Die einfachste Art dieses zu beschleunigen ist ein Weglassen eben dieser Schleifen, d.h. für jedes Optimierungsupdate in der Steuerung macht man nur noch ein Lösungsupdate in Zustand und Adjungierter. Man führt somit die Optimierung mit einem inexakten Gradienten durch. Mathematisch gesprochen entspricht dieses einer Abwandlung der Systemmatrix in einem Newtonschritt zur Bestimmung der notwendigen Optimalitätsbedingungen. Wie in der Übungen gesehen, darf das System

$$\begin{bmatrix} \mathcal{L}_{uu} & \mathcal{L}_{uq} & R_u^T \\ \mathcal{L}_{qu} & \mathcal{L}_{qq} & R_q^T \\ R_u & R_q & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Delta u \\ \Delta q \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mathcal{L}_u \\ \mathcal{L}_q \\ \mathcal{L}_\lambda \end{pmatrix}$$

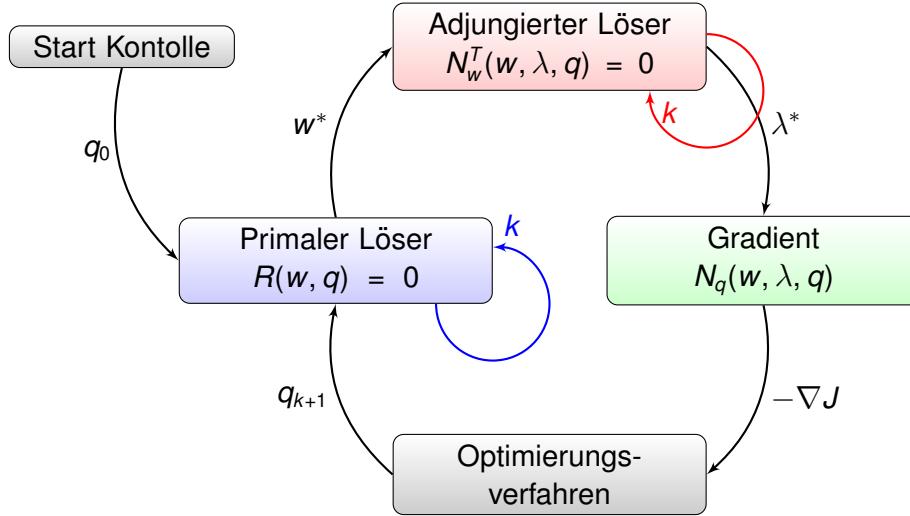


Abbildung 5.12: Verschachtelte Optimierungsiteration

beliebig geändert werden. Wir führen wieder den reduzierten Hessian, vgl. (5.31), ein und verwenden statt der Ableitung des exakten Residuums R_u aus (5.36) die Approximationen $A_a \approx R_u^T$ und $A_f \approx R_u$. Dann erhalten wir

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & A_a \\ 0 & B & R_q^T \\ A_f & R_q & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Delta u \\ \Delta q \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mathcal{L}_u \\ \mathcal{L}_q \\ \mathcal{L}_\lambda \end{pmatrix}.$$

Wird dieses zeilenweise aufgelöst, so erhält man

$$\begin{aligned} \lambda_{k+1} &= \lambda_k + A_a^{-1} \nabla_u \mathcal{L}(u_k, q_k, \lambda_k) \\ q_{k+1} &= q_k + B^{-1} \nabla_q \mathcal{L}(u_k, q_k, \lambda_{k+1}) \\ u_{k+1} &= u_k + A_f^{-1} \nabla_\lambda \mathcal{L}(u_k, q_{k+1}, \lambda_{k+1}), \end{aligned} \quad (5.37)$$

denn für $\mathcal{L} = J(u, q) - \lambda^T R(u, q)$ gilt

$$\mathcal{L}_q - R_q^T(\lambda_{k+1} - \lambda_k) = J_q - \lambda_k^T R_q - \lambda_{k+1}^T R_q + \lambda_k^T R_q = \mathcal{L}_q(u_k, q_k, \lambda_{k+1})$$

Der letzte Ausdruck folgt analog. Eine Optimierungsiteration nach (5.37) wird auch als “One-Shot” bezeichnet, da alle drei Residuen gleichzeitig gegen Null getrieben werden. Vergleiche auch Abb. 5.13.

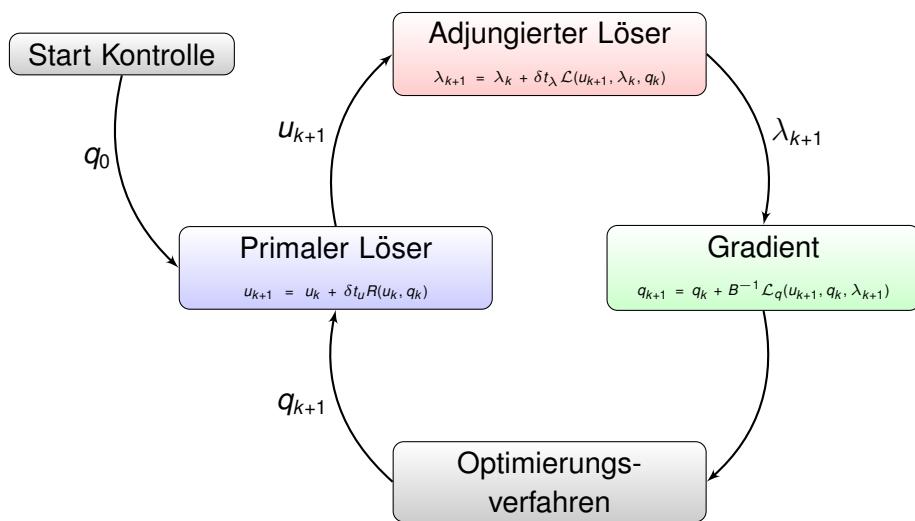


Abbildung 5.13: One-Shot Iteration mit $A_a = \delta t_\lambda \cdot I$, $A_f = \delta t_u \cdot I$, wobei $\delta t_\lambda, \delta t_u < 1$.

6

Gittergeneration und -deformation

6.1 Strukturierte Gitter

6.1.1 Algebraische Gitter: Lofting, Coons Patch und Transfinite Interpolation

Nachdem im vorherigen Kapitel der Focus auf den Optimierungsmethoden lag, kehren wir nun zu geometrischeren Aspekten zurück, insbesondere darauf, wie Formen modelliert, diskretisiert und im Rechner dargestellt werden können. Fragestellungen dieser Art werden erst seit ca. den 1960er Jahren untersucht: Vorher wurden Flächen aus mathematischen Gleichungen als gegeben betrachtet und man hat Eigenschaften dieser gegebenen Flächen ergründet, wie z.B. die Oberfläche eine Sphere, etc. Durch das Aufkommen der Computer in den 1960er Jahren wurde auf einmal die umgekehrte Fragestellung interessant: Was für eine “schöne” (fair) Fläche ergibt sich aus den Wünschen (Randdaten) eines Designers? Die erste Anwendung, welche sich mit solchen Fragen auseinandersetzte war der Schiffsbau: Gegeben die Seitenansicht, Draufsicht und einige Spannnten, wie lässt sich der resultierende Schiffsrumpf ganzheitlich darstellen? Vergleiche auch Abb. 6.1. Die gleichen Fragen traten später auch in der Luftfahrt- und Automobiltechnik auf. Noch heute werden Flugzeugflügel über Querschnitte und Informationen über die Draufsicht definiert (vgl. auch die Flügelprofilquerschnitte auf dem Titelblatt dieses Skriptes). Dieser historischen Vorgehensweise folgend betrachten wir zunächst sog. strukturierte Gitter. Später lernen wir noch “unstrukturierte Gitter” kennen. Dazu nehmen wir im Folgenden zunächst immer an, dass die Randkurven gegeben sind und die eingeschlossene Fläche konstruiert werden soll. Die einfachste Art, eine Fläche aus zwei Kurven zu konstruieren ist das “Lofting”.

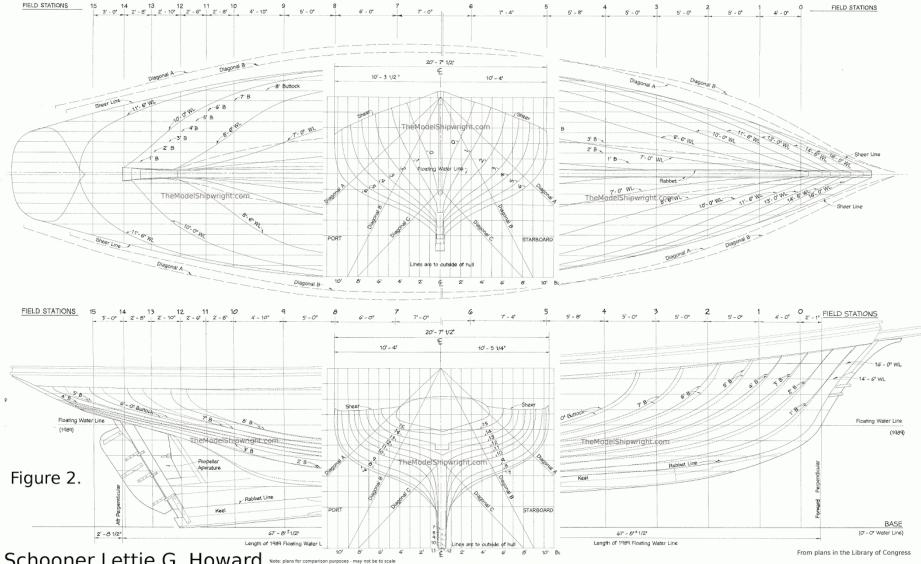


Figure 2.

Abbildung 6.1: Ein historischer Schiffsbauplan.

Definition 6.1 (Lofting). Es seien $\gamma_1, \gamma_2 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ zwei Kurven endlicher Länge. Die ‘‘Lofted Surface’’ L aus diesen beiden Kurven ist durch das Überführen von einer Kurve in die andere definiert

$$L(s, t) = b_1(s)\gamma_1(t) + b_2(s)\gamma_2(t),$$

wobei $b_1(s), b_2(s) \geq 0$ und $b_1(s) + b_2(s) = 1$ für alle s . Falls es sich hierbei um eine Konvexitätskombination handelt, also $b_1(s) = (1 - s)$ und $b_2(s) = s$, so spricht man auch von einer ‘‘Ruled Surface’’.

Bemerkung 6.2. Einige Bemerkungen:

- Die resultierende Fläche des Lofting ist hochgradig abhängig von der Parameterisierung der Kurven γ_i . So kann das Lofting von zwei Kreisen entweder einen Zylinder oder entartete, ineinander übergehende Ellipsen sein (s.a. Übung).
- Das Lofting ist der Grundbaustein der ersten Versionen des Computer Aided Designs (CAD).
- Der Ausdruck ‘‘Loft’’ bezieht sich wiederum auf den Schiffsbau, da die Konstrukteure meist auf dem Dachboden (Loft) der Werft ihr Büro hatten, da dort die Konstruktionspläne in großem Maßstab auf dem Boden ausgebreitet werden konnten.

Die Idee, eine Fläche (Volumen) durch Überblenden von Randkurven (Randflächen) zu erzeugen ist ebenfalls der zentrale Baustein der “Coons-Flächen”.

Definition 6.3 (Coons Patch). Die folgende Definition geht zurück auf S. Coons [4]. Es sei

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(\xi_1, \xi_2) \\ f_2(\xi_1, \xi_2) \\ f_3(\xi_1, \xi_2) \end{pmatrix} =: f(\xi_1, \xi_2), \quad \xi_i \in [0, 1]$$

die parametrische Darstellung eines Punktes auf einer Fläche im \mathbb{R}^3 . Diese Fläche hat die vier Randkurven

$$c_1(\xi_1) = f(\xi_1, 0), \quad c_2(\xi_1) = f(\xi_1, 1), \quad c_3(\xi_2) = f(0, \xi_2), \quad c_4(\xi_2) = f(1, \xi_2), \quad \xi_i \in [0, 1].$$

Ziel ist es nun, eine neue “schöne” Oberfläche zu definieren, welche diese Randkurven enthält. Dazu seien $F_0, F_1 : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$ zwei stetige, monotone “Überblendungsfunktionen” mit $F_i(j) = \delta_{ij}$. Dann wird als “Coons Patch” definiert

$$L(\xi_1, \xi_2) := \sum_{i=0}^1 \begin{pmatrix} f_1(i, \xi_2) \\ f_2(i, \xi_2) \\ f_3(i, \xi_2) \end{pmatrix} F_i(\xi_1) + \sum_{j=0}^1 \begin{pmatrix} f_1(\xi_1, j) \\ f_2(\xi_1, j) \\ f_3(\xi_1, j) \end{pmatrix} F_j(\xi_2) - \sum_{i,j=0}^1 \begin{pmatrix} f_1(i, j) \\ f_2(i, j) \\ f_3(i, j) \end{pmatrix} F_i(\xi_1) F_j(\xi_2). \quad (6.1)$$

Bemerkung 6.4. Einige Bemerkungen

- Der Coons Patch beinhaltet die Randkurven (Übung)
- Jeder einzelne Summand des Coons Patches ist ein Loft wie in Definition 6.1 und die einfachste Wahl von F_i ist wieder die Konvexitätskombination.
- Der Coons Patch braucht zunächst keine Voraussetzungen an die Randkurven. Insbesondere ist der Coons Patch auch für endlich viele Diskretisierungspunkte ξ_i^k für $k = 1, \dots, n$ (bzw. Werte von f_i) definiert. Dadurch ergibt sich dann automatisch eine diskretisierte Oberfläche!
- Zusätzliche Voraussetzungen an die Randkurven können aber sinnvoll sein (z.B. Geschlossenheit)
- Der Effekt des Entstehens einer Fläche als “Morph” von Randkurven ineinander ist gut zu sehen in Abb. 6.2. Die automatische Diskretisierung der Oberfläche ebenfalls.

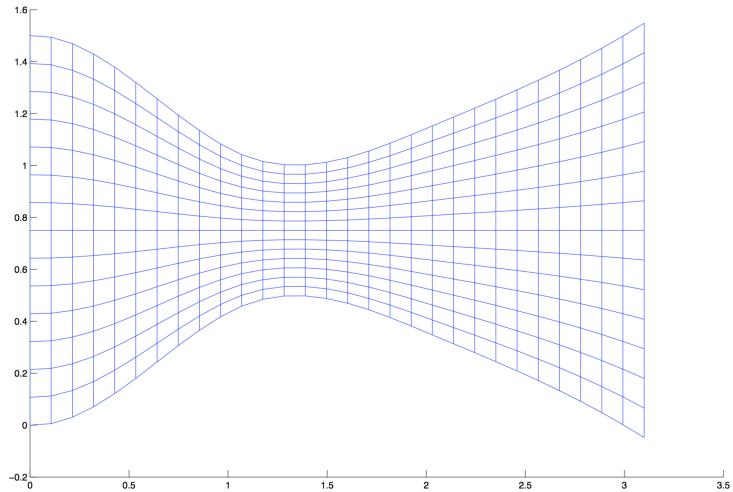


Abbildung 6.2: Diskretisierung einer Laval-Düse durch Überblenden der Randkurven.

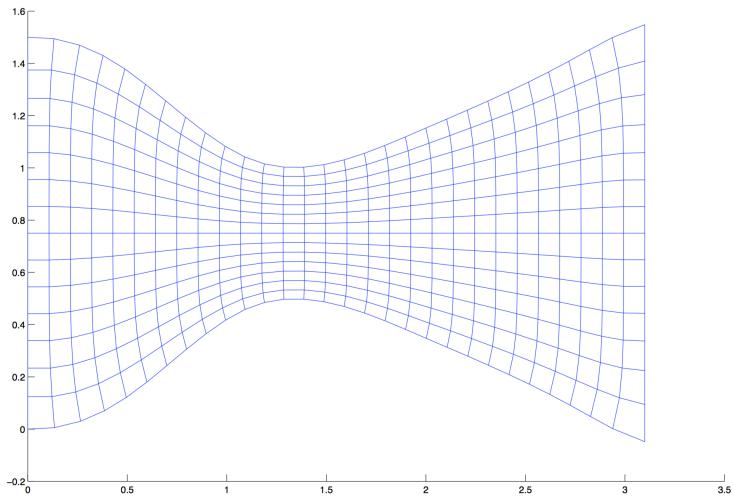


Abbildung 6.3: Die selbe Düse, aber mit orthogonalen Gitterlinien am Rand.

- Über die genaue Wahl von F_i können nun zusätzliche Eigenschaften in den Patch eingebaut werden.

Die Vorgehensweise nach Coons wurde im Laufe der Zeit immer mehr erweitert, um zusätzliche Eigenschaften in das resultierende Gitter einzubauen. Insbesondere mehr Kontrolle über die Abstände der Gitterlinien und den Winkel, mit welchem diese die Randkurven schneiden sind von großem Interesse. Vergleiche hierzu auch die Abbildungen Abb. 6.2 und 6.2. Bevor wir auf die “Transfinite Interpolation” als allgemeinste Form der Coon Methodologie eingehen, be-

trachten wir kurz die Einbindung von Krümmungswünschen. Dazu betrachten wir zunächst die sich automatisch am Rand ergebende Krümmung.

Bemerkung 6.5 (Coons Patches und Stetigkeit von Ableitungen). Da der Coons Patch die Randkurven enthält, sind zwei angrenzende Coons Patches automatisch auch stetig, wenn die Randkurven identisch sind. Allerdings müssen weitere Eigenschaften an die F_i gefordert werden, damit auch höhere Ableitungen an angrenzenden Coons Patches noch stetig sind. Wir bestimmen die Ableitung von (6.1) an einer Randkurve. Da alle Ausdrücke symmetrisch in ξ_1 und ξ_2 sind, reicht es, dies stellvertretend für ξ_1 zu tun. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi_1} L(\xi_1, \xi_2) &= \sum_{i=0}^1 \begin{pmatrix} f_1(i, \xi_2) \\ f_2(i, \xi_2) \\ f_3(i, \xi_2) \end{pmatrix} F'_i(\xi_1) + \sum_{j=0}^1 \left[\frac{\partial}{\partial \xi_1} \begin{pmatrix} f_1(\xi_1, j) \\ f_2(\xi_1, j) \\ f_3(\xi_1, j) \end{pmatrix} \right] F_j(\xi_2) \\ &\quad - \sum_{i,j=0}^1 \begin{pmatrix} f_1(i, j) \\ f_2(i, j) \\ f_3(i, j) \end{pmatrix} F'_i(\xi_1) F_j(\xi_2) \end{aligned} \quad (6.2)$$

Um Stetigkeit der Ableitung zu erhalten, müssen nun weitere Bedingungen an die vom Nutzer zu spezifizierenden Blend-Funktionen F_i gefordert werden. Für $a \in \{0, 1\}$ sei

$$F'_i(a) := \frac{\partial}{\partial \xi} F_i(a) = 0. \quad (6.3)$$

Dann gilt in (6.2)

$$\frac{\partial}{\partial \xi_1} L(a, \xi_2) = \sum_{j=0}^1 \left[\frac{\partial}{\partial \xi_1} \begin{pmatrix} f_1(a, j) \\ f_2(a, j) \\ f_3(a, j) \end{pmatrix} \right] F_j(\xi_2)$$

Damit ergibt sich die starke Eigenschaft, dass die Ableitung am Rand ($a \in \{0, 1\}$) über den Rand hinweg ($\frac{\partial}{\partial \xi_1}$) nur von dem Ausdruck

$$\frac{\partial}{\partial \xi_1} L(a, \xi_2) = \frac{\partial f(a, 0)}{\partial \xi_1} F_0(\xi_2) + \frac{\partial f(a, 1)}{\partial \xi_1} F_1(\xi_2)$$

abhängt. D.h. die Steigung der Randkurve $\frac{\partial}{\partial \xi_1} L(a, \xi_2)$ mit Laufindex ξ_2 hängt ausschließlich von der Ableitung in den Ecken $\frac{\partial f(a, 0)}{\partial \xi_1}$ und $\frac{\partial f(a, 1)}{\partial \xi_1}$ ab. Damit genügt es, um Patches glatt miteinander zu verbinden, dass die F'_i so gewählt sind, dass (6.3) erfüllt ist und passende Ableitungen von f an den Ecken vorliegen. Das Konzept lässt sich für höhere Ableitungen analog fortsetzen.

Der nächste Schritt ist es nun, der neuen Fläche weitere Eigenschaften hinzuzufügen. Naheliegend um z.B. Patches nicht nur stetig miteinander zu verbinden, sondern auch differenzierbar, ist somit ein Hinzufügen der Krümmung der Fläche L am Rand. Dazu wird zunächst die "Krümmungskorrekturfläche" definiert.

Definition 6.6 (Krümmungskorrekturfläche (Slope Correction Surface)). Mit der gleichen Notation wie in Definition 6.3 sei \tilde{L} definiert als

$$\begin{aligned}\tilde{L}(\xi_1, \xi_2) := & \sum_{i=0}^1 \frac{\partial}{\partial \xi_1} \begin{pmatrix} f_1(i, \xi_2) \\ f_2(i, \xi_2) \\ f_3(i, \xi_2) \end{pmatrix} G_i(\xi_1) + \sum_{j=0}^1 \frac{\partial}{\partial \xi_2} \begin{pmatrix} f_1(\xi_1, j) \\ f_2(\xi_1, j) \\ f_3(\xi_1, j) \end{pmatrix} G_j(\xi_2) \\ & - \sum_{i,j=0}^1 \frac{\partial^2}{\partial \xi_1 \partial \xi_2} \begin{pmatrix} f_1(i, j) \\ f_2(i, j) \\ f_3(i, j) \end{pmatrix} G_i(\xi_1) G_j(\xi_2).\end{aligned}$$

Dabei erfülle die Blendfunktion G_i folgende Bedingungen:

$$\begin{aligned}G_0(0) = G_1(0) = G_0(1) = G_1(1) &= 0 \\ G'_0(0) = 1, \quad G'_1(1) = 1, \quad G'_0(1) = 0, \quad G'_1(0) &= 0\end{aligned}$$

Lemma 6.7. Die Krümmungskorrekturfläche erfüllt folgende Eigenschaften

- a) Für $a \in \{0, 1\}$ gilt $\tilde{L}(a, \xi_2) = 0$ für alle $\xi_2 \in [0, 1]$ genau dann, wenn

$$\frac{\partial f(a, 0)}{\partial \xi_2} = 0 \text{ und } \frac{\partial f(a, 1)}{\partial \xi_2} = 0.$$

Analog für $\tilde{L}(\xi_1, a) = 0$.

- b) Außerdem gilt für die Krümmung am Rand wieder für $a \in \{0, 1\}$

$$\frac{\partial \tilde{L}(a, \xi_2)}{\partial \xi_1} = \frac{\partial f(a, \xi_2)}{\partial \xi_1} \quad \forall \xi \in [0, 1].$$

Auch hier analog für die zweite Komponente.

Beweis. Übung □

Bemerkung 6.8. Die Konsequenz der Krümmungskorrekturfläche ist, dass diese auf L aus Definition 6.3 hinzuaddiert werden kann

$$\hat{L}(\xi_1, \xi_2) := L(\xi_1, \xi_2) + \tilde{L}(\xi_1, \xi_2)$$

und dabei unter der Voraussetzung a) oben die neue Fläche \hat{L} immernoch die gewünschten Randkurven hat. Gleichzeitig erfüllt dank b) oben die Fläche \hat{L} genau die vorgegebene Randkrümmung $\frac{\partial f(a, \xi_2)}{\partial \xi_1}$ im Inneren für den Laufindex ξ_2 . Nachdem also L konstruiert wurde, können wir \tilde{L} genau so wählen, dann in Summe die Fläche \hat{L} genau die gewünschte Krümmung am Rand aufweist.

Die Summe \hat{L} von Flächen nach Bemerkung 6.8 kann nun auch direkt in die Definition von Flächen durch das Blending von Randkurven aufgenommen werden. Dadurch entstehen mehr Summanden und es treten Ableitungen auf der Definition f der vorgegebenen Randkurven auf. Wir fassen zusammen:

- Die Funktionen f beschreiben Randkurven, welche durch Blend-Funktionen G zu einer Fläche erweitert werden, welche eben diese Randkurven erhält. Die elementare Idee dazu ist das Lofting.
- Damit für Flächen genau diese Randkurven enthalten sind, haben wir in den Coons Patches eine Interpolationsformel vom Typ $A + B - AB$, welches auch Bool'sche Summe genannt wird.

Der nächste Schritt ist nun die Erweiterung auf 3D, also das Erzeugen von Volumina durch das Überblenden von Randflächen. Dabei gehen wir nun nicht nochmal so detailliert auf alle Details ein. Analog zum 2D-Fall erhält man eine Interpolationsformel vom Typ $A + B + C - AB - AC - BC + ABC$, wobei jeder einzelne dieser Terme wieder ein Loft ist. Diese Vorgehensweise nennt sich auch "Transfinite Interpolation". Bevor wir diese kurz betrachten, definieren wird zunächst ein "strukturiertes Gitter", da wir die transfinite Interpolation direkt für eine diskretisierte Fläche betrachten werden.

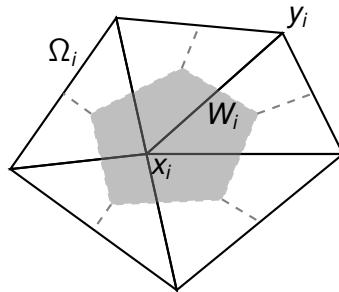


Abbildung 6.4: Die Facette Ω_i um den Knoten x_i . Die Strecke von x_i nach y_i ist eine Kante und die graue Fläche W_i ist die duale Zelle zu x_i .

Definition 6.9 (Gitter, "Mesh"). Wir diskretisieren ein Gebiet Ω durch ein diskretes Rechengitter. Ein Rechengitter Ω_h ist eine Menge aus endlich vielen Punkten x und deren Konnektivität. Dabei wird ein einzelner Punkt auch als "Vertex" oder "Knoten" bezeichnet. Die Verbindung zwischen zwei Punkten wird als Kante (engl. edge) bezeichnet. Die kleinste von den Kanten umschlossene Fläche (2D) oder Volumen (3D) wird Zelle oder Facette genannt. Die Fläche, welche durch Verbinden der Mittelpunkte der Facetten um den Knoten x entsteht wird auch

“duale Zelle” genannt. Knoten, die sich eine Kante teilen, sind benachbart. Zum besseren Verständnis siehe auch Abb. 6.4.

Definition 6.10 (Strukturierte und unstrukturierte Gitter). Ein Gitter wird als strukturiert (oder regulär) bezeichnet, wenn sich (in 3D) jede Zelle Ω_ℓ eindeutig über die Indices $\ell = (i, j, k)$ mit $i \in \{1, 2, \dots, n_i\}$, $j \in \{1, 2, \dots, n_j\}$ und $k \in \{1, 2, \dots, n_k\}$ indizieren lässt und die Zelle $\Omega_{(i,j,k)}$ entsprechend mit den Zellen $\Omega_{(i\pm1,j\pm1,k\pm1)}$ benachbart ist.

Auf einem strukturierten Gitter sind die Kanten (und damit die Verbindung der Knoten) somit direkt aus dem Index des Knoten bekannt. Dies handelt sich also um eine bijektive Abbildung eines kartesischen Gitters. Dies ist ebenfalls in Abb. 6.5 verdeutlicht. Nach dieser Definition ist intuitiv klar, dass strukturierte

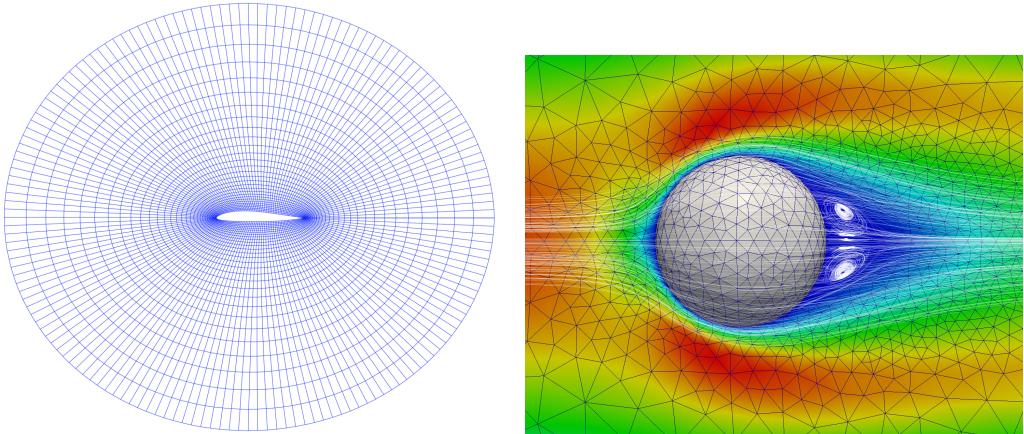


Abbildung 6.5: Strukturiertes Gitter um ein Tsagi-Airfoil und unstrukturiertes Gitter einer Kugel.

Gitter keine Löcher haben können. Möchte man dennoch ein Loch darstellen, so müssen Seiten aufeinander fallen. Dadurch entstehen so genannte C-Gitter oder O-Gitter, siehe auch Abb 6.6.

Wir erweitern nun die oben diskutierten Coons Patches in ein strukturiertes 3D Gitter über algebraische Überlegungen. Die allgemeinste Form dafür ist die sog. Transfinite Interpolation.

Definition 6.11 (Transfinite Interpolation). Es sei

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = f(\xi_1, \xi_2, \xi_3), \quad \xi_i \in [0, 1]$$

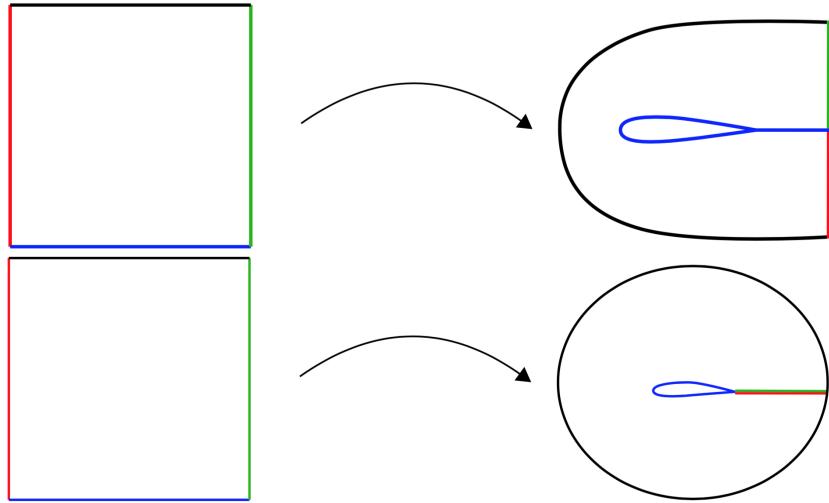


Abbildung 6.6: C- und O-Gitter Topologie.

eine Volumen in 3D mit entsprechenden Randflächen für festgehaltenes ξ_i . Wir wählen nun endlich viele Diskretisierungsstellen $\xi_1^i, \xi_2^j, \xi_3^k$ für $i \in \{1, 2, \dots, n_i\}$, $j \in \{1, 2, \dots, n_j\}$ und $k \in \{1, 2, \dots, n_k\}$ im Parameterraum und definieren darauf für jede “Achse” des Parameterraums ein verallgemeinteres Loft:

$$U(\xi_1, \xi_2, \xi_3) := \sum_{i=1}^{n_i} \sum_{n=0}^P \alpha_{i,n}(\xi_1) \frac{\partial^n f(\xi_1^i, \xi_2, \xi_3)}{\partial \xi_1^n}$$

$$V(\xi_1, \xi_2, \xi_3) := \sum_{j=1}^{n_j} \sum_{m=0}^Q \beta_{j,m}(\xi_2) \frac{\partial^m f(\xi_1, \xi_2^j, \xi_3)}{\partial \xi_2^m}$$

$$W(\xi_1, \xi_2, \xi_3) := \sum_{k=1}^{n_k} \sum_{\ell=0}^R \gamma_{k,\ell}(\xi_3) \frac{\partial^\ell f(\xi_1, \xi_2, \xi_3^k)}{\partial \xi_3^\ell}.$$

Die Variablen n_i, n_j, n_k definieren somit die Anzahl der Gitternetzlinien. Die Variablen P, Q, R die Anzahl der zusätzlichen Terme um weitere Eigenschaften in das resultierende Volumen einbauen zu können, wie z.B. Punkteverteilung oder Stetigkeit der Krümmung, wie schon im Coons Patch gesehen. Wie schon in 2D beim Coons Patch gesehen, erhält man nun ein Volumina durch Aufstellen der “Bool’schen Summe”, in 3D hier also $U + V + W - UV - UW - VW + UVW$,

wobei z.B. UV und UVW gegeben sind durch

$$UV(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sum_{i=1}^{n_i} \sum_{n=0}^P \sum_{j=1}^{n_j} \sum_{m=0}^Q \alpha_{i,n}(\xi_1) \beta_{j,m}(\xi_2) \frac{\partial^{n+m} f(\xi_1^i, \xi_2^j, \xi_3)}{\partial \xi_1^n \partial \xi_2^m}$$

$$UVW(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sum_{i=1}^{n_i} \sum_{n=0}^P \sum_{j=1}^{n_j} \sum_{m=0}^Q \sum_{k=1}^{n_k} \sum_{\ell=0}^R \alpha_{i,n}(\xi_1) \beta_{j,m}(\xi_2) \gamma_{k,\ell}(\xi_3) \frac{\partial^{n+m+\ell} f(\xi_1^i, \xi_2^j, \xi_3^k)}{\partial \xi_1^n \partial \xi_2^m \partial \xi_3^\ell}$$

Wie schon für den 2D Coons Fall in Definition 6.6 gesehen, müssen die Blendfunktionen $\alpha_{i,n}$, $\beta_{j,m}$ und $\gamma_{k,\ell}$ Bedingungen an ihre Ableitungen erfüllen, damit die Randkurven (oder Flächen hier) weiterhin enthalten sind. Konkret hier:

$$\frac{\partial^{\hat{n}} \alpha_{i,n}(\xi_1^i)}{\partial \xi_1^{\hat{n}}} = \delta_{i,i} \delta_{n,\hat{n}}$$

Analog für β und γ .

Bemerkung 6.12. Die Definition der Transfiniten Interpolation ist bewusst allgemein gehalten. In der Praxis gibt es nun je nach Anwendung und Bedürfnissen an das Gitter eine konkrete Wahl der Blendfunktionen und Anzahl an Ableitungen. Im einfachsten Fall wählt man die lineare TFI (Transfinite Interpolation) und erhält $n_i = n_j = n_k = 2$ und $P = Q = R = 0$ (keine Ableitungen) sowie

$$\begin{aligned} \alpha_{1,0}(\xi_1) &= 1 - \xi_1, & \alpha_{2,0}(\xi_1) &= \xi_1 \\ \beta_{1,0}(\xi_2) &= 1 - \xi_2, & \beta_{2,0}(\xi_2) &= \xi_2 \\ \gamma_{1,0}(\xi_3) &= 1 - \xi_3, & \Gamma_{2,0}(\xi_3) &= \xi_3. \end{aligned}$$

6.1.2 Elliptische Gitter und Mesh Deformation

Im vorherigen Kapitel wurde die Konstruktion eines strukturierten Gitters aus Interpolation der Randkurven vorgestellt. Damit lässt sich nun für sich ändernde Ränder, z.B. aufgrund einer Verschiebung der Randkurve durch eine Formoptimierung, jedes mal ein neues Gitter erzeugen. Dabei sind wir bisher an strukturierte Gitter gebunden und müssen je nach Anforderungen an das Gitter (Gitterlinien dürfen sich nicht schneiden, Orthogonalität am Rand, etc...) eine Vielzahl an höheren Thermen in der TFI-Formel benutzen.

Eine attraktive Alternative könnte sein, ein vorhandenes Gitter an geänderte Ränder anzupassen und weiter zu verwenden. Es fällt auf

- Ein Strukturiertes Gitter ist auch “nur” eine Deformation eines kartesischen Gitters

- Halten wir die Deformationsidee allgemein genug, könnten wir sowohl gegebene unstrukturierte Gitter weiterverwenden als auch mit dem gleichen Ansatz strukturierte Gitter neu erzeugen

Eine weitere Idee ein Gitter zu deformieren (und damit auch ein strukturiertes Gitter zu erzeugen) ist das Aufgreifen von Ideen aus der Physik: Wir legen auf jeder Randkurve eine Spannung an und benutzen die elektrostatischen Feldlinien als Gitterlinie, siehe auch Abb. 6.7. In unserem bisherigen Setting der Konstrukti-

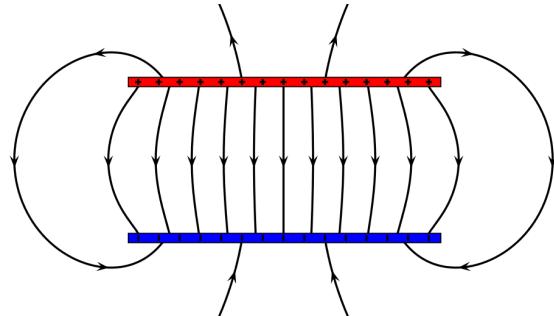


Abbildung 6.7: Feldlinien in einem Plattenkondensator sind ein super Kandidat für Gitterlinien eines strukturierten Meshes.

on einer Fläche aus vier Randkurven müssen wir dabei zweimal das elektrische Feld berechnen, jeweils für einen Potentialunterschied zwischen den beiden sich gegenüberliegenden Randkurven. Die Gleichung für das elektrische Feld im Inneren ist die Laplace-Gleichung, deswegen wird dieser Ansatz auch als “Elliptic Mesh Generation” (bzw. Deformation) bezeichnet.

Definition 6.13 (Elliptic Mesh Generation). Das abgeschlossene Gebiet Ω sei gegeben als das Innere der vier Randkurven $c_i : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^2$ für $i = 1, \dots, 4$, vergleicht wieder Abb. 6.2 und 6.3 für das generelle Layout. Wir bestimmen zweimal das (elektrische) Potential im Inneren

$$-\Delta u_i(x_1, x_2) = 0 \text{ in } \Omega,$$

für $i \in \{1, 2\}$, jeweils mit Dirichlet-Randbedingung $u_i = 0$ und $u_i = 1$ auf zwei gegenüberliegenden Randkurven und $\frac{\partial u_i}{\partial n} = 0$ auf den beiden anderen gegenüberliegenden Kurven. Eine Gitterlinie ist dann die (elektrische) Feldlinie als Lösung des “Flows”

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{c} = \nabla u_i(\tilde{c})$$

mit entsprechendem Anfangswert am Rand.

Anders ausgerückt: Ein gegebenes Tupel $(\xi_1, \xi_2) \in [0, 1]^2$ liefert einen Knoten (x_1, x_2) des elliptischen Gitters, falls

$$(u_1(x_1, x_2), u_2(x_1, x_2)) = (\xi_1, \xi_2) \quad (6.4)$$

gilt. Aufgrund der Maximum-Eigenschaft des Laplace-Operators kann so ein Punkt immer gefunden werden. Wie oben beschrieben handelt es sich somit auch um eine Deformation eines kartesischen Gitters.

Bemerkung 6.14. Die Verwendung des Laplace-Operators liefert einige Vorteile bei der Gittergeneration und -deformation:

- Maximumprinzip: Die Gitterlinien fangen alle am Rand an und hören am Rand auf, das Gitter ist eindeutig
- Die Gitterlinien sind alle H^1 -glatt, können sich nicht berühren und bleiben innerhalb des Gebiets
- Mit einer ähnlichen Idee können wir auch ein gegebenes (unstrukturiertes) Gitter auf eine neue Randkurve verschieben, indem wir das Randverschiebungsfeld V durch Lösen eines Laplace-Problems für jede Komponente ins Volumen fortsetzen. Oft macht man es sich dann aber etwas einfacher und löst $-\Delta u_i = 0$ mit $u_i = V_i$ am Rand (komponentenweise) und verschiebt anschließend direkt $x_{\text{new}} = x_{\text{old}} + u(x_{\text{old}})$ (2D vektorwertig).
- Bei der Gitterdeformation sind noch weitere physikalische Analogien beliebt, z.B. die Gitterdeformation analog zur Deformation eines elastischen Festkörpers unter der Einwirkung von Kräften (“Linear Elasticity”)

Neben den Vorteilen und der Motivation aus der Physik haben wir uns jetzt jedoch (zumindest bei der Benutzung als Gittergenerator) ein Huhn-Ei-Problem eingefangen: Um $-\Delta$ in Ω zu lösen brauchen wird schon ein Gitter, aber genau das sollte ja bestimmt werden...

Definition 6.15 (Elliptic Mesh Generation, revisited). Es soll ein Gitter nach der Vorgehensweise von Gleichung (6.4) bestimmt werden. Der Gitterpunkt mit Index (i, j) ist gegeben durch

$$(\xi_1^i, \xi_2^j) = (u_1(x_1^i, x_2^j), u_2(x_1^i, x_2^j)) = u(x_1^i, x_2^j) \in \mathbb{R}^2, \quad (6.5)$$

mit $i = 1, 2, \dots, n_i$ und $j = 1, 2, \dots, n_j$ und $\xi_1^i, \xi_2^j \in [0, 1]$. Somit sind die Tupel ξ_1^i, ξ_2^j die Knoten eines kartesischen Gitters. Wir invertieren also die obige Gleichung um eine PDE auf einem kartesischen Gitter zu erhalten, welche z.B. mit finiten

Differenzen gelöst werden kann, und die aber dem Laplace-Operator auf Ω , also in den Ortsvariablen (x_1, x_2) , entspricht. Variablentransformation liefert

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x_i} = \sum_{k=1}^2 \frac{\partial u(x)}{\partial \xi_k} \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i}$$

$$\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_i \partial x_j} = \sum_{k,\ell=1}^2 \frac{\partial^2 u(x)}{\partial \xi_k \partial \xi_\ell} \frac{\partial \xi_\ell}{\partial x_j} \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i}.$$

Für die zweiten Ableitungen des Laplace-Operators also

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} = \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_1} \right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi_1^2} + 2 \frac{\partial \xi_1}{\partial x_1} \frac{\partial \xi_2}{\partial x_1} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi_1 \partial \xi_2} + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_1} \right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi_2^2}$$

Es ergibt sich also die PDE in (ξ_1, ξ_2) Koordinaten

$$\alpha \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 u_1}{\partial \xi_1^2} \\ \frac{\partial^2 u_2}{\partial \xi_1^2} \end{pmatrix} + 2\beta \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 u_1}{\partial \xi_1 \partial \xi_2} \\ \frac{\partial^2 u_2}{\partial \xi_1 \partial \xi_2} \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 u_1}{\partial \xi_2^2} \\ \frac{\partial^2 u_2}{\partial \xi_2^2} \end{pmatrix} = 0, \quad (6.6)$$

wobei

$$\alpha = \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_2} \right)^2$$

$$\beta = \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_1} \right) \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_1} \right) + \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_2} \right) \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_2} \right)$$

$$\gamma = \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_2} \right)^2.$$

Diese Koeffizienten können jetzt über die Beziehung $\xi = u(x)$ ebenfalls nach $\frac{\partial u}{\partial \xi}$ aufgelöst und eingesetzt werden (Übung). Die Gleichung des Elliptic Mesh Makings (6.6) ist also nicht-linear! In der Anwendung findet dieser Schritt aber oft im diskreten statt, so dass hierfür direkt die Ableitungen durch finite Differenzen ersetzt sind. Setzt man die Finiten Differenzen nun direkt ein, so ergibt sich z.B. auch, dass eine Vorgabe von Neumann-Randbedingungen direkt den Abstand der Gitterlinien am Rand bestimmt.

6.1.3 Strukturierte Gitter und HPC

Strukturierte Gitter sind die älteste Form der Diskretisierung von PDEs. Man kann sie sogar für Finite Differenzen in krummlinigen Geometrien benutzen. Da jedes

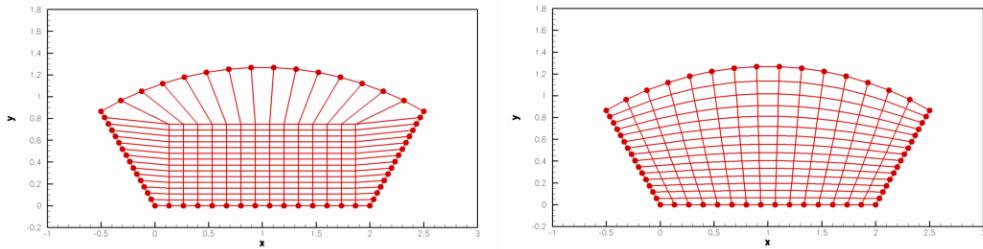


Abbildung 6.8: Eine etwas andere Vorgehensweise: nach Wahl der Randdiskretisierung wird “irgendein” Gitter erzeugt, auf dem man dann die Laplace-Gleichung lösen kann.

strukturierte Gitter eine bijektive Abbildung des Einheitswürfels ist, stellt die Erzeugung von solchen Gittern um Geometrien mit vielen Details und Löchern ein gewisses Problem dar (z.B. Auto mit Außenspiegeln, Scheibenwischern, etc). Da sie jedoch zu extrem regulären Speicherzugriffen führen, sind strukturierte Gitter heute immer noch bei hochparallelen Rechnungen von großer Bedeutung, da sie maßgeschneidert für Vektor-Rechner sind, siehe auch Abb. 6.9 Viele echte An-

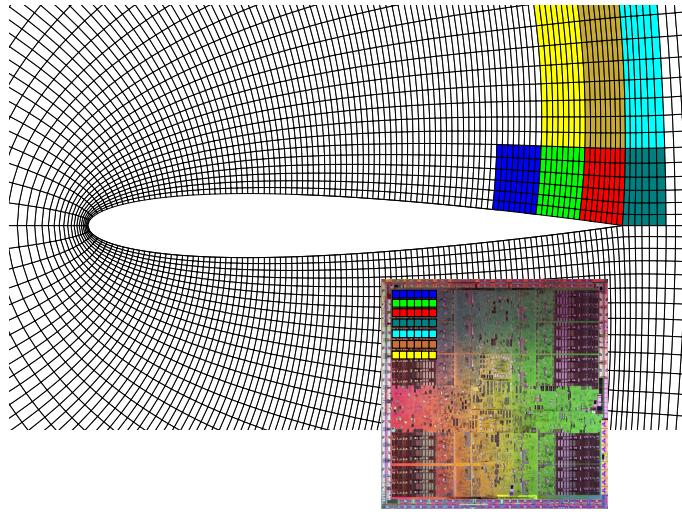


Abbildung 6.9: Ein strukturiertes Gitter führt zu sehr gut vorhersehbaren Speicherzugriffen. Ein Vektorprozessor (z.B. Grafikkarten oder CRAY-Rechner) kann die selbe Instruktion für Bereiche von zusammenhängenden Zellen gleichzeitig anwenden.

wendungen benutzen deshalb heute hybrid Gitter, bei denen manche Bereiche

strukturiert und andere Bereiche unstrukturiert sind.

6.2 Unstrukturierte Gitter

Abschließend beschäftigen wir uns noch kurz mit der Generierung und Deformation von unstrukturierten Gittern. In diesem Kontext bezeichnet der Ausdruck "Simplex" (auch Primitiv) das kleinste mögliche geometrische Objekt mit geraden Seiten, welches in Volumen einschließt, in 1D also eine Strecke, in 2D ein Dreieck und in 3D einen Tetraheder. Das Problem ein unstrukturiertes Gitter zu generieren entspricht also vorrangig der Unterteilung einer endlichen Punktmenge in sich nicht überlappende Simplices, so dass jeder Punkt die Ecke mindestens eines Simplexes ist. Daran untergeordnet ist die Frage, wie man diese endlich vielen Punkte am besten verteilt, um eine gegebene Geometrie am möglichst gut aufzulösen.

In einem ersten Schritt betrachten wir endlich viele Knoten als gegeben und versuchen, diese zu möglichst gleichmäßigen und sich nicht überschneidenden Dreiecken zu verbinden. Danach erlauben wir auch die Position der Punkte als zusätzlichen Freiheitsgrad. Das mit Abstand am weitesten verbreitete unstrukturierte Gitter ist die sog. Delaunay Triangulierung. Diese wird häufig über geometrische Aspekte definiert (Maximierung des spitzesten Winkels der Simplices). Besonders elegant ist jedoch der Zugang als Dual der Voronoi Tessellation (Tessellation = engl. "Mosaik").

6.2.1 Voronoi Tessellation und Delaunay Gitter

Wir betrachten zunächst die Voronoi Tessellation:

Definition 6.16. Es sei eine endliche Punktmenge $P = \{p_1, \dots, p_n\} \in \Omega$ gegeben. Dann wird als Voronoi Gebiet (oder Voronoi Zelle) $Vo(p_i, P)$ die Menge an Punkten des \mathbb{R}^n bezeichnet, die näher an p_i als an allen anderen Punkten aus P liegt, also

$$Vo(p_i, P) := \{x \in \mathbb{R}^n : d(p_i - x) \leq d(p_j - x) \forall p_j \in P\}.$$

Dabei bezeichnet d eine geeignete Metrik. Die Menge aller Voronoi Gebiete zu P bildet dann die Voronoi Tessellation. Siehe auch Abb. 6.10. Die Punkte p_i werden auch als Generator eines Voronoi Gebietes bezeichnet.

Bemerkung 6.17. Voronoi Tessellationen haben ungemeines Anwendungspotential:

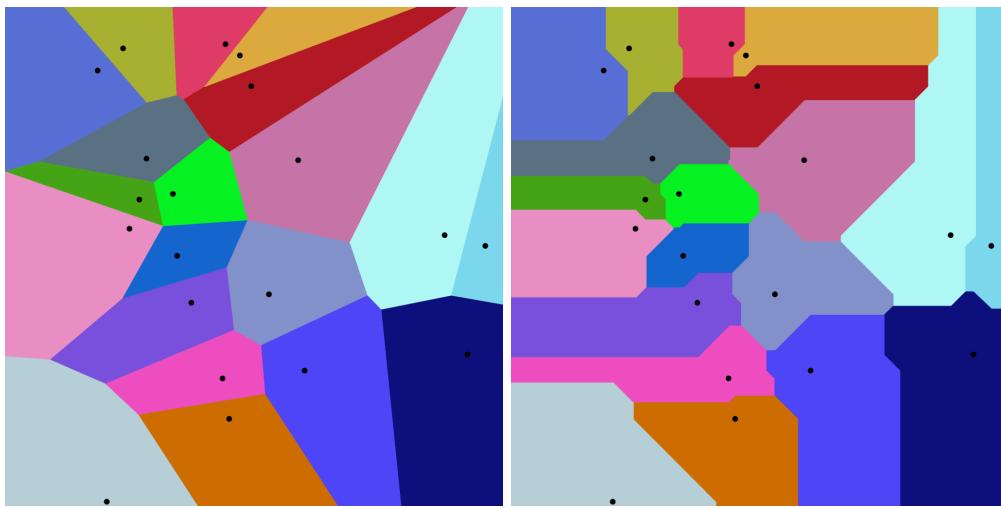


Abbildung 6.10: Voronoi Tessellation für 20 Punkte. Euklidischer Abstand links, L^1 -norm rechts.

- In der Luftfahrt erkennt man über die Voronoi Zelle in der man sich befindet den nächstgelegenen Notlandeplatz
- In der Epidemilogie das Finden von Krankheitsquellen: 1854 hat John Snow die Voronoi Tessellation der Londoner Wasserpumpen vorgenommen und so eine Wasserpumpe als Quelle der Cholera Epidemie statistisch ausgemacht, noch bevor Krankheitsübertragung durch Viren und Bakterien bekannt war
- In der Klimaforschung das Einzugsgebiet einer Messstation
- In der Geologie der Einzugsbereich eines Bohrlochs
- Das Auftreten kristalliner Strukturen
- Path planning bei Robotern
- Die Hilfenachricht, welche anzuzeigen ist, wenn man am Computer mit der Maus über einem Feld bleibt
- ...

Lemma 6.18 (Eigenschaften der Voronoi Gebiete). Das Voronoi Gebiet erfüllt einige Eigenschaften:

- Jedes Voronoi Gebiet ist konvex

- Wenn v der Schnittpunkt der Voronoi Gebiete $Vo(p_1, P), \dots, Vo(p_k, P)$ mit $k \geq 3$ ist (also v gehört zu drei oder mehr Voronoi Gebieten), dann ist v das Zentrum eines Kreises $C(v)$ und p_1, \dots, p_k liegen auf dem Kreis. Anders ausgedrückt: Der Berührpunkt von mindestens drei Voronoi Gebieten ist von allen Generatorpunkten p_i gleich weit entfernt.
- Das Innere des Kreises $C(v)$ beinhaltet keine weiteren Punkte aus P .

Beweis. Die Aussagen oben sind recht einfache geometrische Eigenschaften. Die Menge aller Punkte, welche von p_1 und p_2 den gleichen Abstand haben, bilden eine Gerade in 2D bzw. eine Hyperebene in n Dimensionen. Bei mehr als zwei Punkten ist das Voronoi Gebiet der Schnitt aller solcher Hyperebenen und damit konvex. Siehe auch Abb. 6.11. Außerdem ist der Schnittpunkt v von allen

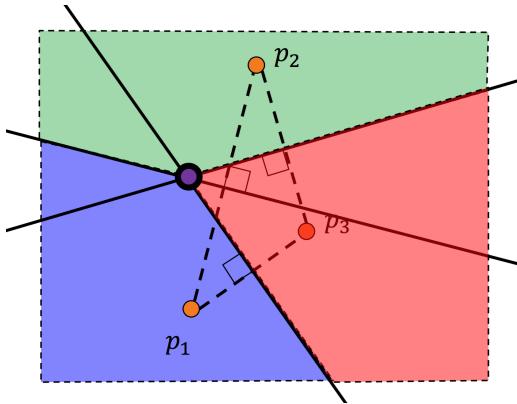


Abbildung 6.11: Ein Voronoi Gebiet entsteht als Schnitt von Hyperebenen

erzeugenden Punkten p_1, \dots, p_k gleich weit entfernt, diese liegen somit auf einem Kreis $C(v)$. Liegt ein weiterer Punkt aus P in $C(v)$, der nicht v selber ist, so hat dieser Punkt einen geringeren Abstand zu v als v zu p_1, \dots, p_k hat. Widerspruch zur Definition des Voronoi Gebiets. \square

Es gibt eine Vielzahl von Arten, das sog. Delaunay Gitter zu definieren. Oftmals sind diese von Überlegungen geprägt, wie die Maximierung des spitzesten Winkels in allen Simplices. Der Einfachheit betrachten wir hier nur den zweidimensionalen Fall. und definieren das Delaunay Gitter als das Dual der Voronoi Tesselation

Definition 6.19 (Delaunay Gitter, Delaunay Kante). Es sei eine Menge P von endlich vielen Knoten gegeben. Für jeden Punkt v , welcher zu drei oder mehr Voronoi Gebieten gehört und deren Generatoren p_i nicht alle auf einem Kreis liegen, formen wir einen Simplex durch gerades Verbinden der Generatoren aller

Voronoi-Gebiete zu denen v gehört. Die so entstehenden Strecken heißen “Delaunay Kanten”. Das Delaunay Gitter ist somit das Duale der Voronoi Tesselation.

Einfacher gesagt: Wir konstruieren Dreiecke durch gerades Verbinden der Generatoren von benachbarten Voronoi Gebieten, wie dargestellt in Abb. 6.12. In dem degenerierten Fall, also wenn mehr als drei Generatoren auf einem Kreis

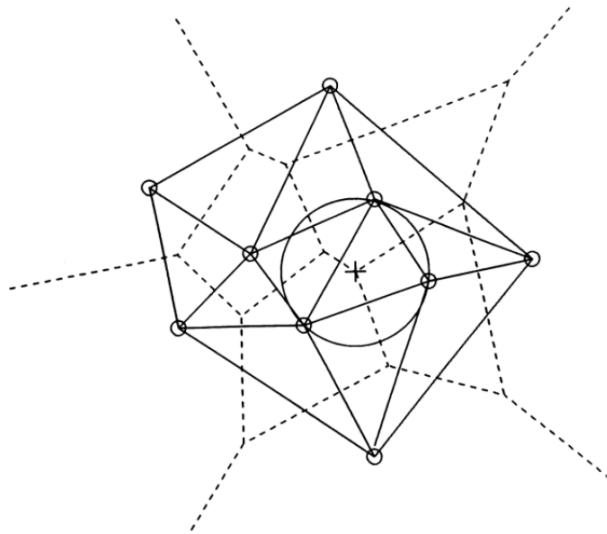


Abbildung 6.12: Das Delaunay Mesh als Dual der Voronoi Tesselation erfüllt das “Empty Circle Criterion”.

liegen, erzeugen wir einen Simplex durch beliebige weitere Teilung.

Lemma 6.20 (Nächster Nachbar). Es sei $p_i, p_j \in P$ gegeben. Dann gilt: Ist p_j der eindeutige nächste Nachbar von p_i , so ist die Strecke $\overline{p_i p_j}$ eine Delaunay Kante, also Teil des Delaunay Gitters.

Beweis. p_j ist der eindeutige nächste Nachbar von p_i genau dann, wenn der abgeschlossene Kreis $B(p_i, r)$ um p_i mit Radius $r := |p_i - p_j|$ keinen weiteren Punkt aus P enthält. Damit ist auch im abgeschlossenen Kreis $B(\tilde{p}, \tilde{r})$ um den Punkt $\tilde{p} := \frac{p_i + p_j}{2}$ mit Radius $\tilde{r} := \frac{|p_i - p_j|}{2}$ kein weiterer Punkt aus P . Da \tilde{p} von p_i und p_j gleich weit entfernt ist, liegt er somit auf der Voronoi-Kante zwischen p_i und p_j . Er gehört also zu beiden Voronoi Gebieten. Nach Konstruktion des Delaunay Gitters werden die Voronoi-Zentren gerade miteinander verbunden, was die Aussage ist. Siehe auch Abb. 6.13. \square

Bemerkung 6.21. Der Graph der nächsten Nachbarn ist also eine Teilmenge der Delaunay Triangulierung und kann daraus in $O(n \log n)$ berechnet werden.

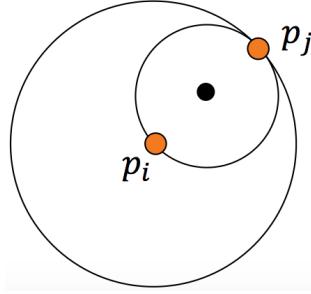


Abbildung 6.13: Nächste Nachbarn formen immer eine Kante im Delaunay Mesh.

Im Folgenden betrachten wir nur nicht-degenerierte Fälle, d.h. nicht mehr als drei Punkte p aus P liegen auf einem Kreis. Durch Hinzufügen von Punkten lässt sich die Degeneration immer vermeiden bzw. in degenerierten Fall muss eine Delaunay Kante zufällig gewählt werden.

Lemma 6.22 (Kreiskriterium (Vorabversion)). Die Punkte p_i und p_j aus P liegen auf einem abgeschlossenen Kreis, welcher keine anderen Punkte aus P enthält, genau dann, wenn die Strecke $\overline{p_i p_j}$ im Delaunay Gitter ist.

Beweis. Es sei $\overline{p_i p_j}$ in Delaunay Gitter. Dann Berühren sich die Voronoi Gebiete $Vo(p_i, P)$ und $Vo(p_j, P)$ entlang einer Kante. Es sei v ein innerer Punkt dieser Kante. Damit ist v gleich weit von p_i und p_j entfernt, also

$$|v - p_i| = |v - p_j| =: r, \text{ und } |v - p_k| > r \quad \forall k \neq i, j$$

Nach Definition der Voronoi Gebiete kann sich kein weiterer Punkt im Kreis um v befinden.

Es liegen p_i und p_j auf einem abgeschlossenen Kreis B mit Zentrum x , in dem sich keine weiteren Punkte aus P befinden. Da x gleich weit von p_i und p_j entfernt ist, liegt x auf beiden Voronoi Gebieten, $x \in Vo(p_i, P) \cap Vo(p_j, P)$. Da auf oder in B kein weiterer Punkt aus P liegt, gibt es eine Umgebung von Kreiszentrern um x , auf denen immernoch p_i und p_j und kein weiterer Punkt liegt. Damit liegt x auf der Voronoi Kante und per Konstruktion sind p_i und p_j im Delaunay Gitter verbunden. Siehe auch Abb. 6.14. \square

Für zwei Dimensionen bildet der Umkreis um die Dreiecke des Delaunay Gitters eine schöne geometrische Erklärung der Ursprünglichen Intention des Delaunay Gitters: Die Maximierung des kleinsten Dreieckswinkels. Dazu betrachten wir zunächst das “Empty Circle Criterion” oder auch “Delaunay Kriterium” und zeigen danach, dass dieses Kriterium tatsächlich den kleinsten Winkel maximiert.

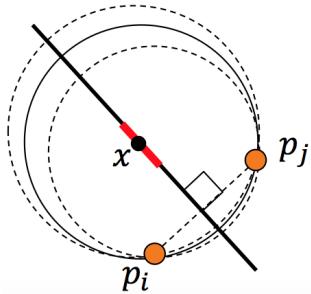


Abbildung 6.14: Eine Voronoi Kante entsteht auch durch Auftragen von Kreisen entlang einer Strecke

Lemma 6.23 (Delaunay Kriterium, “Empty Circle Criterion”). Das oben definierte Delaunay Gitter erfüllt im nicht degenerierten Fall das “Empty Circle Criterion”: Der Umkreis um jedes Dreieck des Delaunay-Gitters enthält keinen weiteren Punkt aus P .

Beweis. Wähle den Kreis aus Lemma 6.22 so groß wie möglich. \square

Lemma 6.24 (Winkeloptimalität). Die Triangulierung, welche den spitzesten Winkel maximiert, ist die Delaunay Triangulierung.

Beweis. Wir zeigen: Aus nicht-Delaunay folgt, dass der spitzeste Winkel verbessert werden kann. Es sei also das Delaunay-Kriterium verletzt und es gibt ein Dreieck $\overline{p_i p_j p_k}$, in dessen Umkreis sich noch zusätzlich der Punkt p_1 aus P befindet. Nach dem verallgemeinerten Satz des Thales, Abb. 6.15 kann durch

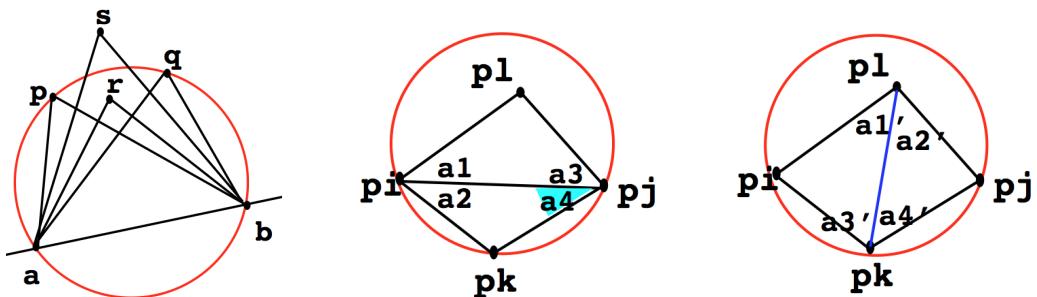


Abbildung 6.15: Verallgemeinerter Satz des Thales: Winkel $s < \text{Winkel } p = \text{Winkel } q < \text{Winkel } r$. Durch Vertauschen einer Ecke kann das Dreieck verbessert werden.

vertauschen (“swap”) einer Kante ein Dreieck mit größerem Winkel erzeugt werden. \square

Oftmals wird die obige Aussage zur eigentlichen Definition des Delaunay Gitters benutzt, da sie die eigentliche Intention der Delaunay Trianguliert am besten widerspiegelt, nämlich möglichst gleichseitige Dreiecke zu konstruieren. Das Konzept des “Edge Swapping” ist ein erster Ansatz, eine Delaunay Triangulierung rechnergestützt zu konstruieren: Ausgehend von einer beliebigen sich nicht überschneidenden Triangulierung werden so lange Kanten geswappt, bis das Kreiskriterium erfüllt ist. Da für jedes Dreieck das Kreiskriterium neu überprüft werden muss, hat dieser Ansatz im schlimmsten Fall die Laufzeit $o(n^2)$.

6.2.2 Optimale Delaunay Triangulierungen und bestes Point Spacing

Bisher war die Menge an Punkten P gegeben und es wurde nur die bestmögliche Triangulierung gesucht. Die Position der Knoten in P war dabei als fest vorgegeben. Wie Abb. 6.16 zeigt, liefert die Delaunay Triangulierung bei festen Knoten noch lange nicht automatisch auch ein “schönes” Gitter, wobei “schön” eine möglichst gleichmäßige Punkteverteilung mit möglichst gleichmäßigen Dreiecken meint. Wir behandeln deshalb Anzahl und Position der Punkte aus P als

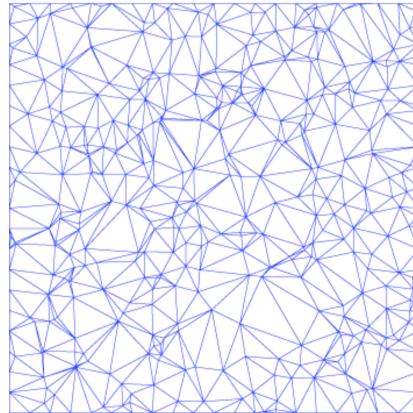


Abbildung 6.16: Die Delaunay Triangulierung muss noch lange nicht “schön” aussehen.

weiteren Freiheitsgrad.

Verbesserung durch Hinzufügen von Punkten

Wir behandeln das Hinzufügen von Punkten nur kurz, da ein Hinzufügen immer auch eine Änderung der Kanten bedingt und deshalb eher dem “Remeshing” zuzuordnen ist als der Gitterdeformation, wie man sie für Formoptimierung

benötigt. Hinzugefügte Punkte werden oft “Steiner Punkte” genannt, auch wenn Sie eigentlich keine “echten” Steiner Punkte (ein echter Steiner Punkt nach J. Steiner, 1796-1863, liegt auf dem Umkreis und symmetrisiert ein Dreick)

Definition 6.25 (Steiner Triangulierung). Es sei P eine endliche Menge von Knoten. Ferner bezeichne b den kleinsten Abstand zweier Punkte aus P . Beginnend von der Delaunay Triangulierung von P wird in der Steiner Triangulierung so lange der Mittelpunkt v des Umkreises jedes Dreiecks zu P hinzugefügt, bis kein Umkreis mehr mit Radius größer als b auftritt. Dieses ist auch dargestellt in

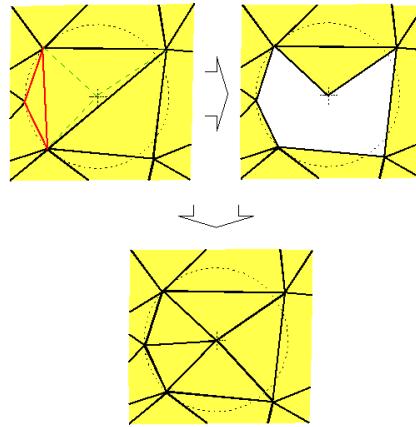


Abbildung 6.17: Hinzufügen eines Steiner Punktes

Abb. 6.17. Da nach dem Delaunay Kriterium der Umkreis frei von Punkten aus P ist, ist kein anderer Punkt aus P näher als b an v . Der Algorithmus terminiert spätestens, wenn die Umkreise mit Radius b das Gebiet überdecken. Es entsteht ein Gitter, in dem alle Kanten zwischen b und $2b$ lang sind.

Verbesserung durch Verschieben von Punkten

Im vorherigen Kapitel wurden einige Charakterisierungen der Delaunay Triangulierung behandelt. Eine weitere Zugangsmöglichkeit ist über die Approximationstheorie, welche auch die Motivierung für eine Umverteilung der Knoten in P liefert. Da das Dreiecksgitter oftmals zur Darstellung von Funktionen genutzt werden soll, ist es naheliegend, die auf einer Triangulierung basierende Approximationsqualität zu maximieren. Dabei wird hier der zunächst der Ansatz nach [2] dargestellt, da dieser einen Methodisch sehr schönen Zugang zur “Centroidalen Voronoi Tesselation” und dem schon zu vor bekannten Lloyd Algorithmus.

Definition 6.26 (Approximationsfehler). Es sei Ω ein Gebiet und P eine endliche Menge von Knoten in Ω . Ferner sei \mathcal{T} eine Triangulierung von P und $f \in C(\Omega, \mathbb{R})$

eine Funktion. Des weiteren sei $f_{I,\mathcal{T}}$ die Interpolation von f aus linearen Funktionen auf \mathcal{T} (z.B. die Darstellung von f in den Ansatzfunktionen der Finiten Element Methode). Die Approximationsqualität Q der Triangulierung \mathcal{T} wird dann als die L^q -Norm des Approximationsfehlers definiert, also

$$Q(\mathcal{T}, f, q) := \|f - f_{I,\mathcal{T}}\|_{L^q(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |f(x) - f_{I,\mathcal{T}}(x)|^q dx \right)^{\frac{1}{q}}$$

Bemerkung 6.27 (Dual Weighted Residual). Wir betrachten hier nur algebraische Funktionen f , im Wesentlichen $f(x) = \|x\|^2$, die euklidische Abstandsfunktion. Tatsächlich kann man auch optimale Triangulierungen suchen, welche den Finite Elemente Approximationsfehler für eine gegebene PDE minimieren. Das Stichwort dafür ist “Dual Weighted Residual (DWR)” Methode.

Theorem 6.28 (Approximationseigenschaft). Ist Ω die konvexe Hülle von P und $f(x) = \|x\|^2$, dann ist die Delaunay Triangulierung DT (basierend auf dem L^2 -Voronoi Diagramm) die Minimierende des Approximationsfehlers Q aus der Menge der Triangulierungen T_P , welche P enthalten. Es gilt also

$$Q(DT, \|x\|^2, q) = \min_{\mathcal{T} \in T_P} Q(\mathcal{T}, \|x\|^2, q) \quad \forall 1 \leq q \leq \infty.$$

Beweis. Der Beweis ist sehr technisch und keineswegs trivial. Tatsächlich liegt hier eine längere Entwicklung zu Grunde, bis die Aussage in der derzeitigen Form bewiesen wurde. Konkret findet man die Beweise für verschiedene Fälle:

- $\mathbb{R}^2, q = \infty$: [5]
- $\mathbb{R}^n, q = \infty$: [9]
- $\mathbb{R}^2, 1 \leq q < \infty$: [10]
- $\mathbb{R}^n, 1 \leq q \leq \infty$: [2]

Die Aussage ist also erst seit 2004 vollständig bewiesen. \square

Definition 6.29 (Optimale Delaunay Triangulierung). Es sei P eine endliche Menge an Knoten, Ω die konvexe Hülle von P und $\mathcal{T}(P)$ eine Triangulierung von P . Die Triangulierung P heißt optimale Delaunay Triangulierung, wenn sie Q aus Theorem 6.28 sowohl in Bezug auf die Konnektivität \mathcal{T} als auch in Bezug auf die Knotenpositionen $p_i \in P$ minimiert, also

$$E(p_1, \dots, p_n, \mathcal{T}) := Q(\mathcal{T}, \|x\|^2, 1)$$

soll minimiert werden in allen Argumenten.

Lemma 6.30. Es sei p_i aus P gegeben und Δ_i die Menge aller Dreiecke mit p_i als Ecke (das wird manchmal auch "Stern" genannt). Dann gilt mit $q = 1$ und $f(x) = \|x\|^2$ folgende Darstellung des Interpolationsfehlers Q auf Δ_i :

$$Q(\Delta_i, f(x), 1) = \int_{\Delta_i} \|f(x) - f_{l,\Delta_i}(x)\|_1 \, dx = \frac{1}{d+1} \int_{\Delta_i} \|x - p_i\|^2 \, dx,$$

wobei d die Dimension des Gebietes ist.

Beweis. Der Beweis basiert im wesentlich auf der Taylor-Entwicklung, benötigt aber Baryzentrische Koordinaten und deren Eigenschaften. Er findet sich z.B. in [2]. \square

Definition 6.31 (Centroidale Voronoi Tesselation). Um ein gleichförmiges Gitter zu finden, wird E alternierend in den Argumenten $P = \{p_1, \dots, p_n\}$ und \mathcal{T} minimiert. Die Minimierung bzgl. \mathcal{T} entspricht der Konstruktion einer Delaunay Triangulierung über das Voronoi-Diagramm wie im vorherigen Kapitel beschrieben.

Wir betrachten die Optimierung in den Knotenpositionen p_i und betrachten die dazugehörige Delaunay Triangulierung und Voronoi Tesselation als bekannt. Wenn Ω polygonal berandet ist, dann lässt sich das Integral über Ω auch als Summe der Integrale über jede Voronoi Zelle $Vo(p_i, P)$ schreiben. Jede Voronoi Zelle ist ein Stern wie Δ_i in Lemma 6.30. Also gilt:

$$E(p_1, \dots, p_n, \mathcal{T}) = Q(\mathcal{T}, \|x\|^2, 1) = \frac{1}{d+1} \sum_{i=1}^n \int_{Vo(p_i, P)} \|x - p_i\|^2 \, dx$$

Da nur die Punkteposition Unbekannte ist, halten wir die Voronoi Zellen konstant. Ableiten und Gradient gleich Null setzen liefert

$$\begin{aligned} \nabla_{p_i} E(p_1, \dots, p_n, \mathcal{T}) &= \frac{2}{d+1} \int_{Vo(p_i, P)} (x - p_i) \, dx \\ &= \frac{2}{d+1} \int_{Vo(p_i, P)} x \, dx - \int_{Vo(p_i, P)} p_i \, dx \\ &= \frac{2}{d+1} \int_{Vo(p_i, P)} x \, dx - p_i \int_{Vo(p_i, P)} \vec{1} \, dx \stackrel{!}{=} 0 \quad d\text{-dimensional} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich als notwendiges Optimalitätskriterium

$$p_i^* = \frac{\int_{Vo(p_i, P)} x \, dx}{\text{vol}(Vo(p_i, P))} \quad d\text{-dimensional}$$

Das ist genau die Definition des Schwerpunktes. D.h. die Knoten p_i des Gitters sind genau dann in diesem Sinne optimal verteilt, wenn sie der (geometrische) Schwerpunkt ihrer eigenen Voronoi Zelle sind. In diesem Fall spricht man auch von einer Centroidalen Voronoi Tesselation (engl. centroid: Schwerpunkt).

Definition 6.32 (Lloyd's Algorithm, Voronoi-Iteration). Im Lloyd Algorithmus werden alternierend die Generatorpunkte auf den Schwerpunkt ihrer Voronoi Zellen gesetzt und danach die Voronoi Gebiete neu bestimmt. Siehe auch Abb. 6.18. Dies entspricht genau der zweistufigen Optimierung aus der Optimal Delaunay Triangulation.

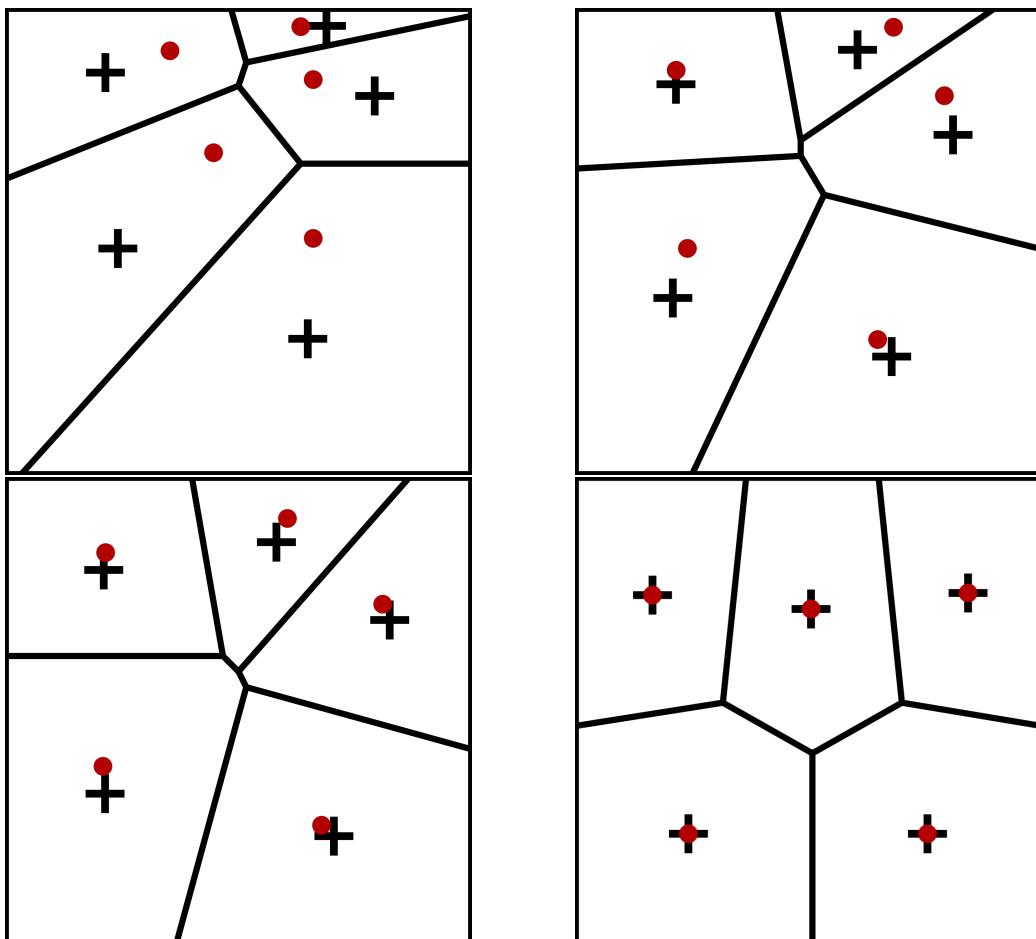


Abbildung 6.18: Lloyd's Algorithm: Die Generatoren (Punkte) werden sukzessiv auf den Schwerpunkt (Kreuz) ihrer Voronoi Zellen (Linien) gelegt.

Definition 6.33 (Mesh Repair Algorithm). In der Formoptimierung mit PDEs als Nebenbedingung ist es oftmals wünschenswert, die Topologie des Gitters nicht zu

ändern, da sich sonst die Nicht-Null Struktur der Systemmatrix ändert. Eine sehr robuste Gitterdeformation und -reparatur erhält man, indem man die Lloyd Iteration ohne Neuberechnung der Voronoi Zellen durchführt. Das so berechnete Gitter ist dann nicht mehr Delaunay, aber dennoch sind im Allgemeinen die Punkte sehr gut verteilt. Für die Punkteverteilung auf Oberflächen kann der Lloyd-Algorithmus im Tangentialraum angewendet werden, also die Minimierung von

$$\int_{V_0(p_i, P)} (x - p_i)_\Gamma \, d x,$$

in p_i , wobei $v_\Gamma := v - \langle v, n \rangle n$ die Projektion von v auf den Tangentialraum ist. Wegen der Abhängigkeit von der Normalen n ist der Gradient hiervon allerdings nicht mehr so elegant wie der Schwerpunkt.

Die resultierende Punkteverschiebung liegt im Tangentialraum. Nach der Hadamard-Formel sind tangentiale Verschiebungen irrelevant für die Zielfunktion. Es handelt sich somit "nur" um eine reparameterisierung, welche die Auflösung im Diskreten verbessert.

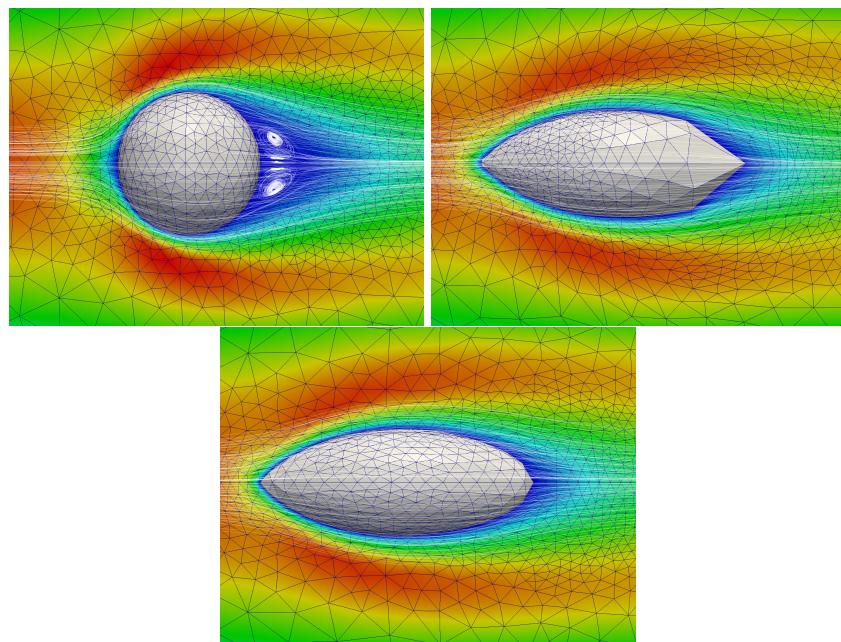


Abbildung 6.19: Effekt der Reparameterisierung durch tangenzialen Lloyd Algorithmus für das Navier–Stokes Problem

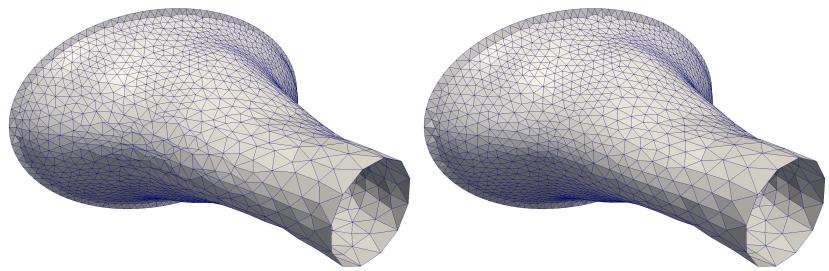


Abbildung 6.20: Effekt der Reparameterisierung durch tangenzialen Lloyd Algorithmus für das Stealth Problem

Literaturverzeichnis

- [1] K. Atkinson and W. Han. *Theoretical Numerical Analysis: A Functional Analysis Framework*. Texts in Applied Mathematics 39. Springer, second edition, 2007.
- [2] L. Chen and J. Xu. Optimal Delaunay triangulations. *Journal of Computational Mathematics*, 22(2):299–308, 2004.
- [3] B. Christianson. Reverse accumulation and attractive fixed points. *Optimization Methods and Software*, 3:311–326, 1994.
- [4] S. A. Coons. Surfaces for computer aided design of space forms. Technical Report MAC-TR-41, Massachusetts Institute of Technology (MIT), 1967.
- [5] E. F. D'Azevedo and R. B. Simpson. On optimal interpolation triangle incidences. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 6:1063–1075, 1989.
- [6] M. C. Delfour and J.-P. Zolésio. *Shapes and Geometries: Analysis, Differential Calculus, and Optimization*. Advances in Design and Control. SIAM Philadelphia, 2001.
- [7] O. Pironneau. On optimum profiles in Stokes flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 59(1):117–128, 1973.
- [8] O. Pironneau. On optimum design in fluid mechanics. *Journal of Fluid Mechanics*, 64(1):97–110, 1974.

- [9] V. T. Rajan. Optimality of the Delaunay triangulation in r^d . In *Proceedings of the Seventh Annual Symposium on Computational Geometry*, pages 357–363, 1991.
- [10] S. Rippa. Long and thin triangles can be good for linear interpolation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 29:257–270, 1992.
- [11] J. Sokolowski and J.-P. Zolésio. *Introduction to Shape Optimization: Shape Sensitivity Analysis*. Springer Berlin Heidelberg, 1992.