

Technische Universität Dresden
Fachrichtung Mathematik

Institut für Wissenschaftliches Rechnen

**Diskretes Äußeres Kalkül (DEC)
auf Oberflächen ohne Rand**

Diplomarbeit
zur Erlangung des ersten akademischen Grades

Diplommathematiker(in) (Technomathematik)

vorgelegt von

Name: Nitschke Vorname: Ingo
geboren am: 04.05.1983 in: Königs Wusterhausen

Tag der Einreichung: 26. August 2014

Betreuer: Prof. Dr.rer.nat.habil Axel Voigt

ERKLÄRUNG

Hiermit erkläre ich, dass ich die am heutigen Tag eingereichte Diplomarbeit zum Thema „Diskretes Äußeres Kalkül (DEC) auf Oberflächen ohne Rand“ unter Betreuung von Prof. Dr.rer.nat.habil Axel Voigt selbstständig erarbeitet, verfasst und Zitate kenntlich gemacht habe. Andere als die angegebenen Hilfsmittel wurden von mir nicht benutzt.

Datum

Unterschrift

Inhaltsverzeichnis

0 Einführung	1
1 Diskrete Mannigfaltigkeiten	2
1.1 Primär- und Dualgitter	2
1.2 Kettenkomplexe	12
1.3 Gittergenerierung für Oberflächen	18
1.4 Implizit gegebene Oberflächen	25
2 Diskretes Äußeres Kalkül (DEC)	27
2.1 Diskrete Differentialformen	27
2.2 Äußere Ableitung	31
2.3 Hodge-Stern-Operator	33
2.4 Laplace-Operator	41
2.5 Primär-Dual-Gradient im Mittel	51
3 Anwendung: Oberflächenkrümmung	56
3.1 Weingartenabbildung	56
3.2 Krümmungsvektor	62
3.3 Gauß-Bonnet-Operator	63
3.4 Numerisches Experiment	64
4 Fazit und Ausblicke	77
5 Appendix	I
5.1 Häufige Bezeichner	I
5.2 Algorithmen	I
5.3 Krümmungen für impliziten Oberflächen	III
5.4 Ausgewählte Oberflächen	III

Abbildungsverzeichnis

1.1	Bsp. Umkreismittelpunktunterteilung	11
1.2	Bsp. induzierte Orientierung	11
1.3	Bsp. Sternoperator in 2D	15
1.4	Bsp. Randoperator auf (dualen) 2-Kette	15
1.5	Kantenkräfte für optimale Kantenlängen	21
1.6	Winkeländerung durch Verschiebung	21
1.7	Euler mit und ohne Vorprojektion	23
1.8	Gittergenerierung: Ellipsoid	24
1.9	Gittergenerierung: Lokale Verfeinerung	24
1.10	Projektion	26
2.1	Approximation einer 1-Form	30
2.2	Schema für Laplace	43
2.3	5-Punkte-Stern	43
2.4	lokale Nummerierung	44
2.5	Fehlerplot (Laplace auf Sphäre/Torus)	48
2.6	Laplace auf Sphäre	49
2.7	Laplace auf Torus	49
2.8	Fehlerplot (Laplace auf Torus)	50
2.9	Gradient auf Sphäre	54
2.10	Gradient auf Torus	54
2.11	Gradient auf Torus (Fehler)	54
3.1	Fehler Gauß-/mittlere Krümmung aus Weingartenabb. auf Torus	61
3.2	Außenwinkel der Voronoi-Zelle	64
3.3	Mittlere Krümmung aus Weingartenabb. auf Torus	71
3.4	Fehler (Krümmungen auf Sphäre)	71
3.5	Fehlerplot (Krümmungen auf Sphäre)	72
3.6	Gitterauflösung (quadratische Oberfläche)	72
3.7	Fehler (Krümmungen auf quadratischer Oberfläche)	73
3.8	Fehlerplot (Krümmungen auf quadratischer Oberfläche)	74
3.9	Diameter u. Fehler f. Krümmungsvektor (Torus)	74
3.10	Fehler (Krümmungen auf Ellipsoid)	75
3.11	Fehlerplot (Krümmungen auf Ellipsoid)	76

Tabellenverzeichnis

2.1	Formeln für Äußere Ableitung	33
2.2	Laplace auf Sphäre (DEC)	47
2.3	Laplace auf Sphäre (FEM)	47
2.4	Laplace auf Torus (DEC)	50
2.5	Laplace auf Torus (FEM)	50
2.6	Gradient auf Sphäre	53
2.7	Gradient auf Torus	55
3.1	Gauß-/mittlere Krümmung aus Weingartenabb. auf Torus (ExN)	60
3.2	Gauß-/mittlere Krümmung aus Weingartenabb. auf Torus (AvN)	60
3.3	Gauß-/mittlere Krümmung aus Weingartenabb. auf Torus (ConnN)	60
3.4	IDOFs Vergleich	68
3.5	Weingarten auf der Sphäre (S^*)	68
3.6	Weingarten auf der Sphäre (S^*AvN)	68
3.7	Gauß-Bonnet und Krümmungsvektor auf der Sphäre	68
3.8	Weingarten auf einer quartischen Oberfläche (S^*)	69
3.9	Weingarten auf der Sphäre (S^*AvN)	69
3.10	Gauß-Bonnet und Krümmungsvektor auf einer quartischen Oberfläche	69
3.11	Weingarten auf einem Ellipsoid (S^*)	70
3.12	Weingarten auf einem Ellipsoid (S^*AvN)	70
3.13	Gauß-Bonnet und Krümmungsvektor auf einem Ellipsoid	70

0 Einführung

History: [Whi57] (1957)

1 Diskrete Mannigfaltigkeiten

1.1 Primär- und Dualgitter

Zielsetzung. Bei vielen numerischen Methoden werden Gebiete über nichtabzählbaren Mengen auf denen Gleichungen „leben“ diskretisiert. Ziel dabei ist es endlich viele Gleichungen zu erzeugen, die das ursprüngliche Problem approximativ lösen. Ein Beispiel für solch ein Vorgehen ist die FDM (Finite-Differenzen-Methode) im \mathbb{R}^n . Dort wird ein Gebiet $U \subseteq \mathbb{R}^n$ mit endlich vielen Rechtecken diskretisiert und es wird versucht eine Funktion zu finden, die jedem Knoten einen Wert zuweist und damit endlichdimensional beschrieben ist, so dass diese diskrete Funktion eine stetige Funktion auf U approximiert.

Das funktioniert beim DEC ähnlich. Die Objekte, die es hier zu approximieren gilt, sind allerdings Differentialformen und das Gebiet eine Mannigfaltigkeit welche durch Polyeder diskretisiert wird. Die diskreten Differentialformen sind dann auf den Knoten, Kanten, Flächen usw. als Integralwerte definiert. Wir werden uns hierbei auf Simplizes als spezielle Polyeder beschränken und die Menge der Simplizes so charakterisieren, dass wir eine algebraische Topologie bekommen. Somit wird eine algebraische Struktur erzeugt, die es einem ermöglicht in dieser Topologie „sinnvoll zu rechnen“. Das heißt der große Unterschied zu anderen numerischen Verfahren ist, dass wir nicht auf einem Gitter sondern mit einem Gitter rechnen wollen. Aus diesem Grund müssen Anforderungen an die diskrete Struktur gestellt werden, die bestimmte Eigenschaften der Differentialformen auch widerspiegeln. So bilden die Differentialformen auf einer Mannigfaltigkeit zusammen mit der äußeren Ableitung einen Kokettenkomplex, den de-Rham-Kokomplex und mit ihm die de-Rham-Kohomologiegruppen. Kohomologiegruppen lassen sich mit Hilfe eines Randoperators auch erzeugen, deshalb scheinen zum Beispiel die Simplizialkomplexe als Triangulierung einer Mannigfaltigkeit ein geeigneter Kandidat für eine Gitterstruktur zu sein. Wie wir später noch in Kapitel 2 sehen werden haben wir mit der de-Rham-Abbildung eine Möglichkeit mit der sich Elemente aus dem de-Rham-Kokomplex (Differentialformen) auf dem simplizialen Kokettenkomplex (diskrete Differentialformen) identifizieren lassen. Dazu sind aber einige Voraussetzungen an das Gitter nötig die im Folgende eingeführt werden. Zudem wird im Abschnitt 1.3 eine einfache Möglichkeit geboten bestehende Gitter an diesen Anforderungen anzupassen.

1.1.1 Simplizialkomplex

Die Elemente des noch zu definierenden Simplizialkomplexes sind die Simplizes. Diese wollen wir hier erst einmal geometrisch als Teilmenge des \mathbb{R}^N einführen.

Definition 1.1.1. Ein p -Simplex ist die konvexe Hülle von $p + 1$ geometrisch unabhängigen Punkten im \mathbb{R}^N , d.h.

$$\sigma^p := \left\{ x \in \mathbb{R}^N \middle| x = \sum_{i=0}^p \mu^i v_i \text{ wobei } \mu^i \geq 0 \text{ und } \sum_{i=0}^p \mu^i = 1 \right\} \quad (1.1)$$

Geometrisch unabhängig bedeutet dabei, dass die p Vektoren $v_1 - v_0, v_2 - v_0, \dots, v_p - v_0$ linear unabhängig sind. Konkret werden wir je nach Kontext σ^0 Knoten, Ecke oder Gitterpunkt, σ^1 Kante und σ^2 Dreieck(element) oder Volumenelement nennen. Des Weiteren

schreiben wir auch kurz $\sigma^p = v_0v_1 \dots v_p$ und sagen „Das Simplex σ^p wird von den Ecken $\{v_0, v_1, \dots, v_p\}$ aufgespannt.“.

Bemerkung 1.1.2. Die obige Definition eines Simplexes, hier als σ_{geo} geschrieben, nennt man auch geometrische Realisierung eines Simplexes. Denn es ist auch möglich ein Simplex als Abbildung vom Standard-Simplex

$$\Delta^p := \left\{ (\mu^0, \mu^1, \dots, \mu^p) \middle| \mu^i \geq 0 \text{ und } \sum_{i=0}^p \mu^i = 1 \right\} \subset \mathbb{R}^{p+1} \quad (1.2)$$

in einen Topologischen Raum zu definieren, im obigen Fall in den \mathbb{R}^N . Mit Hilfe der Ecken $v_i \in \mathbb{R}^N$ können wir die Abbildung festlegen durch

$$\sigma_{\text{sing}} = \sigma_{\text{sing}}^p(v_0, v_1, \dots, v_p) : \Delta^p \rightarrow \mathbb{R}^N : (\mu^0, \mu^1, \dots, \mu^p) \mapsto \sum_{i=0}^p \mu^i v_i \quad (1.3)$$

so dass $\sigma_{\text{sing}}(\Delta^p) = \sigma_{\text{geo}}^p$ gilt. Das Simplex σ_{sing} heißt singuläres p -Simplex (vgl. [Lü05]).

Von nun an ist mit einem Simplex σ immer die geometrische Realisierung nach Definition 1.1.1 gemeint solange nicht explizit auf etwas anderes hingewiesen wird.

Eine Größe, die wir noch häufig benötigen werden ist das Volumen eines Simplexes.

Definition 1.1.3. Das Volumen eines p -Simplexes σ^p für $p > 0$ ist definiert durch

$$|\sigma^p| := \int_{\sigma^p} dx^1 \wedge dx^2 \wedge \dots \wedge dx^p, \quad (1.4)$$

wobei (x^1, x^2, \dots, x^p) gerade die Koordinaten des p -Dimensionalen Untervektorraumes des \mathbb{R}^N sind in dem σ^p liegt. Für $p = 0$ definieren wir

$$|\sigma^0| := 1. \quad (1.5)$$

Damit ist das Volumen einer Ecke also 0, von einer Kante die Länge und von einem Dreieck der Flächeninhalt.

Definition 1.1.4. Für $0 \leq r < p$ definiert sich eine Relation zwischen dem r -Simplex σ^r und dem p -Simplex $\sigma^p := v_0v_1 \dots v_p$ durch

$$\sigma^r \prec \sigma^p : \Leftrightarrow \sigma^p \succ \sigma^r \quad (1.6)$$

$$\Leftrightarrow \exists \{v_{i_0}, v_{i_1}, \dots, v_{i_r}\} \subset \{v_0, v_1, \dots, v_p\} : \sigma^r = v_{i_0}v_{i_1} \dots v_{i_r} \quad (1.7)$$

und σ^r nennen wir Facette oder Seite von σ^p .

Damit bildet \prec beziehungsweise \succ eine strikte Ordnung auf der Menge aller (endlichen) Simplizes.

Definition 1.1.5. Ein Simplizialkomplex K über \mathbb{R}^N ist eine Menge von Simplizes mit folgenden zwei Regeln

- Jede Facette eines Simplexes aus K ist ebenfalls aus K .
- Der Schnitt zweier Simplizes aus K ist entweder eine Facette von beiden oder leer.

Dabei heißt

$$n := \dim(K) := \max \{p \in \mathbb{N} | \sigma^p \in K\} \quad (1.8)$$

die Dimension von K und N bezeichnet die Dimension des Ambienteraumes, in unserem Fall also des \mathbb{R}^N .

Im Folgendem ist ein Simplizialkomplex immer endlich, das heißt es besteht nur aus einer endlichen Menge von Simplizes.

Definition 1.1.6. Die Vereinigung aller Simplizes eines Simplizialkomplexes über \mathbb{R}^N , das heißt

$$|K| := \bigcup_{\sigma \in K} \sigma \subset \mathbb{R}^N, \quad (1.9)$$

ist der zugrundeliegende (topologische) Raum oder auch Polytop. Die Topologie von $|K|$ ist dann gerade die induzierte Teilraumtopologie des \mathbb{R}^N .

Meistens sieht es aber so aus, dass wir ein Raum haben und ein Simplizialkomplex suchen der diesen beschreibt. Dieses führt uns zu folgender Definition.

Definition 1.1.7. Ein Simplizialkomplex L heißt (simpliziale) Triangulation von $V \subset \mathbb{R}^N$, wenn $|L| = V$ gilt. Existiert eine Triangulation von V , dann heißt V triangulierbar.

Bisher kann solch ein Simplizialkomplex noch sehr viele Teilläume des \mathbb{R}^N beschreiben, die für diese Arbeit nicht von Belang sind. Wir wollen deshalb die Menge der Simplizialkomplexe etwas einschränken, um uns langsam der Beschreibung von (Hyper-)Oberflächen zu nähern.

Definition 1.1.8. Ein Simplizialkomplex K heißt mannigfaltigartig, wenn das Polytop $|K|$ eine C^0 -Mannigfaltigkeit ist.

Da wir uns später mit den Spezialfall von Oberflächen im \mathbb{R}^3 beschäftigen möchten, seien hier schon mal ein paar Bemerkungen dazu.

Bemerkung 1.1.9. Sei K ein mannigfaltigartiger Simplizialkomplex im \mathbb{R}^3 mit $\dim(K) = 2$.

- Falls $|K|$ nicht flach ist, dann ist das Polytop $|K|$ global nicht differenzierbar.
- Falls $|K|$ zudem eine geschlossene Mannigfaltigkeit ist, dann ist $|K|$ ein Polyeder.

Der zugrundeliegende Raum eines Simplizialkomplexes kann im Allgemeinen nicht eine beliebige C^∞ -Mannigfaltigkeit sein. Jedoch kann ein Simplizialkomplex solch eine Mannigfaltigkeit approximieren, d.h.

Definition 1.1.10. Ist K ein mannigfaltigartiger Simplizialkomplex und M eine C^∞ -Mannigfaltigkeit, dann sei

$$K \sim M : \Leftrightarrow \forall \sigma^0 \in K : \sigma^0 \in M. \quad (1.10)$$

Das heißt K approximiert M genau dann, wenn alle Ecken von K auch auf M liegen.

Bemerkung 1.1.11. Wenn $K \sim M$ gilt, dann würden wir für die Übertragung von skalarwertigen Informationen von der Mannigfaltigkeit M auf den Simplizialkomplex K auf den Ecken nichts falsch machen. Wie sieht es aber mit höherwertigen Informationen aus, wie zum Beispiel Vektorfelder oder allgemein Differentialformen höheren Grades als null? Für 2 dimensionale Mannigfaltigkeiten bedeutet das, dass 1-Formen auf Kanten und 2-Formen auf den Dreieckelementen ausgewertet werden, wie wir später noch im Kapitel 2 sehen werden. Kanten und Dreieckflächen liegen aber nur (linear) approximiert im Simplizialkomplex vor, genauso wie auch die Metrik, da die Simplizes im Inneren flach sind. Dennoch brauchen wir für spätere Argumentationen ein simpliziales Konstrukt bei dem wir diese Fehler nicht machen. Dieses formale Brücke zwischen der Mannigfaltigkeit

und dem Simplizialkomplex nennen wir abstrakter Simplizialkomplex (über der Mannigfaltigkeit M). Er lässt sich genauso einführen wie oben für den Simplizialkomplex über dem \mathbb{R}^N nur dass die p -Simplizes für $p > 0$ eine Krümmung besitzen, die gleiche wie M eingeschränkt auf das jeweilige Simplex. Das heißt, dass der zugrundeliegende Raum des abstrakten Simplexes gleich der Mannigfaltig M ist. Folgendes kommutative Diagramm, soll das für ein einzelnes Simplex verdeutlichen.

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{R}^{p+1} \supset \Delta^p & \xrightarrow{\sigma_{\text{sing}}} & \sigma^p \subset \mathbb{R}^N \\ & \searrow \hat{\sigma}_{\text{sing}} & \swarrow \pi_\sigma \\ & \sigma_M^p \subset M & \end{array} \quad (1.11)$$

Die Abbildungen σ_{sing} und $\hat{\sigma}_{\text{sing}}$ sind singuläre Simplexe, wie in Bemerkung 1.1.2 definiert. σ^p und σ_M^p sind deren geometrische Realisierungen im \mathbb{R}^N beziehungsweise auf M und es gelte $\sigma^p \sim \sigma_M^p$. π_σ ist ein Homöomorphismus, das heißt bijektiv, stetig und π_σ^{-1} ist ebenfalls stetig. Whitney [Whi57] forderte noch weitere Bedingungen an diese Abbildung. Für uns soll die Homöomorphieeigenschaft allerdings reichen, da wir sie nur formal nutzen werden und nie explizit mit ihr rechnen wollen. Prinzipiell genügt es, wenn wir uns die Abbildung π_σ als „Ankleben“ des Simplexes σ auf die Mannigfaltigkeit vorstellen. Des Weiteren soll $\pi := \pi_\bullet$ ¹ homomorph auf dem ganzem Simplizialkomplex bezüglich der Relation \prec sein, also ist π ein Isomorphismus zwischen dem Simplizialkomplex K und einem abstrakten Simplizialkomplex L mit $|L| = M$ und $K^{(0)} = L^{(0)}$. Wobei

$$K^{(p)} := \{\sigma^p \in K\} \quad (1.12)$$

das p -Skelett von K ist. Zu dem ist $L = \pi(K)$ somit eindeutig bestimmt falls π bekannt ist. Wenn solch eine Triangulation L von M existiert, dann nennen wir auch $K = \pi^{-1}(L)$ eine (lineare) Triangulation von M .

Später werden wir häufig den Begriff „1-Ring“ verwenden. Meistens sind damit die Menge der Dreieckelemente gemeint, die eine gemeinsame Ecke besitzen, im Falle einer triangulierten Oberfläche. Dieser Begriff lässt sich auch allgemeiner fassen.

Definition 1.1.12. Es sei K ein n -dimensionaler mannigfaltigartiger Simplizialkomplex, dann bezeichnet die Menge

$$\{\sigma^n \in K | \sigma^p \prec \sigma^n\} \subseteq K^{(n)} \quad (1.13)$$

den 1-Ring um $\sigma^p \in K$.

Für den DEC ist der Begriff der Orientierung von essenzieller Bedeutung. Zum einen weil die Orientierung der Simplizes über das Vorzeichen eines Berechnungsschemata entscheiden kann und zum anderen wird eine weitere notwendige Eigenschaft an den Simplizialkomplex, dessen Polytop und die zu approximierende Mannigfaltigkeit gestellt: die Orientierbarkeit.

Wie wir in Bemerkung 1.1.2 sehen hängt die geometrische Realisierung σ eines singulären Simplexes σ_{sing} , also dessen Bild, nicht von der gewählten Reihenfolge der Ecken v_i ab. Formal können wir aber diesen für σ syntaktischen Unterschied auch semantisch nutzen und schreiben $\sigma = (v_0, v_1, \dots, v_p)$ mit runden Klammern um die Reihenfolge zu würdigen. Somit ergeben sich für einen Satz Ecken $p!$ Simplizes

$$\Sigma^p := \{(v_{\tau(0)}, v_{\tau(1)}, \dots, v_{\tau(p)}) | \tau \in S_p \text{ Permutation}\}, \quad (1.14)$$

¹d.h. $\pi|_\sigma = \pi_\sigma$

die geometrisch das gleiche Simplex beschreiben. Auf Σ^p lässt sich nun eine Äquivalenzrelation $\Theta \subseteq \Sigma^p \times \Sigma^p$ definieren:

Definition 1.1.13. Es sei $\sigma_1 = \tau(\sigma_2) \in \Sigma^p$, dann gelte

$$\sigma_1 \Theta \sigma_2 : \Leftrightarrow \tau \in A_n \text{ gerade Permutation}, \quad (1.15)$$

wobei $\tau(\sigma) := (v_{\tau(0)}, v_{\tau(1)}, \dots, v_{\tau(p)})$ für $\sigma = (v_0, v_1, \dots, v_p)$ ist. Ein Element des Faktorraumes Σ^p / Θ heißt orientiertes Simplex und wir schreiben dafür

$$\sigma = [v_0, v_1, \dots, v_p] \quad (1.16)$$

Dass hier das orientierte Simplex ebenfalls als σ geschrieben wird soll uns nicht stören, da dieses auch immer das entsprechende geometrische Simplex impliziert. Oft werden wir einfacheitshalber nur Simplex sagen, wenn aus dem Kontext klar ist, dass dieses Simplex orientiert ist. Für $p > 0$ ergeben sich somit genau 2 Äquivalenzklassen und somit Orientierungen pro Simplex. Wir wollen die Orientierung eindeutig mit

$$\text{sgn} : \Sigma^p / \Theta \rightarrow \{-1, +1\} \quad (1.17)$$

beschreiben. Falls $p = 0$, das heißt es liegt eine Ecke vor und folglich nur eine Orientierungsmöglichkeit, dann wird die Orientierung festgelegt, wenn möglich durch die induzierte Orientierung.

Definition 1.1.14. Es sei $\sigma^p = [v_0, v_1, \dots, v_p] \in \Sigma^p / \Theta$ mit $p \geq 1$, dann definiert sich eine induzierte Orientierung für die $(p-1)$ -Facetten von σ^p durch

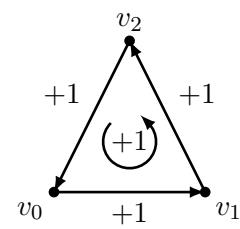
$$\text{sgn}([v_0, v_1, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_p]) := \begin{cases} \text{sgn}(\sigma^p) & \text{falls } i \text{ gerade,} \\ -\text{sgn}(\sigma^p) & \text{falls } i \text{ ungerade,} \end{cases} \quad (1.18)$$

wobei $[v_0, v_1, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_p]$ bedeutet, dass die i -te Ecke weggelassen wird.

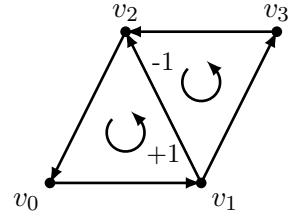
Beispiel 1.1.15. Anhand folgendes Beispieles sehen wir, dass diese Definition intuitiver ist als es vielleicht auf den ersten Blick anmuten mag. Gegeben sei ein 2-Simplex $\sigma := [v_0, v_1, v_2]$, also ein Dreieck, dessen Orientierung auf $+1$ festgelegt wird. Daraus leiten sich die Orientierungen der Kanten ab. Durch Transposition der Kante $[v_0, v_2]$, und damit der Wechsel zur anderen Äquivalenzklasse, kann zudem eine einheitliche Orientierung aller Kanten erreicht werden.

$$\begin{array}{ccc} \text{sgn}([v_0, v_1, v_2]) := +1 & & \\ \swarrow \quad \downarrow \quad \searrow & & \\ \text{sgn}([v_0, v_1]) = +1 & \text{sgn}([v_0, v_2]) = -1 & \text{sgn}([v_1, v_2]) = +1 \\ & \downarrow & \\ & \text{sgn}([v_2, v_0]) = +1 & \end{array} \quad (1.19)$$

Geometrisch wird die Orientierung oft durch Pfeile visualisiert. In diesem Beispiel ein gebogener Pfeil für die Fläche. Gegen den Uhrzeigersinn bedeutet dabei eine Orientierung von $+1$, das ist auch gleichbedeutend damit, dass die Rechte-Hand-Regel gilt und die Fläche per Definition eine äußere Normale besitzt. Sollen nun alle Kanten die gleiche Orientierung wie die Fläche besitzen, so müssen die Pfeile der Kanten ebenfalls gegen den Uhrzeiger abgetragen werden. Von nun an werden wir Pfeile ohne Beschriftung immer als positiv, also mit Orientierung $+1$, anerkennen.



Es sei nun ein weiteres Simplex $\tilde{\sigma} := [v_1, v_3, v_2]$ „angelegt“, so dass beide Simplizes sich die Kante $[v_1, v_2]$ teilen und die Orientierung von $\tilde{\sigma}$ auf $+1$ gesetzt wird. Dabei müssen die von den Kanten aufgespannten (Unter-)Vektorräume (z.B. des \mathbb{R}^3) nicht notwendigerweise gleich sein. Dennoch liegt das Gefühl nahe zusagen, dass die beiden 2-Simplizes irgendwie „gleichorientiert“ sind. Des Weiteren fällt auf, dass die induzierte Orientierung der gemeinsamen Kante für beide Dreiecke entgegengesetzt ist. Darauf wollen wir im allgemeineren näher eingehen.



Definition 1.1.16. Es seien zwei orientierte p -Simplizes σ_1^p und σ_2^p gegeben mit $1 \leq p \leq n$, die sich genau eine $(p-1)$ -Facette teilen, das heißt es existiert genau ein σ^{p-1} mit $\sigma^{p-1} \prec \sigma_1^p$ und $\sigma^{p-1} \prec \sigma_2^p$.

σ_1^p und σ_2^p heißen gleichorientiert, falls

$$\operatorname{sgn}_{\sigma_1^p}(\sigma^{p-1}) = -\operatorname{sgn}_{\sigma_2^p}(\sigma^{p-1}), \quad (1.20)$$

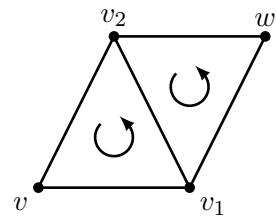
also die von den beiden Simplizes induzierten Orientierungen der gemeinsamen Facette ungleich sind. Andernfalls heißen σ_1^p und σ_2^p verschiedenorientiert.

Bemerkung 1.1.17. Für Simplizialkomplexe der Dimension 2 im \mathbb{R}^3 wollen wir nun festlegen, dass die 2-Simplizes genau dann die Orientierung $+1$ besitzen, wenn dessen Ecken geometrisch gegen den Uhrzeigersinn gezählt werden, falls wir von „oben“ drauf schauen, das heißt in Richtung der inneren Normale. Da wir uns später ausschließlich mit unberandeten orientierbaren Oberflächen beschäftigen möchten, ist auch intuitiv immer klar, was „innen“ und „außen“ bezeichnet. In Graphiken kennzeichnen wir die Orientierung $+1$ mit einem gebogenen Pfeil im mathematisch positiven Drehsinn, wie im Beispiel 1.1.15.

Folgerung 1.1.18. Im \mathbb{R}^3 ist ein Paar von 2-Simplizes, die sich eine Kante teilen, genau dann gleichorientiert, wenn die Ecken beider gegen den Uhrzeigersinn gezählt werden.

Beweis. Es seien zwei Simplizes gegeben mit $\sigma_1 := vv_1v_2$ und $\sigma_2 := wv_2v_1$.

Da für dreielementige Mengen jede zyklische Permutation eine gerade Permutation ist, lässt auch jede zyklische Vertauschung der Ecken das jeweilige Simplex in der gleichen Äquivalenzklasse bleiben. Sind die Ecken im mathematisch positiven Drehsinn gezählt, so ist es deshalb auch keine Einschränkung der Allgemeinheit, wenn



$$\sigma_1 = [v, v_1, v_2] \quad \sigma_2 = [w, v_2, v_1] \quad (1.21)$$

$$\Leftrightarrow \operatorname{sgn}_{\sigma_1}([v_1, v_2]) = +1 \quad \operatorname{sgn}_{\sigma_2}([v_2, v_1]) = +1 \quad (1.22)$$

$$\Leftrightarrow \operatorname{sgn}_{\sigma_1}([v_1, v_2]) = -\operatorname{sgn}_{\sigma_2}([v_1, v_2]) \quad (1.23)$$

d.h. σ_1 und σ_2 sind gleichorientiert. \square

Definition 1.1.19. Ein mannigfaltigartiger Simplizialkomplex der Dimension n heißt orientiert, wenn alle paarweise benachbarten n -Simplizes gleichorientiert sind. Solch einen orientierten mannigfaltigartigen Simplizialkomplex nennen wir auch kurz Primär-gitter.

Satz 1.1.20. Ist eine triangulierbare Mannigfaltigkeit M orientiert, so sind auch alle linearen Triangulationen $K \sim M$ orientiert.

Beweis. Sei L der zugehörige abstrakte Simplizialkomplex, d.h. $|L| = M$, $L^{(0)} = K^{(0)}$ und $(L, \prec) \cong (K, \prec)$. Es reicht zu zeigen, dass L orientiert ist, da die Orientierung eines abstrakten n -Simplexes auf das zugehörige n -Simplex aus K einfach übertragen werden kann, et vice versa. Für jedes einzelne abstrakte n -Simplex $\sigma^n \in L$ kann die Orientierung im Inneren der Untermannigfaltigkeit $|\sigma^n| \subset M$ übernommen werden, da sie dort konstant ist. Betrachten wir die gemeinsame Kante $\sigma^{(n-1)} \in L$ eines benachbarten abstrakten n -Simplexes $\tilde{\sigma}^n \in L$, dann gilt, dass die Orientierung in einer Umgebung $U_\varepsilon(x) \subset M$ konstant ist, mit x im Inneren von $|\sigma^{(n-1)}| \subset M$ (vgl. [Jän05]). Folglich ist die Orientierung auf beiden Seiten der Kante gleich und damit sind beide n -Simplizes gleichorientiert. Da σ^n und $\tilde{\sigma}^n$ beliebig benachbarte Simplizes sind, ist L orientiert. \square

Damit ist es uns nun möglich eine Mannigfaltigkeit mit obigen Voraussetzungen mittels Primärgitter linear zu triangulieren.

Bemerkung 1.1.21 (zur Implementierung). Da später alle computergestützten Rechnungen mit AMDiS gemacht werden ist es wichtig, dass die dortigen Gitter die Anforderungen eines Primärgitters erfüllen. Ob ein mannigfaltigartiger Simplizialkomplex als Eingangsgröße vorliegt, liegt in der Verantwortung des Benutzers. Die Orientiertheit eines 2D-Gitters, also für Simplizialkomplexe der Dimension 2, ist mit Folgerung 1.1.18 automatisch gegeben, da in AMDiS die Ecken eines Dreieckelements immer gegen den Uhrzeigersinn aufgetragen werden (siehe [Pra14]).

1.1.2 Umkreismittelpunktunterteilung

Eine sehr wichtige Zutat für das DEC ist das Dualgitter. Es erlaubt uns später die Definition des Sternoperators \star , das geometrische Analogon zum Hodge-Stern-Operators $*$. Liegt der Simplizialkomplex zum Beispiel als Delaunay-Triangulierung vor, so ist der duale Zellkomplex gerade das zugehörige Voronoi-Diagramm. Dieser ist im allgemeinen natürlich kein Simplizialkomplex. Des Weiteren teilt im nichtflachen Fall, das Voronoi-Diagramm und die Delaunay-Triangulierung nicht einmal den selben zugrunde liegenden Raum. Unter gewissen Voraussetzungen ist es aber möglich ein Primärgitter so simplizial zu verfeinern, dass wir ein Gitter zu bekommen, welches wieder die Primärgitter-eigenschaften erfüllt und zudem Gruppierungen von n -Simplizes enthalten, die den zugehörigen Voronoi-Zellen ähneln, als eine Art „Voronoi-Zelle mit Knicken“.

Definition 1.1.22. Der Umkreismittelpunkt $c(\sigma^p)$ eines Simplexes $\sigma^p := v_0 v_1 \dots v_p$ ist der Mittelpunkt der $(p-1)$ -Sphäre $\mathbb{S}_r^{p-1}(c(\sigma^p))$, mit Radius $r \in [0, \infty)$, die durch

$$\forall i = 0, 1, \dots, p : \quad \|v_i - c(\sigma^p)\|^2 = r^2 \quad (1.24)$$

bestimmt ist. Speziell für $p=0$ definieren wir formal

$$\mathbb{S}^{-1}(c(\sigma^0)) := \{c(\sigma^0)\} \quad (1.25)$$

und damit ist

$$c(\sigma^0) = \sigma^0. \quad (1.26)$$

Bemerkung 1.1.23. Obige Definition, stellt ein Spezialfall des Kleinste-Sphäre-Problems dar. Die Ecken von σ^p sind nach Voraussetzung geometrisch linear unabhängig, demnach ist nach [EH72] die Sphäre $\mathbb{S}_r^{p-1}(c(\sigma^p))$ existent und eindeutig bestimmt. Der Umkreismittelpunkt $c(\sigma^p)$ nach Definition 1.1.22 ist somit wohldefiniert.

Bemerkung 1.1.24 (zur Implementierung). Im \mathbb{R}^3 ist die Berechnung der Umkreismittelpunkte für 0- und 1-Simplizes einfach:

$$c(v_0) = v_0 \quad \text{und} \quad (1.27)$$

$$c(v_0v_1) = \frac{1}{2}(v_0 + v_1) . \quad (1.28)$$

Für ein 2-Simplex nutzen wir die Formel

$$\begin{aligned} c(v_0v_1v_2) &= v_0 + a_1(v_0 - v_1) + a_2(v_0 - v_2) \quad \text{mit} \\ a_1 &= \frac{\|v_0 - v_2\|^2}{2D^2} (v_1 - v_0) \cdot (v_2 - v_1) \quad \text{und} \\ a_2 &= \frac{\|v_0 - v_1\|^2}{2D^2} (v_0 - v_2) \cdot (v_2 - v_1) . \end{aligned} \quad (1.29)$$

D ist die Determinante des Simplexes, also dessen doppeltes Volumen. Einsetzen in (1.24) für z.B. $r = \|v_0 - c(v_0v_1v_2)\|$ und nachrechnen ergibt die Korrektheit der Formel.

Definition 1.1.25. Liegt der Umkreismittelpunkt eines Simplexes σ^p im Inneren dieses Simplexes, das heißt $c(\sigma^p) \in \text{Int}(\sigma^p)$, dann nennen wir σ^p ein wohlzentriertes Simplex.

Sind alle $\sigma \in K$ wohlzentriert, dann heißt K ein wohlzentrierter Simplizialkomplex.

1-Simplizes sind natürlich immer wohlzentriert. Für 0-Simplizes legen wir hier eine topologische Besonderheit fest: $\text{Int}(\sigma^0) := \sigma^0$. Folglich soll die Ecke σ^0 eine offene Menge sein (mit leerem Rand). Es sei hier explizit darauf hingewiesen, dass das einen deutlichen Unterschied zu der Topologie des Polytopes eines Simplizialkomplexes darstellt, bei der einzelne Punkte keine offenen Mengen sind. Bei 2-Simplizes lassen sich verschiedene äquivalente Kriterien für die Wohlzentriertheit finden. Die populärsten sind zum Beispiel:

- Alle Innenwinkel sind kleiner als $\frac{\pi}{2}$, oder
- bilden wir einen Kreis in der aufgespannten Ebene des Dreieckes mit zwei Ecken auf dem Rand und Mittelpunkt auf der sich ergebenen Kante beider Ecken, dann liegt die dritte Ecke außerhalb dieses Kreises, das heißt

$$\forall \sigma^1 := [v_{\tau(0)}, v_{\tau(1)}] \prec [v_0, v_1, v_2] : \quad \|v_{\tau(2)} - c(\sigma^1)\| > \|v_{\tau(0)} - c(\sigma^1)\| . \quad (1.30)$$

Wie dem auch sei, mit der Wohlzentriertheit eines Simplizialkomplexes ist es nun möglich eine Verfeinerung durchzuführen, die alle Umkreismittelpunkte als neue Knoten enthält und zudem wieder ein Simplizialkomplex ist.

Definition 1.1.26. Für einen wohlzentrierten Simplizialkomplex K der Dimension n , ist

$$\text{csd}K := \{c(\sigma_0) \dots c(\sigma_k) | \sigma_i \in K \text{ für } 0 \leq i \leq k \text{ und } \sigma_0 \prec \dots \prec \sigma_k \text{ für } 0 \leq k < n\} \quad (1.31)$$

die Umkreismittelpunktunterteilung von K . (Dabei ist zu beachten, dass die Indizierung unten vorgenommen wurde und nicht mit der Dimension der Simplizes verwechselt werden sollte. Gefordert wird, dass die Dimension der Simplizes von links nach rechts streng monoton steigend sein soll. Vgl. dazu das erklärende Beispiel in Abbildung 1.1.)

Bemerkung 1.1.27. Da alle n -Simplizes des $\text{csd}K$ jeweils Teilmengen eines n -Simplexes aus K sind, ändert sich am zugrundeliegenden Raum nichts, das heißt $|\text{csd}K| = |K|$. Jedoch approximiert $\text{csd}K$ nicht mehr die Mannigfaltigkeit M im Sinne von Definition 1.1.10, weil neu entstandene Knoten im Allgemeinen nicht auf der Mannigfaltigkeit liegen.

Wie wir im vorhergehenden Absatz gesehen haben, spielt die Orientierung eines Simplizialkomplexes eine große Rolle. Die Frage ist nur, wie lässt sich auf sinnvoller Art und Weise eine Orientierung von dem ausgehenden Simplizialkomplex induzieren, konkret, wenn wir von einem Primärgitter ausgehen. Für Volumenelemente ist intuitiv klar, was sinnvoll ist, nämlich, dass die Orientierung der n -Simplizes des $\text{csd}K$, welche die n -Simplizes aus K verfeinern, übernommen werden kann. Schließlich ist das Polytop beider Komplexe gleich und sollte als n -Mannigfaltigkeit auch ihre Orientierung beibehalten. Allgemein definieren wir

Definition 1.1.28. Es sei $\hat{\sigma}^p \in \text{csd}K$, $\sigma^p \in K$ mit $\hat{\sigma}^p \subseteq \sigma^p$, dann ist durch

$$\text{sgn}_{\sigma^p}(\hat{\sigma}^p) := \text{sgn}(\sigma^p) \quad (1.32)$$

die von $\sigma^p \in K$ (dual) induzierte Orientierung gegeben.

Definition 1.1.29. Es sei $\text{csd}K$ die Umkreismittelpunktunterteilung eines wohlzentrierten Primärgitters K versehen mit einer Orientierung. Ist die Orientierung der n -Simplizes aus $\text{csd}K$ von den n -Simplizes aus K induziert, dann nennen wir $\text{csd}K$ das Dualgitter von K .

Dass sich überhaupt erst eine Orientierung für die Volumenelemente nach Definition 1.1.28 induzieren lässt, also die dortige Bedingung $\hat{\sigma}^n \subseteq \sigma^n$ erfüllt ist, erhalten wir durch folgendes Lemma für $p = n$ und der Tatsache, dass

$$(\text{csd}K)^{(n)} = \{c(\sigma^0) c(\sigma^1) \dots c(\sigma^n) \mid \sigma^i \in K \text{ für } 0 \leq i \leq n\}. \quad (1.33)$$

Lemma 1.1.30. Ist K ein wohlzentrierter Simplizialkomplex, dann gilt für $\sigma^p \in K$

$$\sigma^p \supseteq c(\sigma^0) c(\sigma^1) \dots c(\sigma^p) \in \text{csd}K, \quad (1.34)$$

Beweis. Es sei $x \in c(\sigma^0) c(\sigma^1) \dots c(\sigma^p)$ und $\sigma^p = v_0 v_1 \dots v_p$, dann gilt

$$x = \sum_{i=0}^p \tilde{\mu}^i c(\sigma^i) \quad \text{mit} \quad \sum_{i=0}^p \tilde{\mu}^i = 1 \quad \text{und} \quad \tilde{\mu}^i \geq 0 \quad (1.35)$$

$$= \sum_{i=0}^p \tilde{\mu}^i \sum_{k=0}^i \mu_i^k v_k, \quad \text{da } c(\sigma^i) \in \sigma^i, \text{ wobei } \sum_{k=0}^i \mu_i^k = 1 \quad \text{und} \quad \mu_i^k \geq 0 \quad (1.36)$$

$$= \sum_{k=0}^p \left(\sum_{i=k}^p \tilde{\mu}^i \mu_i^k \right) v_k =: \sum_{k=0}^p \lambda^k v_k. \quad (1.37)$$

Bleibt noch zu zeigen, dass (1.37) die Bedingung einer Konvexitätskombination der Ecken von σ^p erfüllt:

$$\sum_{k=0}^p \lambda^k = \sum_{k=0}^p \sum_{i=k}^p \tilde{\mu}^i \mu_i^k = \sum_{i=0}^p \tilde{\mu}^i \sum_{k=0}^i \mu_i^k = \sum_{i=0}^p \tilde{\mu}^i = 1, \quad (1.38)$$

zudem ist $\lambda^k = \sum_{i=k}^p \tilde{\mu}^i \mu_i^k \geq 0$, da alle Summanden nicht negativ sind, also ist $x \in \sigma^p$. \square

Somit ist Definition 1.1.29 sinnvoll und das Dualgitter existiert unter den getroffenen Voraussetzungen.

Nun wissen wir welches das duale Gitter zum wohlzentrierten Primärgitter sein soll. Was ist aber konkret dual zu einem Element, also einem einzelnen Simplex, aus dem Primärgitter? Betrachten wir eine zweidimensionale Delaunay-Triangulierung und das

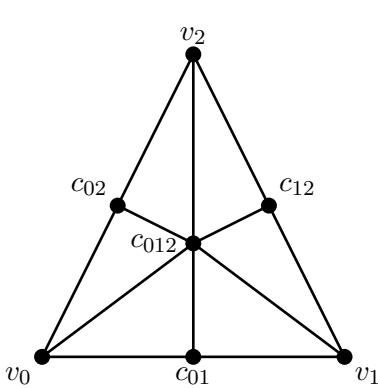


Abbildung 1.1: Umkreismittelpunktunterteilung eines Dreieckelements $v_0v_1v_2$ mit dessen Kanten und Ecken, wobei $c_{v_1 \dots v_p} := c(v_1 \dots v_p)$

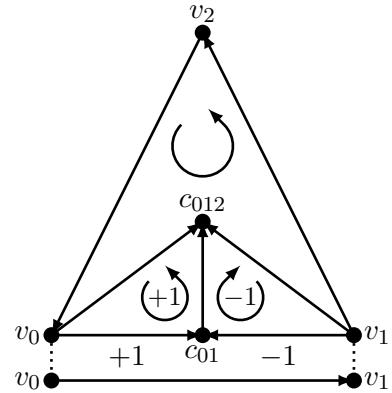


Abbildung 1.2: Wie wir sehen ist $\text{sgn}_{[v_0, v_1]}([c_{01}, c_{012}]) = +1$, dabei spielt es keine Rolle, ob wir $v_0 \prec [v_0, v_1]$ oder $v_1 \prec [v_0, v_1]$ für die Berechnung hinzuziehen.

dazugehörige Voronoi-Diagramm, dann ist die Dualitätszugehörigkeit geometrisch klar. Ecken sind dual zu den Voronoi-Zellen, Kanten zu den Kanten, der Voronoi-Zelle und Dreiecke zu den Ecken, der Voronoi-Zelle. All diese, im allgemeinen Zellen, lassen sich nun auch innerhalb des $\text{csd}K$ als Vereinigungen von Simplizes darstellen. In [Hir03] und [Mun84] werden die Dualzellen als offene Zellen eingeführt. Das wollen wir hier nicht machen, da es für diese Arbeit nicht vonnöten ist und weitere technische Kompliziertheiten beinhalten würde.

Definition 1.1.31. Es sei K ein wohlzentriertes Primärgitter, dann definieren wir die Dualzelle von $\sigma^p \in K$ durch

$$D(\sigma^p) := \bigcup_{\sigma^p \prec \sigma^{p+1} \prec \dots \prec \sigma^n} c(\sigma^p)c(\sigma^{p+1}) \dots c(\sigma^n). \quad (1.39)$$

Wobei die Simplizes $c(\sigma^p)c(\sigma^{p+1}) \dots c(\sigma^n) \in \text{csd}K$ die (elementaren) Dualsimplizes von σ^p sind.

Auch hier lässt sich eine Orientierung für die elementaren Dualsimplizes induzieren.

Definition 1.1.32. Es sei K ein wohlzentriertes Primärgitter, dann induziert $\sigma^p \in K$ eine Orientierung für $[c(\sigma^p), c(\sigma^{p+1}), \dots, c(\sigma^n)] \in \text{csd}K$ durch

$$\begin{aligned} \text{sgn}_{\sigma^p}([c(\sigma^p), c(\sigma^{p+1}), \dots, c(\sigma^n)]) &:= \text{sgn}_{\sigma^p}([c(\sigma^0), c(\sigma^1), \dots, c(\sigma^p)]) \\ &\cdot \text{sgn}_{\sigma^n}([c(\sigma^0), c(\sigma^1), \dots, c(\sigma^n)]) \end{aligned} \quad (1.40)$$

für beliebig gewählte $\sigma^0 \prec \sigma^1 \prec \dots \prec \sigma^p$, wobei $\text{sgn}_\bullet(\bullet)$ die induzierten Orientierungen aus Definition 1.1.28 sind.

Definition 1.1.32 ist wohldefiniert, das heißt unabhängig von den gewählten $\sigma^i \prec \sigma^p$, denn würden wir ein σ^i durch ein $\tilde{\sigma}^i \prec \sigma^p$ austauschen und sich dabei die Orientierung für das resultierende $[c(\sigma^0), \dots, c(\tilde{\sigma}^i), \dots, c(\sigma^p)]$ ändern, dann würde sich auch bei $[c(\sigma^0), \dots, c(\tilde{\sigma}^i), \dots, c(\sigma^n)]$ die Orientierung ändern. Das gilt natürlich für jedes beliebige $\tilde{\sigma}^i \prec \sigma^p$ und auch für beliebig häufiges wiederholen der Wechsel.

In Abbildung 1.2 ist beispielhaft die Berechnung der induzierten Orientierung für eine elementare Dualkante in einem Dreieckelement dargestellt.

Fazit. Damit wäre nun das geometrische Fundament für ein DEC gelegt, welches für diese Arbeit hier vollkommen ausreichend ist. Wenn wir genau hinschauen, dann ist zu bemerken, dass nicht alle Simplizes des Dualgitters vom Primärgitter nach unseren Definitionen eine induzierte Orientierung erhalten können. Wohl aber für eine Teilmenge des $csdK$, mehr als diese Teilmenge wird auch für die numerischen Schematas nicht vonnöten sein, wie wir noch sehen werden.

Leider ist gerade die Wohlzentriertheit eine problematische Bedingung für die Zulässigkeit von Gitter. Zum Beispiel gibt es in der FEM diese Anforderung nicht, obgleich wohlzentrierte Gitter die numerischen Eigenschaften sicherlich verbessern würden. Wie dem auch sei, in 1.3 wird ein (ingenieurmäßiger) Ansatz geboten für den DEC brauchbare Triangulierungen aus nicht zulässigen Gittern zu generieren. Jedoch setzt das auch einiges explizites oder implizites Wissen an die tatsächliche Geometrie der Mannigfaltigkeit voraus und es muss zusätzliche Rechnergestützte Arbeit in das Problem gesteckt werden. Damit zeichnet sich schon hier das größte Manko eines DECs auf wohlzentrierten Primärgittern ab. In zukünftigen Arbeiten muss die Wohlzentriertheit abgeschwächt werden. Ein kleiner Sieg wäre zum Beispiel schon eine „Wohlzentriertheit im Limes“, das heißt es wären auch Umkreismittelpunkte auf dem Rand eines Simplexes zulässig. Damit wären auf zweidimensionalen Gittern auch Rechtecke möglich und folglich auch, selbst im planaren, Ecken mit nur 4 Dreieckelementen, die sich diese Ecke teilen. Prinzipiell könnte so auch der hier vorgestellte DEC in gleicher Art und Weise geführt werden, allerdings können sich so auch Kanten der Länge null ergeben und somit müssten wir auch ständig aufpassen in den späteren Berechnungsschematas nicht durch null zuteilen. Deswegen sehen wir hier in dieser Arbeit davon ab. In 1.4 wird auch noch kurz gezeigt wie wir numerisch mit implizit gegebenen Oberflächen umgehen können.

Eine weitere Möglichkeit ist es einen ganz anderen Ansatz für die Dualität der Gitter zu verfolgen. In [SSSA00] wird im Rahmen einer diskreten Chern-Simons-Theorie auf speziellen dreidimensionalen Mannigfaltigkeiten (Raumzeit) eine baryzentrische Unterteilung genutzt. Das heißt der Mittelpunkt ist hier das „Maszentrum“. So gilt zum Beispiel $c([v_0, v_1, v_2]) = \frac{1}{3} \sum_{i=0}^2 v_i$. Die Diskretisierung des Hodge-Stern-Operators in einem allgemeinen DEC-Kontext würde somit aber ziemlich schwierig werden, da hier auch metrische Informationen mit eingehen. Die Tatsache, dass bei einer Umkreismittelpunktunterteilung die zueinander dualen Simplizes im gewissen Sinne orthogonal sind, macht es uns da später einfacher. Für zukünftige Arbeiten sollte dennoch die baryzentrische Dualität ein paar Gedanken wert sein, denn jeder Simplizialkomplex ist mit dieser Unterteilung baryzentrisch wohlzentriert, speziell auch das Dualgitter selbst, das gibt die Umkreismittelpunktunterteilung nicht her. Somit würde auch einer globalen und sogar lokalen Verfeinerung bzgl. der Zulässigkeit des Gitters nichts mehr im Wege stehen.

1.2 Kettenkomplexe

Zielsetzung. Ziel dieses Abschnittes ist es die zuvor eingeführten Simplizes in einer algebraisch sinnvollen Weise zu „verketten“. Die Universaleigenschaft sichert uns zudem, dass wir Operatoren auf diesen „Ketten“ nur auf den einzelnen Simplizes definieren müssen, da sie sich kanonisch auf den „Ketten“ fortsetzen lassen. Im Mittelpunkt soll hier der Sternoperator stehen, der Simplizes mit ihren dualen „Ketten“ identifiziert, et vice versa und der Randoperator, der den Ketten und speziell auch den Simplizes die Komplexeigenschaft bringt.

Definition 1.2.1. Eine p -Kette ist eine formale Summe aus p -Simplizes mit Koeffizien-

ten in \mathbb{Z} , das heißt für einen Simplizialkomplex K ist

$$C_p(K) := \left\{ \sum_{\sigma \in K^{(p)}} a_\sigma \sigma \mid a_\sigma \in \mathbb{Z} \right\} \quad (1.41)$$

die Menge aller p -Ketten über K .

Prinzipiell würde für das reine Rechnen mit p -Ketten Koeffizienten aus $\{+1, 0, -1\}$ ausreichen, da wir Simplizes gleicher Dimension immer nur „aneinander reihen“ (konkatenieren) werden, das entspräche das reine Addieren ($+1$) zweier benachbarter Simplizes. Subtrahieren (-1) erlaubt zudem die Orientierung, falls vorhanden, zu wechseln. Auch Koeffizienten aus \mathbb{R} sind denkbar, dann wäre $C_p(K)$ ein \mathbb{R} -Vektorraum. Da wir hier jedoch \mathbb{Z} gewählt haben, hat den Vorteil, dass $C_p(K)$ bezüglich der Addition eine freie abelsche Gruppe ist (mit Erzeugendensystem $K^{(p)}$, d.h. $\langle K^{(p)} \rangle_{C_p(K)} = C_p(K)$) in der die Universaleigenschaft gilt. Genauer $C_p(K)$ ist frei bzgl. jeder abelschen Gruppe \mathfrak{A} , deswegen kommutiert das Diagramm

$$\begin{array}{ccc} C_p(K) & & (1.42) \\ \downarrow & \searrow \widehat{op} & \\ K^{(p)} & \xrightarrow{op} & \mathfrak{A} \end{array}$$

mit $op = \widehat{op}|_{K^{(p)}}$, das heißt \widehat{op} ist der eindeutig bestimmte Homomorphismus, der op fortsetzt und zwar gilt

$$\widehat{op} \left(\sum_{\sigma \in K^{(p)}} a_\sigma \sigma \right) = \sum_{\sigma \in K^{(p)}} a_\sigma op(\sigma). \quad (1.43)$$

Somit reicht es vollkommen aus, dass wir bestimmte Operatoren/Homomorphismen nur auf der Basis definieren und diese dann linear fortsetzen. Speziell werden wir uns das noch für $\mathfrak{A} = C_q(\text{csd}K)$, $C_q(K)$, \mathbb{R} oder $\text{Hom}(C_p(K), \mathbb{R})$ zunutze machen.

Geometrisch kann die in (1.41) rein formale Addition als Vereinigung interpretiert werden. In Definition 1.1.31 wurde die Dualzelle eines p -Simplex eingeführt. Sie ist die geometrische Vereinigung von $(n-p)$ -Simplizes. Nun liegt es nahe, diese Dualzelle als $(n-p)$ -Kette darzustellen. Das führt uns zur Definition des Sternoperators.

Definition 1.2.2. Es sei K ein wohlzentriertes Primärgitter der Dimension n . Der Sternoperator $\star : C_p(K) \rightarrow C_{n-p}(\text{csd}K)$ ist definiert durch

$$\star \sigma^p := \sum_{\sigma^p \prec \sigma^{p+1} \prec \dots \prec \sigma^n} s_{\sigma^p, \sigma^{p+1}, \dots, \sigma^n} [c(\sigma^p), c(\sigma^{p+1}), \dots, c(\sigma^n)] \quad (1.44)$$

mit $s_{\sigma^p, \sigma^{p+1}, \dots, \sigma^n} \in \{-1, +1\}$ so gewählt, dass $s_{\sigma^p, \sigma^{p+1}, \dots, \sigma^n} [c(\sigma^p), c(\sigma^{p+1}), \dots, c(\sigma^n)]$ der durch σ^p induzierte Orientierung entspricht.

Wie man sieht besteht das Bild von \star nur aus Verkettungen von elementaren Dualsimplizes und freilich ist das eine Untergruppe des $C_{n-p}(\text{csd}K)$. Wir definieren deshalb hier $C_{n-p}(\star K) := \text{Im}(\star_{(p)}) = \star C_p(K)$. Also gilt $\star : C_p(K) \rightarrow C_{n-p}(\star K)$.

Wir können somit Simplizes verketten und haben mit dem Sternoperator auch einen Isomorphismus zwischen den Ketten des Primär- und elementaren Dualgitters. Die Surjektivität ist per Definition gegeben, da $C_{n-p}(\star K)$ Bild ist. Für

$$0 = \star \sum_{\sigma \in K^{(p)}} a_\sigma \sigma = \sum_{\sigma \in K^{(p)}} a_\sigma (\star \sigma) \quad (1.45)$$

ergibt sich über Koeffizientenvergleich nur der triviale Kern $\{0\}$ für den Gruppenhomomorphismus \star , folglich ist der Sternoperator auch injektiv.

Des Weiteren ist auch $C_{n-p}(\star K)$ freie abelsche Gruppe mit $\star K^{(n-p)} := \star(K^{(p)})$ als Erzeugendensystem, denn für jedes $\hat{c} = \star c \in C_{n-p}(\star K)$ mit $c = \sum_{\sigma \in K^{(p)}} a_\sigma \sigma \in C_p(K)$ für gewisse $a_\sigma \in \mathbb{Z}$ gilt

$$\hat{c} = \star \sum_{\sigma \in K^{(p)}} a_\sigma \sigma = \sum_{\sigma \in K^{(p)}} a_\sigma (\star \sigma) = \sum_{\hat{\sigma} := (\star \sigma) \in \star K^{(p)}} a_\sigma \hat{\sigma}. \quad (1.46)$$

Somit ist $\star K^{(n-p)}$ Erzeugendensystem und falls $\hat{c} = \star c = 0$, dann muss auch $c = 0$ gelten, weil der Sternoperator ein Gruppenisomorphismus ist, das heißt es wären alle $a_\sigma = 0$ in (1.46) als einzige (triviale) Lösung für $\hat{c} = 0$. Genauso wie bei (1.42) können wir nun Operatoren auf $C_{n-p}(\star K)$ auf der Basis $\star K^{(n-p)}$ definieren und fortsetzen, wenn der Operator auf eine abelsche Gruppe abbildet.

Da der Sternoperator das simpliziale Analogon zum Hodge-Stern-Operator $*$ werden soll, sollten auch analoge, also auf syntaktischer Ebene gleiche, Bedingungen gelten. Für eine Differentialform $\alpha \in \Omega^p(M)$ auf einer n -dimensionalen Mannigfaltigkeit M gilt (vgl. [AMR88, Kap.6.2.]²)

$$**\alpha = (-1)^{p(n-p)}\alpha. \quad (1.47)$$

Deswegen definieren wir den Sternoperator auf $C_p(\star K)$ implizit über genau diese Bedingung.

Definition 1.2.3. Es sei K ein wohlzentriertes Primärgitter der Dimension n . Der (duale) Sternoperator $\star : C_p(\star K) \rightarrow C_{n-p}(K)$ definiert sich über

$$\star \star \sigma^{n-p} = (-1)^{p(n-p)}\sigma^{n-p} \quad (1.48)$$

für alle $\sigma^{n-p} \in C_{n-p}(K)$.

Natürlich gilt Bedingung (1.48) auch für alle Ketten $\star \sigma^{n-p} =: \hat{\sigma}^p \in C_p(\star K)$, denn

$$\begin{aligned} \star \star \hat{\sigma}^p &= \star \star \star \sigma^{n-p} = \star \left((-1)^{p(n-p)}\sigma^{n-p} \right) = (-1)^{p(n-p)} \star \sigma^{n-p} \\ &= (-1)^{p(n-p)} \hat{\sigma}^p. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Bemerkung 1.2.4. Es sei K ein zweidimensionales wohlzentriertes Primärgitter ohne Rand, dann wird mit dem Sternoperator

- ein Knoten auf eine 2-Kette abgebildet, so dass alle Dreiecke in dieser Verkettung vorkommen, die diesen Knoten als Ecke haben, et vice versa. Die Orientierung der Flächenelemente ist die aller Flächenelemente. Die sich ergebene 2-Kette nennen wir auch Voronoi-Zelle.
- eine Kante σ^1 auf eine 1-Kette abgebildet, die aus genau den beiden dualen Kanten des $\text{csd}K$ besteht, die $c(\sigma^1)$ als gemeinsamen Randpunkt haben, et vice versa. Die sich ergebene 1-Kette nennen wir auch Voronoi-Kante. Die orientierte Kante bzw. Voronoi-Kante wird somit immer in Richtung der Flächenorientierungen „gedreht“.
- ein Dreieckelement auf dessen Umkreismittelpunkt abgebildet, et vice versa, deswegen nennen wir den Umkreismittelpunkt auch Voronoi-Knoten.

In Abbildung 1.3 ist dieser Zusammenhang für einen Ausschnitt eines Primärgitters beispielhaft dargestellt.

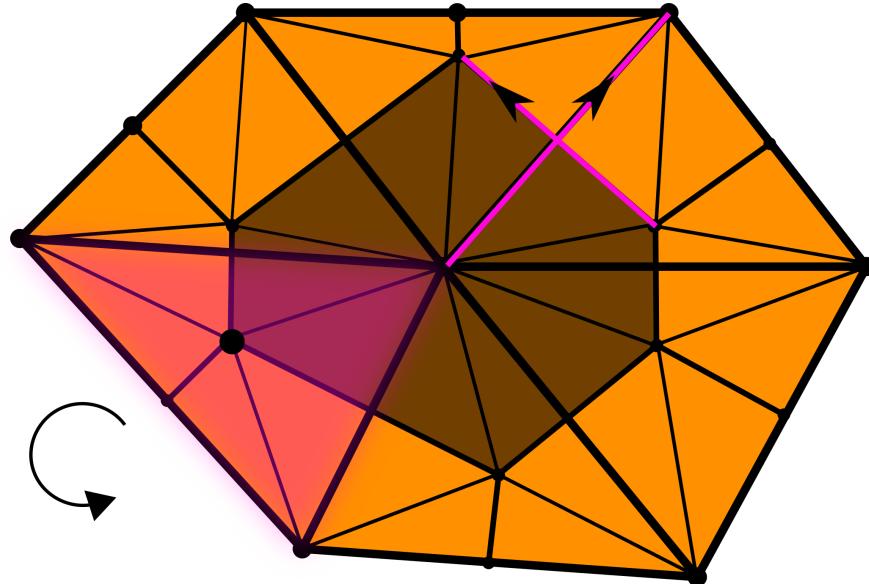


Abbildung 1.3: Beispiel für den Sternoperator auf einem Primärgitter der Dimension 2. Für Knoten und Volumenelemente ändert sich die Orientierung auch nach mehrmaliger Anwendung nicht, dagegen muss bei Kanten immer gegen den Uhrzeigersinn „gedreht“ werden, so dass z.B. $\star \star \sigma^1 = -\sigma^1$

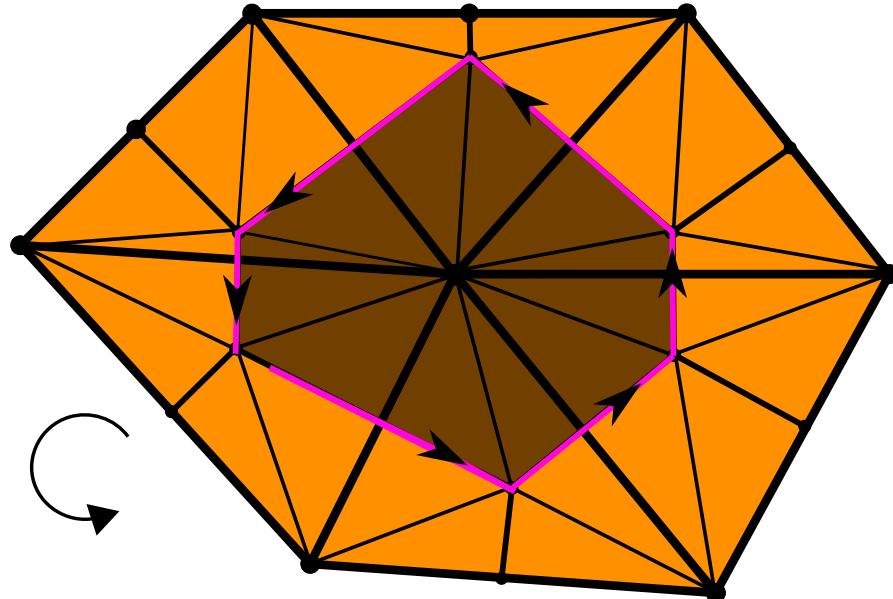


Abbildung 1.4: Rand mit Orientierungen einer (dualen) 2-Kette, genauer, der Voronoi-Zelle, der primären Ecke in der Mitte des Simplizialkomplexes. Es ergibt sich eine (duale) 1-Kette aus Voronoi-Kanten, dual zu den primären Kanten, die sich im Mittelpunkt treffen. Die Orientierung dieser primären Kanten muss für die Berechnung so geändert werden, dass sie alle nach außen zeigen.

Nun wird es Zeit der Überschrift Rechnung zutragen und einen Operator einzuführen, der die Komplexeigenschaft erfüllt.

Definition 1.2.5. Es sei K ein Simplizialkomplex und $0 < p \leq n$. Der Randoperator $\partial_p : C_p(K) \rightarrow C_{p-1}(K)$ definiert sich durch

$$\partial_p \sigma^p := \sum_{i=0}^p (-1)^i [v_0, v_1, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_p] \quad (1.50)$$

wobei $\sigma^p = [v_0, v_1, \dots, v_p] \in K$ ist. Das Dach bedeutet wieder, dass die entsprechende Ecke weggelassen wird. Da schon vorher erwähnt wurde das Knoten offene Mengen bezüglich der simplizialen Topologie sind, setzen wir konsistenterweise

$$\partial_0 \sigma^0 := 0 \quad (1.51)$$

Wenn kein Grund zur Verwirrung besteht, dann darf auch nur ∂ statt ∂_p geschrieben werden.

Folgerung 1.2.6. Der (duale) Randoperator $\partial_p : C_p(\star K) \rightarrow C_{p-1}(\star K)$ lässt sich vom obigen Randoperator für einen wohlzentrierten Simplizialkomplex K ableiten, in dem wir $\text{csd}K$ als Simplizialkomplex nutzen und den Operator auf $C_p(\star K) \leq C_p(\text{csd}K)$ einschränken. Das bedeutet für $\hat{\sigma}^p = \star \sigma^{n-p} \in \star K^{(p)}$ ($\star K^{(p)}$ Erzeugendensystem)

$$\partial_p \hat{\sigma}^p = \partial_p \star \sigma^{n-p} \quad (1.52)$$

$$= \sum_{\sigma^{n-p+1} \succ \sigma^{n-p}} \star (s_{\sigma^{n-p+1}} \sigma^{n-p+1}), \quad (1.53)$$

wobei $s_{\sigma^{n-p+1}} \in \{-1, +1\}$ so gewählt wird, dass die durch $s_{\sigma^{n-p+1}} \sigma^{n-p+1}$ induzierte Orientierung für σ^{n-p} konsistent ist. (vergleiche Beispiel in Abbildung 1.4)

Beweis. Das $\partial_p C_p(\star K) \leq C_{p-1}(\text{csd}K)$ gilt, ist klar wegen der Untergruppeneigenschaft von $C_p(\star K)$ und weil der Randoperator ein Homomorphismus ist. Zu zeigen ist allerdings noch, dass $\partial_p C_p(\star K) \leq C_{p-1}(\star K)$ gilt. Dabei reicht es auch hier aus, dass nur auf dem Erzeugendensystem zu zeigen (algebraischer Induktionsanfang). Der (algebraische) Induktionsschritt gilt dann immer wegen der Universaleigenschaft für homomorphe Fortsetzungen auf freie abelsche Gruppen.

Für eine bessere Lesbarkeit substituieren wir den Grad der Simplizes $(n-p) \leftrightarrow p$ und schreiben nur s für $s_\bullet \in \{+1, -1\}$ und machen uns dabei bewusst, dass der Koeffizient s in jeder Zeile und Summanden etwas anderes bedeuten kann.

$$\partial_{n-p} \star \sigma^p = \sum_{\sigma^p \prec \dots \prec \sigma^n} s \partial_{n-p} [c(\sigma^p), c(\sigma^{p+1}), \dots, c(\sigma^n)] \quad (1.54)$$

$$= \sum_{\sigma^p \prec \dots \prec \sigma^n} s \sum_{i=p}^n (-1)^{i-p} [c(\sigma^p), \dots, \widehat{c(\sigma^i)}, \dots, c(\sigma^n)] \quad (1.55)$$

$$= \sum_{\sigma^p \prec \dots \prec \widehat{\sigma^k} \prec \dots \prec \sigma^n} s \sum_{i=p}^n (-1)^{i-p} \left(\begin{aligned} & [c(\sigma^p), \dots, c(\sigma_1^k), \dots, \widehat{c(\sigma^i)}, \dots, c(\sigma^n)] \\ & - [c(\sigma^p), \dots, c(\sigma_2^k), \dots, \widehat{c(\sigma^i)}, \dots, c(\sigma^n)] \end{aligned} \right) \quad (1.56)$$

²Der Index, der von uns behandelten Mannigfaltigkeiten, ist immer null.

$$= \sum_{\sigma^p \prec \dots \prec \sigma^n} s \sum_{\substack{i=p \\ i \neq k}}^n (-1)^{i-p} [c(\sigma^p), \dots, \widehat{c(\sigma^i)}, \dots, c(\sigma^n)] \quad (1.57)$$

⋮

$$= \sum_{\sigma^p \prec \dots \prec \sigma^n} s [c(\sigma^{p+1}), c(\sigma^{p+1}), \dots, c(\sigma^n)] \quad (1.58)$$

$$= \sum_{\sigma^p \prec \sigma^{p+1}} \sum_{\sigma^{p+1} \prec \dots \prec \sigma^n} s [c(\sigma^{p+1}), c(\sigma^{p+1}), \dots, c(\sigma^n)] \quad (1.59)$$

$$= \sum_{\sigma^{p+1} \succ \sigma^p} \star(s\sigma^{p+1}) \in C_{n-p-1}(\star K) \quad (1.60)$$

Dabei ergibt sich (1.54) aus der Homomorphie des Randoperators und (1.55) nach Definition 1.2.5. In (1.56) schreiben wir die beiden Summanden für σ_r^k für $r = 1, 2$ explizit aus. Es gibt immer genau zwei solcher Folgen

$$\sigma^p \prec \dots \prec \sigma^{k-1} \prec \sigma^k \prec \sigma^{k+1} \prec \dots \prec \sigma^n, \quad (1.61)$$

wenn bis auf σ^k und σ^p alle Simplizes fest gewählt sind. Die beiden sich ergebenden dualen Simplizes sind gegensätzlich orientiert, da die „Zählrichtung“ der Dualecken anders herum ist. (1.57) folgt daraus, dass sich beide Summanden für $i = k$ aufheben. Das machen wir dann für alle $p < k \leq n$. Der Rest ergibt sich durch aufteilen der Summe und der Definition des Sternoperators.

Bemerkung: In z.B. [Hir03] wurde der duale Randoperator per Definition festgelegt ohne zu prüfen oder zu verweisen ob er mit dem primären Randoperator auf dualen Gittern konsistent ist. Dem wurde hier nun genüge getan. Es ist der gleiche Operator mit eingeschränktem Definitionsbereich. \square

Folgerung 1.2.7. Die Folgen $(C_p(K), \partial_p)_{0 \leq p \leq n}$ beziehungsweise $(C_p(\star K), \partial_p)_{0 \leq p \leq n}$ bilden einen (simplizialen) Kettenkomplex.

$$\begin{array}{ccccccc} 0 & \longrightarrow & C_n(K) & \xrightarrow{\partial_n} & C_{n-1}(K) & \xrightarrow{\partial_{n-1}} & \dots \xrightarrow{\partial_1} C_0(K) \longrightarrow 0 \\ & & \downarrow \star & & \downarrow \star & & \downarrow \star \\ 0 & \longleftarrow & C_0(\star K) & \xleftarrow{\partial_1} & C_1(\star K) & \xleftarrow{\partial_2} & \dots \xleftarrow{\partial_n} C_n(\star K) \longleftarrow 0 \end{array} \quad (1.62)$$

Das heißt $\partial_p \circ \partial_{p+1} = 0$, was sich einfach nachrechnen lässt. Zudem sei noch der Isomorphismus \star im Diagramm mit angegeben.

Fazit. Am Anfang des Absatzes haben wir uns entschieden, die Koeffizienten der Ketten aus \mathbb{Z} zu wählen. Hätten wir \mathbb{R} genommen, dann wäre $C_p(K)$ ein \mathbb{R} -Vektorraum mit (linear unabhängiger) Basis $K^{(p)}$. Dem entsprechend würde auch immer noch alles aus diesem Absatz gelten. Wir würde aber die Abzählbarkeit des $C_p(K)$ aufgeben, die uns unter Umständen später noch von nützen sein könnte.

Wenn wir allgemein C_p als Funktor auf der Kategorie der Simplizialkomplexe sehen, also

$$\begin{array}{ccc} C_p(K) & \xrightarrow{C_p(f)} & C_p(\mathfrak{S}) \\ \uparrow C_p & & \uparrow C_p \\ K & \xrightarrow{f} & \mathfrak{S} \end{array} \quad (1.63)$$

dann wäre

$$f_p := C_p(f) : \sum_{\sigma \in K^{(p)}} a_i \sigma \mapsto \sum_{\sigma \in K^{(p)}} a_i f(\sigma) \quad (1.64)$$

kanonisch gegeben. Somit wäre zum einen eine Zuordnung zu den singulären Kettenkomplexen mit

$$f := \langle \bullet, \bullet \rangle := K \rightarrow K_{sing} : [v_0, \dots, v_p] \mapsto \langle \bullet, [v_0, \dots, v_p] \rangle := \left([\mu^0, \dots, \mu^p] \mapsto \sum_{i=0}^p \mu^i v_i \right) \quad (1.65)$$

oder zu den abstrakten Kettenkomplexen mit $f := \pi$ (Projektion/Ankleben der Simplizes auf die Mannigfaltigkeit) gegeben. Zum anderen haben wir in zukünftigen Arbeiten auch die Möglichkeit Oberflächen zu betrachten die sich zeitlich ändern $f(t) : K \rightarrow K(t)$ unter beibehalten der simplizialen Struktur, so es denn möglich ist. Im Einzelnen muss dann noch geprüft werden unter welchen Voraussetzungen $f \circ \partial = \partial \circ f$ beziehungsweise $f \circ \star = \star \circ f$ gilt.

1.3 Gittergenerierung für Oberflächen

Zielsetzung. Die Wohlzentriertheit eines Gitters ist Pflicht, da ohne sie kein brauchbares duales Gitter (Voronoi-Gitter) erzeugt werden kann. Diese zur Triangulierung duale Gebietsdiskretisierung wird aber benötigt um zum Beispiel einen diskreten Hodge-Stern-Operator sinnvoll zu entwickeln. Bei einem nicht wohlzentrierten Dreieck liegt der Voronoi-Knoten $\star\sigma^2$ nicht im Dreieck σ^2 . Das Problem dabei ist, dass sich die Werte auf $\star\sigma^2$ und σ^2 nur um einen metrischen Faktor³ unterscheiden sollten. Diese Voraussetzung wäre aber nicht mehr haltbar, da die Gebiete, die beide Elemente einnehmen, disjunkt sind. Sie können sogar „sehr weit“ von einander entfernt liegen. Dann hätte die eine Größe fast nichts mehr mit der anderen gemein und die Linearität beider wäre nicht mehr gegeben.

Wohlzentriertheit ist eine schwerwiegende Einschränkung an die Gitterstruktur. Sie verbietet unter anderem einen 1-Ring um einen Knoten aus vier oder weniger Dreieckelementen. Für eine nicht planare Triangulierung mit positiver Gaußkrümmung mag ein 1-Ring aus vier Flächenelementen gerade noch funktionieren, da die Innenwinkelsumme der inneren Kanten weniger als 2π ist. Im planaren Fall erhalten wir aber für eine optimale⁴ Triangulierung Winkel von $\frac{\pi}{2}$ und somit nur Wohlzentriertheit im Limes⁵. Damit sind oft genutzte lokale und globale Strategien zur Verfeinerung nicht anwendbar. So wird zum Beispiel bei der FEM-Toolbox AMDiS [WV10] die längste Kante halbiert und von dort zwei neue Kanten zu den jeweils gegenüberliegenden Knoten der beiden angrenzenden Dreiecken erstellt. Der neu entstandene Knotenpunkt hat folglich einen 1-Ring aus 4 Flächenelementen. Auch CAD-Programme liefern im Allgemeinen keine geeigneten Gitter. Ein möglicher Ausweg könnte eine Triangulierung (bzw. Neutriangulierung) mittels angepassten Delaunay oder anderen Algorithmen sein, zum Beispiel Centroidal Voronoi Tessellation (CVT) [DFG99], Optimal Delaunay Triangulations (ODT) [CX04] oder Hexagonal Delaunay Triangulation [SG09].

³hier $|\sigma^2|$ bzw. dessen Reziproke

⁴bzgl. der maximalen Winkel

⁵für planare äquidistante Gitter kann diese schwächere Restriktion dennoch sinnvoll sein, da somit bekannte Differenzenschematas entstehen können

Im Folgenden wollen wir davon ausgehen, dass zumindest eine Triangulation vorliegt, die die Bedingung erfüllt, dass jeder Knoten Teil von mehr als 4 Dreiecken ist. Damit möchten wir ein Oberflächengitter erzeugen, welches wohlzentriert ist. Die Struktur des Simplizialkomplexes soll dabei erhalten bleiben. Nur die Knotenpunkte werden neu angeordnet. Das setzt natürlich voraus, dass die Oberfläche exakt, zum Beispiel explizit durch eine Immersion $X : M \rightarrow \mathbb{R}^3$ oder implizit durch das 0-Niveau einer Level-Set-Funktion [OF02], oder eine Approximation der 2-Mannigfaltigkeit höher als 1 gegeben ist.

Ansätze zur Gitterverbesserung bei der die Wohlzentriertheit im Vordergrund steht gibt es bis jetzt wenige. Denn obwohl diese Forderung an der Triangulation für viele numerische Verfahren Vorteile bringen würde, so ist sie doch nur für den hier verwendeten DEC zwingend. Eine Arbeit ist zum Beispiel [VHGR08], wobei auch hier das diskrete Äußere Kalkül die Motivation bildete. Hier wird eine Kostenfunktion aufgestellt deren Argument des Minimums ein wohlzentrierter Simplizialkomplex ist. Leider muss solch ein Minimum nicht existieren, weder im planaren noch auf gekrümmten Oberflächen. Wir wollen hier im Folgendem einen ähnlich Ansatz verwenden. Ausgangspunkt sind Kraftvektoren an den Knoten, die das Gitter so unter Zwang setzen, dass die daraus resultierende Bewegung der Knoten, wenn es denn möglich ist, eine wohlzentrierte Triangulation formt. Das Modell ist nicht neu und wird zum Beispiel zur Simulation von biologischen Zellgewebe verwendet. Einen Überblick zu der Thematik bietet [PCF⁺09].

1.3.1 Mechanisches Modell und dessen Diskretisierung

Ein einfacher mechanischer Ansatz, um nach gewissen Kriterien ein optimales Gitter zu entwickeln ist

$$\gamma \frac{d\vec{x}_i}{dt} = \vec{F}(\vec{x}_i) \quad (1.66)$$

Diese gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung beschreibt eine Viskosedaämpfung am Knoten σ_i^0 mit dem Koordinatenvektor $\vec{x}_i \in M \subset \mathbb{R}^3$ und Viskositätskoeffizient γ . Eine einfache Diskretisierung des Problems (1.66) ist das Explizite Eulerverfahren mit nachgeschalteter Projektion $\pi : \mathbb{R}^3 \rightarrow M$ um die Nebenbedingung $\vec{x}_i \in M$ zu erfüllen.

$$\vec{x}_i(t + \Delta t) = \pi \left(\vec{x}_i(t) + h \vec{F}_i \right) \quad (1.67)$$

wobei $h := \frac{\Delta t}{\gamma}$ und $\vec{F}_i := \vec{F}(\vec{x}_i(t))$. Der Kraftvektor \vec{F}_i resultiert aus Interaktionen mit den anderen Knoten. Im Overlapping-Sphere-Modell(OS) [PCF⁺09] sind das all die Knoten σ_j^0 , die einen bestimmten Abstand zu σ_i^0 haben. Für das explizite Eulerverfahren (Verfahren 1.Ordnung) werden kleine Schrittweiten h benötigt. Allerdings bringen Verfahren höherer Ordnung wahrscheinlich keine signifikant besseren Ergebnisse. Zum einen könnte eine größere Schrittweite nicht ausgenutzt werden, da es sonst passieren kann, dass sich, durch die resultierende größere Verschiebung eines Knoten, Dreiecke überlappen und somit keine zulässige Triangulierung mehr vorliegt. Zum anderen reduziert die Projektion π die Konvergenzordnung der Verfahren. So wurde zum Beispiel in den numerischen Experimenten auch das Heun-Verfahren (explizites Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung 2) getestet ohne nennenswerte bessere Resultate, dafür mit wesentlich höheren Kosten in der Berechnung. Implizite Verfahren haben einen zu hohen Aufwand in der Implementation, denn es ist zu bedenken, dass der Kraftvektor \vec{F}_i nicht nur von den Koordinaten \vec{x}_i abhängt, sondern auch von der umgebenden Struktur.

Wir wollen hier, im Gegensatz zum OS-Modell, die Gitterstruktur des Simplizialkomplexes ausnutzen, das heißt es interagieren genau die Knoten mit einander, die eine

gemeinsame Kante besitzen. Somit lässt sich der Kraftvektor \vec{F}_i zerlegen zu

$$\vec{F}_i = \sum_{\sigma^1 := [\sigma_j^0, \sigma_i^0] \succ \sigma_i^0} \frac{F_{\sigma_i^0 \prec \sigma^1}}{\|\vec{x}_j - \vec{x}_i\|} (\vec{x}_j - \vec{x}_i) . \quad (1.68)$$

$F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}$ ist folglich die Kraft die am Knoten σ^0 in Richtung der Kante σ^1 wirkt. Da die Kraft aber auch von der Geometrie der Flächenelemente abhängen kann, zerlegen wir die Kantenkräfte weiter zu

$$F_{\sigma^0 \prec \sigma^1} = \sum_{\sigma^2 \succ \sigma^1} F_{\sigma^0 \prec \sigma^1 \prec \sigma^2} . \quad (1.69)$$

Als praktisch erweist es sich außerdem die Kräfte dimensionslos zu halten, da somit eventuell auftretende Parameter für unterschiedliche Ausgangsgitter annähernd gleich gewählt werden können. Die Schrittweite h in (1.67) hängt somit annähernd linear von der Gitterweite ab. Zu beachten ist hierbei, dass sich die Gitterweite, je nach Definition⁶, in jedem Eulerschritt ändern kann.

Es folgen nun 2 heuristische Ansätze für die Kraft um die Beschaffenheit des Gitters positiv zu beeinflussen.

Optimale Kantenlängen

Ein ideales Dreieck mit bestmöglichen Eigenschaften hat überall Innenwinkel von $\frac{\pi}{3}$. Folglich liegt ein gleichseitiges Dreieck vor. Deshalb wäre es ein guter Ansatz zu versuchen eben diese Eigenschaft bei einem Dreieckelement hervorzurufen. Wir setzen eine Kantenkraft in linearer Abhängigkeit der Länge der Kante σ^1 an, die für alle Knoten $\sigma^0 \prec \sigma^1$ gleich ist.

$$F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}^L := F_{\sigma^1}^L := \frac{|\sigma^1|}{l^*} - k \quad (1.70)$$

mit $k \in [0, 1]$. l^* ist die Referenzlänge des Dreiecks T^* . Sie resultiert aus der Annahme, dass wir eine äquidistante flache Triangulierung haben mit hexagonaler Struktur. Das heißt alle Dreiecke σ^2 wären dann vom Ausmaß gleich einem gleichseitigen Referenzdreieck T^* . Dessen Fläche berechnet sich dann über die Gesamtfläche $V(K) = \sum_{\sigma^2} |\sigma^2|$ und der Anzahl aller Dreiecke $N_{\sigma^2} = |\{\sigma^2 \in K\}|$

$$|T^*| = \frac{V(K)}{N_{\sigma^2}} \quad (1.71)$$

sowie unter Ausnutzung, dass T^* gleichseitig ist

$$|T^*| = \frac{l^* \sqrt{3}}{4} \quad (1.72)$$

Zusammen ergibt sich für die Referenzlänge $l^* > 0$

$$l^* = 2 \sqrt{\frac{V(K)}{\sqrt{3} N_{\sigma^2}}} \quad (1.73)$$

Für $k = 1$ kann man sich das so vorstellen, dass die beiden Knoten einer Kante σ^1 sich abstoßen falls $|\sigma^1| < l^*$, sich anziehen falls $|\sigma^1| > l^*$ oder keine Kräfte wirken wenn

⁶z.B. Maximum aller Umkreisradien

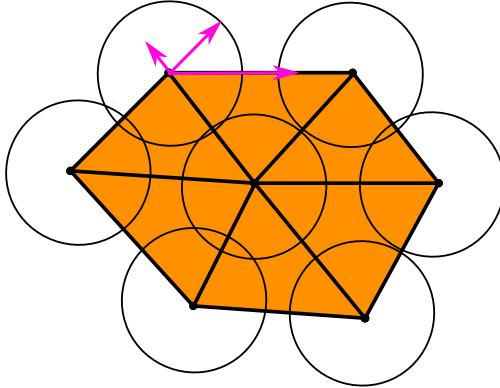


Abbildung 1.5: Kantenkräfte für an einem Knoten $k = 1$. Die eingezeichneten Radien entsprechen $\frac{l^*}{2}$.

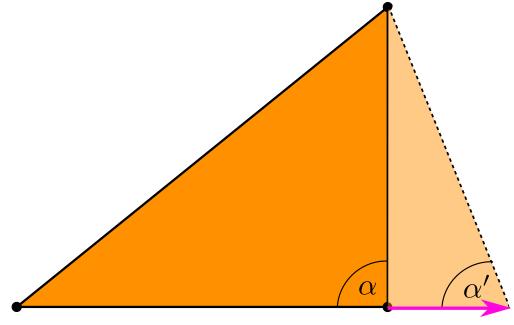


Abbildung 1.6: Eine Verschiebung des Knotens entlang einer Kante verändert den Winkel.

$|\sigma^1| = l^*$ gilt (siehe Abb. 1.5). $k = 0$ würde für eine Gitter mit Rand und freien Randknoten⁷ bedeuten, dass es immer weiter schrumpft. In unserem Fall, also Triangulierung von Oberflächen ohne Rand, zeigt sich, dass sich die Gitter vor allem dort zusammen ziehen, wo sich zum einen 1-Ringe aus 5 Dreieckselementen befinden und zum anderen wo die Krümmung der Mannigfaltigkeit klein ist. Letzteres ist allerdings keine gute Eigenschaft, da gerade dort ein feineres Gitter vornöten wäre, wo die Oberfläche eine große Krümmung aufweist. Der andere Extremfall, $k = 1$, würde zwar ein annähernd gleich grobes Gitter erzeugen, aber in Experimenten zeigte sich, dass (1.67) dadurch instabil wird. Stabilisierend wirkt sich aber das Hinzuzaddieren des folgenden Kraftansatzes aus.

Optimale Winkel

Ein weiterer heuristischer Ansatz bezieht sich direkt auf die inneren Winkel eines Dreieckelements. Wie in Abbildung 1.6 angedeutet bewirkt eine Verschiebung entlang der Kante eine Änderung des Winkels. Wird dabei, wie in Abbildung 1.6, die Kante länger, dann wird der Winkel an dem zu verschiebenden Knoten kleiner, et vice versa. Somit ist ein sinnvoller Ansatz für die Kraft an einem Knoten σ_0 in Abhängigkeit zur Kante $\sigma_i^1 \succ \sigma^0$ und dem Dreieck $\sigma^2 \succ \sigma_i^1$

$$F_{\sigma^0 \prec \sigma_i^1 \prec \sigma^2}^A := \cos \angle(\vec{e}_0, \vec{e}_1) - c \quad (1.74)$$

$$= \frac{\vec{e}_0 \cdot \vec{e}_1}{\|\vec{e}_0\| \|\vec{e}_1\|} - c \quad (1.75)$$

$$\vec{e}_i := \vec{e}_{\sigma_i^1} = \vec{x}_{v_i} - \vec{x}_{\sigma^0} \quad (1.76)$$

$$(1.77)$$

mit $i \in \{0, 1\}$ und $c \in [-1, 1]$. v_i ist also der Knoten, der mit σ^0 die gemeinsame Kante σ_i^1 im Dreieck $\sigma^2 = [\sigma^0, v_0, v_1]$ hat.

Eine sinnvolle Wahl für die Konstante ist $c = \cos \frac{\pi}{3} = 0.5$. Sie würde in einer flachen Triangulation mit hexagonaler Struktur bewirken, dass sich keine Kräfte entwickeln, falls alle Dreiecke bis auf Rotation und Translation gleich sind.

⁷Randknoten dürfen auch nach innen wandern

Kombination der Kantenkräfte

Es hat sich gezeigt, dass (1.70) und (1.74) gerade auf komplizierteren Gebieten einzeln entweder nicht das gewünschte Resultat liefern oder instabil sind. Deshalb kombinieren wir die beiden Kräfte linear:

$$F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}^{\text{Gesamt}} := D \cdot F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}^L + (1 - D) \cdot F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}^A \quad (1.78)$$

mit $D \in [0, 1]$. Algorithmus 5.2.1 zeigt wie die resultierenden Kräfte auf einem Dreieckselement berechnet werden können. Um alle Knotenkräfte⁸ zu erhalten müssen wir nur noch diese Element-Knotenkräfte aufzusammeln.

Projektion der Kraftvektoren

Des Weiteren, wie im Algorithmus 5.2.1 zu sehen, wird der Kraftvektor \vec{F}_i in den Tangentialraum projiziert, das heißt

$$\vec{F}_{T_p M, i} = \vec{F}_i - (\vec{F}_i \cdot \vec{\nu}_i) \vec{\nu}_i, \quad (1.79)$$

wobei der Normalenvektor $\vec{\nu}_i$ am Knoten σ_i^0 entweder als bekannt vorausgesetzt ist, über eine signierte Distanzfunktion φ ermittelt wird, also

$$\vec{\nu}_i = \frac{\nabla \varphi}{\|\nabla \varphi\|}(\vec{x}_i), \quad (1.80)$$

oder über die Elementnormalen approximiert wird

$$\vec{\nu}_i = \sum_{\sigma^2 \succ \sigma_i^0} \frac{|\sigma^2|}{\sum_{\sigma^2 \succ \sigma_i^0} |\sigma^2|} \vec{\nu}_{\sigma^2} \quad (1.81)$$

Somit kann im expliziten Eulerverfahren (1.67) $\vec{F}_{T_p M, i}$ statt \vec{F}_i verwendet werden. Das müssen wir nicht machen, aber es bringt Vorteile. Zum einen könnten Knoten soweit in Normalenrichtung verschoben werden, dass die nachfolgende Projektion den Knoten falsch abbildet und das Gitter zerstört wird (vgl. Abb. 1.7), zum anderen wird die Projektion in (1.67) oft iterativ gelöst (vgl. 1.4.1) und je weiter weg wir den Knoten von der Mannigfaltigkeit verschieben um so schlechter ist die Startnährung für das iterative Verfahren.

1.3.2 Beispiele

Ellipsoid

Wir wollen nun ein geeignetes Gitter für ein Ellipsoid erstellen (vgl. Appendix 5.4.4). Zur Verfügung steht uns eine Starttriangulierung der Einheitssphäre mit zirka 1000 Knoten. Es ist fast überall eine hexagonale Struktur vorhanden bis auf 12 Defekte, genauer, an 12 Knoten befinden sich pentagonale 1-Ringe. Dieses Startgitter wird nun auf den Ellipsoid projiziert (vgl. Abschnitt 1.4.1).

Wie in Abbildung 1.8 zu sehen, ist ein wohlzentrierter Simplizialkomplex nach nur wenigen Eulerschritten (1.67) erreicht. Der größte Winkel nimmt aber weiterhin logarithmisch ab. Nach zirka 200 Schritten hat er sein Minimum erreicht und steigt danach wieder leicht. Das ist nicht verwunderlich, denn kleinere Winkel sind nicht das einzige Optimalitätskriterium. Geplottet wurde das Integralmittel $\bar{\alpha}_{\max}$ (`AvMaxAngle`) der größten

⁸d.h. $(\vec{F}_i)_{i=1, \dots, N_{\sigma^0}} \in (\mathbb{R}^3)^{N_{\sigma^0}}$

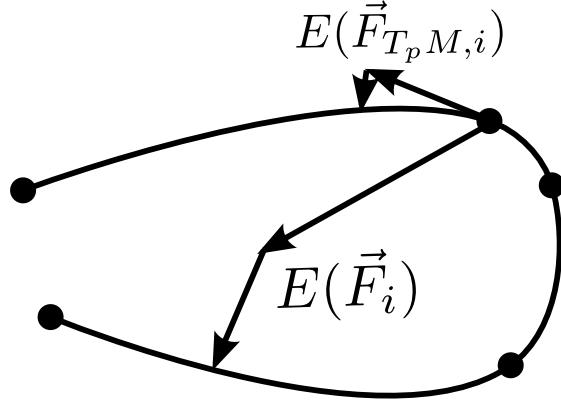


Abbildung 1.7: Eindimensionales Extrembeispiel für ein Schritt Euler-Explizit E (inkl. Nachprojektion π) eines Knotens mit und ohne Vorprojektion des Kraftvektors \vec{F}_i zu $\vec{F}_{T_p M,i}$. Ohne Vorprojektion kann es zu einem unzulässigen Gitter kommen.

Winkel der Dreiecke und der größte aller maximalen Winkel α_{\max}^{\max} (`MaxMaxAngle`) nach jedem Iterationsschritt.

$$\bar{\alpha}_{\max} := \frac{\int_{|K|} \alpha_{\max} \mu}{\int_{|K|} \mu} = \frac{1}{V(K)} \sum_{\sigma^2 \in K} |\sigma^2| \alpha_{\max}^{\sigma^2} \quad (1.82)$$

$$\alpha_{\max}^{\max} := \max \left\{ \alpha_{\max}^{\sigma^2} \mid \sigma^2 \in K \right\} \quad (1.83)$$

wobei $|K|$ der zugrunde liegende Raum des Simplizialkomplexes K ist und $\mu \in \Lambda^2(|K|)$ die die stückweise konstante Volumenform auf $|K|$. $\alpha_{\max}^{\sigma^2}$ ist der größte Winkel auf dem Dreieck σ^2 .

Lokale Verfeinerung

Die in der FEM häufig anzutreffende Verfeinerung, nämlich die Halbierung der Dreiecke, führt zu 1-Ringen aus 4 Flächenelementen an den neu entstandenen Knoten und ist somit im Allgemeinen nicht zulässig für unsere Triangulierung. Eine Möglichkeit Dreiecke zu verfeinern und trotzdem eine Ausgangssituation für ein wohlzentriertes Gitter zu schaffen ist das Vierteln von Flächenelementen, wobei 3 neue Knoten an den Seitenhalbierenden entstehen (siehe Abb. 1.9 ganz links). Die somit hängenden Knoten werden beseitigt indem die Nachbarelemente halbiert werden. Das heißt es entsteht hexagonale Struktur an einem neuen Knoten, wenn beide angrenzende Dreiecke zum Verfeinern markiert wurden und pentagonale Struktur, wenn nur ein Dreieck markiert wurde. Für die alten Knoten an denen eine neue Kante hinzu kommt erhöht sich die Anzahl der umliegenden Flächenelemente um eins.

Nachdem die neuen Knoten auf die Mannigfaltigkeit projiziert werden ist im Allgemeinen noch nicht sichergestellt, dass ein wohlzentrierte Triangulation vorliegt. Deshalb wenden wir unseren Algorithmus (1.67) darauf an. Wenn vor der Verfeinerung ein zulässiges Gitter vorlag, dann zeigt sich, dass wir nur sehr wenige Iterationsschritte benötigen um wieder ein zulässiges Gitter herzustellen. Abbildung 1.9 zeigt das Resultat nach nur einem Eulerschritt mit zwei verschiedenen Parameterkonfigurationen. Hier wurde ein Dreieck verfeinert (links). Das Gitterverbesserungsverfahren erzeugt zum einen wohlzentrierte Dreiecke bei denen die Abmessungen weitestgehend gleich bleiben (Mitte) und bei denen die neu entstandenen Elemente schrumpfen, jedoch die Winkel besser sind (rechts) als bei der anderen Parameterkonfiguration.

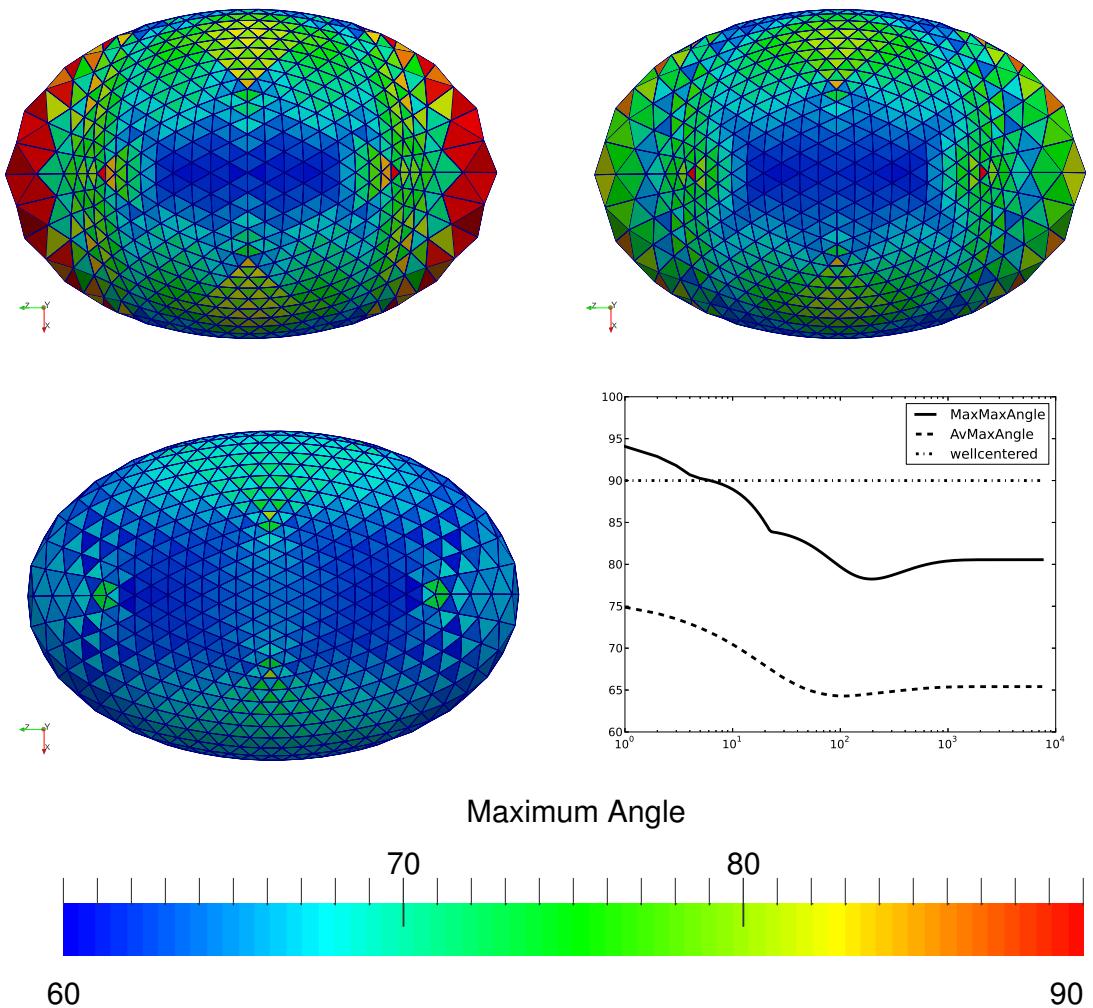


Abbildung 1.8: Parameter: $h = 0.01$; $k = 1$; $c = 0.7$. Von links oben nach rechts unten: Startgitter (keine Wohlzentriertheit, maximaler Winkel ca. 95.9°); nach 7 Eulerschritten (Wohlzentriertheit); nach 1000 Eulerschritten (danach keine signifikanten Veränderungen mehr); (semilog)Eulerschritte-Winkel-Plot (Maximum und Integralmittel)

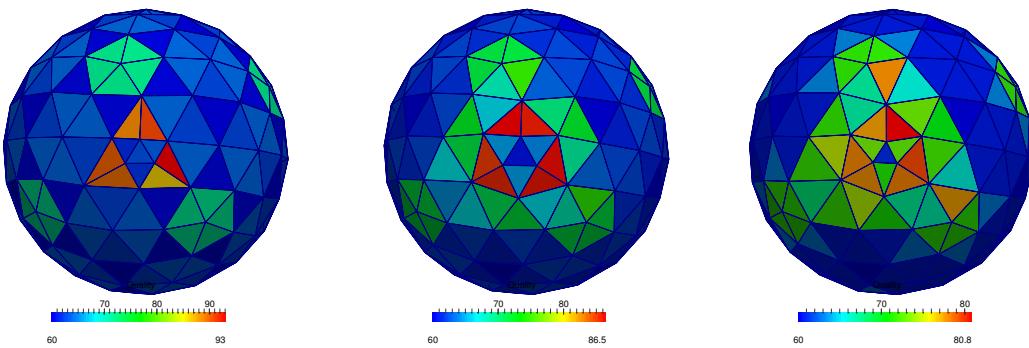


Abbildung 1.9: Von links nach rechts: Startgitter; nach 1 Eulerschritt ($h = 0.1$, $k = 1$, $c = 0.7$, max. Winkel ca. 86.5°); nach 1 Eulerschritt ($h = 0.08$, $k = 0.3$, $c = 0.7$, max. Winkel ca. 80.8°)

Fazit. Prinzipiell ist es also möglich ein wohlzentriertes Gitter aus einer Ausgangstriangulation zu erzeugen, wenn genügend viele Informationen über die stetige Oberfläche bekannt sind. Zum Teil reichen auch nur wenige Eulerschritte aus um Wohlzentriertheit zu erreichen, jedoch um in gewissen Sinne gleichmäßige Gitter zu bekommen muss wesentlich mehr Aufwand betrieben werden, der unter Umständen den des eigentlichen Problems, wie das Lösen einer Partiellen Differentialgleichung auf der Oberfläche, bei weitem übersteigt.

1.4 Implizit gegebene Oberflächen

Oftmals ist eine Oberfläche $M \subset \mathbb{R}^3$ nicht explizit über eine Parametrisierung

$$X : (u, v) \mapsto X(u, v) \in \mathbb{R}^3 \quad (1.84)$$

gegeben, sondern über den 0-Level-Set einer signierten Distanzfunktion $\varphi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$. Die 2-Mannigfaltigkeit kann dann durch

$$M = \{\vec{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \varphi(\vec{x}) = 0\}. \quad (1.85)$$

beschrieben werden. Solche implizit beschriebenen Oberflächen liegen zum Beispiel bei dreidimensionalen Phasenfeldproblemen vor (z.B. Allen-Cahn-, Cahn-Hilliard- oder Phase-Field-Crystal-Modell). Die Distanzfunktion⁹ φ ist dort gerade die Lösung dieser Probleme und das Null-Niveau dieser Funktion beschreibt die Phasengrenzen.

Wir treffen hier die Konvention, dass „außen“ $\varphi > 0$ gilt und „innen“ $\varphi < 0$. Dadurch zeigt der Gradient $\nabla \varphi(\vec{x})$ für alle $\vec{x} \in M$ in Richtung der äußeren Normalen. „Außen“ und „innen“ ist durch die Orientierung der Mannigfaltigkeit gegeben. In Falle von 2-Mannigfaltigkeiten ohne Rand, ist „innen“ gerade das von der Oberfläche umschlossene Gebiet im \mathbb{R}^3 .

1.4.1 Numerische Projektion

Wenn bei einem Simplizialkomplex, welches die Oberfläche approximiert, neue Knoten entstehen oder vorhandene verschoben werden sollen, dann ist es notwendig diese Knoten auf die Mannigfaltigkeit zu projizieren, denn eine Bedingung an den Simplizialkomplex ist, dass die Knoten dort und auf dem abstrakten Simplizialkomplex übereinstimmen.

Gesucht ist also das

$$\operatorname{argmin}_{\vec{x} \in M} \|\vec{y} - \vec{x}\| \quad (1.86)$$

für den Knoten mit den Koordinaten $\vec{y} \in \mathbb{R}^3 \setminus M$, der sich noch nicht auf der Mannigfaltigkeit M befindet und damit $\varphi(\vec{y}) \neq 0$ gilt.

Der kürzeste Weg mit Länge ε steht im rechten Winkel zur Oberfläche am Punkt \vec{x} (siehe Abb. 1.10). Für den gesuchten Punkt $\vec{x} \in M \subset \mathbb{R}^3$ folgt somit

$$\vec{x} = \vec{y} + \frac{\varepsilon}{\|\nabla \varphi(\vec{x})\|} \nabla \varphi(\vec{x}) = \vec{y} + h \nabla \varphi(\vec{x}) \quad (1.87)$$

für $\varepsilon = h \|\nabla \varphi(\vec{x})\|$. Allerdings ist weder h noch \vec{x} bekannt. Deshalb approximieren wir den Gradienten mittels Taylor an \vec{y} :

$$\nabla \varphi(\vec{x}) = \nabla \varphi(\vec{y}) + H[\varphi](\vec{y})(\vec{x} - \vec{y}) + HOT \quad (1.88)$$

$$= \nabla \varphi(\vec{y}) + \frac{\varepsilon}{\|\nabla \varphi(\vec{x})\|} H[\varphi](\vec{y}) \nabla \varphi(\vec{x}) + HOT \quad (1.89)$$

⁹auch Phasen- oder Ordnungsfunktion genannt

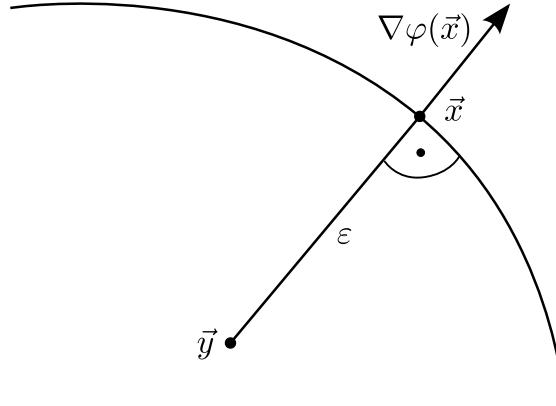


Abbildung 1.10: Darstellung des Punktes \vec{y} und dessen projizierter Punkt \vec{x}

wobei HOT für Therme höherer Ordnung (in ε) steht und $H[\varphi]$ ist die (symmetrische) Hessematrix von $\varphi \in C^2(\overline{B_\varepsilon(\vec{x})})$. Einsetzen in (1.87) liefert

$$\vec{x} = \vec{y} + h \nabla \varphi(\vec{y}) + \tilde{O}(\varepsilon^2) \quad . \quad (1.90)$$

Somit ist für uns die Abschätzung

$$\vec{x}^* := \vec{y} + h \nabla \varphi(\vec{y}) \quad (1.91)$$

für \vec{x} ausreichend falls φ hinreichend glatt und ε klein.

Nun wollen wir h so bestimmen, dass \vec{x}^* auf der Oberfläche liegt, das heißt

$$\Phi_{\vec{y}}(h) := \varphi(\vec{x}^*) = \varphi(\vec{y} + h \nabla \varphi(\vec{y})) = 0 \quad . \quad (1.92)$$

Dieses Nullstellenproblem lösen wir in erster Näherung mittels Newton-Verfahren und Startlösung $h = 0$.

$$\hat{h} = -\frac{\Phi_{\vec{y}}(0)}{\Phi'_{\vec{y}}(0)} = -\frac{\varphi(\vec{y})}{\|\nabla \varphi(\vec{y})\|^2} \quad (1.93)$$

Damit stellen wir die Iterationsvorschrift

$$\vec{y}_{i+1} := \vec{y}_i - \frac{\varphi(\vec{y}_i)}{\|\nabla \varphi(\vec{y}_i)\|^2} \nabla \varphi(\vec{y}_i) \quad (1.94)$$

auf. Diese numerische Projektion, die wir hier nun erhalten haben, ist für unsere Zwecke vollkommen ausreichend und lieferte in allen Berechnungen, die im Rahmen dieser Arbeit gemacht wurden, ausgezeichnete Ergebnisse. Als Abbruchskriterium wurde fast immer $\varphi(\vec{y}) < 1.0E - 8$ gewählt, das nach wenigen Iterationsschritten erreicht wurde.

2 Diskretes Äußeres Kalkül (DEC)

In diesem Kapitel werden wir die diskreten Differentialformen einführen und Operatoren für diese definieren. Eine Einführung in das Rechnen mit (stetigen) Differentialformen oder allgemein in moderner Vektoranalysis und Differentialgeometrie wird es nicht geben. Grundlegende Kenntnisse in diesen Gebieten seien hier vorausgesetzt oder können in [AMR88], [BG88], [Jän05], [Lee97] und [Shi14] nach gelesen werden. Ähnlich wie auch eine p -Form eine Abbildung des p -fachen Tangentialraumes $(T_x M)^p$ in \mathbb{R} ist, bildet eine diskrete p -Form, auch p -Kokette genannt, eine p -Kette in \mathbb{R} ab. Dabei gilt es eine diskrete äußere Ableitung zu schaffen, die die Menge der diskreten Differentialformen zu einem Kokettenkomplex macht, genauso wie auch die äußere Ableitung die Menge der Differentialformen zu solch einen Komplex macht, dem de-Rham-Komplex. Hierbei werden wir den Satz von Stokes ausnutzen, der bewirkt, dass sich das Integral der äußeren Ableitung als Randintegral ausdrücken lässt. Da die genutzten Integrationsgebiete Ketten sind, ist nicht mehr viel zutun, da der Randoperator für Ketten schon im vorherigen Kapitel hergeleitet wurde. Speziell für Funktionen ist die äußere Ableitung eine 1-Form. Hierbei werden wir einen diskreten Gradienten herleiten, der eben die resultierende exakte Form approximiert. Ebenfalls werden wir ein diskreten Hodge-Stern-Operator entwickeln und damit auch den Laplace-Beltrami-Operator erhalten.

2.1 Diskrete Differentialformen

Definition 2.1.1. Eine diskrete p -Form ist ein Homomorphismus vom Kettenkomplex $C_p(K)$ nach \mathbb{R} . Die Menge aller dieser Homomorphismen bezeichnen wir je nach Kontext mit $C^p(K)$ (Menge der p -Ketten) oder $\Omega_d^p(K)$ (Menge der diskreten p -(Differential-)Formen). Das heißt

$$\text{Hom}(C_p(K), \mathbb{R}) =: C^p(K) =: \Omega_d^p(K). \quad (2.1)$$

Des Weiteren erfolgt die Addition punktweise, das heißt

$$(\alpha + \beta)(c) := \alpha(c) + \beta(c) \quad (2.2)$$

für $\alpha, \beta \in C^p(K)$ und $c \in C_p(K)$.

Folgerung 2.1.2. Da \mathbb{R} mit der Addition eine abelsche Gruppe ist, können wir uns wieder die Universaleigenschaft (1.42) des Kettenkomplexes zunutze machen. Für eine p -Kette $c = \sum_{\sigma \in K^{(p)}} a_\sigma \sigma \in C_p(K)$ und eine p -Kokette $\alpha \in C^p(K)$ gilt

$$\alpha(c) = \alpha \left(\sum_{\sigma \in K^{(p)}} a_\sigma \sigma \right) = \sum_{\sigma \in K^{(p)}} a_\sigma \alpha(\sigma), \quad (2.3)$$

damit reicht es auch hier aus die p -Ketten nur auf den p -Simplizes zu definieren.

Hätten wir die Menge der p -Ketten als \mathbb{R} -Vektorraum eingeführt, so hätte uns die Frage nach einem inneren Produkt zwischen den Ketten und den Koketten zur dualen Paarung geführt und damit auch, dass $C^p(K) = (C_p(K))^*$ der Dualraum von $C_p(K)$ ist. Nun hält uns aber auch nichts davon ab, dies auch für die hier eingeführten Ketten analog zu machen.

Definition 2.1.3.

$$\begin{aligned} \langle \bullet, \bullet \rangle : C^p(K) \times C_p(K) &\rightarrow \mathbb{R} \\ (\alpha, c) &\mapsto \langle \alpha, c \rangle := \alpha(c) \end{aligned} \tag{2.4}$$

heißt natürliche Paarung zwischen den p -Koketten (-Formen) und den p -Ketten.

Die Verbindung zwischen diskreter Form und Differentialform ist die de-Rham-Abbildung. Dazu nehmen wir zunächst an, dass wir einen abstrakten Simplizialkomplex L vorliegen haben, das heißtt, dass alle Simplizes auf der zugehörigen Mannigfaltigkeit M liegen. Das bringt erst einmal den Vorteil, dass Integration auf den Simplizes das gleiche Ergebnis auch auf der Mannigfaltigkeit liefert.

Definition 2.1.4. Die de-Rham-Abbildung bildet p -Differentialformen auf diskrete p -Formen (Koketten) ab. Genauer

$$\begin{aligned} \psi^p : \Omega^p(M) &\rightarrow C^p(L) = \Omega_d^p(L) \\ \alpha &\mapsto \left(\sigma^p \mapsto \int_{\sigma^p} \alpha =: \psi^p(\alpha)(\sigma^p) = \langle \psi^p(\alpha), \sigma^p \rangle \right), \end{aligned} \tag{2.5}$$

das heißtt die diskrete p -Form $\psi^p(\alpha) \in \Omega_d^p(L)$ ist auf den p -Simplizes definiert, was wegen Folgerung 2.1.2 vollkommen ausreicht.

Folgerung 2.1.5. Zum einen ist ψ linear, da das Integral ein lineares Funktional ist. Zum anderen ist die de-Rham-Abbildung surjektiv. Das hat den Vorteil, dass sich jedes $\alpha_d \in \Omega_d^p(L)$ auch als $\psi(\alpha) = \alpha_d$ schreiben lässt, da immer solch ein geeignetes $\alpha \in \Omega^p(M)$ existiert.

Beweis. Da es ausreicht die Aussage für eine Basis von $\Omega_d^p(L)$ zu zeigen, nehmen wir einfach die duale Basis

$$\left(L^{(p)} \right)^* := \left\{ \sigma_i^* \in \Omega_d^p(L) \mid \sigma_i^*(\sigma_j) = \delta_{ij}, i, j = 1, \dots, N_{\sigma^p} \right\}, \tag{2.6}$$

wobei N_{σ^p} die Anzahl der p -Simplizes in $L^{(p)}$ ist und δ_{ij} das Kronecker-Delta. Nun brauchen wir für $i = 1, \dots, N_{\sigma^p}$ nur noch geeignete $\alpha_i \in \Omega^p(M)$ finden, so dass

$$\int_{\sigma_j} \alpha_i = \delta_{ij} \tag{2.7}$$

gilt. Es sei dazu eine auf $\sigma_i \subset M$ lokale Basis (x^1, \dots, x^p) gegeben, dann definieren wir eine p -Form auf dem Polytop von $L^{(p)}$

$$\alpha_i := \frac{1}{|\sigma_i|} \chi_{\sigma_i} dx^1 \wedge \dots \wedge dx^p \in \Omega^p(|L^{(p)}|), \tag{2.8}$$

wobei χ die Indikatorfunktion ist. Mit der Inklusionsabbildung $\iota : |L^{(p)}| \hookrightarrow M$ erfüllt gerade der Pullback (s.u. (2.23)) $\iota^* \alpha_i \in \Omega^p(M)$ die Anforderung (2.7) und damit auch $\psi(\iota^* \alpha_i) = \sigma_i^*$. \square

Bemerkung 2.1.6. Nun haben wir bei der Definition der de-Rham-Abbildung vorausgesetzt, dass ein abstrakter Simplizialkomplex vorliegt. Das entspricht aber nur für flache Mannigfaltigkeiten unseren Anforderungen. Im Allgemeinen ist die gegebene Triangulation nur eine lineare Approximation der Mannigfaltigkeit und damit auch des zugehörigen abstrakten Simplizialkomplexes. Das bedeutet auch, dass für $p \geq 1$ die Differentialformen von M in einem anderen Raum „leben“ als die Differentialformen des Polytopes $|K|$.

Rein formal ließe sich die Situation entschärfen, in dem wir die Simplizes von K auf die Mannigfaltigkeit projizieren (vgl. (1.11)), also es wird $\langle \psi^p(\alpha), \pi(\sigma^p) \rangle = (\psi^p(\alpha) \circ \pi)(\sigma^p)$ gerechnet für ein $\sigma^p \in K$. Nur ist in vielen praktischen Aufgaben weder die Projektion noch die Mannigfaltigkeit exakt bekannt, so bleibt also nur die approximative Auswertung des Integrals. Wir werden deshalb auch einfach $\langle \alpha_d, \sigma^p \rangle$ statt $\langle \alpha_d, \pi(\sigma^p) \rangle$ schreiben. Für die numerische Analysis ist das eine schwierige Situation, da vor der eigentlichen Diskretisierung (Diskretisierungsfehler) noch eine Approximation (geometrischer Fehler) auf einen stückweise flachen Raum gemacht wird.

Für 0-Formen (identisch zu Skalarfeldern) ergibt sich dieser geometrische Fehler nicht, da nach Voraussetzung die Ecken des Simplicialkomplexes auf der Mannigfaltigkeit liegen. Hier ist die Diskretisierung genauso wie wir das aus anderen Verfahren, wie die Finite-Differenzen-Methode, gewöhnt sind, da das „Punktintegral“ nichts weiter als die Auswertung an eben diesem Punkt ist. Das heißt, liegt ein Skalarfeld $u : M \rightarrow \mathbb{R}$ vor, so ist das diskrete Skalarfeld $u_d : K^{(0)} \rightarrow \mathbb{R}$ an den Ecken definiert.

$$u(v_i) = \psi(u)(v_i) = \langle \psi(u), v_i \rangle = u_d(v_i) =: u_i \quad (2.9)$$

für alle $v_i \in K^{(0)}$. Die Interpolation zurück zur Mannigfaltigkeit kann dann mittels linearer Ansatzfunktionen erfolgen, die sich auf den Volumenelementen σ^n in gewohnter Weise definieren, das heißt 1 auf einer ausgezeichneten Ecke und 0 auf den übrigen Ecken. In dieser Arbeit werden wir uns größtenteils auf die Auswertung von 0-Formen beschränken, das reicht aus um skalawertige oder vektorisierte skalawertige Differentialgleichungen höherer Ordnung zu diskretisieren.

Dennoch sei hier auf die Auswertung von 1-Formen (Pfaffsche-Formen) eingegangen, denn sie werden zum einen für spätere numerischen Betrachtungen und zum anderen für die Behandlung von (Tangential-)Vektorproblemen noch interessant werden, denn mittels \flat beziehungsweise \sharp ist ein Isomorphismus zwischen Vektorfeldern und 1-Formen gegeben. Betrachten wir hierzu eine 1-Form $\alpha \in \Omega^1(M)$ und die zugehörige diskrete Form $\alpha_d = \psi(\alpha) \in \Omega_d^1(M)$. Wie sind diese beiden Formen zu vergleichen? Beide geben zwar Antworten in \mathbb{R} aber die Differentialform nimmt einen Tangentialvektor und die diskrete Form eine Kante als Eingabe. Dazu sei eine Kante $\sigma_\varepsilon^1 \in K$ der Länge 2ε gegeben und deren abstrakte Kante $s_\varepsilon \in L$, die auf der Mannigfaltigkeit liegt, siehe Abbildung 2.1. $s_\varepsilon : (-\varepsilon, \varepsilon) \rightarrow M$ sei in Parameterform gegeben und zwar so, dass $s_\varepsilon(0) = x_0 \in M$, $\dot{s}_\varepsilon(0) = v \in T_{x_0} M$ und $x_0 \in M \subset \mathbb{R}^N$ so gewählt, dass v parallel zur Kante σ_ε^1 ist (Existenz folgt aus dem Mittelwertsatz der Differentialrechnung). Ohne Einschränkung der Allgemeinheit sei v der tangentiale Einheitsvektor in der umgebenen ξ - η -Ebene. Die Auswertung der diskreten Form an der Kante σ_ε^1 ergibt

$$\alpha_d(\sigma_\varepsilon^1) = \langle \psi(\alpha), s_\varepsilon \rangle = \int_{s_\varepsilon} \alpha = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} (\alpha \circ \dot{s}_\varepsilon)(t) dt \quad (2.10)$$

$$\approx 2\varepsilon \alpha(v). \quad (2.11)$$

Mit $|\sigma_\varepsilon^1| = 2\varepsilon$ folgt

$$\frac{1}{|\sigma_\varepsilon^1|} \alpha_d(\sigma_\varepsilon^1) = \text{„}\alpha_d(v)\text{“} \approx \alpha(v). \quad (2.12)$$

$\alpha_d(v)$ ist in Anführungszeichen gesetzt, da die diskreten Formen diese Schreibweise nicht hergeben ($v \cong \sigma_\varepsilon^1 / |\sigma_\varepsilon^1| \notin K$), aber wir wollen hier auf unnötigen Formalismus verzichten und uns ist klar, was damit gemeint ist. Das Integral wurde an $t = 0$ approximiert, also

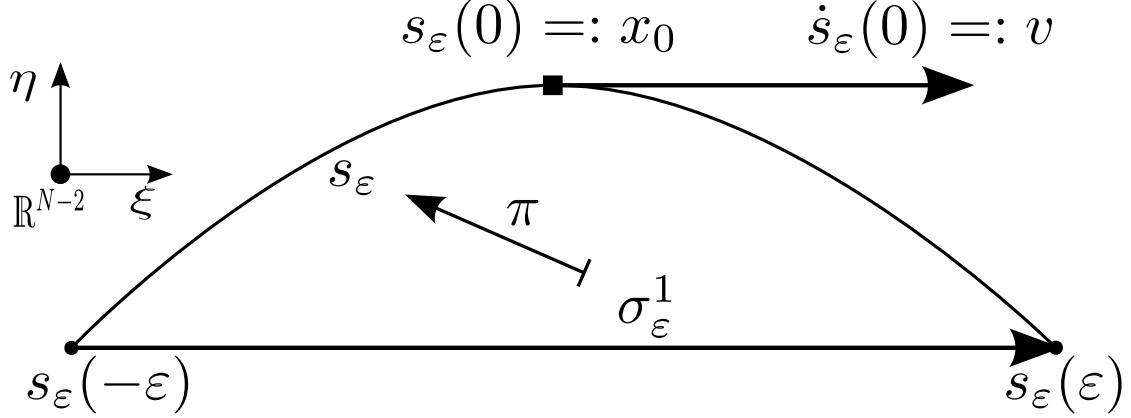


Abbildung 2.1: Das umliegende Koordinatensystem ist so gedreht, dass die Kante σ_ε^1 und die zugehörige abstrakte Kante s_ε in der ξ - η -Ebene liegen. Die übrigen ($N - 2$) Dimensionen zeigen aus der Bildebene heraus. π klebt die Kante auf die Mannigfaltigkeit, d.h. $\pi(\sigma_\varepsilon^1) = s_\varepsilon$

mit der Mittelpunktsregel. Daher können wir abschätzen (siehe [Kno13, Kap. 7])

$$\begin{aligned} |,,\alpha_d(v)'' - \alpha(v)| &\leq \frac{(2\varepsilon)^3}{24} \frac{1}{2\varepsilon} \max_{\tau \in (-\varepsilon, \varepsilon)} \left| \frac{d^2(\alpha \circ \dot{s}_\varepsilon)}{dt^2}(\tau) \right| \\ &= \frac{\varepsilon^2}{6} \max_{\tau \in (-\varepsilon, \varepsilon)} \left| \frac{d^2(\alpha \circ \dot{s}_\varepsilon)}{dt^2}(\tau) \right|. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Das soll nicht heißen, dass die 1-Form $\alpha \in \Omega^1(M)$ mit mindestens Ordnung 2 approximiert wird, denn im hinteren Faktor steckt noch immer die Größe ε und s_ε hängt zudem stark von der Geometrie der Mannigfaltigkeit ab. Wenn allerdings die Mannigfaltigkeit über der Kante σ_ε^1 flach wäre, dann ergibt sich $s_\varepsilon(t) = tv$ für $x_0 = c(\sigma_\varepsilon^1) = \vec{0}$ (alle x_0 erfüllen hier $\dot{s}_\varepsilon(x_0) \parallel \sigma_\varepsilon^1$). Daraus folgt, dass

$$|,,\alpha_d(v)'' - \alpha(v)| \leq \frac{\varepsilon^2}{6} \max_{\tau \in (-\varepsilon, \varepsilon)} \left| \frac{\partial^2 \alpha_\xi}{\partial \xi^2}(\tau v) \right|, \quad (2.14)$$

wobei $\alpha_\xi = \alpha(\frac{\partial}{\partial \xi}) = \alpha(v)$ die entsprechende (kovariante) Koordinatenfunktion von α ist. Somit hätten wir Konsistenz der Ordnung 2 für den flachen Fall. In zukünftigen Arbeiten müsste also „nur“ noch geklärt werden mit welcher Ordnung eine „flache“ 1-Form aus $\Omega^1(\sigma_\varepsilon^1)$ eine „gekrümmte“ 1-Form aus $\Omega^1(\pi(\sigma_\varepsilon^1)) \subset \Omega^1(M)$ approximiert.

Dagegen lässt sich für exakte 1-Formen tatsächlich eine Ordnung von 2 direkt abschätzen. Sei eine exakte Form $\alpha \in \Omega^1(M)$ gegeben, das heißt es existiert ein $f \in \Omega^0(M)$, sodass $\alpha = df$ gilt. Mit dem Stokes Theorem (s. [AMR88, Kap. 7.2]) erhalten wir

$$\frac{1}{|\sigma_\varepsilon^1|} \alpha_d(\sigma_\varepsilon^1) = \frac{1}{|\sigma_\varepsilon^1|} \int_{s_\varepsilon} \alpha = \frac{1}{2\varepsilon} \int_{\partial s_\varepsilon} f = \frac{(f \circ s_\varepsilon)(\varepsilon) - (f \circ s_\varepsilon)(-\varepsilon)}{2\varepsilon}. \quad (2.15)$$

Wenn wir (x^1, \dots, x^n) als lokale Koordinaten der n -Mannigfaltigkeit am Punkt x_0 wählen, sodass x^1 gerade die Standardkoordinate entlang der abstrakten Kante s_ε ist mit $v = \dot{s}_\varepsilon(0)$ als tangentialer Einheitsvektor, also für die dualen Basisvektoren gilt

$$dx^i(v) = \begin{cases} 1 & \text{falls } i = 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (2.16)$$

dann ergibt sich am Punkt $x_0 = s_\varepsilon(0)$

$$\alpha(v) = (\mathbf{d}f)(v) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x^i} dx^i(v) = \nabla f \cdot v = \nabla f \cdot \dot{s}_\varepsilon = \frac{d(f \circ s_\varepsilon)}{dt}(0). \quad (2.17)$$

Da (2.15) nichts weiter als der Zentrale Differenzenquotient von (2.17) ist, gilt

$$|,\alpha_d(v)“ - \alpha(v)| = \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (2.18)$$

Wir könnten nun auch ähnliche Betrachtungen für Differentialformen höheren Grades anstellen, jedoch werden wir uns im praktischen Teil nur auf zweidimensionale Oberflächen beschränken. Damit bleiben nur noch die 2-Formen übrig und die unterscheiden sich wegen dem Hodge-Stern-Isomorphismus nur um einen geometrischen Faktor (und Syntax) von den 0-Formen. Das heißt, wenn eine Riemannsche Mannigfaltigkeit vorliegt mit metrischen Tensor g , dann gilt für alle 2-Formen $f dx^1 \wedge dx^2 \in \Omega^2(M)$, dass

$$*(f dx^1 \wedge dx^2) = \frac{f}{\sqrt{|\det(g)|}} \in \Omega^0(M). \quad (2.19)$$

2.2 Äußere Ableitung

Wenn wir uns den de-Rham-Komplex anschauen, also die für eine n -Mannigfaltigkeit eindeutig festgelegte Sequenz

$$0 \longrightarrow \Omega^0(M) \xrightarrow{\mathbf{d}^0} \Omega^1(M) \xrightarrow{\mathbf{d}^1} \dots \xrightarrow{\mathbf{d}^{n-1}} \Omega^n(M) \longrightarrow 0 \quad (2.20)$$

mit den äußeren Ableitungen (Cartansche Ableitungen) \mathbf{d}^i , dann kommt uns das irgendwie bekannt vor. Dieser Kokettenkomplex mit der Komplexeigenschaft $\mathbf{d} \circ \mathbf{d} \equiv 0$ (auf die Indizierung kann wieder verzichtet werden) ähnelt doch sehr dem simplizialen Kettenkomplex aus Folgerung 1.2.7 mit dem Unterschied, dass die lineare Abbildung \mathbf{d} „in eine andere Richtung zeigt“ als der lineare Randoperator ∂ . Und tatsächlich gibt es eine Verbindung zwischen diesen beiden Komplexen. Es ist der Satz von Stokes ([AMR88, Kap.7.2], [Jän05, Kap.9]), der im vorherigen Abschnitt auch schon benutzt wurde. Wir wollen ihn hier nochmal kurz niederschreiben.

Satz 2.2.1 (Satz von Stokes). Es sei U eine orientierte p -dimensionale berandete Mannigfaltigkeit und $\alpha \in \Omega^{p-1}(U)$ eine $(p-1)$ -Form mit kompakten Träger. Dann gilt

$$\int_U \mathbf{d}\alpha = \int_{\partial U} \alpha. \quad (2.21)$$

Dabei ist formal etwas Vorsicht geboten, denn α ist eine Differentialform auf U und nicht auf dessen Rand. Deshalb müssen wir uns die Inklusionsabbildung $\iota : \partial U \hookrightarrow U$ dazu denken und nutzen die entlang dieser Abbildung zurückgezogene Differentialform $\iota^*\alpha \in \Omega^{p-1}(\partial U)$ (Pullback). Das heißt

$$\int_{\partial U} \alpha := \int_{\partial U} \iota^*\alpha. \quad (2.22)$$

Diese Kurzschreibweise ist berechtigt, denn es gilt für alle $x \in \partial U$, dass

$$(\iota^*\alpha)_x(v_1, v_2, \dots, v_{p-1}) = \alpha_x(v_1, v_2, \dots, v_{p-1}). \quad (2.23)$$

und da beide Formen auf dem Rand lokal die gleichen Antworten in \mathbb{R} liefern, spielt das auch für die Integralauswertung keine Rolle.

Definition 2.2.2. Für eine Mannigfaltigkeit M und einem Primärgitter K heißt

$$\begin{aligned} \mathbf{d} : \Omega_d^p(K) &\rightarrow \Omega_d^{p+1}(K) \\ \psi(\alpha) &\mapsto \mathbf{d}\psi(\alpha) := \psi(\mathbf{d}\alpha) \end{aligned} \quad (2.24)$$

diskrete äußere Ableitung.

Folgerung 2.2.3. Die diskrete äußere Ableitung lässt sich mit Hilfe des Satzes von Stokes und den Randoperator berechnen. Es sei $\alpha_d = \psi(\alpha) \in \Omega_d^p(K)$ eine diskrete p -Form und $\sigma \in K^{(p+1)}$ ein $(p+1)$ -Simplex, dann gilt

$$\langle \mathbf{d}\alpha_d, \sigma \rangle = \int_{\pi_\sigma(\sigma)} \mathbf{d}\alpha = \int_{\partial\pi_\sigma(\sigma)} \alpha = \int_{\pi_{\partial\sigma}(\partial\sigma)} \alpha = \langle \alpha_d, \partial\sigma \rangle \quad (2.25)$$

mit $\pi_\sigma|_{\partial\sigma} = \pi_{\partial\sigma}$. Deshalb bezeichnen wir (2.24) auch als Korandoperator. Des Weiteren ist Definition 2.2.2 repräsentantenunabhängig (Wohldefiniertheit), denn wenn wir $\alpha_1, \alpha_2 \in \Omega^p(M)$ wählen mit $\psi(\alpha_1) = \psi(\alpha_2)$, dann gilt für alle $\sigma \in K^{(p+1)}$, dass

$$\langle \mathbf{d}\psi(\alpha_1), \sigma \rangle = \langle \psi(\alpha_1), \partial\sigma \rangle = \langle \psi(\alpha_2), \partial\sigma \rangle = \langle \mathbf{d}\psi(\alpha_2), \sigma \rangle. \quad (2.26)$$

Bemerkung 2.2.4. Betrachten wir nun im speziellen wieder ein zweidimensionales Primärgitter K beziehungsweise dessen Dualgitter $\text{csd}K$, falls K wohlzentriert ist. Da das Dualgitter wiederum auch ein Primärgitter ist, gelten obige Definitionen dieses Abschnittes auch auf diesem (vgl. Abschnitt 2.3). Somit ergeben sich Berechnungsformeln für 0- und 1-Formen, die in Tabelle 2.1 zusammengefasst sind.

Alleine mit der äußeren Ableitung ließe sich auf einer 2-Mannigfaltigkeit schon einiges Rechnen. Sie definiert uns nämlich den Gradienten eines (glatten) Skalarfeldes

$$\begin{aligned} \nabla : C^\infty(M) &\rightarrow \mathcal{V}^\infty(M) \\ f &\mapsto (\mathbf{d}f)^\sharp = \left[g^1 \frac{\partial f}{\partial x^1}, g^2 \frac{\partial f}{\partial x^2} \right]^T \end{aligned} \quad (2.27)$$

und die Rotation eines (glatten) (Tangential-)Vektorfeldes

$$\begin{aligned} \text{rot} : \mathcal{V}^\infty(M) &\rightarrow C^\infty(M) \\ \vec{v} = [v^1, v^2]^T &\mapsto * \mathbf{d}(\vec{v})^\flat = \frac{1}{\sqrt{|\det g|}} \left(\frac{\partial g_2 v^2}{\partial x^1} - \frac{\partial g_1 v^1}{\partial x^2} \right) \end{aligned} \quad (2.28)$$

für ein lokales orthogonales¹ Koordinatensystem (x^1, x^2) mit Riemannmetrik $g = \text{diag}(g_1, g_2)$, wobei $g^i = (g_i)^{-1}$ (vgl. [NVW12]). Damit ergibt sich folgendes kommutatives Diagramm:

$$\begin{array}{ccccc} \Omega^0(M) & \xrightarrow{\mathbf{d}} & \Omega^1(M) & \xrightarrow{\mathbf{d}} & \Omega^2(M) \\ \text{id} \uparrow & & \sharp \uparrow \flat & & \downarrow * \\ C^\infty(M) & \xrightarrow[\nabla]{} & \mathcal{V}^\infty(M) & \xrightarrow[\text{rot}]{} & C^\infty(M) \end{array} \quad (2.29)$$

Die Übersetzungsismorphismen \sharp (Sharp) zum „hinaufziehen der Indizes“ und \flat (Flat) zum „herunterziehen der Indizes“ sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \sharp : \quad \Omega^1(M) &\rightarrow \mathcal{V}^\infty(M) \\ v_1 dx^1 + v_2 dx^2 &\mapsto [g^1 v_1, g^2 v_2]^T = [v^1, v^2]^T \end{aligned} \quad (2.30)$$

¹O.E.d.A, da die riemannsche Metrik g lokal positiv definit und symmetrisch ist, also auch diagonalisierbar

und

$$\begin{aligned} \flat : \mathcal{V}^\infty(M) &\rightarrow \Omega^1(M) \\ [v^1, v^2]^T &\mapsto g_1 v^1 dx^1 + g_2 v^2 dx^2 = v_1 dx^1 + v_2 dx^2. \end{aligned} \quad (2.31)$$

(Der Hodge-Stern-Isomorphismus für 2-Formen wurde schon in (2.19) angegeben.)

Um auch noch zwei weitere für die klassische Vektoranalysis wichtige Differentialoperatoren erster Ordnung zu diskretisieren, nämlich die Rotation für Skalarfelder (Rot) und die Divergenz für Vektorfelder (Div), benötigen wir noch eine diskrete Version des Hodge-Stern-Operators.

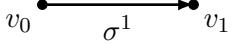
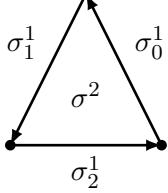
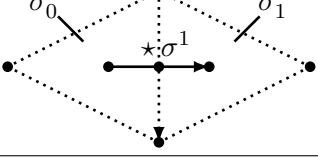
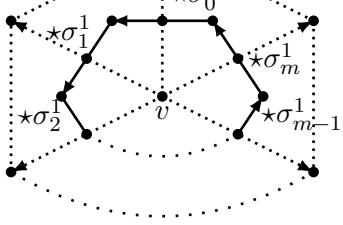
Darstellung	Formel
	Für $f \in \Omega_d^0(K)$ und $\sigma^1 = [v_0, v_1] \in K$ gilt $\langle \mathbf{d}f, \sigma^1 \rangle = f(v_1) - f(v_0). \quad (2.32)$
	Für $\alpha \in \Omega_d^1(K)$ und $\sigma^2, \sigma_0^1, \sigma_1^1, \sigma_2^1 \in K$ mit $\partial\sigma^2 = \sum_{i=0}^2 \sigma_i^1$ gilt $\langle \mathbf{d}\alpha, \sigma^2 \rangle = \sum_{i=0}^2 \langle \alpha, \sigma_i^1 \rangle \quad (2.33)$
	Für $f \in \Omega_d^0(\text{csd}K)$, $\sigma_0^2, \sigma_1^2 \in K$ und $\star\sigma^1 \in \star K$ gilt $\langle \mathbf{d}f, \star\sigma^1 \rangle = f(c(\sigma_1^2)) - f(c(\sigma_0^2)). \quad (2.34)$
	Für $\alpha \in \Omega_d^1(\text{csd}K)$ und $\star v, \star\sigma_i^1 \in \star K$ mit $\partial(\star v) = \sum_{i=0}^m \star\sigma_i^1$ und $\sigma_i^1 \succ v$ gilt $\langle \mathbf{d}\alpha, \star v \rangle = \sum_{i=0}^m \langle \alpha, \star\sigma_i^1 \rangle, \quad (2.35)$ wobei $(m+1)$ die Anzahl der Kanten ist, die v als Ecke haben.

Tabelle 2.1: Formeln für die Äußere Ableitung. Die Orientierungen der Kanten wurden dabei so gewählt, dass möglichst wenig Vorzeichenwechsel entstehen.

2.3 Hodge-Stern-Operator

Betrachten wir ein Vektorfeld $\vec{v} := [v^1, v^2]^T \in \mathcal{V}^\infty(M)$ auf einer zweidimensionalen geschlossenen Riemannschen Mannigfaltigkeit M mit lokalen orthogonalen Koordinaten (x^1, x^2) und metrischen Tensor $g = \text{diag}(g_1, g_2)$. Werten wir nun die zu \vec{v} duale Differentialform $\vec{v}^\flat \in \Omega^1(M)$ an dem tangentialen Basisvektor $\frac{\partial}{\partial x^1} \in T_x M$ am Punkt $x \in M$ aus, dann erhalten wir

$$\vec{v}^\flat \left(\frac{\partial}{\partial x^1} \right) = (v_1 dx^1 + v_2 dx^2) \left(\frac{\partial}{\partial x^1} \right) = v_1 = g_1 v^1 \quad (2.36)$$

als Antwort. Der in der orthogonalen $\frac{\partial}{\partial x^2}$ -Richtung gedrehte Basisvektor $\frac{\partial}{\partial x^1}$ (unter Beibehaltung der Länge $\|\frac{\partial}{\partial x^1}\|_g = \sqrt{g_1}$) ist $\sqrt{g_1 g^2} \frac{\partial}{\partial x^2} \in T_x M$, was sich entweder durch Nachrechnen überprüfen lässt oder sich auch als Ergebnis von $(*(\frac{\partial}{\partial x^1})^\flat)^\sharp$ ergibt. Hierbei merken wir schon, dass der Hodge-Stern-Operator durchaus auch eine anschauliche Seite hat. Auf Oberflächen dreht er nämlich Vektorfelder in orthogonaler Richtung. Wird auf die 1-Form \vec{v}^\flat ebenfalls der Hodge-Stern-Operator angewendet erhalten wir

$$\begin{aligned} (*\vec{v}^\flat) \left(\sqrt{g_1 g^2} \frac{\partial}{\partial x^2} \right) &= \left(\sqrt{|\det(g)|} (-v^2 dx^1 + v^1 dx^2) \right) \left(\sqrt{g_1 g^2} \frac{\partial}{\partial x^2} \right) \\ &= \sqrt{g_1 g_2} \sqrt{g_1 g^2} v^1 = g_1 v^1 \\ &= \vec{v}^\flat \left(\frac{\partial}{\partial x^1} \right) \end{aligned} \quad (2.37)$$

als Antwort auf den gedrehten Basisvektor. Wie die diskreten 1-Formen auf die Basisvektoren reagieren, dass wissen wir schon aus (2.12). Also gilt für die diskreten 1-Formen $\psi(\vec{v}^\flat) \in \Omega_d^1(K)$ beziehungsweise $\psi(*\vec{v}^\flat) \in \Omega_d^1(\text{csd}K)$

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\sigma^1|} \psi(\vec{v}^\flat)(\sigma^1) &\approx \vec{v}^\flat \left(\frac{\partial}{\partial x^1} \right) = (*\vec{v}^\flat) \left(\sqrt{g_1 g^2} \frac{\partial}{\partial x^2} \right) \\ &\approx \frac{1}{|\star \sigma^1|} \psi(*\vec{v}^\flat)(\star \sigma^1) \end{aligned} \quad (2.38)$$

wobei σ^1 ein 1-Simplex aus dem wohlzentrierten Primärgitter K ist. Der Punkt $x \in M$, an dem die Basisvektoren definiert sind, ist der Schnittpunkt der zugehörigen abstrakten Simplizes, das heißt $\{x\} = \pi(\sigma^1) \cap \pi(\star \sigma^1)$. Die 2. Approximation in (2.38) auf der dualen Kante erhalten wir ähnlich, wie schon in (2.12). Sei $\alpha := v_1 dx^1 + v_2 dx^2 = \vec{v}^\flat$, dann ergibt sich

$$*\alpha = -\sqrt{g_1 g^2} v_2 dx^1 + \sqrt{g_1 g_2} v_1 dx^2 \quad (2.39)$$

Da in $\frac{\partial}{\partial x^2}$ -Richtung integriert wird, braucht auch nur der zweite Summand Beachtung finden.

$$\psi(*\alpha)(\star \sigma^1) = \int_{\pi(\star \sigma^1)} \sqrt{g_1 g_2} v_1 dx^2 \quad (2.40)$$

Des Weiteren sei eine Kurve $s_\delta : [-\delta_1, \delta_2] \rightarrow \pi(\star \sigma^1) \subset M$ gegeben, so dass $s_\delta(-\delta_1)$ und $s_\delta(\delta_2)$ die beiden Endpunkte der abstrakten dualen Kante sind ($|\star \sigma^1| = \delta_1 + \delta_2$) und $x = s_\delta(0)$ ist der Schnittpunkt mit der abstrakten Kante $\pi(\sigma^1)$, wobei $\dot{s}_\delta(0) = \sqrt{g_1 g^2} \frac{\partial}{\partial x^2}$ gelten soll. Damit lässt sich auch hier wieder das Integral am Punkt x approximieren.

$$\begin{aligned} \psi(*\alpha)(\star \sigma^1) &= \int_{-\delta_1}^{\delta_2} \left(\sqrt{g_1 g_2} v_1 \right) (s_\delta(t)) dx^2(\dot{s}_\delta(t)) dt \\ &\approx |\star \sigma^1| v_1 = |\star \sigma^1| (*\alpha) \left(\sqrt{g_1 g^2} \frac{\partial}{\partial x^2} \right) \end{aligned} \quad (2.41)$$

Die approximative Gleichung (2.38) ließe sich auch so lesen: Im Integralmittel ist die Auswertung einer diskreten 1-Form auf einer Kante ungefähr gleich der Auswertung der „dualen“ diskreten Form auf der dualen Kante.

In [DHLM05] wird die Gleichheit als Bedingung gefordert und ist die Motivation für eine Verallgemeinerung auf diskrete p -Formen.

Definition 2.3.1. Der diskrete Hodge-Stern-Operator $* : \Omega_d^p(K) \rightarrow \Omega_d^{n-p}(\text{csd}K)$ ist definiert durch

$$(*\alpha)(\star\sigma^p) = \langle *\alpha, \star\sigma^p \rangle := \frac{|\star\sigma^p|}{|\sigma^p|} \langle \alpha, \sigma^p \rangle = \frac{|\star\sigma^p|}{|\sigma^p|} \alpha(\sigma^p) \quad (2.42)$$

für alle $\sigma^p \in K$. Wir werden im Folgendem auch hier nur kurz $\Omega_d^{n-p}(\star K)$ für das Bild $*\Omega_d^p(K) \leq \Omega_d^{n-p}(\text{csd}K)$ schreiben.

Lemma 2.3.2. Definition 2.3.1 ist für $M = |K|$ mit wohlzentrierten Primärgitter K konsistent und für alle $\alpha \in \Omega^p(|K|)$ und $\sigma^p \in K$ gilt die Abschätzung

$$|(*\psi(\alpha))(\star\sigma^p) - \psi(*\alpha)(\star\sigma^p)| \leq |\star\sigma^p| \mathcal{O}(\varepsilon_{\sigma^p} + \hat{l}_{\star\sigma^p}) . \quad (2.43)$$

wobei ε_{σ^p} der Umkreisradius von σ^p ist (speziell ist $\varepsilon_{\sigma^0} = 0$) und $\hat{l}_{\star\sigma^p}$ die Länge der längsten Kante aller $(n-p)$ -Simplizes der Kette $\star\sigma^p$, die $c(\sigma^p)$ als Ecke haben. Für $p = n$ setzen wir $\hat{l}_{\star\sigma^n} := 0$.

Beweis. Für $0 < p \leq n$ sei die p -Form

$$\alpha := \sum_{i_1 < \dots < i_p} \alpha_{i_1 \dots i_p} dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_p} \quad (2.44)$$

auf $|K|$ gegeben mit den Koordinaten $\alpha_{i_1 \dots i_p}$. Mit der Inklusionsabbildung $\iota : \sigma^p \hookrightarrow |K|$ und dass o.E.d.A. (x^1, \dots, x^p) die rechtwinkligen Koordinaten des von den Kante(n) von $\sigma^p \in K$ aufgespannten p -dimensionalen \mathbb{R} -Vektorraums sind, gilt somit

$$\iota^* \alpha = \alpha_{1 \dots p} dx^1 \wedge \dots \wedge dx^p \in \Omega^p(\sigma^p) . \quad (2.45)$$

Auch hier werden wir wieder, aus schon weiter oben genannten Gründen, nur α statt $\iota^* \alpha$ für die zurückgezogene Differentialform schreiben. Zunächst wollen wir überprüfen wie gut sich die Integralauswertungen im Punkt $c := c(\sigma^p)$ abschätzen lassen, da dies der einzige gemeinsame Punkt von σ^p und $\star\sigma^p$ ist. Dazu nutzen wir den Umkreisradius des Simplexes σ^p

$$\varepsilon_{\sigma^p} := \max_{x \in \sigma^p} \|x - c\| \geq \|x - c\| \quad (\forall x \in \sigma^p) \quad (2.46)$$

und einen Schritt Taylor für die Koordinatenfunktion:

$$|\sigma^p| \alpha_{1 \dots p}(c) - \psi(\alpha)(\sigma^p)| \quad (2.47)$$

$$= \left| |\sigma^p| \alpha_{1 \dots p}(c) - \int_{\sigma^p} \alpha_{1 \dots p}(c) + (x - c)^T \nabla \alpha_{1 \dots p}(c) + \mathcal{O}(\varepsilon_{\sigma^p}^2) dx^1 \wedge \dots \wedge dx^p \right| \quad (2.48)$$

$$= \left| \int_{\sigma^p} (x - c)^T \nabla \alpha_{1 \dots p}(c) dx^1 \wedge \dots \wedge dx^p + |\sigma^p| \mathcal{O}(\varepsilon_{\sigma^p}^2) \right| \quad (2.49)$$

$$\leq \int_{\sigma^p} |(x - c)^T \nabla \alpha_{1 \dots p}(c)| dx^1 \wedge \dots \wedge dx^p + |\sigma^p| \mathcal{O}(\varepsilon_{\sigma^p}^2) \quad (2.50)$$

$$\leq \int_{\sigma^p} \|x - c\| \|\nabla \alpha_{1 \dots p}(c)\| dx^1 \wedge \dots \wedge dx^p + |\sigma^p| \mathcal{O}(\varepsilon_{\sigma^p}^2) \quad (\text{Cauchy-Schwarz}) \quad (2.51)$$

$$\leq \|\nabla \alpha_{1 \dots p}(c)\| \int_{\sigma^p} \varepsilon_{\sigma^p} dx^1 \wedge \dots \wedge dx^p + |\sigma^p| \mathcal{O}(\varepsilon_{\sigma^p}^2) \quad (2.52)$$

$$\leq |\sigma^p| (\|\nabla \alpha_{1 \dots p}(c)\| \varepsilon_{\sigma^p} + \mathcal{O}(\varepsilon_{\sigma^p}^2)) \quad (2.53)$$

Für den diskreten Hodge-Stern erhalten wir somit

$$|(*\psi(\alpha))(\star\sigma^p) - |\star\sigma^p|\alpha_{1\dots p}(c)| = \frac{|\star\sigma^p|}{|\sigma^p|} ||\sigma^p|\alpha_{1\dots p}(c) - \psi(\alpha)(\sigma^p)| \quad (2.54)$$

$$\leq |\star\sigma^p| (\|\nabla\alpha_{1\dots p}(c)\|\varepsilon_{\sigma^p} + \mathcal{O}(\varepsilon_{\sigma^p}^2)) \quad (2.55)$$

Wenn $p = 0$ ist, dann gilt für $\alpha := f \in C^\infty(M)$ die Gleichheit

$$(*\psi(f))(\star\sigma^0) = |\star\sigma^0|f(c). \quad (2.56)$$

Für die Dualkette $\star\sigma^p$ mit $0 \leq p < n$ lässt sich die Abschätzung (2.53) ähnlich machen. Dazu müssen wir erst $\star\sigma^p \in C_p(\star K)$ in seine elementaren $(n-p)$ -Simplizes $\hat{\sigma}^{n-p}$ mit der passenden Orientierung zerlegen. Es sei dazu eine Zerlegung $S_{\sigma^p} \subseteq (\text{csd}K)^{(n-p)}$ gegeben, sodass

$$\sum_{\hat{\sigma}^{n-p} \in S_{\sigma^p}} \hat{\sigma}^{n-p} = \star\sigma^p. \quad (2.57)$$

Für alle

$$*\alpha = \sum_{i_{p+1} < \dots < i_n} (*\alpha)_{i_{p+1}\dots i_n} dx^{i_{p+1}} \wedge \dots \wedge dx^{i_n} \in \Omega^{n-p}(|K|) = \Omega^{n-p}(|\text{csd}K|) \quad (2.58)$$

gilt wegen der stückweisen flachen Metrik $g|_{\hat{\sigma}^{n-p}} \equiv I$ auf allen $\hat{\sigma}^{n-p} \in S_{\sigma^p}$, dass

$$(*\alpha)_{i_{p+1}\dots i_n} = \alpha_{i_1\dots i_p}. \quad (2.59)$$

Nun gilt weiter

$$||\star\sigma^p|\alpha_{1\dots p}(c) - \psi(*\alpha)(\star\sigma^p)|| = \left| \sum_{\hat{\sigma}^{n-p} \in S_{\sigma^p}} |\hat{\sigma}^{n-p}|\alpha_{1\dots p}(c) - \sum_{\hat{\sigma}^{n-p} \in S_{\sigma^p}} \int_{\hat{\sigma}^{n-p}} *\alpha \right| \quad (2.60)$$

$$\leq \sum_{\hat{\sigma}^{n-p} \in S_{\sigma^p}} ||\hat{\sigma}^{n-p}|\alpha_{1\dots p}(c) - \psi(*\alpha)(\hat{\sigma}^{n-p})||. \quad (2.61)$$

Anders als in (2.53) ist c eine Ecke von $\hat{\sigma}^{n-p} = [c, \hat{v}_{p+1}, \dots, \hat{v}_n]$, das heißt wir nutzen dessen längste Kante

$$l_{\hat{\sigma}^{n-p}} := \max_{p < i \leq n} \|\hat{v}_i - c\| \geq \|x - c\| \quad (\forall x \in \hat{\sigma}^{n-p}). \quad (2.62)$$

Somit gilt die Abschätzung

$$||\hat{\sigma}^{n-p}|\alpha_{1\dots p}(c) - \psi(*\alpha)(\hat{\sigma}^{n-p})|| \leq |\hat{\sigma}^{n-p}| (\|\nabla\alpha_{1\dots p}(c)\|l_{\hat{\sigma}^{n-p}} + \mathcal{O}(l_{\hat{\sigma}^{n-p}}^2)) \quad (2.63)$$

für die Summanden in (2.61). Mit der Länge, der längsten in der Dualkette $\star\sigma^p$ enthalten Kante,

$$\hat{l}_{\star\sigma^p} := \max_{\hat{\sigma}^{n-p} \in S_{\sigma^p}} l_{\hat{\sigma}^{n-p}} \quad \text{und} \quad \sum_{\hat{\sigma}^{n-p} \in S_{\sigma^p}} |\hat{\sigma}^{n-p}| = |\star\sigma^p| \quad (2.64)$$

folgt nun aus (2.61) und (2.63), dass

$$||\star\sigma^p|\alpha_{1\dots p}(c) - \psi(*\alpha)(\star\sigma^p)|| \leq |\star\sigma^p| (\|\nabla\alpha_{1\dots p}(c)\|\hat{l}_{\star\sigma^p} + \mathcal{O}(\hat{l}_{\star\sigma^p}^2)). \quad (2.65)$$

Wenn $p = n$ ist, dann gilt für $*\alpha := f dx^1 \wedge \dots \wedge dx^n$ mit $f \in C^\infty(M)$ die Gleichheit

$$\psi(*\alpha)(\star\sigma^n) = f(c). \quad (2.66)$$

Somit erhalten wir insgesamt

$$|(*\psi(\alpha))(\star\sigma^p) - \psi(*\alpha)(\star\sigma^p)| \leq |(*\psi(\alpha))(\star\sigma^p) - |\star\sigma^p|\alpha_{1\dots p}(c)| \quad (2.67)$$

$$+ |\psi(*\alpha)(\star\sigma^p) - |\star\sigma^p|\alpha_{1\dots p}(c)| \quad (2.68)$$

$$\leq |\star\sigma^p| \|\nabla \alpha_{1\dots p}(c)\| (\varepsilon_{\sigma^p} + \hat{l}_{\star\sigma^p}) \quad (2.69)$$

$$+ |\star\sigma^p| \mathcal{O}(\varepsilon_{\sigma^p}^2 + \hat{l}_{\star\sigma^p}^2) \quad (2.70)$$

(speziell auch für $p = 0$ bzw. $p = n$) und damit die Behauptung. \square

Satz 2.3.3. Es sei K ein wohlzentriertes zweidimensionales Primärgitter mit $|K| = M$, das heißt die Mannigfaltigkeit M ist ein Polyeder, dann gilt für alle $\alpha \in \Omega^p(M)$ mit $0 \leq p \leq 2$

$$|(*\psi(\alpha) - \psi(*\alpha))(\star\sigma^p)| \leq \mathcal{O}(\hat{h}_{\sigma^p}^{3-p}) \quad (2.71)$$

wobei $\hat{h}_{\sigma^p} := \max_{\sigma^2 \succ \sigma^p} h_{\sigma^2}$ das Maximum aller Umkreisdurchmesser der anliegenden Dreieckelemente für $p \in \{0, 1\}$ ist. Wenn $p = 2$ ist, dann setzen wir $\hat{h}_{\sigma^2} := h_{\sigma^2}$.

Beweis. Die Aussagen folgen direkt aus Lemma 2.3.2 und den folgenden rein geometrischen Überlegungen:

p	ε_{σ^p}	$\hat{l}_{\star\sigma^p}$	$ \star\sigma^p $
$= 0$	$= 0$	$= \frac{1}{2}\hat{h}_{\sigma^0}$	$\leq \pi \hat{l}_{\star\sigma^0}^2 = \frac{1}{4}\pi \hat{h}_{\sigma^0}^2$
$= 1$	$\leq \frac{1}{2}\hat{h}_{\sigma^1}$	$\leq \frac{1}{2}\hat{h}_{\sigma^1}$	$\leq 2\hat{l}_{\star\sigma^1} \leq \hat{h}_{\sigma^1}$
$= 2$	$= \frac{1}{2}\hat{h}_{\sigma^2}$	$= 0$	$= 1$

(2.72)

\square

Dieser lokale Fehler für den diskreten Hodge-Stern-Operator lässt sich natürlich auch global erweitern. Also für die diskrete Maximumsnorm

$$\|\alpha\|_\infty := \max_{\sigma^p \in K^{(p)}} |\alpha(\sigma^p)| \quad (\forall \alpha \in \Omega_d^p(K)) \quad (2.73)$$

auf dem Primärgitter K gilt im obigen Fall

$$\|*\psi(\alpha) - \psi(*\alpha)\|_\infty \leq \mathcal{O}(h^{3-p}) \quad (2.74)$$

mit $h := \max_{\sigma^2 \in K} h_{\sigma^2}$. Wie schon in Definition 1.2.3 kann der Sternoperator auf $\Omega_d^p(\star K)$ implizit definiert werden, sodass er die gleiche Eigenschaft wie sein stetiges Vorbild hat.

Definition 2.3.4. Der diskrete Hodge-Stern-Operator $* : \Omega_d^p(\star K) \rightarrow \Omega_d^{(n-p)}(K)$ definiert sich implizit über

$$**\alpha = (-1)^{p(n-p)}\alpha \quad (2.75)$$

für alle $\alpha \in \Omega_d^{n-p}(K)$.

Dabei sei nochmal hervorgehoben, dass $\Omega_d^p(\star K)$ gerade als surjektives Bild definiert wurde und damit macht obige Definition auch Sinn, das heißt sie beschreibt tatsächlich das Bild aller $\hat{\alpha} \in \Omega_d^p(\star K)$. Natürlich lässt sich daraus eine explizite Schreibweise ableiten.

Folgerung 2.3.5. Für alle diskreten p -Formen $\hat{\alpha} \in \Omega_d^p(\star K)$ und $\hat{\sigma}^p = \star \sigma^{n-p} \in \star K$ gilt

$$(*\hat{\alpha})(\star \hat{\sigma}^p) = \langle *\hat{\alpha}, \star \hat{\sigma}^p \rangle = \frac{|\sigma^{n-p}|}{|\star \sigma^{n-p}|} \langle \hat{\alpha}, \hat{\sigma}^p \rangle = \frac{|\sigma^{n-p}|}{|\star \sigma^{n-p}|} \hat{\alpha}(\hat{\sigma}^p). \quad (2.76)$$

Beweis. Da für alle $\hat{\alpha} \in \Omega_d^p(\star K)$ ein $\alpha \in \Omega_d^{n-p}(\star K)$ existiert, sodass $\hat{\alpha} = \star \alpha$ gilt, können wir mit Hilfe der Definitionen 2.3.1 und 1.2.3 rechnen, dass

$$\langle *\hat{\alpha}, \star \hat{\sigma}^p \rangle = (-1)^{p(n-p)} (-1)^{p(n-p)} \langle \alpha, \sigma^{n-p} \rangle = \frac{|\sigma^{n-p}|}{|\star \sigma^{n-p}|} \langle \star \alpha, \star \sigma^{n-p} \rangle. \quad (2.77)$$

□

Folgerung 2.3.6. Für $M = |K|$ mit wohlzentrierten Primärgitter K ist der diskrete Hodge-Stern-Operator nach Definition 2.3.4 ebenfalls konsistent mit

$$|(*\psi(\hat{\alpha}))(\sigma^p) - \psi(*\hat{\alpha})(\sigma^p)| \leq |\sigma^p| \mathcal{O}(\varepsilon_{\sigma^p} + \hat{l}_{\star \sigma^p}). \quad (2.78)$$

für alle $\hat{\alpha} \in \Omega^{n-p}(M)$.

Beweis. Da der Hodge-Stern-Operator ein Isomorphismus auf den Differentialformen ist, existiert ein $\alpha \in \Omega^p(M)$, sodass $\hat{\alpha} = \star \alpha$ gilt. Somit können wir die Abschätzung (2.43) nutzen, denn es gilt

$$|[*\psi(\hat{\alpha}) - \psi(*\hat{\alpha})](\sigma^p)| = \frac{|\sigma^p|}{|\star \sigma^p|} |[*\psi(\hat{\alpha}) - \psi(*\hat{\alpha})](\star \sigma^p)| \quad (2.79)$$

$$= \frac{|\sigma^p|}{|\star \sigma^p|} |[\psi(*\alpha) - \psi(\star \alpha)](\star \sigma^p)| \quad (2.80)$$

$$\leq \frac{|\sigma^p|}{|\star \sigma^p|} |\star \sigma^p| \mathcal{O}(\varepsilon_{\sigma^p} + \hat{l}_{\star \sigma^p}), \quad (2.81)$$

da $*\hat{\alpha} = \star \alpha = (-1)^{p(n-p)} \alpha$ und $*\star \psi(\hat{\alpha}) = (-1)^{p(n-p)} \psi(\hat{\alpha})$ gilt. □

Auch hier können wir wieder den Spezialfall eines zweidimensionalen Polyeders betrachten.

Satz 2.3.7. Es sei K ein wohlzentriertes Zweidimensionales Primärgitter mit $|K| = M$, dann gilt für alle $\hat{\alpha} \in \Omega^{2-p}(M)$ mit $0 \leq p \leq 2$

$$|(*\psi(\hat{\alpha}) - \psi(*\hat{\alpha}))(\sigma^p)| \leq \mathcal{O}(\hat{h}_{\sigma^p}^{1+p}) \quad (2.82)$$

für alle $\sigma^p \in K$.

Beweis. Die Aussage folgt aus (2.78). Die geometrischen Größen ε_{σ^p} und $\hat{l}_{\star \sigma^p}$ können aus der vorhergehenden Tabelle (2.72) entnommen werden. Die noch fehlenden (Abschätzungen der) Volumina der Simplizes sind

$$\begin{aligned} |\sigma^0| &= 1 \\ |\sigma^1| &= 2\varepsilon_{\sigma^1} \leq \hat{h}_{\sigma^1} \\ |\sigma^2| &\leq \frac{\pi}{4} \hat{h}_{\sigma^2}^2. \end{aligned} \quad (2.83)$$

□

Letztere Abschätzung ließe sich auch so lesen, dass sich für eine \hat{p} -Form $\alpha \in \Omega^{\hat{p}}(M)$ (lokal auf einem $(2 - \hat{p})$ -Simplex) ebenfalls eine Ordnung von $(3 - \hat{p})$ ergibt, wie schon in (2.43).

Für eine allgemeine Definition der Rotation für Differentialformen

$$*\mathbf{d} : \Omega^p(M) \rightarrow \Omega^{n-p-1} \quad (2.84)$$

ist ersichtlich, dass für die DEC-diskretisierte Rotation nur der Hodge-Stern-Operator dabei einen Diskretisierungsfehler² auf der exakten Form $\mathbf{d}\alpha \in \Omega^{p+1}$ verursacht, da wir für die äußere Ableitung wegen dem Stokes-Theorem keinen Fehler machen. Anders sieht die Situation für die Koableitung

$$\delta = (-1)^{np+1} * \mathbf{d}* : \Omega^{p+1}(M) \rightarrow \Omega^p(M) \quad (2.85)$$

aus, bei dem wir uns zweimal den Fehler des Hodge-Stern-Operators beim diskretisieren einhandeln. Im Übrigen ist bei dem Studium der Koableitung für Differentialformen Vorsicht geboten, denn bezüglich des inneren L^2 -Produktes

$$\begin{aligned} \langle \langle \bullet, \bullet \rangle \rangle : \Omega^p(U) \times \Omega^p(U) &\rightarrow \mathbb{R} \\ (\alpha, \beta) &\mapsto \langle \langle \alpha, \beta \rangle \rangle = \int_U \alpha \wedge * \beta \end{aligned} \quad (2.86)$$

ist hier gerade δ der formal adjungierte Operator zu \mathbf{d} , das heißt es gilt $\langle \langle \mathbf{d}\alpha, \beta \rangle \rangle = \langle \langle \alpha, \delta\beta \rangle \rangle$. In [AMR88] ist die Koableitung so definiert, in anderen Lektüren, wie zum Beispiel [Jän05], ist $-\delta$ der adjungierte Operator. Das kann zu einiger Verwirrung führen, deshalb einigen wir uns hier den in (2.85) angegebenen Operator für die Koableitung zu verwenden.

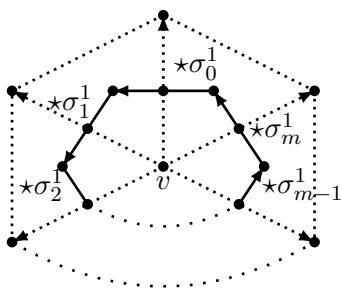
Definition 2.3.8. Es sei K ein wohlzentriertes Primärgitter, dann ist mit $T \in \{K, \star K\}$ die diskrete Koableitung definiert durch

$$\delta := (-1)^{np+1} * \mathbf{d}* : \Omega^{p+1}(T) \rightarrow \Omega^p(T). \quad (2.87)$$

Beispiel 2.3.9 (Divergenz). Die Divergenz eines Vektorfeldes $\vec{w} \in \mathcal{V}^\infty(M)$ auf einer zweidimensionalen Mannigfaltigkeit M kann mit Hilfe der Koableitung berechnet werden (s. [AMR88]), denn es gilt

$$\text{Div} \vec{w} = -\delta \vec{w}^\flat. \quad (2.88)$$

Wobei bei einer Dimension $n = 2$, wie auch für alle anderen geraden Dimensionen, immer gilt, dass $\delta = -* \mathbf{d}*$ ist. Wird nun eine 2-Mannigfaltigkeit M durch ein wohlzentriertes Primärgitter K approximiert, dann können wir die Divergenz an einer Ecke $v \in K$ numerisch berechnen. Sei dazu die diskrete 1-Form $\alpha := \psi(\vec{v}^\flat) \in \Omega_d^1(K)$ gegeben. Dann ergibt sich die diskrete Divergenz zu



$$\begin{aligned} \langle -\delta \alpha, v \rangle &= \langle * \mathbf{d} * \alpha, v \rangle \\ &= \frac{1}{|\star v|} \langle \mathbf{d} * \alpha, \star v \rangle \\ &= \frac{1}{|\star v|} \sum_{i=0}^m \langle * \alpha, \star \sigma_i^1 \rangle \\ &= \frac{1}{|\star v|} \sum_{i=0}^m \frac{|\star \sigma_i^1|}{|\sigma_i^1|} \langle \alpha, \sigma_i^1 \rangle. \end{aligned} \quad (2.89)$$

²ohne den geometrischen Fehler, d.h. $M = |K|$

Bemerkung 2.3.10 (zur Implementierung). Prinzipiell können alle hier vorgestellten Operatoren als Matrizen implementiert werden, da sie linear sind, vergleiche [DKT05] und [ES05]. Das wollen wir hier nicht machen, da hier das Interface und die Methodik von AMDiS genutzt werden soll. Das heißt FEM-typisch werden die Operatoren auf den Dreieckelementen aufgestellt und bilden somit Elementmatrizen, die dann erst zu einer Systemmatrix aufgesammelt werden. Da AMDiS von Haus aus eine geeignete Speicherstruktur für skalarwertige oder vektorisierte skalarwertige Probleme mitbringt, müssen intern nur die FEM-Operatoren durch geeignete DEC-Operatoren ausgetauscht werden. Die Problemformulierung, das aufaddieren der Elementmatrizen sowie das Lösen des Gleichungssystems bleibt somit im Ursprünglichen Zustand erhalten. Es ist somit unter Umständen sogar möglich Differentialgleichungssysteme mit DEC und FEM in einer einzelnen hybriden Problemformulierung gemischt zu lösen.

Fazit. Auf einer 2-Mannigfaltigkeit lässt sich noch ein weiterer, aus der klassischen Vektoranalysis bekannter, Ableitungsoperator mit Hilfe der Koableitung darstellen. Für $f \in C^\infty(M)$ definiert sich die Rotation über

$$(\delta(*f))^\sharp = -(*\mathbf{d}f)^\sharp =: -\text{Rot } f. \quad (2.90)$$

Damit können wir analog zu (2.29) zusammenfassend den Kettenkomplex mit den zugehörigen Skalar-/Vektorfeldübersetzungsismorphismen aufstellen:

$$\begin{array}{ccccc} \Omega^0(M) & \xleftarrow{\delta} & \Omega^1(M) & \xleftarrow{\delta} & \Omega^2(M) \\ \text{id} \downarrow & & \uparrow \flat & & \uparrow * \\ C^\infty(M) & \xleftarrow{\text{Div}} & \mathcal{V}^\infty(M) & \xleftarrow{\text{-Rot}} & C^\infty(M) \end{array} \quad (2.91)$$

Nach dem Baukastenprinzip ließen sich somit alle linearen Differentialgleichungen endlicher Ordnung diskretisieren. Um auch nichtlineare Terme wie die Kontraktion (inneres Produkt) $i_{\vec{v}}\alpha \in \Omega^{p-1}(M)$ oder die Lie-Ableitung $\mathcal{L}_{\vec{v}}\alpha \in \Omega^p(M)$ für $\vec{v} \in \mathcal{V}^\infty(M)$ und $\alpha \in \Omega^p(M)$ darzustellen benötigen wir noch das diskrete Dachprodukt \wedge . In [DHLM05] werden zwei diskrete Dachprodukte auf $\Omega_d^p(K) \times \Omega_d^q(K)$ bzw. $\Omega_d^p(\star K) \times \Omega_d^q(\star K)$ für $p+q \leq n$ vorgestellt, welche, wie auch das Dachprodukt für Differentialformen, antikommutativ sind und die Leibnizregel (Produktregel) bzgl. der äußeren Ableitung erfüllen. Allerdings sind sie im Allgemeinen nicht assoziativ im Gegensatz zum stetigen Vorbild. In [MMP⁺11] gibt es einen anschaulichen Ansatz zur Diskretisierung der Kontraktion. Damit könnten wir auch ohne Dachprodukt über Cartans „magische“ Formel

$$\mathcal{L}_{\vec{v}}\alpha = i_{\vec{v}}\mathbf{d}\alpha + \mathbf{d}i_{\vec{v}}\alpha \quad (2.92)$$

als algebraische Bedingung eine diskrete Lie-Ableitung erhalten. Folglich wäre es zum Beispiel auch möglich den Jacobian

$$\mathcal{J}(\psi, \Delta\psi) = *\mathbf{d}\mathcal{L}_{\vec{u}}\vec{u}^\flat \quad (2.93)$$

mit dem Strömungsfeld $u = \text{Rot}\psi \in \mathcal{V}^\infty(M)$ und der Stromfunktion $\psi \in C^\infty(M)$, wie er in der Wirbelgleichung in [NVW12] vorkommt, numerisch mit Hilfe des DECs als skalarwertiges Problem zu behandeln. Auch eine direkte Diskretisierung des Konvektionstermes $\mathcal{L}_{\vec{u}}\vec{u}^\flat$ in den Navier-Stokes-Gleichungen (vgl. [AMR88, Kap.8]) wäre denkbar. Das Problem an dem resultierendem (Tangential-)Vektorproblem ist, dass wir noch keine diskreten Übersetzungsismorphismen \sharp und \flat haben. Diese müssten in zukünftigen Arbeiten noch sinnvoll entwickelt werden. Erste Ansätze dazu finden sich zum Beispiel in [Hir03]. Vorher müssten allerdings noch fundamentale implementiertechnische Fragen

gestellt werden. Wollen wir mit 1-Formen oder mit Vektorfeldern speicherintern arbeiten und bei Bedarf die Indizes rauf bzw. herunter ziehen? Und wie wollen wir speichern? Bei 1-Formen ist das klar. Im diskreten definieren sie sich über die Werte auf den Kanten, das heißt ein Freiheitsgrad auf jeder Kante. Bei Vektorfeldern wird es da schon schwieriger. Am sichersten ist es diese auf den Dreieckelementen zu speichern (effektiv 2 Freiheitsgrade pro Element), da es dort einen eindeutigen Tangentialraum auf dem Polytop gibt. Tangentialvektoren auf den Ecken zu speichern, wie es im flachen Fall üblich ist, wird zu Problemen führen, da auf den Ecken kein eindeutiger Tangentialraum definiert ist. Eine Mittelung der umliegenden Tangentialräume der anliegenden Dreiecke (oder auch Kanten) scheint doch recht willkürlich zu sein und könnte zu einem nicht lösbarer Gleichungssystem führen. Es müssen drei Freiheitsgrade für die Ecken angesetzt werden für ein eigentlich zweidimensionales Problem, was zu einem überbestimmten System führen könnte. Auf jeden Fall würde es die (dünnbesetzte) Systemmatrix unnötig „aufblähen“.

Wir haben gezeigt, dass für ein immer feiner werdendes wohlzentriertes Primärgitter der diskrete Hodge-Stern-Operator gegen den Hodge-Stern-Operator für Differentialformen auf dem zugehörigen Polytop konvergiert. Offen für zukünftige Arbeiten bleibt die Frage wie gut denn überhaupt eine Differentialform auf einem Polytop eine Differentialform auf einer glatten Mannigfaltigkeit zu approximieren vermag und in welchem Sinne. Auf dem Primärgitter ließe sich diese Frage noch am einfachsten beantworten, da dort auf einem Simplex, nach dem Mittelwertsatz der Differentialrechnung, der Tangentialraum an wenigstens einem Punkt auf dem zugehörigen abstrakten Simplex übereinstimmt, d.h. dort hätten wir zumindest schon mal einen gemeinsamen Vektorraum zum vergleichen. Für ein Simplex auf dem Dualgitter, wie wir es für den Hodge-Stern-Operator bräuchten, scheint die Situation schwieriger, da hier im allgemeinen die Ecken nicht auf der Mannigfaltigkeit liegen und es somit noch unklar ist ob sich überhaupt ein gemeinsamer Tangentialraum finden lässt. Weitere Möglichkeiten zum Vergleichen für zweidimensionale Probleme sind zum einen den Ambiente Raum \mathbb{R}^3 zu nutzen in dem M und $|K|$ liegen. Hier ist die Schwierigkeit, dass zum Beispiel der Hodge-Operator 1-Formen auf 2-Formen abbildet, dass heißt es muss im Limes auch sichergestellt werden, dass $*$ auch die gleiche Wirkung im \mathbb{R}^3 wie auch auf M und $|K|$ hat. Ist die Klebeabbildung $\pi : |K| \rightarrow M$ bekannt, so ließe sich auch mit der zurückgezogenen Form $\pi^* \alpha \in \Omega^p(|K|)$ argumentieren für ein $\alpha \in \Omega^p(M)$. Für die äußere Ableitung spielt das keine Rolle da hier immer $\mathbf{d} \circ \pi^* = \pi^* \circ \mathbf{d}$ gilt. Die äußere Ableitung ist aber auch metrikunabhängig, der Hodge-Stern-Operator ist das im Allgemeinen nicht und damit haben wir solch eine Invarianz gegenüber den Pullback für eine nichtisometrische Abbildung π auch nicht.

2.4 Laplace-Operator

Zielsetzung. Wenn es um Numerik partieller Differentialgleichungen geht, dann liegt der Schwerpunkt oftmals auf der Diskretisierung des Laplace-Operators bzw. Gleichungen der Form

$$\Delta u = F(u) \tag{2.94}$$

mit zum Beispiel linearem F und Skalarfeld oder Vektorfeld u . Auch Zeitabhängige Probleme sind denkbar, die durch eine Methode der Wahl in der Zeit diskretisiert werden und somit in jedem Zeitschritt auch in die Kategorie (2.94) passen.

Wir werden hier den Laplace-Operator für skalare Größen diskretisieren um einen diskreten Laplace-Beltrami-Operator zu erhalten und diesen in der Poisson-Gleichung als Minimalbeispiel auch testen. Des Weiteren kann der Laplace-Operator auch zur Bestimmung der mittleren Krümmung benutzt werden, wie wir in 3.2 noch sehen werden.

Da hier Oberflächen ohne Rand betrachtet werden, wird auch keine Behandlung von Randbedingungen benötigt.

2.4.1 Laplace-Beltrami-Operator

Wer sich mit Differentialoperatoren auf Mannigfaltigkeiten beschäftigt wird bald feststellen, dass es einen ganzen Zoo von Laplace-Operatoren gibt. Da es hier um das äußere Kalkül geht, werden wir hier und im Folgenden den Laplace-de-Rham-Operator, auch Hodge-Laplace-Operator genannt, benutzen, denn er definiert sich auf p -Formen und bildet auch auf diese wieder ab.

$$\Delta_{dR} := \mathbf{d}\delta + \delta\mathbf{d} : \Omega^p(M) \rightarrow \Omega^p(M) \quad (2.95)$$

Speziell für 0-Formen ergibt sich $\Delta_{dR} = \delta\mathbf{d}$, da die Koableitung 0-Formen auf 0 abbildet. Das ist gerade der negative Laplace-Beltrami-Operator

$$\Delta_B f := \operatorname{Div} \nabla f = -\delta\mathbf{d}f = -\Delta_{dR}f \quad (2.96)$$

für eine Funktion $f \in C^\infty(M)$. Wegen der unterschiedlichen Vorzeichen des Laplace-Beltrami-Operators und des Laplace-de-Rham-Operators für 0-Formen ist Obacht geboten, da dies Grund zur Verwirrung sein könnte. Mit einer Riemann-Metrik g ergibt sich somit

$$\Delta_B f = \frac{1}{\sqrt{|\det g|}} \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x^j} \left(g^{ij} \sqrt{|\det g|} \frac{\partial f}{\partial x^i} \right). \quad (2.97)$$

Für eine zweidimensionale Mannigfaltigkeit mit orthogonalen Koordinaten und positiv definiter Metrik $g = \operatorname{diag}(g_1, g_2)$ lässt sich die Formel vereinfachen zu

$$\Delta_B f = \sqrt{g^1 g^2} \left(\frac{\partial}{\partial x^1} \left(\sqrt{g^1 g^2} \frac{\partial f}{\partial x^1} \right) + \frac{\partial}{\partial x^2} \left(\sqrt{g^1 g^2} \frac{\partial f}{\partial x^2} \right) \right). \quad (2.98)$$

Der diskrete Laplace-Beltrami-Operator soll der durch (2.96) DEC-diskretisierte Operator sein. In Beispiel 2.3.9 wurde die Divergenz an einer Ecke $v \in K$ schon beschrieben, ebenso die Ableitung an einer Kante in (2.32). Damit ergibt sich zusammenfassend (vgl. Abbildung 2.2)

$$\begin{aligned} \Delta_{B,d} f(v) &:= \langle \Delta_B f, v \rangle = \frac{1}{|\star v|} \sum_{\sigma^1 \succ v} \frac{|\star \sigma^1|}{|\sigma^1|} \langle \mathbf{d}f, \sigma^1 \rangle \\ &= \frac{1}{|\star v|} \sum_{\sigma^1=[v,v_i]} \frac{|\star \sigma^1|}{|\sigma^1|} (f(v_i) - f(v)). \end{aligned} \quad (2.99)$$

Der zusätzliche Index d soll hervorheben, dass der Operator diskret ist. In der Schreibweise der dualen Paarung, ist diese zusätzliche Indizierung nicht notwendig.

Bemerkung 2.4.1. Der in (2.99) beschriebene diskrete Laplace-Operator ist nicht neu. In [SAM68] wurde er zum Beispiel schon auf einer quasi-uniform triangulierten Sphäre benutzt. Dort wird als Grundgitter ein Ikosaeder heran gezogen, der die Sphäre approximiert, dann werden die 20 Dreiecke gleichmäßig unterteilt. Solch eine Triangulation werden wir später auch verwenden, wenn wir auf der Sphäre rechnen wollen. Der Kontext in [SAM68] ist allerdings nicht durch das Äußere Kalkül motiviert, sondern ist Folge

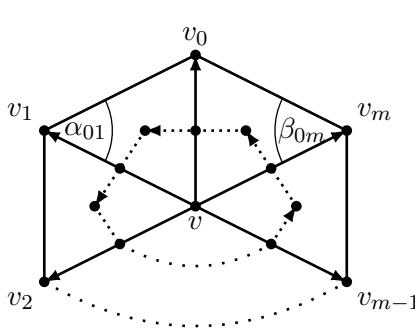


Abbildung 2.2: 1-Ring um v mit $m + 1$ Dreieckselementen. Die gepunkteten 1-Simplizes sind die zu den Kanten $[v, v_i]$ dualen Kanten. α_{01} und β_{0m} sind die in (2.101) verwendeten und zur Ecke v_0 gehörigen Winkel.

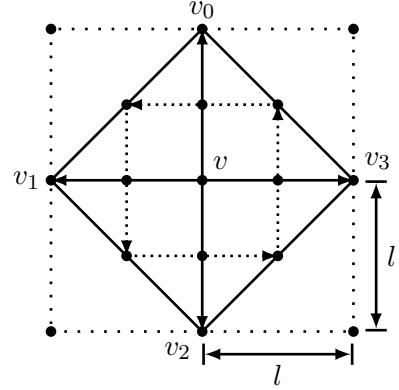


Abbildung 2.3: Flacher 1-Ring um v mit 4 rechteckigen Dreieckselementen. Die dicht gepunkteten 1-Simplizes sind die zu den Kanten $[v, v_i]$ dualen Kanten. Die dünn gepunkteten Linien deuten ein äquidistantes Rechteckgitter an.

eines eher anschaulicher Ansatzes. Denn der Laplace-Operator kann an v approximiert werden, als den Fluss von ∇f , der aus der Voronoi-Zelle hinaus fließt.

$$\begin{aligned} \text{Div} \nabla f &= \lim_{|\star v| \rightarrow 0} \left(\frac{1}{|\star v|} \int_{\partial \star v} \nabla f \cdot \vec{n} dS \right) \\ &\approx \frac{1}{|\star v|} \sum_{\sigma^1 = [v, v_i]} \int_{\star \sigma^1} \frac{1}{|\sigma^1|} (f(v_i) - f(v)) dS \\ &= \Delta_{B,d} f(v) \end{aligned} \quad (2.100)$$

Auch in [MDSB03] wird der hier hergeleitete diskrete Laplace-Beltrami verwendet und mit anderen diskreten Operatoren verglichen. Zudem ist er eine Approximation der Ordnung 2, welches in [Xu04] gezeigt wird. In beiden Artikeln ist er allerdings als „Cotan-Formel“ beschrieben, das heißt (vgl. Abbildung 2.2)

$$\Delta_B f(v) \approx \frac{1}{|\star v|} \sum_{i=0}^m \frac{\cot \alpha_{ii+} + \cot \beta_{ii-}}{2} (f(v_i) - f(v)) \quad (2.101)$$

wobei i_+ und i_- der Nachfolger bzw. Vorgänger von i modulo $(m + 1)$ ist. Es lässt sich leicht geometrisch zeigen, dass im Dreieck $\sigma^2 := [v, v_i, v_{i+}]$

$$\cot \alpha_{ii+} = \frac{|\star \sigma^1 \cap \sigma^2|}{\frac{1}{2} |\sigma^1|} \quad (2.102)$$

gilt für $\sigma^1 := [v, v_i] \prec \sigma^2$, analog für β_{ii-} . Somit ist der diskrete Operator in (2.101) auch wirklich gleich unserem hergeleiteten diskreten Laplace-Beltrami-Operator.

Um die Nähe zur Finiten-Differenzen-Methode (FDM) zu zeigen lassen wir hier auch die Wohlzentriertheit im Limes, also rechtwinklige Dreiecke, zu. Betrachten wir nun einen flachen 1-Ring um v mit vier rechtwinkligen Dreiecken, die alle die Kathetenlänge l haben (vgl. Abbildung 2.3). Dann haben alle Kanten, die v als Anfang haben und auch dessen Voronoi-Kanten, die Länge l . Die Voronoi-Zelle $\star v$ hat den Flächeninhalt l^2 . Somit ergibt sich

$$\langle \Delta_B f, v \rangle = \frac{1}{l^2} (f(v_0) + f(v_1) + f(v_2) + f(v_3) - 4f(v)) , \quad (2.103)$$

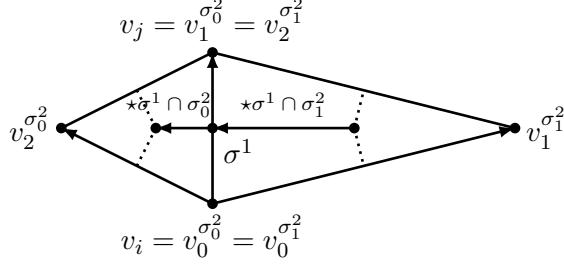


Abbildung 2.4: Zwei benachbarte Dreiecke (links σ_0^2 , rechts σ_1^2), die sich die gemeinsame Kante $\sigma^1 = [v_i, v_j]$ teilen. Die Ecken sind lokal nummeriert. Die Länge von $\star\sigma^1$ ergibt sich aus dessen beiden 1-Simplizes.

welches der aus der FDM wohlbekannte 5-Punkte-Stern zur Diskretisierung des Laplace-Operators auf äquidistanten Gittern ist.

2.4.2 Implementierung

Da $\Delta_{B,d}f$ nichts weiter als eine Linearkombination der Auswertungen von f an den Knoten von K ist, ließe sich der diskrete Laplace-Beltrami-Operator auch elementweise durch Traversierung über alle Dreiecke berechnen. Wenn wir zudem voraussetzen, dass wir rechentechnisch auf einem $\sigma^2 \in K$ nichts weiter über alle anderen Dreiecke $K^{(2)} \setminus \{\sigma^2\}$ wissen, dann kennen wir auch den Flächeninhalt $|\star v_i|$ für eine Ecke $v_i \prec \sigma^2$ nicht. Deshalb werden wir den Hodge-Operator auf den Laplace-Operator anwenden und somit $\star\Delta_{B,d}f$ auf der Voronoi-Zelle v_i als duale Aufgabe berechnen, denn der Flächeninhalt von $\star v_i$ kürzt sich somit raus:

$$\langle \star\Delta_B f, \star v_i \rangle = \sum_{\sigma^1=[v_i, v_j]} \frac{|\star\sigma^1|}{|\sigma^1|} (f_j - f_i) . \quad (2.104)$$

$$= \sum_{\substack{\sigma^2=[v_0^{\sigma^2}, v_1^{\sigma^2}, v_2^{\sigma^2}] \\ v_0^{\sigma^2}=v_i}} \sum_{l=1,2} C_{0,l}^{\sigma^2} (f_l^{\sigma^2} - f_0^{\sigma^2}) . \quad (2.105)$$

mit $f_i := [f_h]_i := f(v_i)$ ($0 \leq i < N_{\sigma^0}$) beziehungsweise $f_l^{\sigma^2} := [f^{\sigma^2}]_l := f(v_l^{\sigma^2})$ ($l = 0, 1, 2$) und den Koeffizienten

$$C_{k,l}^{\sigma^2} = C_{l,k}^{\sigma^2} = \frac{|\star[v_k^{\sigma^2}, v_l^{\sigma^2}] \cap \sigma^2|}{|[v_k^{\sigma^2}, v_l^{\sigma^2}]|} \quad (2.106)$$

für alle $k, l = 0, 1, 2$ und $l \neq k$. Das elementweise aufsummieren ist korrekt, da für $\sigma^1 = [v_i, v_j]$, $\sigma_0^2 \succ \sigma^1$ und $\sigma_1^2 \succ \sigma^1$ gilt, dass (vgl. Abbildung 2.4)

$$|\star\sigma^1| = |\star[v_0^{\sigma^2}, v_1^{\sigma^2}] \cap \sigma^2| + |\star[v_0^{\sigma^2}, v_2^{\sigma^2}] \cap \sigma^2| \quad (2.107)$$

$$|\sigma^1| = |[v_0^{\sigma^2}, v_1^{\sigma^2}]| = |[v_0^{\sigma^2}, v_2^{\sigma^2}]| . \quad (2.108)$$

Wenn wir nun den Laplace-Beltrami an allen Ecken $v_l^{\sigma^2}$ eines Dreieckelements σ^2 berechnen, dann können wir den Anteil der rechten Seite der Gleichung (2.105) für die drei

Ecken auf σ^2 zusammenfassen zu

$$\begin{bmatrix} -\left(C_{01}^{\sigma^2} + C_{02}^{\sigma^2}\right) & C_{01}^{\sigma^2} & C_{02}^{\sigma^2} \\ C_{01}^{\sigma^2} & -\left(C_{01}^{\sigma^2} + C_{12}^{\sigma^2}\right) & C_{12}^{\sigma^2} \\ C_{02}^{\sigma^2} & C_{12}^{\sigma^2} & -\left(C_{02}^{\sigma^2} + C_{12}^{\sigma^2}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_0^{\sigma^2} \\ f_1^{\sigma^2} \\ f_2^{\sigma^2} \end{bmatrix} =: A^{\sigma^2} f^{\sigma^2} \quad (2.109)$$

mit der symmetrischen Elementmatrix $A^{\sigma^2} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ und dem Elementvektor $f^{\sigma^2} \in \mathbb{R}^3$. Da das Primärgitter aus N_{σ^0} Ecken besteht, lässt sich die Elementmatrix auf eine $(N_{\sigma^0} \times N_{\sigma^0})$ -Matrix \bar{A}^{σ^2} erweitern unter Beachtung der lokalen und globalen Nummerierung der Ecken, so dass

$$[\bar{A}^{\sigma^2}]_{ij} = \begin{cases} [A^{\sigma^2}]_{kl} & \text{falls } v_i = v_k^{\sigma^2} \text{ und } v_j = v_l^{\sigma^2}, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.110)$$

Für die Systemmatrix

$$A := \sum_{\sigma^2 \in K} \bar{A}^{\sigma^2} \in \mathbb{R}^{N_{\sigma^0} \times N_{\sigma^0}} \quad (2.111)$$

gilt somit

$$Af_h = [\langle * \Delta_B f, \star v_i \rangle]_{0 \leq i < N_{\sigma^0}}. \quad (2.112)$$

Da A dünnbesetzt ist, können geeignete Löser gewählt werden, falls f_h unbekannt und die rechte Seite bekannt ist.

Für die Implementierung in AMDiS müssen somit nur die Elementmatrizen A^{σ^2} berechnet werden (siehe Algorithmus 5.2.2). Die Assemblierung der Systemmatrix übernimmt AMDiS von Haus aus.

2.4.3 Beispiel: Poisson-Gleichung

Wie wir im letzten Abschnitt gesehen haben, führt uns das kontinuierliche Problem

$$\Delta_B w = g \quad (2.113)$$

für $w, g \in C^\infty(M)$ mit Hilfe eines DEC zum diskreten Problem

$$Aw_h = \tilde{g}_h \quad (2.114)$$

mit w_h , dem Vektor der Freiheitsgrade, und der rechten Seite

$$[\tilde{g}_h]_i = \langle *g, \star v_i \rangle = |\star v_i| g(v_i) = \sum_{\sigma^2 \succ v_i} |\star v_i \cap \sigma^2| g(v_i). \quad (2.115)$$

Somit kann hier ebenfalls die rechte Seite elementweise ohne Kenntnisse der anderen Dreieckelementen berechnet werden.

Beispiel 2.4.2 (Einheitssphäre). Für die Parametrisierung der (Einheits)Sphäre, das heißt die Abbildung von lokalen Koordinaten (u, v) in globalen \mathbb{R}^3 -Koordinaten (x, y, z) , und den Laplace-Beltrami-Operator in lokalen Koordinaten siehe Appendix 5.4.1. Auf der Sphäre ist

$$w := \sin u \cos u \cos v = xz \quad (2.116)$$

eine Lösung des Eigenwertproblems

$$\Delta_B w = \lambda w \quad (2.117)$$

zum Eigenwert $\lambda = -6$, denn

$$\Delta_B w = \cot(\cos^2 u - \sin^2 u) \cos v - 4 \sin u \cos u \cos v - \frac{1}{\sin^2 u} \sin u \cos u \cos v \quad (2.118)$$

$$= \cos u \cos v \left(\frac{1}{\sin u} (1 - 2 \sin^2 u) - 4 \sin u - \frac{1}{\sin u} \right) \quad (2.119)$$

$$= -6 \sin u \cos u \cos v = -6w. \quad (2.120)$$

Das heißt wir kennen die exakte Lösung des Problems (in globalen Koordinaten)

$$\Delta_B w = -6xz \quad (2.121)$$

auf der Sphäre zum vergleichen. Durch fehlende Randbedingungen lässt sich dieses Problem nicht eindeutig lösen, da jede beliebige harmonische Funktion $w_H \in C^\infty(M)$ (also $\Delta_B w_H = 0$) zur Lösung hinzugefügt werden könnte und die Summe immer noch Lösung des Problems wäre. Hier im Speziellen heißt das

$$\Delta_B (w + w_H) = -6xz. \quad (2.122)$$

Es müssten also je nach Problemstellung ein oder mehrere zusätzliche Bedingungen gestellt werden um die Eindeutigkeit zu erzwingen. Da das nicht Bestandteil dieser Arbeit sein soll, werden wir die Differentialgleichung (2.121) einfach umschreiben zu

$$\Delta_B w + w = -5xz. \quad (2.123)$$

Als Primärgitter nutzen wir ein verfeinerten Ikosaeder. Dabei werden die einzelnen Ikosaederflächen gleichmäßig unterteilt. Es zeigt sich das Cinema4D (siehe [Eck09]), eine 3D-Grafiksoftware, hier sehr gute Gitter erstellt. Der globale Verfeinerungsmechanismus von AMDiS kann leider nicht genutzt werden, da im Allgemeinen, durch Halbierung der Dreieckelemente, keine wohlzentrierten und damit zulässigen Primärgitter entstehen. Das Problem wurde sowohl mit DEC als auch FEM (mit linearen Ansatzfunktionen) numerisch berechnet. Wie wir in Abbildung 2.6 sehen ist die DEC-Lösung etwas besser als die der FEM. Auffällig bei der FEM-Lösung ist, dass die maximalen Fehler sich bei den Defekten³ befinden. Dieses Lösungsverhalten ist bei einer naiven FEM-Diskretisierung häufiger zu beobachten und spiegelt sich auch im Konvergenzverhalten bezüglich der Maximumsnorm wieder, wie wir in Tabelle 2.3 sehen können. h ist hierbei wieder der maximale Umkreisdurchmesser aller Dreiecke des Primärgitters. DOFs = N_{σ^0} bezeichnet die Anzahl der Freiheitsgrade und damit die Anzahl der Ecken bei nur einer gesuchten skalarwertigen Größe. Err_• ist der relative Fehler, das heißt

$$\text{Err}_{\bullet} := \frac{\|w_h - w\|_{\bullet}}{\|w\|_{\bullet}} \quad (2.124)$$

in der jeweiligen Norm. Dabei wurde zum einen die Maximumsnorm (vgl. 2.73) als auch die diskrete L_2 -Norm verwendet, die in AMDiS schon implementiert ist. EOC ist die experimentelle Konvergenzordnung (Experimental Order of Convergence)

$$\text{EOC} := \frac{\log \frac{\text{Err}_{\bullet}^{h_1}}{\text{Err}_{\bullet}^{h_2}}}{\log \frac{h_1}{h_2}} \quad (2.125)$$

³Als Defekt bezeichnen wir bei hexagonal-dominierenden Gittern die Ecken die nicht einen 1-Ring aus 6 Dreieckselementen besitzen.

mit zwei verschiedenen maximalen Umkreisdurchmessern $h_1 < h_2$. Wie in den Tabellen 2.2 und 2.3 beziehungsweise in der Abbildung 2.5 zu sehen ist, liefert die DEC-Diskretisierung ein leicht besseres Ergebnis als die der FEM. In der L_2 -Norm ist die experimentelle Konvergenzordnung bei beiden Verfahren etwa 2. Lediglich in der Maximumsnorm hat der DEC ein besseres Konvergenzverhalten als die FEM, was an den oben schon angesprochenen FEM-Verhalten an den Gitterdefekten liegt. Bei beiden Verfahren wurde der BiCGStab2-Algorithmus (s. [Gut93]) zum lösen der linearen Gleichungssysteme benutzt, mit einer Abbruchstoleranz von 1.0E-10.

DOFs	h	Err_2	EOC	Err_∞	EOC
1002	0.152342	4.52E-03		4.67E-03	
1962	0.108972	2.30E-03	2.0087025407	2.37E-03	2.0225601077
5292	0.0663925	8.54E-04	2.0038033504	8.81E-04	1.9995573186
10242	0.0477329	4.41E-04	2.0017080311	4.55E-04	2.0002292995
25002	0.0305541	1.81E-04	2.0007499329	1.86E-04	2.0008136244
50412	0.0215183	8.96E-05	2.0003571238	9.25E-05	1.999641636
100002	0.0152791	4.52E-05	2.0004212967	4.66E-05	2.0004803364
249642	0.00967015	1.81E-05	1.9999410149	1.87E-05	1.9997695362

Tabelle 2.2: (Sphäre) Problem (2.123) mit DEC numerisch gelöst.

DOFs	h	Err_2	EOC	Err_∞	EOC
1002	0.152342	7.01E-03		8.65E-03	
1962	0.108972	3.59E-03	1.9994601718	4.55E-03	1.9176164215
5292	0.0663925	1.33E-03	1.9996567336	1.77E-03	1.9090696932
10242	0.0477329	6.89E-04	1.9999112249	9.40E-04	1.9144389991
25002	0.0305541	2.82E-04	1.9999058673	3.99E-04	1.9186042595
50412	0.0215183	1.40E-04	1.9999668347	2.04E-04	1.9208126876
100002	0.0152791	7.06E-05	2.0002360283	1.05E-04	1.9236661471
249642	0.00967015	2.83E-05	1.9998409049	4.37E-05	1.9256432951

Tabelle 2.3: (Sphäre) Problem (2.123) mit FEM numerisch gelöst.

Beispiel 2.4.3 (Torus). Die verwendete Parametrisierung für den Torus in lokalen Koordinaten (t, p) sowie der sich somit ergebende Laplace-Beltrami-Operator kann im Appendix 5.4.2 nachgelesen werden. Als Torusradien nutzen wir $r = 0.5$ und $R = 2.0$. Für das Primärgitter wurde ein Schlauch verwendet der um 4π verdrillt und am Anfang und Ende mit einander verbunden wurde. Somit konnte bezüglich des maximalen Winkels ein recht hochwertiges Torusgitter mit vollständig hexagonaler Struktur erzeugt werden. Geben wir uns die Funktion

$$w := \cos^2 t = \frac{x^2}{x^2 + y^2} \quad (2.126)$$

vor mit globalen kartesischen \mathbb{R}^3 -Koordinaten (x, y, z) . Für den Laplace-Operator ergibt sich nun

$$\Delta_B w = -\frac{2(\cos^2 t - \sin^2 t)}{(R + r \cos p)^2} = -2 \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2}. \quad (2.127)$$

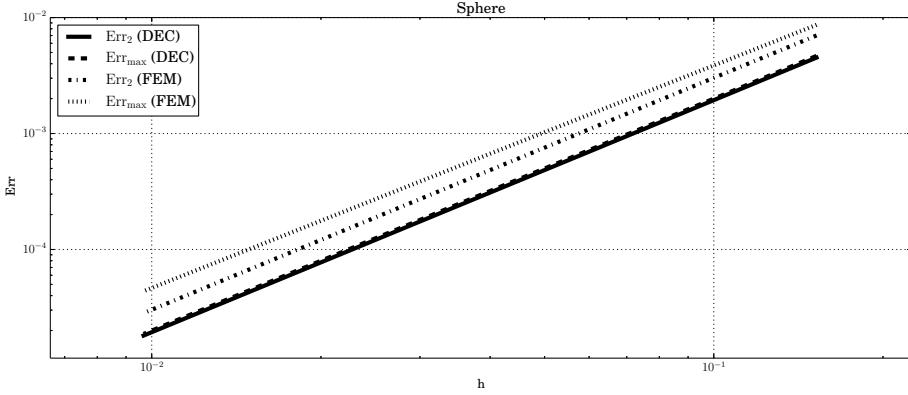


Abbildung 2.5: Log-Log-Fehlerplot für Problem (2.123) auf der Sphäre. (Fehler Err_2 und $\text{Err}_{\max} = \text{Err}_{\infty}$ für die DEC-Diskretisierung liegen in beiden Bildern übereinander.)

Wie schon im letzten Beispiel formulieren wir die Aufgabe etwas um, damit sich kein schlecht gestelltes Problem ergibt. Da

$$-2 \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2} = \frac{2y^2}{(x^2 + y^2)^2} - \frac{2}{x^2 + y^2} w \quad (2.128)$$

gilt, soll unser hier behandeltes Problem

$$\Delta_B w + \frac{2}{x^2 + y^2} w = \frac{2y^2}{(x^2 + y^2)^2} \quad (2.129)$$

sein (vgl. Abbildung 2.7).

Die FEM ergibt leicht bessere Ergebnisse als der DEC, wie wir in den Tabellen 2.5 und 2.4 und der Abbildung 2.8 erkennen können. Allerdings weist das Primärgitter für den Torus auch keine Defekte in seiner hexagonalen Struktur auf, welche die FEM-Diskretisierung vermutlich negativ beeinflussen würde. Dass die experimentelle Konvergenzordnung beim DEC mit feineren Gitter besser wird, liegt wahrscheinlich daran, dass die Gitterqualität bezüglich der maximalen Winkel der Dreieckelemente zunimmt. Wie schon im letzten Beispiel wurde auch hier wieder der BiCGStab2 mit einer Abbruchstoleranz von 1.0E-10 verwendet um das resultierende Gleichungssystem für DEC und FEM zu lösen.

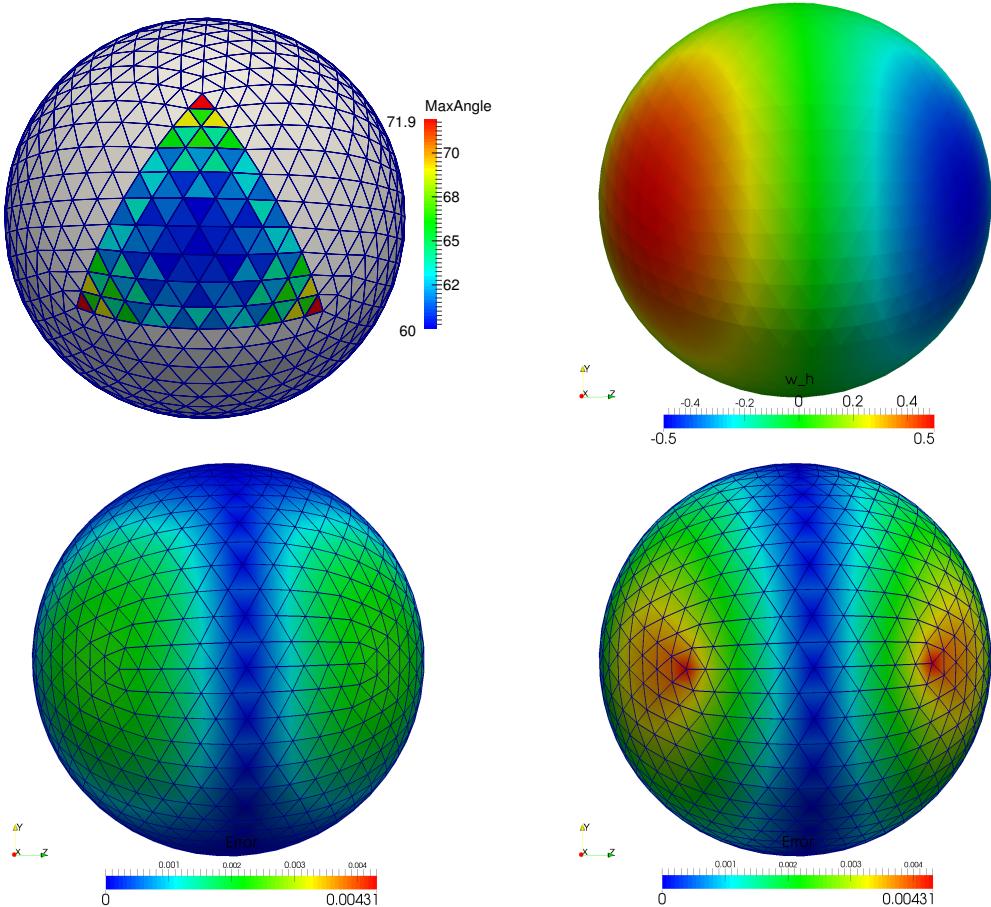


Abbildung 2.6: Oben links: Für eine Ikosaederfläche sind die maximalen Winkel zu sehen. Oben rechts: Numerische Lösung des Problems (2.123) auf der Sphäre (1002 DOFs). Unten links: Lokaler Fehler der DEC-Lösung (Farben mit rechter Abbildung gleichskaliert). Unten rechts: Lokaler Fehler der FEM-Lösung, auffällig ist der maximale Fehler am Defekt.

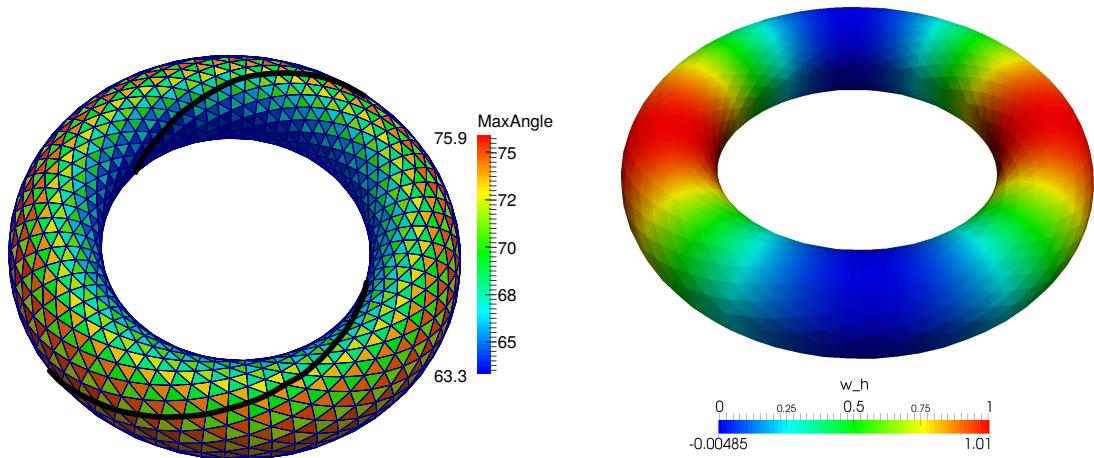


Abbildung 2.7: Links: Gitter mit maximalen Winkeln. Die dicke schwarze geschlossene Kurve auf dem Torus soll die Verdrillung des Torusschlauches um 4π andeuten. Im Ursprungsgitter war diese Kurve „gerade“, d.h. nur abhängig vom Winkel t . Rechts: Numerische Lösung des Problems (2.129) auf dem Torus (1360 DOFs).

DOFs	h	Err_2	EOC	Err_∞	EOC
432	0.484083	1.53E-02		1.43E-02	
1360	0.263248	5.26E-03	1.7487502806	5.13E-03	1.676583294
2016	0.214754	3.64E-03	1.8124915763	3.58E-03	1.7722152372
4752	0.138422	1.61E-03	1.8539424379	1.60E-03	1.827141796
10192	0.0940568	7.72E-04	1.9033291206	7.74E-04	1.8875065925
24640	0.0603108	3.27E-04	1.9367574278	3.29E-04	1.9269600665
48832	0.0427842	1.67E-04	1.9577876987	1.68E-04	1.951624291
100480	0.0297978	8.18E-05	1.9701256217	8.26E-05	1.9656343129
250992	0.0188374	3.30E-05	1.9796579788	3.33E-05	1.9768600188

Tabelle 2.4: (Torus) Problem (2.129) mit DEC numerisch gelöst.

DOFs	h	Err_2	EOC	Err_∞	EOC
432	0.484083	4.22E-03		6.60E-03	
1360	0.263248	6.97E-04	2.9550325517	1.12E-03	2.9086442442
2016	0.214754	4.25E-04	2.4308893715	6.02E-04	3.0599695746
4752	0.138422	1.98E-04	1.737972941	3.04E-04	1.5561979645
10192	0.0940568	1.10E-04	1.5310189919	1.66E-04	1.5681290101
24640	0.0603108	5.26E-05	1.6532303871	7.65E-05	1.739953836
48832	0.0427842	2.87E-05	1.7679125643	4.07E-05	1.8354873743
100480	0.0297978	1.47E-05	1.8393626791	2.06E-05	1.8877622847
250992	0.0188374	6.18E-06	1.8946420182	8.51E-06	1.9266311481

Tabelle 2.5: (Torus) Problem (2.129) mit FEM numerisch gelöst.

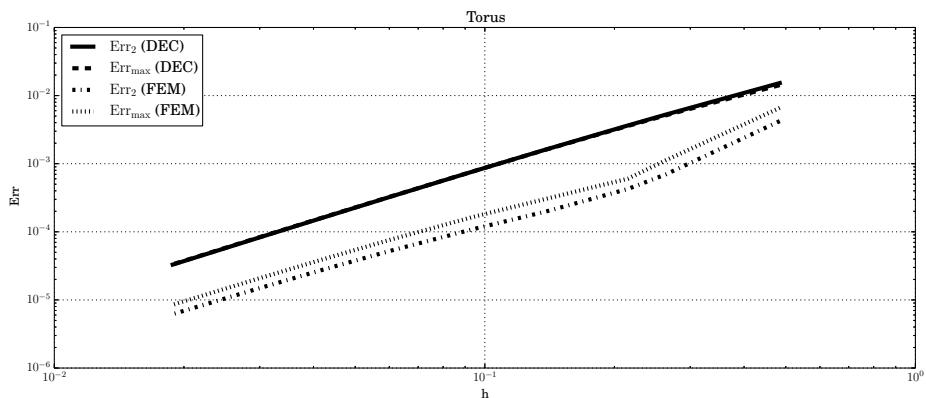


Abbildung 2.8: Log-Log-Fehlerplot für Problem (2.129) auf dem Torus. (Fehler Err_2 und $\text{Err}_{\max} = \text{Err}_{\infty}$ für die DEC-Diskretisierung liegen in beiden Bildern übereinander.)

2.5 Primär-Dual-Gradient im Mittel

In Abschnitt 3.1 werden wir den Gradienten einer Funktion $f \in C^\infty(M)$ benötigen. Nun können wir zwar die äußere Ableitung benutzen, aber es fehlt uns immer noch die Möglichkeit im Diskreten bei der resultierenden 1-Form $\mathbf{d}f$ die Indizes hinauf zu ziehen um ein diskretes Tangentialvektorfeld zu erhalten. Eine Abhandlung, wie mit Vektorfeldern zu verfahren wäre um einen diskreten Sharp-Operator zu entwickeln, würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Allein schon wegen der noch offenen Fragen, die oben schon gestellt wurden. Wie schon erwähnt ist es prinzipiell erstmal eine sichere Sache den Gradienten im Inneren eines Dreieckelements zu definieren, da hier zumindest ein Tangentialraum für das Polytop $|K|$ existiert und eindeutig ist. Hirani schlägt in seiner Doktorarbeit [Hir03] folgenden Sharp-Operator vor:

Definition 2.5.1. Es sei $f \in \Omega_d^0(K)$, $\sigma^2 \in K$ und $w \prec \sigma^2$ eine beliebig feste Ecke von σ^2 . Dann ist der diskrete Primär-Dual-Sharp-Operator für die exakte 1-Form $\mathbf{d}f \in \Omega_d^1(K)$ an der dualen Ecke $\star\sigma^2 \in \star K$ gegeben durch

$$\langle (\mathbf{d}f)^{\sharp_{pd}}, \star\sigma^2 \rangle := \sum_{\sigma^0 \prec \sigma^2} (f(\sigma^0) - f(w)) \nabla \Phi_{\sigma^0}^{\sigma^2}, \quad (2.130)$$

wobei $\nabla \Phi_{\sigma^0}^{\sigma^2}$ der \mathbb{R}^3 -Gradient der lineare Ansatzfunktion von σ^0 eingeschränkt auf σ^2 ist, das heißt es gilt

$$f|_{\sigma^2}(x) \approx \sum_{\sigma^0 \prec \sigma^2} f(\sigma^0) \Phi_{\sigma^0}^{\sigma^2}(x). \quad (2.131)$$

Für den sich ergebenen Primär-Dual-Gradienten

$$\sharp_{pd} \circ \mathbf{d} : \Omega_d^0(K) \rightarrow \mathcal{V}_d(\star K) \supset (\Omega_d^0(\star K))^3 \quad (2.132)$$

(mit dem diskreten dualen Tangentialvektorraum $\mathcal{V}_d(\star K)$) schrieben wir auch kurz ∇^{pd} . Die Paarung $\langle \bullet, \bullet \rangle$ in (2.130) ist komponentenweise zu verstehen, also für einen N -dimensionalen Vektor von diskreten p -Formen $\vec{\alpha} = [\alpha_i]_{i=1,\dots,N} \in (\Omega_d^p(\mathcal{K}))^N$ gilt

$$\langle \vec{\alpha}, \sigma^p \rangle := [\langle \alpha_i, \sigma^p \rangle]_{i=1,\dots,N} \quad (2.133)$$

mit $\sigma^p \in \mathcal{K} := \{K, \star K\}$.

Der große arbeitstechnische Vorteil ist, dass die hier angegebenen Ansatzfunktionen und dessen Gradienten auf den Dreieckelementen in AMDiS schon implementiert sind und wir diese nutzen können. Der Nachteil ist, dass die Problemformulierung auf den Ecken des Dualgitters zur Zeit noch Probleme in der Programmierung mit sich bringen würde und wir deshalb lieber einen Gradienten verwenden möchten, der auf dem Primärgitter definiert ist. Der in [Hir03] vorgeschlagene Primär-Primär-Gradient ∇^{pp} , der uns weiterhelfen würde, da er auf $\mathcal{V}_d(K)$ abbildet, kann leider nur für flache Primärgitter verwendet werden. Ein einfacher Ausweg aus diesem Dilemma ist es den Primär-Dual-Gradienten für eine Ecke aus K zu mitteln.

Definition 2.5.2. Es sei $f \in \Omega_d^0(K)$ und $v \in K$, dann heißt

$$\langle \nabla^{\overline{pd}} f, v \rangle := \frac{1}{|\star v|} \sum_{\sigma^2 \succ v} |\star v \cap \sigma^2| \langle \nabla^{pd} f, \star\sigma^2 \rangle \quad (2.134)$$

Primal-Dual-Gradient im Mittel von f an v .

Zu postulieren mit welcher Ordnung dieser diskrete Gradient einer Funktion f zum stetigen Vorbild $(\mathbf{d}f)^\sharp \in \mathcal{V}^\infty(|K|)$ konsistent ist, ist sehr schwierig, da nur im Inneren der Dreieckelemente $T_{\bar{x}}|K|$ überhaupt stetig wäre.

2.5.1 Implementierung

Wie schon beim diskreten Laplace-Beltrami-Operator lässt sich auch der gemittelte Primär-Dual-Gradient elementweise Assemblieren. Wir machen das wieder auf dem „Dualraum“. Damit ergibt sich

$$\left\langle * \nabla^{\overline{pd}} f, \star v \right\rangle = \sum_{\sigma^2 \succ v} |\star v \cap \sigma^2| \left\langle \nabla^{pd} f, \star \sigma^2 \right\rangle \quad (2.135)$$

$$= \sum_{\sigma^2 \succ v} |\star v \cap \sigma^2| \sum_{\sigma^0 \prec \sigma^2} (f(\sigma^0) - f(v)) \nabla \Phi_{\sigma^0}^{\sigma^2}, \quad (2.136)$$

da die Ecke $w \prec \sigma^2$ in (2.130) beliebig aber fest gewählt werden durfte und v immer Ecke des 1-Rings um sich selbst ist. Somit lässt sich die q -te Komponente des diskreten Gradienten an einer globalen Ecke v_i ebenfalls auf den Dreieckelementen mit lokaler Nummerierung darstellen durch

$$\left\langle * \left[\nabla^{\overline{pd}} f \right]_q, \star v_i \right\rangle = \sum_{\sigma^2 = [v_0^{\sigma^2}, v_1^{\sigma^2}, v_2^{\sigma^2}] \atop v_0^{\sigma^2} = v_i} \sum_{l=1,2} C_{0lq}^{\sigma^2} (f_l^{\sigma^2} - f_0^{\sigma^2}) \quad (2.137)$$

mit

$$C_{klq}^{\sigma^2} := |\star v_k^{\sigma^2} \cap \sigma^2| \frac{\partial}{\partial x^q} \Phi_{v_l^{\sigma^2}}^{\sigma^2} \quad (2.138)$$

für $k, l, q \in \{0, 1, 2\}$ wobei (x^0, x^1, x^2) die gewöhnlichen kartesischen \mathbb{R}^3 -Koordinaten sind. $\frac{\partial}{\partial x^q} \Phi_{v_l^{\sigma^2}}^{\sigma^2} = \left[\nabla \Phi_{v_l^{\sigma^2}}^{\sigma^2} \right]_q$ wird von AMDiS für alle Elemente σ^2 bereitgestellt. Die zugehörige Elementmatrix ist dann

$$A_q^{\sigma^2} := \begin{bmatrix} - (C_{01l}^{\sigma^2} + C_{02l}^{\sigma^2}) & C_{01l}^{\sigma^2} & C_{02l}^{\sigma^2} \\ C_{10l}^{\sigma^2} & - (C_{10l}^{\sigma^2} + C_{12l}^{\sigma^2}) & C_{12l}^{\sigma^2} \\ C_{20l}^{\sigma^2} & C_{21l}^{\sigma^2} & - (C_{20l}^{\sigma^2} + C_{21l}^{\sigma^2}) \end{bmatrix}, \quad (2.139)$$

die sich in der gleichen Weise wie im Abschnitt 2.4.2 zu einer Systemmatrix A_q aufsummieren lässt, so dass

$$[A_q f_h]_i = \left\langle * \left[\nabla^{\overline{pd}} f \right]_q, \star v_i \right\rangle \quad (2.140)$$

gilt für alle $v_i \in K^{(0)}$. Für die Implementierung der Elementmatrix in Pseudocode siehe Appendix 5.2.3.

2.5.2 Beispiele

Beispiel 2.5.3 (Sphäre). Für einen kurzen Test des hier hergeleiteten diskreten Gradienten wollen wir die Koordinatenprojektion $p_z(x, y, z) := z$ auf der Sphäre in den Standard- \mathbb{R}^3 -Koordinaten (x, y, z) ableiten. Für die Parametrisierung und dessen Ableitungen siehe Appendix 5.4.1.

$$\nabla z = (\mathbf{d}z)^{\sharp} = (\mathbf{d} \cos u)^{\sharp} \quad (2.141)$$

$$= (-\sin u du)^{\sharp} = -g^u \sin u \frac{\partial}{\partial u} = -\sin u \frac{\partial}{\partial u} \vec{x} \quad (2.142)$$

$$= [-\sin u \cos u \cos v, -\sin u \cos u \sin v, \sin^2 u]^T \quad (2.143)$$

$$= [-xz, -yz, 1 - z^2]^T \quad (2.144)$$

In Tabelle 2.6 und Abbildung 2.9 sehen wir die relativen Fehler des gemittelten Primär-Dual-Gradienten. Für die Fehlerberechnung nutzen wir die schon eingeführten Normen auf der punktweisen euklidischen Norm, das heißt für $\vec{v} = [v^0, v^1, v^2] \in \mathcal{V}_d(K)$

$$\|\vec{v}\|_{\bullet} := \left\| \sqrt{\sum_{q=0}^2 (v^q)^2} \right\|_{\bullet}. \quad (2.145)$$

Auffällig ist, dass wir bis zu dem Gitter mit 25002 DOFs eine experimentelle Konvergenzrate von 2 haben. Bei feineren Gittern fällt die Konvergenzrate in der Maximumsnorm enorm ab während die in der diskreten L_2 -Norm nur moderat abnimmt, was darauf schließen lässt, dass nur wenige Gitterpunkte betroffen sind. Und tatsächlich sehen wir in Abbildung 2.9, dass sich die maximalen Fehler auf den Ikosaederecken beziehungsweise auf dessen Kanten befinden. Der Ikosaeder war das Grundgitter, das verfeinert wurde um alle anderen Primärgitter zu erzeugen.

DOFs	h	Err_2	EOC	Err_{∞}	EOC
1002	0.152342	5.66E-03		7.71E-03	
1962	0.108972	2.98E-03	1.9186534413	3.95E-03	1.9987732373
5292	0.0663925	1.14E-03	1.9374175035	1.47E-03	1.991362152
10242	0.0477329	6.00E-04	1.9442558734	7.61E-04	1.999043939
25002	0.0305541	2.52E-04	1.945023907	3.12E-04	1.9967278866
50412	0.0215183	1.27E-04	1.9442042884	2.27E-04	0.9077077757
100002	0.0152791	6.56E-05	1.9398199601	1.74E-04	0.7821359392
249642	0.00967015	2.72E-05	1.9274641706	1.18E-04	0.8378214011

Tabelle 2.6: Fehler des Primär-Dual-Gradienten im Mittel auf der Sphäre.

Beispiel 2.5.4 (Torus). Auf dem Torus ist der Gradient der Funktion

$$f := \sin t + r \cos p = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} + \sqrt{x^2 + y^2} - R \quad (2.146)$$

in lokalen (t, p) -Koordinaten (vgl. Appendix 5.4.2) gegeben durch

$$\nabla f = (\mathbf{d}f)^{\sharp} = (\cos t dt - r \sin p dp)^{\sharp} \quad (2.147)$$

$$= \frac{\cos t}{(R + r \cos p)^2} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\sin p}{r} \frac{\partial}{\partial p}. \quad (2.148)$$

Einsetzen der Koordinatenfunktion \vec{x} und Umrechnen in \mathbb{R}^3 -Koordinaten (x, y, z) ergibt

$$\nabla f = \frac{1}{R + r \cos p} \begin{bmatrix} -\cos t \sin t \\ \cos t \cos t \\ 0 \end{bmatrix} - \sin p \begin{bmatrix} -\cos t \sin p \\ -\sin t \sin p \\ \cos p \end{bmatrix} \quad (2.149)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{(x^2 + y^2)^3}} \begin{bmatrix} -xy \\ x^2 \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{r^2} \begin{bmatrix} xz^2 / \sqrt{x^2 + y^2} \\ yz^2 / \sqrt{x^2 + y^2} \\ z(R - \sqrt{x^2 + y^2}) \end{bmatrix}. \quad (2.150)$$

Die Funktion f und dessen Gradient ist in Abbildung 2.10 dargestellt. Die Fehler berechnen sich genauso, wie im vorherigen Beispiel. In Abbildung 2.11 sind die absoluten punktweisen Fehler zu sehen und in Tabelle 2.7 die relativen Fehler zu verschiedenen maximalen Umkreisradien h . Die experimentelle Konvergenzordnung ist in der L_2 -Norm

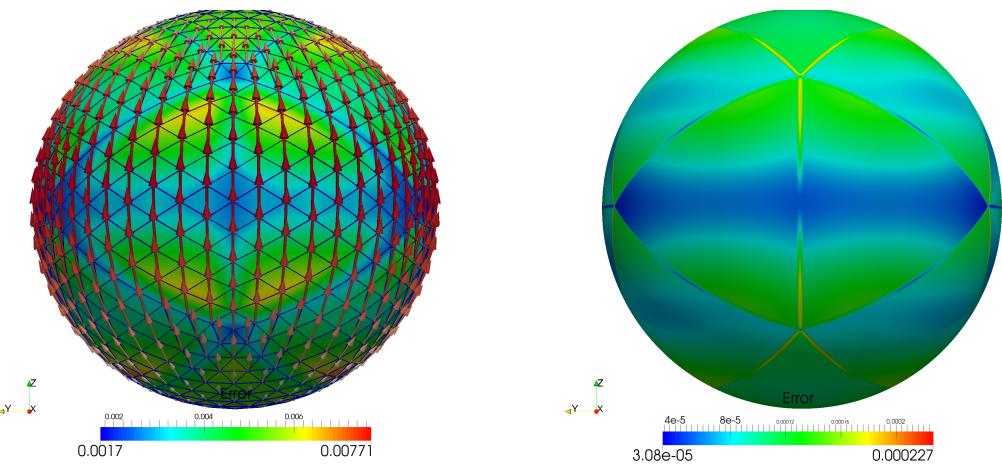


Abbildung 2.9: Links: Diskreter Gradient und sein absoluter Fehler (1002 DOFs) Rechts: Absoluter Fehler des diskreten Gradientens (50412 DOFs). Die maximalen Fehler befinden sich auf den ursprünglichen Ikosaederecken und -kanten.

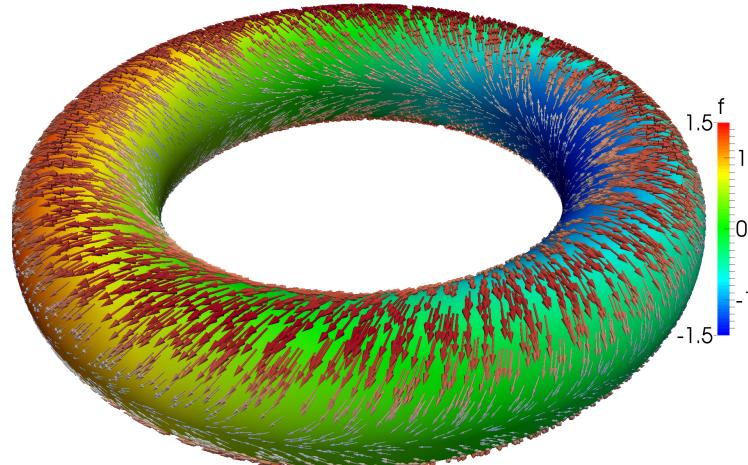


Abbildung 2.10: Gradient (Pfeile) und Funktion f (100480 DOFs)

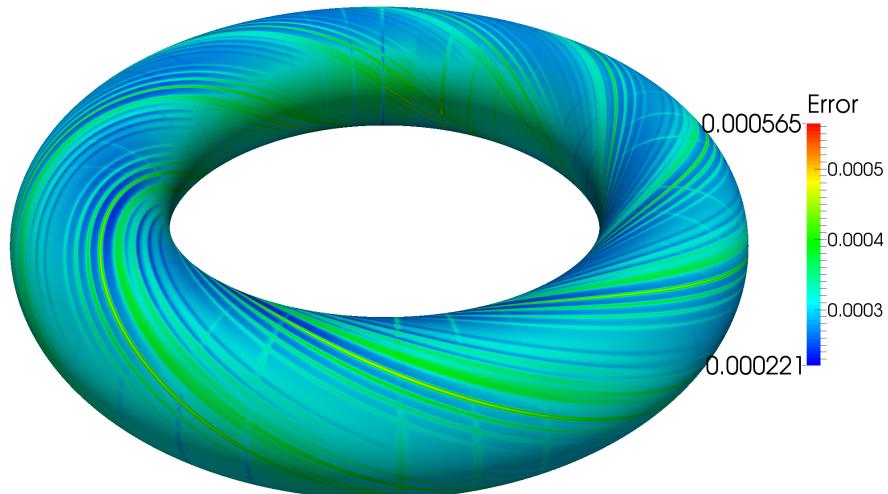


Abbildung 2.11: Absolute Fehler des Gradienten (100480 DOFs)

etwas weniger als 2. In der Maximumsnorm sehen wir ein schlechteres Konvergenzverhalten und auch hier lässt sich bei feineren Gittern wieder ein Muster für den Ort der maximalen Fehler erkennen. So ist die Verdrillung des Grundgitters um 4π in Abbildung 2.11 zu erahnen.

DOFs	h	Err ₂	EOC	Err _{∞}	EOC
432	0.484083	6.77E-02		5.56E-02	
1360	0.263248	2.36E-02	1.7305079159	2.02E-02	1.6629554448
2016	0.214754	1.63E-02	1.8171490839	1.42E-02	1.7387209712
4752	0.138422	7.19E-03	1.8636888703	6.31E-03	1.8422086261
10192	0.0940568	3.43E-03	1.910983696	3.19E-03	1.7674119374
24640	0.0603108	1.48E-03	1.9007457457	1.60E-03	1.5467737467
48832	0.0427842	7.59E-04	1.9375324008	8.49E-04	1.8502988355
100480	0.0297978	3.78E-04	1.9243221883	5.04E-04	1.4401355577
250992	0.0188374	1.55E-04	1.9393211627	2.59E-04	1.4507979763

Tabelle 2.7: Fehler des Primär-Dual-Gradienten im Mittel auf dem Torus.

3 Anwendung: Oberflächenkrümmung

Zielsetzung. In vielen wissenschaftlichen Problemen kann die Krümmung einer Oberfläche eine entscheidende Rolle spielen. Sie kann zum Beispiel ein wichtiger Bestandteil von Differentialgleichungen sein. So kommt die mittlere Krümmung H bei fluidmechanischen Formulierungen auf bewegliche Membranen M_t in der Kontinuitätsgleichung

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{Div} \vec{v} - \rho v_{\vec{v}} H = 0 \quad (3.1)$$

vor (siehe [AD09]). Ein weiteres einfaches Beispiel ist die Evolution von Oberflächen M_t über den mittleren Krümmungsfluss

$$\dot{x} = 2H\vec{\nu} \quad (3.2)$$

oder die Bestimmung des topologisch invarianten Geschlechts

$$\mathfrak{g} = 1 - \frac{1}{4\pi} \int_M K \mu \quad (3.3)$$

einer orientierten Mannigfaltigkeit M ohne Rand mit Gaußscher Krümmung K , was direkt aus dem Satz von Gauß-Bonnet und den Zusammenhang für die Euler-Charakteristik $\chi = 2 - 2\mathfrak{g}$ folgt. Unter den gewählten Voraussetzungen gibt \mathfrak{g} die Anzahl der „Löcher“/„Poren“/„Henkel“ an.

Es ließen sich noch weitere Beispiele finden in dem diverse Krümmungsgrößen für die Behandlung vonnöten wären. Oftmals liegt die Oberfläche allerdings nur als diskrete Eingangsgröße vor. Somit sind viele geometrische Werte nicht bekannt und müssen approximiert werden. Wir werden uns in diesem Kapitel speziell mit der Gaußsche und der mittlere Krümmung beschäftigen. Diese werden wir mit Hilfe des DECs approximieren und zum einen mit den Ergebnissen von C.-J. Heine [Hei04] vergleichen und zum anderen, im Falle der Gauß-Krümmung, mit einer naiven Gauß-Bonnet-Diskretisierung. Insgesamt werden wir vier verschiedene Verfahren herleiten.

- (S*) Berechnung der Weingartenabbildung, wenn die Oberflächennormalen bekannt sind, zur Bestimmung von K und H
- (S*AvN) Berechnung der Weingartenabbildung, wenn die Oberflächennormalen nicht bekannt sind, zur Bestimmung von K und H
- (LX) Berechnung des Krümmungsvektors zur Bestimmung von H
- (GB) Berechnung von K mit dem Gauß-Bonnet-Operator

3.1 Weingartenabbildung

Die Weingartenabbildung S , auch Formoperator (Shapeoperator), ist im Prinzip die 2. Fundamentalform II unter Beachtung der Metrik g (1. Fundamentalform). S gibt uns Informationen über die Gestalt von M . Sie misst in einer gewissen Weise wie sehr sich die Oberfläche von einer Ebene unterscheidet, speziell ist M eine flache Ebene genau dann, wenn die Weingartenabbildung identisch Null ist. Des Weiteren lassen sich

aus der Weingartenabbildung die Hauptkrümmungen k_1 und k_2 herleiten und damit auch die Gaußkrümmung $K = k_1 \cdot k_2$ und die mittlere Krümmung $H = \frac{1}{2}(k_1 + k_2)$. Die 1. Fundamentalform ist eine Größe der inneren Geometrie und kann somit alleine auf der Oberfläche selbst bestimmt werden, invariant gegenüber jeglicher Einbettungen/Parametrisierungen. Das ist bei der Weingartenabbildung anders, sie hängt von der äußeren Geometrie ab, das heißt von der Einbettung in einem Ambienteraum. In unserem Fall ist das der \mathbb{R}^3 und die Weingartenabbildung lässt sich über das Normalenvektorfeld (Gaußabbildung)

$$\vec{\nu} = [\nu^1, \nu^2, \nu^3]^T : M \rightarrow TN \subset \mathbb{R}^3 \quad (3.4)$$

$$\vec{x} \mapsto \vec{\nu}_{\vec{x}} \in T_{\vec{x}}N \perp T_{\vec{x}}M \quad (3.5)$$

berechnen. Hierbei ist $\vec{\nu}_{\vec{x}}$ der Normalenvektor im Punkt \vec{x} und $T_{\vec{x}}N$ der eindimensionale Normalenraum der orthogonal zum Tangentialraum ist. Da meistens klar ist, dass wir Punktweise arbeiten, kann auch hier die Indizierung weggelassen werden und wir schreiben nur $\vec{\nu}$ statt $\vec{\nu}_{\vec{x}}$.

Definition 3.1.1. Die Weingartenabbildung ist in jedem Punkt der Oberfläche eine lineare Abbildung und definiert sich dort durch

$$S : T_{\vec{x}}M \rightarrow T_{\vec{x}}M \quad (3.6)$$

$$\vec{v} \mapsto \mathbf{d}\vec{\nu}(\vec{v}) , \quad (3.7)$$

wobei $\mathbf{d}\vec{\nu}(\vec{v})$ der \mathbb{R}^3 -Vektor der Richtungsableitungen in Richtung \vec{v} ist, wie sich einfach nachrechnen ließe ($\vec{\nu}$ ist eine \mathbb{R}^3 -vektorierte 0-Form).

Bei der Definition von S ist etwas Obacht geboten, weil sie oft auch mit negativen Vorzeichen definiert wird. Anders als in [Hei04] angegeben ist die Weingartenabbildung ((1, 1)-Tensor) nicht die 2. Fundamentalform ((0, 2)-Tensor). In der Matrixdarstellung unterscheiden sich beide in der Höhe der Indizes, das heißt $S = (h_j^i)$ und $\Pi = (h_{ij})$ oder anders geschrieben $S = (g)^{-1}\Pi$ (vgl. [Shi14]). Somit sind auch die Eigenwerte beider Matrizen im Allgemeinen nicht gleich. Die Komponenten der Weingartenabbildung lassen sich für eine lokales orthogonales Koordinatensystem (x^1, x^2) mit Riemannmetrik $g = \text{diag}(g_1, g_2)$ berechnen durch

$$h_j^i = g^i h_{ij} = g^i \mathbf{d}\vec{\nu} \left(\frac{\partial}{\partial x^i} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial x^j} \quad (3.8)$$

$$= \nabla_i \vec{\nu} \cdot \frac{\partial}{\partial x^j} \quad (3.9)$$

für $i, j \in \{1, 2\}$ und $\nabla_i \vec{\nu}$, die i -ten Komponente (Zeile) des Gradienten des Normalenvektors, das heißt

$$\nabla \vec{\nu} = (\mathbf{d}\vec{\nu})^\sharp = \left(\sum_{k=1,2} \frac{\partial}{\partial x^k} \vec{\nu} dx^k \right)^\sharp \quad (3.10)$$

$$= \sum_{k=1,2} g^k \frac{\partial}{\partial x^k} \vec{\nu} \frac{\partial}{\partial x^k} \quad (3.11)$$

$$=: \sum_{k=1,2} \nabla_k \vec{\nu} \frac{\partial}{\partial x^k} , \quad (3.12)$$

Zu beachten ist dabei, dass ∇_i sich von der Richtungsableitung in der i -ten Basisrichtung um einen metrischen Faktor unterscheidet.

Nun wollen wir aber nicht in lokalen sondern in globalen \mathbb{R}^3 -Koordinaten rechnen in denen auch das Bild des Normalenvektorfeldes definiert ist. Dazu definieren wir die erweiterte Weingartenabbildung in diesen Koordinaten.

Definition 3.1.2. Die erweiterte Weingartenabbildung \bar{S} sei an jedem Punkt der Oberfläche gegeben durch

$$\bar{S} := \nabla \vec{\nu} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}. \quad (3.13)$$

Dabei sei das Ableiten in Normalenrichtung zulässig ergibt jedoch den Wert Null (konstante Erweiterung in Normalenrichtung).

Die erweiterte Weingartenabbildung eingeschränkt auf $T_x M$ in lokalen Koordinaten ist dann gerade S , wobei die Eigenwerten von \bar{S} gleich $\{0, k_1, k_2\}$ sind. Einen Beweis dazu findet sich in [KLY⁺08, Part 2, Kap.2].

3.1.1 Implementierung

Die Komponenten der erweiterte Weingartenabbildung können wir nun mit Hilfe des diskreten Primär-Dual-Gradienten im Mittel approximieren, das heißt

$$\bar{h}_j^i = [\nabla \vec{\nu}]_{ij} = \nabla_j \nu^i \approx \left[\nabla^{\overline{pd}} \nu^i \right]_j =: \left[S^{\overline{pd}} \right]_{ij} \quad (3.14)$$

mit $i, j \in \{1, 2, 3\}$. Für die Berechnung der Eigenwerte $\{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2\}$ an jedem Gitterpunkt nutzen wir den von der MTL4 (Matrix Template Library 4) bereitgestellten QR-Algorithmus. Der betragsmäßig kleinste Eigenwert, der annähernd null ist, ist o.E.d.A. λ_0 . Somit können die Gaußsche Krümmung und die mittlere Krümmung durch

$$K \approx \lambda_1 * \lambda_2 \quad \text{bzw.} \quad (3.15)$$

$$H \approx \frac{1}{2} (\lambda_1 + \lambda_2) \quad (3.16)$$

approximiert werden. Die Weingartenabbildung S ist symmetrisch, das können wir von der numerisch ermittelten nicht exakt erwarten. Deshalb berechnen wir auch alle Einträge von $S^{\overline{pd}}$ und nicht nur die obere oder untere Dreiecksmatrix. Die Eigenwerte können dann über die symmetrisch gemittelten Matrix erhalten werden, also von der Matrix

$$\frac{1}{2} \left(S^{\overline{pd}} + (S^{\overline{pd}})^T \right). \quad (3.17)$$

Mit dem Normalenraum auf den Gitterpunkten haben wir das gleiche Problem, wie schon mit dem Tangentialraum. Es ist nicht klar wo der Normalenraum auf den Ecken des Polyeders $|K|$ liegen soll, denn eindeutig ist er nur auf den Inneren der Dreiecke bzw. auf den Voronoi-Ecken. Deshalb mitteln wir wieder über einen 1-Ring des Primärgitterpunktes v zu

$$\begin{aligned} \vec{\nu}^{\text{Av}}(v) &= \langle \vec{\nu}^{\text{Av}}, v \rangle := \frac{1}{|\star v|} \sum_{\sigma^2 \succ v} |\star v \cap \sigma^2| \langle \vec{\nu}, \star \sigma^2 \rangle \\ &= \frac{1}{|\star v|} \sum_{\sigma^2 \succ v} |\star v \cap \sigma^2| \vec{\nu}^{\sigma^2}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Die Elementnormalen $\vec{\nu}^{\sigma^2}$ werden von AMDiS bereit gestellt. Wenn wir $\vec{\nu}_i$ wieder im „Dualen“ lösen wollen, das heißt anwenden des Hodge-Operators auf die Gleichung (3.18) und damit durchmultiplizieren der Gleichung mit $|\star v_i|$, dann können auch hier

die Ecken-Normalen elementweise bestimmt werden. Dadurch ergibt sich das lineare Gleichungssystem

$$\langle * \bar{\nu}^i, \star v \rangle = \langle * [\bar{\nu}^{Av}]_i, \star v \rangle \quad (3.19)$$

$$\left\langle * \left[\nabla^{\overline{pd}} \bar{\nu}^i \right]_j, \star v \right\rangle - \left\langle * \left[S^{\overline{pd}} \right]_{ij}, \star v \right\rangle = 0 \quad (3.20)$$

für alle $i, j \in \{1, 2, 3\}$ und $v \in K^{(0)}$ in dem alle Operatoren elementweise bestimmt werden können. Zusammen ergibt das 12 DOFs pro Knoten v . Gleichung (3.19) (3 DOFs pro Knoten) und (3.20) (9 DOFs pro Knoten) könnten zwar auch separat gelöst werden, wodurch wir Speichervorteile hätten, aber das Lösen der beiden kleineren Gleichungssystem wäre nicht schneller, da der Lösungsaufwand für die resultierenden dünnbesetzten Systeme mit angepassten Lösern etwa linear ist. Hinzu würden außerdem noch Initialisierungskosten kommen.

Eine alternative Möglichkeit an die Normalen an einer Ecke v zu mitteln ist eine Mittelung über die Elementnormalen ohne Wichtung, das heißt

$$\begin{aligned} \bar{\nu}^{\text{Conn}}(v) &= \langle \bar{\nu}^{\text{Conn}}, v \rangle := \frac{1}{m_v} \sum_{\sigma^2 \succ v} \langle \bar{\nu}, \star \sigma^2 \rangle \\ &= \frac{1}{m_v} \sum_{\sigma^2 \succ v} \bar{\nu}^{\sigma^2}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

wobei $m_v = \sum_{\sigma^2 \succ v} 1 \in \mathbb{N}_+$ die Anzahl der 2-Simplizes im 1-Ring um v ist. Das Problem hierbei ist, dass m_v a priori auf einem einzelnen Dreieckelement nicht bekannt ist und damit vor dem Assemblieren der Systemmatrix zusätzliche globale Arbeit in die Bestimmung aller m_v gesteckt werden muss.

Beispiel 3.1.3 (Torus). Auf dem Torus sind die Gaußkrümmung K , die mittlere Krümmung H und die Normalen $\bar{\nu}$ bekannt (siehe Appendix 5.4.2) und stehen uns zum vergleichen bzw. als Eingangsgröße zur Verfügung. Die Weingartenabbildung wurde als Gradient der exakten Normalen $\bar{\nu}$ (Tab. 3.1) und der beiden hier vorgestellten gemittelten Normalen $\bar{\nu}^{\text{Av}}$ (Tab. 3.2) und $\bar{\nu}^{\text{Conn}}$ (Tab. 3.3) berechnet. Es werden wieder die relativen Fehler für die Auswertung benutzt. Für die Approximation der Krümmungsgrößen mit den exakten Normalen bekommen wir etwa eine experimentelle Konvergenzordnung von 2. Gerade in der Maximumsnorm überrascht das ein wenig, da in Beispiel 2.5.4 der diskrete Gradient auf feineren Gitter eine schlechteres Konvergenzverhalten aufwies. Bei den beiden Berechnungen mit den gemittelten Normalen bricht die Konvergenzrate bei feineren Gittern ein. Wobei die Approximation der Weingartenabbildung mit $\bar{\nu}^{\text{Conn}}$ noch etwas besser ausfällt als mit $\bar{\nu}^{\text{Av}}$. In Abbildung 3.1 ist zudem noch der Fehler von $\bar{\nu}^{\text{Av}}$ aufgetragen (der von $\bar{\nu}^{\text{Conn}}$ ist ähnlich). Wie wir sehen liegt das schlechte Konvergenzverhalten nicht primär an der Mittelung der Normalen an sich. Vermutlich kommt es bei kleiner werdenden h zur starken Rundungsfehlern bei den Differenzen in der Gradientenbildung, denn hier werden lokal zwei Werte von einander abgezogen, die auf überlappenden Bereichen gemittelt werden. In Abbildung 3.3 ist die mittlere Krümmung und die lokalen absoluten Fehler für die Berechnung mit $\bar{\nu}^{\text{Av}}$ abgebildet. Auch hier können wieder gewisse Strukturen im Fehlerbild erkannt werden, was darauf schließen lässt, dass der Fehler von der Gestalt der Dreieckelemente und seinen Nachbarn abhängt, denn auf den Niveaulinien des Fehlers sind die Gitter nahezu gleich. Hierbei konnte eine Verbindung zu diversen Gitterqualitätsmaßen¹ nicht hergestellt werden.

¹die von ParaView zur Verfügung stehen, z.B. **Radius Ratio**, **Aspect Frobenius**, **Maximum Angle**, usw.

DOFs	h	Err_2^K	EOC	Err_∞^K	EOC	Err_2^H	EOC	Err_∞^H	EOC
1360	0.263	4.21E-02		1.18E-01		1.59E-02		1.84E-02	
2016	0.215	2.77E-02	2.06	7.85E-02	2.02	1.11E-02	1.76	1.28E-02	1.79
4752	0.138	1.16E-02	1.98	3.64E-02	1.75	4.97E-03	1.83	5.64E-03	1.86
10192	0.094	5.42E-03	1.97	1.72E-02	1.93	2.38E-03	1.90	2.71E-03	1.89
24640	0.060	2.26E-03	1.97	7.44E-03	1.89	1.01E-03	1.94	1.15E-03	1.93
48832	0.043	1.15E-03	1.98	3.71E-03	2.03	5.14E-04	1.96	5.91E-04	1.95
100480	0.030	5.61E-04	1.97	1.88E-03	1.88	2.52E-04	1.97	2.94E-04	1.93
250992	0.019	2.26E-04	1.98	7.04E-04	2.14	1.01E-04	1.98	1.25E-04	1.87

Tabelle 3.1: Fehler von K und H (aus Weingartenabb. und exakten Normalen) (*ExN) auf dem Torus.

DOFs	h	Err_2^K	EOC	Err_∞^K	EOC	Err_2^H	EOC	Err_∞^H	EOC
1360	0.263	6.01E-02		1.20E-01		2.68E-02		3.77E-02	
2016	0.215	4.06E-02	1.93	8.15E-02	1.90	1.87E-02	1.77	2.75E-02	1.55
4752	0.138	1.77E-02	1.89	3.86E-02	1.71	8.33E-03	1.84	1.23E-02	1.84
10192	0.094	8.65E-03	1.85	1.77E-02	2.02	4.07E-03	1.86	7.68E-03	1.21
24640	0.060	4.13E-03	1.67	1.44E-02	0.46	2.14E-03	1.44	8.90E-03	-0.33
48832	0.043	2.79E-03	1.14	1.01E-02	1.03	2.02E-03	0.18	6.35E-03	0.98
100480	0.030	2.18E-03	0.68	9.68E-03	0.11	1.82E-03	0.29	6.08E-03	0.12
250992	0.019	1.61E-03	0.66	1.07E-02	-0.22	1.29E-03	0.74	5.50E-03	0.22

Tabelle 3.2: Fehler von K und H (aus Weingartenabb. und gemittelten Normalen nach (3.18)) (*AvN) auf dem Torus.

DOFs	h	Err_2^K	EOC	Err_{\max}^K	EOC	Err_2^H	EOC	Err_{\max}^H	EOC
1360	0.263	5.90E-02		1.13E-01		2.48E-02		2.92E-02	
2016	0.215	4.02E-02	1.89	7.77E-02	1.84	1.73E-02	1.76	2.11E-02	1.59
4752	0.138	1.75E-02	1.89	3.62E-02	1.74	7.75E-03	1.83	9.45E-03	1.83
10192	0.094	8.39E-03	1.91	1.71E-02	1.95	3.75E-03	1.88	5.73E-03	1.30
24640	0.060	3.64E-03	1.88	7.49E-03	1.85	1.78E-03	1.68	5.86E-03	-0.05
48832	0.043	2.12E-03	1.58	4.81E-03	1.29	1.41E-03	0.68	3.94E-03	1.15
100480	0.030	1.39E-03	1.16	4.23E-03	0.36	1.19E-03	0.47	3.31E-03	0.48
250992	0.019	8.84E-04	0.99	3.73E-03	0.27	8.24E-04	0.80	2.51E-03	0.60

Tabelle 3.3: Fehler von K und H (aus Weingartenabb. und gemittelten Normalen nach (3.21)) (*ConnN) auf dem Torus.

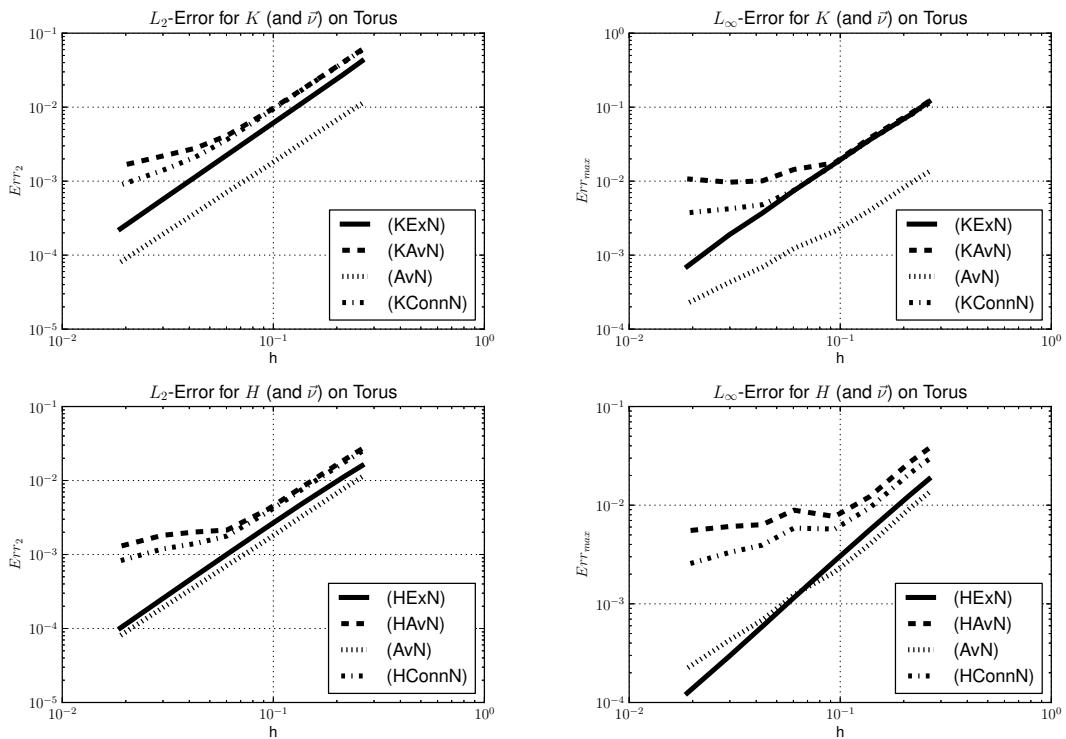


Abbildung 3.1: (Log-Log-Plot) Fehler in diskreter L_2 - und Maximumsnorm für die Gaußkrümmung K bzw. mittlere Krümmung H berechnet aus der Weingartenabbildung mit exakten Normalen (KExN)/(HExN), nach (3.18) gemittelte Elementnormalen (KAaN)/(HAvN) und nach (3.21) gemittelte Elementnormalen (KConnN)/(HConnN). Zudem ist auch der Fehler der Normalenmittelung nach (3.18) in der jeweiligen Norm zusehen (AvN).

Fazit. Wenn die Normalenvektoren an jedem Kanten der Oberflächentriangulierung bekannt sind, zum Beispiel aus einer Parametrisierung $\vec{x} : (u, v) \mapsto (x, y, z)$ durch

$$\vec{\nu} = \frac{\frac{\partial \vec{x}}{\partial u} \times \frac{\partial \vec{x}}{\partial v}}{\left\| \frac{\partial \vec{x}}{\partial u} \times \frac{\partial \vec{x}}{\partial v} \right\|} \quad (3.22)$$

oder einer signierten Distanzfunktion φ durch

$$\vec{\nu} = \frac{\nabla_{\mathbb{R}^3} \varphi}{\|\nabla_{\mathbb{R}^3} \varphi\|}, \quad (3.23)$$

dann können mit der diskreten Weingartenabbildung gute Ergebnisse erzielt werden. Sind dagegen die Normalen nicht bekannt, so muss in zukünftigen Arbeiten entweder eine angepasstere Möglichkeit bereitgestellt werden die Normalen an den Ecken des Polyeders zu gewinnen oder ein für diese Problemstellung geeigneter diskreter Gradient, zum Beispiel ein Dual-Primär-Gradient für eine diskrete duale 0-Form ausgewertet auf den primären Gitterpunkten. Hätten wir so einen Gradienten, dann könnten wir die Elementnormalen $\vec{\nu}^e$ direkt für eine Berechnung der diskreten Weingartenabbildung auf den Ecken auswerten.

In Abschnitt 3.4 wird zudem die hier vorgestellte Krümmungsapproximation auch auf anderen Oberflächen getestet und mit den Ergebnissen von [Hei04] verglichen.

3.2 Krümmungsvektor

Der Krümmungsvektor \vec{H} ist die mittlere Krümmung in Normalenrichtung unter Beachtung der Dimension n der Oberfläche. Für eine 2-Mannigfaltigkeit gilt

$$\vec{H} := 2H\vec{\nu}. \quad (3.24)$$

Nach [Che84, Kap.4.5] gilt für jede isometrische Immersion $\vec{x} : M \rightarrow \mathbb{R}^3$

$$-\Delta_B \vec{x} = \vec{H}, \quad (3.25)$$

wobei auch hier wieder die Gleichung komponentenweise, also als vektorisiertes skalarwertiges Problem, zu sehen ist. Da wir numerisch nicht in lokalen Koordinaten rechnen möchten (außer zur Verifizierung der Ergebnisse) und uns die Oberfläche als Punktmenge im \mathbb{R}^3 vorliegt, wählen wir als Abbildung zwischen der Oberfläche und dem \mathbb{R}^3 einfach die Inklusion, das heißt

$$\vec{x} := \iota : \mathbb{R}^3 \supset M \hookrightarrow \mathbb{R}^3. \quad (3.26)$$

Es ist leicht zu sehen, dass die Inklusion als Identität eingeschränkt auf M eine isometrische Immersion ist ($g \equiv I$ und der Pushforward $\iota_* : T_p M \rightarrow T_p \mathbb{R}^3$ ist injektiv). Mit Hilfe des DEC-diskretisierten Laplace-Beltrami-Operators erhalten wir nun das diskrete Problem

$$\langle \vec{H}, v \rangle = -\langle \Delta_B \vec{x}, v \rangle \quad (3.27)$$

für alle Ecken $v \in K^{(0)}$. Durch anwenden des Hodge-Stern-Operators auf beiden Seiten können wir das resultierende „duale“ Problem in gewohnter Weise in AMDiS lösen (vgl. Abschnitt 2.4.2). Als \mathbb{R}^3 -vektorierte Aufgabenstellung kann dabei auch jede der drei Komponenten unabhängig von einander gelöst werden. Nach (3.24) lässt sich die mittlere Krümmung über die euklidische Norm des Krümmungsvektors erhalten, also

$$H = \frac{1}{2} \left\| \vec{H} \right\|_{\mathbb{R}^3}. \quad (3.28)$$

Numerische Beispiele dazu finden sich im Abschnitt 3.4.

3.3 Gauß-Bonnet-Operator

Eine weitere Möglichkeit die Gaußsche Krümmung zu approximieren besteht aus einem einfachen geometrischen Ansatz, der aus dem Satz von Gauß-Bonnet folgt. Dieser Satz besagt speziell für eine orientierte Riemannsche Mannigfaltigkeit P mit nur stückweise differenzierbaren Rand (vgl. [BG88, Kap.10.5])

$$\int_P K\mu = 2\pi - \sum_{i=1}^m \beta_i - \int_{\partial P} k_g ds \quad (3.29)$$

wobei β_i die Außenwinkel an den m „Knicke“ der Randkurve sind und k_g die geodätische Krümmung der Randkurve. Diese Formel können wir auch auf eine abstrakte Voronoi-Zelle $P = \star\pi(v) \in C_2(\star L)$ für die Ecke $v \in K^{(0)} = L^{(0)}$ anwenden. Da die „Knicke“ immer genau im Umkreismittelpunkt der Dreieckselemente um v sind, ergibt sich $m = m_v$, die Anzahl der 2-Simplizes des 1-Ringes um v . Die Approximation besteht nun darin $\star v \in C_2(\star K)$ als Näherung für $\star\pi(v)$ in Gleichung (3.29) zu verwenden. Da die Randkurve $\partial(\star v)$ auf den differenzierbaren Teilstücken gerade ist, verschwindet dort die geodätische Krümmung. An den Schnitten mit den Primärkanten

$$\star\sigma^1 \cap \sigma^1 = c(\sigma^1) \in \text{csd}K \quad (3.30)$$

ist die geodätische Krümmung ebenfalls null, da dort die Randkurve einen Winkel von genau π auf dem Polytop $|K|$ hat (vgl. [PS06]). Weil nun die Volumenform

$$d\mu = \sqrt{|g|} dx^1 \wedge dx^2 \quad (3.31)$$

nichts weiter als das Hodge-Stern-Duale der Eins ist, das heißt $d\mu = *1$ und damit $K\mu = *K$, ergibt sich folgende approximative Aufgabenstellung

$$\langle *K, \star v \rangle \approx 2\pi - \sum_{i=1}^{m_v} \beta_i \quad (3.32)$$

mit den Außenwinkeln an den Ecken von $\star v$ (vgl. Abb. 3.2). Damit haben wir schon eine „duale“ DEC-Formulierung der rechten Seite zur elementweisen Assemblierung über

$$\langle *K, \star v \rangle = |\star v| \langle K, v \rangle = \sum_{\sigma^2 \succ v} |\star v \cap \sigma^2| \langle K, v \rangle \quad (3.33)$$

automatisch erhalten mit dem Freiheitsgrad K am Knoten v . Der zugehörige „primäre“ Gauß-Bonnet-Operator definiert sich dementsprechend in DEC-Notation durch

$$\langle K^{GB}, v \rangle := \frac{1}{|\star v|} \left(2\pi - \sum_{i=1}^{m_v} \beta_i \right). \quad (3.34)$$

Der obere Index GB kann auch weggelassen werden, wenn klar ist, dass es sich um den Gauß-Bonnet-Operator handelt.

3.3.1 Implementierung

Um auch die rechte Seite von (3.32) elementweise zu berechnen müssen die Außenwinkel auf jedem Dreieck berechnet werden. Nun ist der Außenwinkel β_i gleich dem Innenwinkel des i -ten Dreiecks an der Ecke v , denn mit den Bezeichnern aus Abbildung 3.2 gilt

$$\gamma_k = \frac{\pi}{2} - \alpha_k \quad (k = 0, 1) \quad (3.35)$$

$$\beta_i = \pi - \gamma_0 - \gamma_1 = \pi + \alpha_0 - \frac{\pi}{2} + \alpha_1 - \frac{\pi}{2} \quad (3.36)$$

$$= \alpha_0 + \alpha_1. \quad (3.37)$$

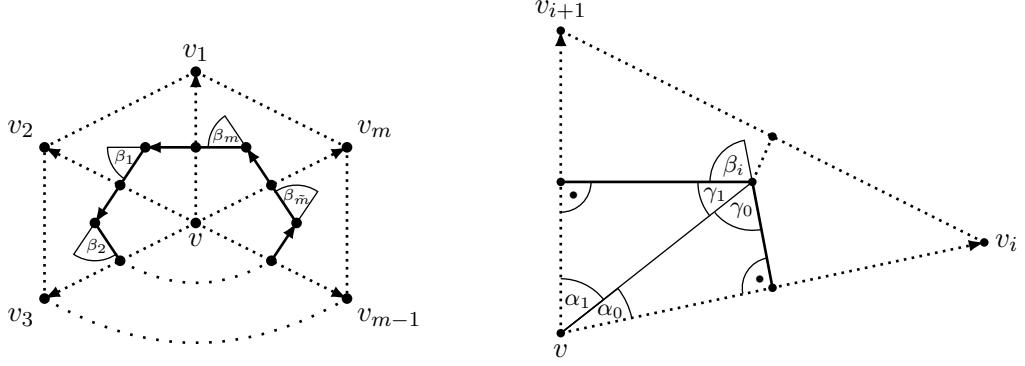


Abbildung 3.2: Die $m = m_v =: \tilde{m} + 1$ Außenwinkel β_i an den Ecken der Voronoi-Zelle (links) und die zugehörigen Innenwinkel bzgl. der Primär- und Dualkanten für ein Dreieckelement σ^2 (rechts).

Weiterhin lassen sich die Winkel α_k über die Längen der Primärkanten und der auf $\sigma^2 = [v, v_i, v_{i+1}]$ eingeschränkten Voronoi-Kanten bestimmen durch

$$\alpha_k = \arctan \left(\frac{|\star[v, v_{i+k}] \cap \sigma^2|}{\frac{1}{2} |[v, v_{i+k}]|} \right) = \text{atan2} \left(2 |\star[v, v_{i+k}] \cap \sigma^2|, |[v, v_{i+k}]| \right). \quad (3.38)$$

Insgesamt erhalten wir also für die Summe der Außenwinkel der Voronoi-Zelle $\star v$

$$\sum_{i=1}^{m_v} \beta_i = \sum_{\sigma^2 \succ v} \sum_{\sigma^2 \succ \sigma^1 \succ v} \text{atan2} \left(2 |\star \sigma^1 \cap \sigma^2|, |\sigma^1| \right), \quad (3.39)$$

die somit immer noch elementweise Bestimmt werden kann. Ein Problem stellt jedoch noch der Minuend 2π in der rechten Seite von 3.32 dar. Eine Möglichkeit wäre es den globalen Rechte-Seite-Vektor mit $[2\pi]_{v \in K^{(0)}}$ statt wie gewohnt mit $[0]_{v \in K^{(0)}}$ zu initialisieren und beim assemblieren die sich aus (3.39) ergebenden Elementvektoren abzuziehen. Eine andere Möglichkeit ist es 2π selbst auch elementweise zu zerlegen, sodass wir

$$\langle \star K^{GB}, \star v \rangle = 2\pi - \sum_{i=1}^{m_v} \beta_i = \sum_{\sigma^2 \succ v} \left(\frac{2\pi}{m_v} - \sum_{\sigma^2 \succ \sigma^1 \succ v} \text{atan2} \left(2 |\star \sigma^1 \cap \sigma^2|, |\sigma^1| \right) \right) \quad (3.40)$$

für die Voronoi-Zelle am Knoten v erhalten. Jedoch ist zu bedenken, dass m_v a priori auf einem Dreieckelement nicht bekannt ist, somit wäre es sinnvoll m_v für alle Ecken $v \in K^{(0)}$ noch vor dem Aufstellen der Systemmatrix zu bestimmen falls eine Parallelisierung des Assemblierungsalgorithmus gewünscht ist.

Ein Algorithmus zur Berechnung der Elementvektoren ist im Appendix 5.2.4 gegeben. In Abschnitt 3.4 werden wir den Operator als Vergleich zur diskreten Weingartenabbildung und den Ergebnissen von [Hei04] testen. In [MDSB03] wird der Gauß-Bonnet-Operator ebenfalls mit anderen Methoden verglichen.

3.4 Numerisches Experiment

Zur Bestimmung der Gaußkrümmung K und der mittleren Krümmung H stehen uns nun jeweils drei Methoden zur Verfügung. Die Gaußsche Krümmung kann aus der diskreten Weingartenabbildung berechnet werden mit (SK) und ohne (SKAvN) gegebenen Normalenfeld oder mit Hilfe des Gauß-Bonnet-Operators (GB) und die mittlere Krümmung ebenfalls aus der diskreten Weingartenabbildung (SH)/(SHAvN) oder aus

dem Krümmungsvektor, der aus dem diskreten Laplace-Beltrami-Operators der Koordinatenabbildung folgt (LX).

In [Hei04] wird K und H auch aus einer Approximation der Weingartenabbildung gewonnen. Hierbei wird ein isoparametrischer Finite-Elemente-Ansatz (FEM) genutzt. Die Oberfläche M wird elementweise Lagrange-interpoliert zu M_h^γ mit dem Polynomgrad $\gamma \in \{1, 2, 3, 4\}$. Zunächst wird dabei M linear zu \mathcal{T}_h^1 trianguliert, so dass

$$M_h^1 = |K| \quad \text{und} \quad \mathcal{T}_h^1 = K^{(2)} \quad (3.41)$$

gilt. Für $\gamma = 2, 3, 4$ werden dann die noch übrigen 3, 7 bzw. 12 Lagrange-Knoten $Q_i \in \sigma^2$ durch $\pi(Q_i) \in M$ orthogonal projiziert. Der Raum der Ansatzfunktion definiert sich dann über

$$W_h^\gamma := \left\{ w_h \in C^{0,1}(M_h^\gamma) \mid \forall T_h^\gamma \in \mathcal{T}_h^\gamma : (w_h \circ \Phi_{T_h^\gamma}^\gamma) \in \mathbb{P}_\gamma(\hat{T}) \right\}, \quad (3.42)$$

wobei $\hat{T} := \Delta^2 \in \mathbb{R}^2$ das Referenzdreieck ist und $\Phi_{T_h^\gamma}^\gamma : \hat{T} \rightarrow T_h^\gamma$ die polynomiale Parametrisierung vom Grad γ . Das diskrete Problem für die Weingartenabbildung lautete nun für alle $\vec{\psi}_h \in (W_h^\gamma)^3$ und $j \in \{1, 2, 3\}$

$$\int_{M_h^\gamma} \Pi_h^j \cdot \vec{\psi}_h \mu = - \int_{M_h^\gamma} \nu_h^j (\nabla_{M_h^\gamma} \cdot \vec{\psi}_h + \vec{H}_h \cdot \vec{\psi}_h) \mu \quad (3.43)$$

mit der diskreten Weingartenabbildung

$$\Pi_h = [\Pi_h^1, \Pi_h^2, \Pi_h^3] \in (W_h^\gamma)^{3 \times 3} \quad (3.44)$$

als Lösung. $\vec{\nu}_h = [\nu_h^1, \nu_h^2, \nu_h^3]^T$ ist das äußere Normalenfeld von M_h^γ . Des Weiteren ist die Tangentialdivergenz der vektorisierten Ansatzfunktion $\vec{\psi}_h = [\psi_h^1, \psi_h^2, \psi_h^3]^T$ definiert als

$$\nabla_{M_h^\gamma} \cdot \vec{\psi}_h := \nabla_{\mathbb{R}^3} \cdot \vec{\psi}_h - \sum_{i=1}^3 (\nabla_{\mathbb{R}^3} \psi_h^i \cdot \vec{\nu}_h) \nu_h^i. \quad (3.45)$$

Der diskrete Krümmungsvektor $\vec{H}_h := [H_h^1, H_h^2, H_h^3]^T \in (W_h^\gamma)^3$ ergibt sich als Lösung von

$$\int_{M_h^\gamma} H_h^i \psi_h^i \mu = \int_{M_h^\gamma} \nabla_{M_h^\gamma} x_h^i \cdot \nabla_{M_h^\gamma} \psi_h^i \mu \quad (3.46)$$

für alle $i \in \{1, 2, 3\}$ und $\vec{\psi}_h \in (W_h^\gamma)^3$. Dabei ist $\vec{x}_h = [x_h^1, x_h^2, x_h^3]^T$ die Identität und $\nabla_{M_h^\gamma} = (I - \vec{\nu}_h \vec{\nu}_h^T) \nabla_{\mathbb{R}^3}$ der Oberflächengradient auf M_h^γ . Weitere Einzelheiten dazu können in [Hei04] nachgelesen werden.

Als Oberflächen wählen wir drei, die auch in [Hei04] genutzt werden. Dazu gehören die Einheitssphäre (Appendix 5.4.1), eine quartische Oberfläche, die sich als Null-Level-Sets eines Polynomes vierten Grades beschreiben lässt (Appendix 5.4.3) und ein Ellipsoid (Appendix 5.4.4). Für unsere Berechnungen, wie auch bei [Hei04], ist die Makrotrianulation ein Ikosaeder projiziert auf die Oberfläche. Da für die DEC-Diskretisierung Wohlzentriertheit an das Primärgritter gestellt wird, verfeinern wir zunächst die Ikosaederflächen. Für die Sphäre ist bei den hier verwendeten Verfeinerungsmechanismus (Cinema4D) nichts weiter zu tun, da wir schon eine sehr gleichmäßige Triangulierung erhalten. Für die anderen beiden Oberflächen verwenden wir den in Abschnitt 1.3 vorgestellten Algorithmus um die Triangulierung zu verbessern und Wohlzentriertheit zu gewährleisten. Ein Nachteil dieser Prozedur ist es, dass gerade an Orten mit starker

Krümmung das Gitter schlechter Aufgelöst wird als bei flacheren Umgebungen. So war es zum Beispiel nicht möglich bei größeren Gittern unter ca. 5300 Gitterpunkten ($h \approx 0.26$) bei der quartischen Oberfläche die beiden Wölbungen ordentlich darzustellen, wie wir in Abbildung 3.6 sehen können.

Die exakten mittleren Krümmungen und die Gaußschen Krümmungen für den Ellipsoiden und der quartischen Oberfläche sind in Abbildung 3.7 bzw. 3.10 dargestellt. Für die Sphäre sind beide Krümmungsgrößen konstant eins.

Für die Berechnung der Weingartenabbildung werden zum einen die gemittelten Normalen verwenden (S^*AvN), das heißt es werden die Gleichungen (3.19)+(3.20) gelöst ($3 \cdot (9 + 3) = 36$ DOFs p. Element²). Zum anderen nutzen wir die exakten Normal (S^*) an den Knoten, die wir durch die genormten Gradienten der signierten Distanzfunktion erhalten (vgl. (3.23)) und lösen nur Gleichung (3.20) ($3 \cdot 9 = 27$ DOFs p. Element). Zum Vergleich, bei [Hei04] müssen zu den 9 Komponenten der Weingartenabbildung auch noch die 3 Komponenten des Krümmungsvektor berechnet werden, das heißt für die linearen Elemente sind ebenfalls $3 \cdot (9 + 3) = 36$ DOFs pro Element zu bestimmen, wie auch bei unserem (S^*AvN)-Problem. Für den Grad 2, 3 bzw. 4 sind es dann schon 72, 120 bzw. 180 DOFs pro Element. Für unsere Berechnung der mittleren Krümmung direkt aus dem Krümmungsvektor (LX) nach Gleichung (3.27) erhalten wir nur 9 DOFs pro Element und für die Ermittlung der Gaußkrümmung mit den Gauß-Bonnet-Operators nach Gleichung (3.40) sogar nur 3 DOFs pro Dreieckselement. Prinzipiell sollte sich der Assemblierungsaufwand für einen einzelnen Freiheitsgrad asymptotisch nicht von der FEM-Diskretisierung unterscheiden, da bei der FEM-Diskretisierung mit den Gittern in [Hei04] im Mittel etwa genauso viele Elemente (ca. 6) für die Assemblierung eines globalen DOFs beteiligt sind. Bei allen Problemen ließe sich im „Primärraum“ auf das Lösen eines linearen Gleichungssystems verzichten, da auch bei den (S^*AvN)-Problemen sich die Gleichungen entkoppeln lassen, so dass alle zu berechnenden Größen auf der rechten Seite stehen (Vektoroperatoren) und auf der linken Seite nur die Identität als Systemmatrix. Da wir uns aber wegen dem Vorteil der einfacheren elementweisen Assemblierung dazu entschlossen hatten im „Dualraum“ zurechnen, haben wir für die entkoppelten Probleme einen Eintrag pro Zeile in der Systemmatrix, der den metrischen Faktor $|\star v|$ für jeden Knoten $v \in K^{(0)}$ enthält. Um auch zu zeigen, dass Differentialgleichungssysteme mit einem DEC möglich sind lösen wir die (S^*AvN)-Probleme ((3.19)+(3.20)) nicht entkoppelt, so dass in der Systemmatrix, wegen der impliziten Berechnung der Normalen-Gradienten, 7 Nicht-Null-Einträge für Knoten mit hexagonaler Struktur und 6 für die Defekte (Fünfer-1-Ring) pro Zeile stehen. Da in [Hei04] keine genaue Aussage getroffen wird, wie hoch der tatsächliche betriebene relative Aufwand ist, können wir davon ausgehen, dass die Anzahl der Freiheitsgrade ein geeignetes Maß dafür ist. Somit sind die Kosten für alle hier vorgestellten DEC-Probleme kleiner oder gleich (für (S^*AvN)) dem der isoparametrischen FEM vom Grade 1. Für das Lösen der dünnbesetzten Gleichungssysteme wird in allen Fällen einheitlich der BiCGStab2-Algorithmus benutzt mit einer Abbruchstoleranz von $1.0E-10$. Wie zu erwarten übersteigt der Assemblierungsaufwand in den meisten Fällen den des Lösungsaufwandes.

In den Tabellen 3.5 - 3.13 sind die relativen Fehler und die sich ergebenden experimentellen Konvergenzordnungen der sechs DEC-Probleme (SK, SH, SKAvN, SHAvN, GB, LX) zu unterschiedlichen maximalen Gitterweiten niedergeschrieben. Tabellarische Ergebnisse der gleichen Form für die isoparametrische FEM können in [Hei04] nachgelesen werden. In den Abbildungen 3.5, 3.8 und 3.11 sind die relativen FEM-Fehler als Vergleich mit gezeichnet worden. Dabei sei zu bemerken das der lineare FE-Ansatz gar

²lokale Freiheitsgrade

nicht konvergierte.

Für (SK) und (SH) sind die Ergebnisse für die Sphäre und den Ellipsoiden mit denen der FEM vom Grad 2 und 3 in etwa vergleichbar. Dagegen fällt das Konvergenzverhalten auf der quartischen Oberfläche nicht so gut aus. Jedoch liegt die Vermutung nahe, dass die Konvergenzordnung mit feiner werdenden Gitter, unter Vernachlässigung von Rundungsfehlern, noch steigt, wie wir das zum Beispiel auch auf dem Ellipsoiden sehen können. Die größten Fehler kommen erwartungsgemäß dort vor, wo die Krümmung am größten ist, wie wir in Abbildung 3.7 für den Ellipsoiden und 3.10 für die quartische Oberfläche sehen können. Das liegt vermutlich zum größten Teil an der wesentlich schlechteren Gitterauflösung an diesen Stellen. Für den Fall, dass die Normalen weder explizit noch implizit an den Gitterknoten bekannt wären stehen die Problemformulierungen (SKAvN) und (SHAvN) zur Verfügung. Dabei fallen die Konvergenztests schlechter aus als bei den (S^*)-Problemen. Vor allem in der Maximumsnorm bricht in den meisten Fällen die Konvergenzrate ab einer bestimmten Gitterweite ein. Dieses Verhalten war schon auf dem Torus im Beispiel 3.1.3 zu beobachten.

Das Verhalten der Fehler der Gaußschen Krümmung mit dem Gauß-Bonnet-Operator (GB) überrascht ein wenig. Wie wir sehen, konnten solide Ergebnisse erzielt werden trotz des sehr geringen Aufwandes für die Berechnung. Einzig in der Maximumsnorm auf dem Ellipsoiden war keine Konvergenz meßbar. Hier hält sich vor allem der Fehler an den seitlichen Defekten hartnäckig (vgl. Abb. 3.10).

Das (LX)-Problem zur Berechnung der mittleren Krümmung brachte auf der Sphäre im Vergleich zu allen anderen Verfahren die besten Ergebnisse hervor. Der Grund für das abnehmen der experimentellen Konvergenzordnung ist die Genauigkeit der Lösung des linearen Gleichungssystems. Mit einer kleineren Abbruchstoleranz für den BiCGStab2 ließe sich auch eine Konvergenzrate von über 3 beibehalten. Auf der quartischen Oberfläche stagniert vor allem die Konvergenzrate in der L_2 -Norm wobei sie in der Maximumsnorm etwa linear bleibt. Das lässt darauf schließen, dass die größeren Fehler sich in einem festen Bereich der Oberfläche befinden. Wie wir in Abbildung 3.7 sehen können, sind die Fehler im Bereich der Sattelfläche recht hoch, obwohl dort das Gitter vergleichsweise fein ist. Auf einer Sattelfläche ist die eine Hauptkrümmung negativ und die andere positive, folglich ist die Gaußsche Krümmung dort negativ. Solche eine Situation liegt auch im „inneren Bereich“ des Torus vor und auch hier haben wir ein ähnliches Fehlerverhalten, wie eine Vergleichsrechnung zeigt (siehe Abb. 3.9). Während auf dem Ellipsoiden die Konvergenzrate in der diskreten L_2 -Norm etwas unter 2 bleibt, bricht sie in der Maximumsnorm ein. Die maximalen Fehler befinden sich dort, wo die Krümmung am stärksten ist und zudem die Gitterauflösung vergleichsweise schlecht (vgl. 3.10).

Insgesamt schneiden alle DEC-Diskretisierung im Vergleich zu den FEM-Diskretisierungen in Hinblick auf den Aufwand ganz gut ab. Denn unter der Annahme, dass bei beiden Ansätzen ähnlich gleichmäßige Gitter verwendet werden, lohnt sich ein Blick auf die zum Teil stark unterschiedlichen Anzahlen der Freiheitsgrade pro Element, wie wir in Tabelle 3.4 sehen können.

	lDOFs	FEM 1	FEM 2	FEM 3	FEM 4
(S*AvN)	36	100%	50%	30%	20%
(S*)	27	75%	37.5%	22.5%	15%
(LX)	9	25%	12.5%	7.5%	5%
(GB)	3	8.33%	4.17%	2.5%	1.67%

Tabelle 3.4: Verhältnis der Anzahl der lokalen Freiheitsgrade (lDOFs, DOFs pro Element) zwischen den DEC-Methoden und FEM. FEM i bezeichnet hierbei die isoparametrische FEM mit $\gamma = i$.

h	Err_2^{SK}	EOC	Err_{∞}^{SK}	EOC	Err_2^{SH}	EOC	Err_{∞}^{SH}	EOC
0.152	4.93E-03		5.69E-03		2.47E-03		2.85E-03	
0.109	2.53E-03	2.00	2.94E-03	1.97	1.26E-03	2.00	1.47E-03	1.98
0.0664	9.39E-04	2.00	1.10E-03	1.99	4.70E-04	2.00	5.49E-04	1.99
0.0477	4.85E-04	2.00	5.69E-04	1.99	2.43E-04	2.00	2.84E-04	2.00
0.0306	1.99E-04	2.00	2.33E-04	2.00	9.95E-05	2.00	1.17E-04	2.00
0.0215	9.87E-05	2.00	1.16E-04	2.00	4.93E-05	2.00	5.79E-05	2.00
0.0153	4.98E-05	2.00	5.83E-05	2.00	2.49E-05	2.00	2.92E-05	2.00
0.00967	1.99E-05	2.00	2.34E-05	2.00	9.97E-06	2.00	1.17E-05	2.00

Tabelle 3.5: Relative Fehler für K und H (diskreten Weingartenabbildung(S*)) auf der Sphäre.

h	Err_2^{SK}	EOC	Err_{∞}^{SK}	EOC	Err_2^{SH}	EOC	Err_{∞}^{SH}	EOC
0.152	2.63E-02		5.22E-02		1.32E-02		2.58E-02	
0.109	1.65E-02	1.38	3.35E-02	1.32	8.31E-03	1.39	1.66E-02	1.31
0.0664	8.09E-03	1.44	1.81E-02	1.24	4.06E-03	1.45	9.07E-03	1.22
0.0477	4.99E-03	1.47	1.45E-02	0.68	2.50E-03	1.47	7.25E-03	0.68
0.0306	2.59E-03	1.47	2.31E-02	-1.05	1.30E-03	1.47	1.16E-02	-1.06
0.0215	1.56E-03	1.45	2.95E-02	-0.69	7.79E-04	1.45	1.48E-02	-0.70
0.0153	9.52E-04	1.44	3.38E-02	-0.40	4.77E-04	1.43	1.70E-02	-0.40
0.00967	5.00E-04	1.41	3.78E-02	-0.25	2.51E-04	1.40	1.91E-02	-0.25

Tabelle 3.6: Relative Fehler für K und H (diskreten Weingartenabbildung mit gemittelten Normalen(S*AvN)) auf der Sphäre.

h	Err_2^{GB}	EOC	Err_{∞}^{GB}	EOC	Err_2^{LX}	EOC	Err_{∞}^{LX}	EOC
0.152	3.10E-03		3.58E-03		4.55E-06		1.02E-05	
0.109	1.58E-03	2.01	1.84E-03	1.98	1.35E-06	3.62	2.78E-06	3.87
0.0664	5.87E-04	2.00	6.87E-04	1.99	2.11E-07	3.75	4.16E-07	3.83
0.0477	3.03E-04	2.00	3.56E-04	2.00	6.03E-08	3.79	1.45E-07	3.19
0.0306	1.24E-04	2.00	1.46E-04	2.00	1.22E-08	3.59	3.85E-08	2.98
0.0215	6.16E-05	2.00	7.23E-05	2.00	3.89E-09	3.26	2.54E-08	1.18
0.0153	3.10E-05	2.00	3.65E-05	2.00	1.55E-09	2.69	1.54E-08	1.47
0.00967	1.24E-05	2.00	1.46E-05	2.00	5.14E-10	2.41	7.13E-09	1.68

Tabelle 3.7: Relative Fehler für K (Gauß-Bonnet-Operator(GB)) und H (Krümmungsvektor(LX)) auf der Sphäre.

h	Err_2^{SK}	EOC	Err_{∞}^{SK}	EOC	Err_2^{SH}	EOC	Err_{∞}^{SH}	EOC
0.414	9.82E-01		1.24E+00		3.93E-01		5.09E-01	
0.340	1.02E+00	-0.20	1.51E+00	-1.02	3.60E-01	0.45	4.54E-01	0.57
0.257	8.83E-01	0.52	9.39E-01	1.72	2.88E-01	0.80	3.74E-01	0.70
0.109	2.21E-01	1.62	4.81E-01	0.78	1.11E-01	1.12	3.59E-01	0.05
0.0786	2.25E-01	-0.06	4.32E-01	0.32	1.01E-01	0.27	3.74E-01	-0.13
0.0598	2.10E-01	0.27	4.35E-01	-0.02	8.46E-02	0.66	3.26E-01	0.50
0.0391	1.40E-01	0.95	3.04E-01	0.83	5.33E-02	1.08	2.22E-01	0.89

Tabelle 3.8: Relative Fehler für K und H (diskreten Weingartenabbildung(S^*)) auf einer quartischen Oberfläche.

h	Err_2^{SK}	EOC	Err_{∞}^{SK}	EOC	Err_2^{SH}	EOC	Err_{∞}^{SH}	EOC
0.414	7.66E-01		8.38E-01		3.26E-01		4.13E-01	
0.340	7.56E-01	0.07	1.02E+00	-0.97	3.01E-01	0.41	4.45E-01	-0.38
0.257	6.22E-01	0.70	6.81E-01	1.44	2.55E-01	0.59	5.04E-01	-0.45
0.109	3.73E-01	0.60	6.46E-01	0.06	1.79E-01	0.42	5.00E-01	0.01
0.0786	3.78E-01	-0.04	6.38E-01	0.04	1.64E-01	0.27	5.11E-01	-0.07
0.0598	3.25E-01	0.55	5.72E-01	0.40	1.36E-01	0.68	4.46E-01	0.50
0.0391	2.22E-01	0.89	4.24E-01	0.70	8.93E-02	0.99	3.23E-01	0.76

Tabelle 3.9: Relative Fehler für K und H (diskreten Weingartenabbildung mit gemittelten Normalen(S^*AvN)) auf einer quartischen Oberfläche.

h	Err_2^{GB}	EOC	Err_{∞}^{GB}	EOC	Err_2^{LX}	EOC	Err_{∞}^{LX}	EOC
0.414	1.92E+00		3.24E+00		5.31E-01		7.99E-01	
0.340	1.87E+00	0.12	4.20E+00	-1.30	4.76E-01	0.55	6.69E-01	0.90
0.257	1.89E+00	-0.03	3.21E+00	0.97	3.94E-01	0.68	6.50E-01	0.10
0.109	4.42E-01	1.70	6.70E-01	1.83	1.18E-01	1.41	2.31E-01	1.21
0.0786	1.75E-01	2.79	2.79E-01	2.64	8.76E-02	0.91	1.54E-01	1.22
0.0598	1.04E-01	1.90	1.86E-01	1.49	8.02E-02	0.32	1.31E-01	0.59
0.0391	5.18E-02	1.64	1.03E-01	1.38	7.48E-02	0.16	8.37E-02	1.05

Tabelle 3.10: Relative Fehler für K (Gauß-Bonnet-Operator(GB)) und H (Krümmungsvektor(LX)) auf einer quartischen Oberfläche.

h	Err_2^{SK}	EOC	Err_{∞}^{SK}	EOC	Err_2^{SH}	EOC	Err_{∞}^{SH}	EOC
0.25	2.10E-01		4.73E-01		9.68E-02		3.22E-01	
0.18	1.40E-01	1.22	3.27E-01	1.12	6.40E-02	1.25	2.19E-01	1.16
0.11	6.90E-02	1.44	1.57E-01	1.49	3.08E-02	1.49	1.05E-01	1.49
0.078	3.97E-02	1.66	9.15E-02	1.63	1.75E-02	1.70	6.10E-02	1.64
0.050	1.77E-02	1.82	4.04E-02	1.84	7.76E-03	1.84	2.70E-02	1.84
0.036	9.52E-03	1.92	2.17E-02	1.93	4.15E-03	1.93	1.44E-02	1.93
0.026	4.82E-03	1.95	1.10E-02	1.95	2.10E-03	1.95	7.31E-03	1.95
0.017	2.07E-03	1.97	4.71E-03	1.97	8.97E-04	1.98	3.14E-03	1.97

Tabelle 3.11: Relative Fehler für K und H (diskreten Weingartenabbildung(S^*)) auf einem Ellipsoid.

h	Err_2^{SK}	EOC	Err_{∞}^{SK}	EOC	Err_2^{SH}	EOC	Err_{∞}^{SH}	EOC
0.25	3.22E-01		6.03E-01		1.61E-01		4.38E-01	
0.18	2.33E-01	0.98	4.65E-01	0.79	1.12E-01	1.09	3.27E-01	0.88
0.11	1.26E-01	1.25	2.63E-01	1.16	5.77E-02	1.35	1.79E-01	1.22
0.078	7.60E-02	1.52	1.66E-01	1.38	3.41E-02	1.58	1.12E-01	1.43
0.050	3.54E-02	1.72	7.91E-02	1.67	1.56E-02	1.76	5.29E-02	1.69
0.036	1.94E-02	1.85	6.26E-02	0.72	8.50E-03	1.88	4.72E-02	0.35
0.026	1.00E-02	1.91	6.12E-02	0.06	4.35E-03	1.92	4.60E-02	0.08
0.017	4.36E-03	1.93	5.93E-02	0.07	1.89E-03	1.95	4.34E-02	0.13

Tabelle 3.12: Relative Fehler für K und H (diskreten Weingartenabbildung mit gemittelten Normalen (S^*AvN)) auf einem Ellipsoid.

h	Err_2^{GB}	EOC	Err_{∞}^{GB}	EOC	Err_2^{LX}	EOC	Err_{∞}^{LX}	EOC
0.25	6.06E-02		5.86E-02		3.77E-02		1.32E-01	
0.18	3.04E-02	2.08	5.53E-02	0.18	2.25E-02	1.56	8.20E-02	1.44
0.11	1.17E-02	1.93	5.36E-02	0.06	1.04E-02	1.57	3.54E-02	1.71
0.078	6.49E-03	1.79	5.17E-02	0.11	5.89E-03	1.71	1.98E-02	1.75
0.050	3.08E-03	1.68	5.12E-02	0.02	2.61E-03	1.83	1.71E-02	0.33
0.036	1.84E-03	1.59	5.22E-02	-0.06	1.41E-03	1.91	1.65E-02	0.12
0.026	1.12E-03	1.43	5.19E-02	0.02	7.27E-04	1.89	1.62E-02	0.04
0.017	6.24E-04	1.36	5.35E-02	-0.07	3.22E-04	1.90	1.57E-02	0.08

Tabelle 3.13: Relative Fehler für K (Gauß-Bonnet-Operator(GB)) und H (Krümmungsvektor(LX)) auf einem Ellipsoid.

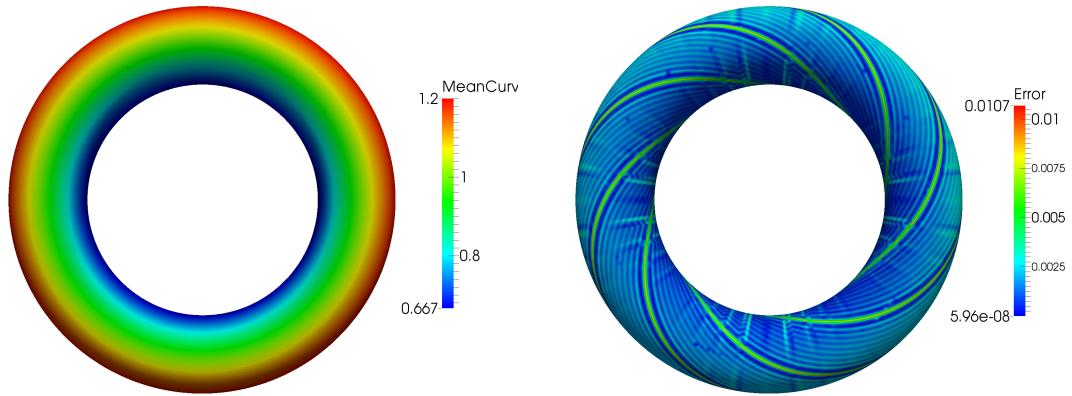


Abbildung 3.3: Links: Mittlere Krümmung H . Rechts: Lokaler absoluter Fehler für die Bestimmung von H über die Weingartenabbildung mit gemittelten Normalen (3.18). Das Gitter hat 24640 DOFs ($h \approx 0.06$). Ab dieser Gitterauflösung fängt die Konvergenzrate an stark zu stagnieren. Deutlich sind wieder die Verdrillungsstrukturen des Torus zu sehen.

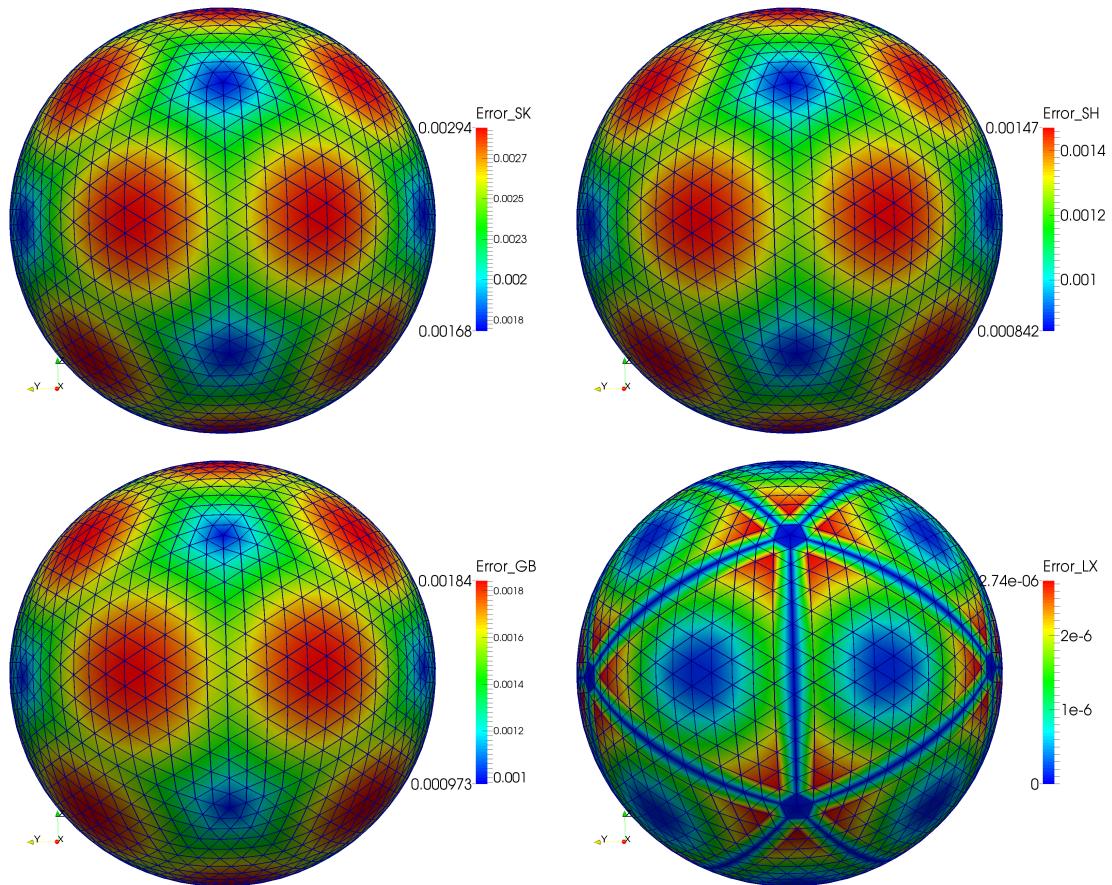


Abbildung 3.4: Absolute lokale Fehler für die Gaußsche Krümmung (links) und mittlere Krümmung (rechts) auf der Sphäre ermittelt aus den Eigenwerten der diskreten Weingartenabbildung (oben), dem Gauß-Bonnet-Operator (unten links) bzw. dem Krümmungsvektor (unten rechts). (1962 DOFs, $h \approx 0.11$)

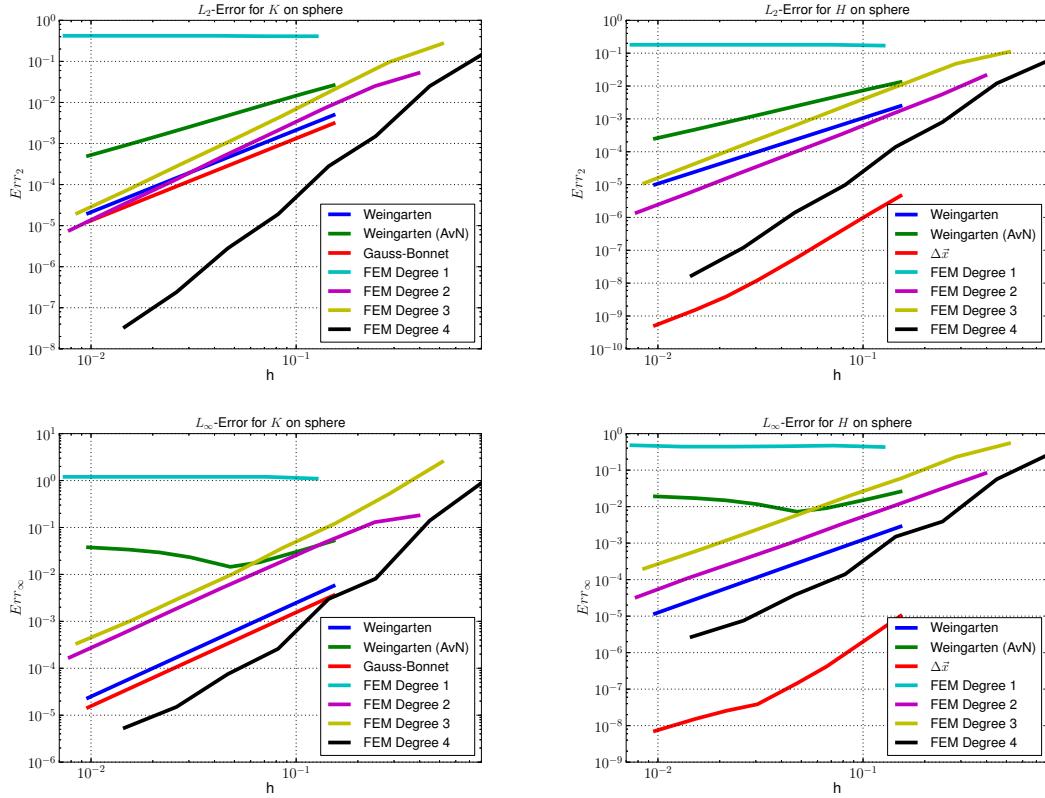


Abbildung 3.5: Log-Log-Plot der relativen diskreten L_2 -Fehler (oben) und Maximumsfehler (unten) für die Gaußsche Krümmung (links) und mittlere Krümmung (rechts) auf der Sphäre.

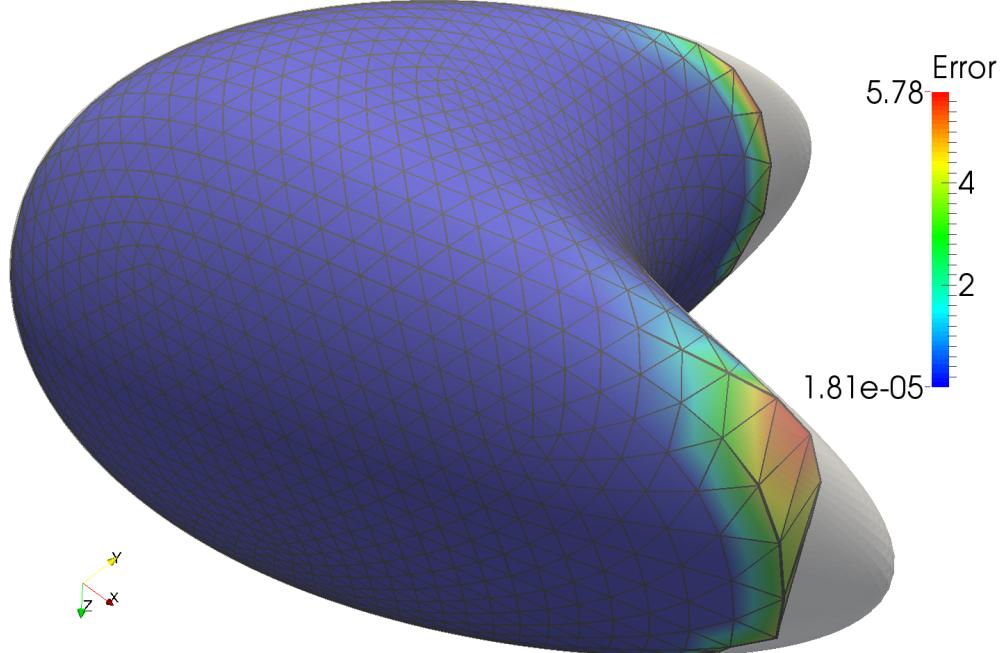


Abbildung 3.6: Das Gitter mit 1962 DOFs ($h \approx 0.34$) löst die beiden Wölbungen mit starker Krümmung nicht auf. Der Fehler (hier für K (Weingarten)) ist dort am größten. Zum Vergleich ist ein Gitter mit 249642 DOFs ($h \approx 0.04$) halbtransparent dargestellt.

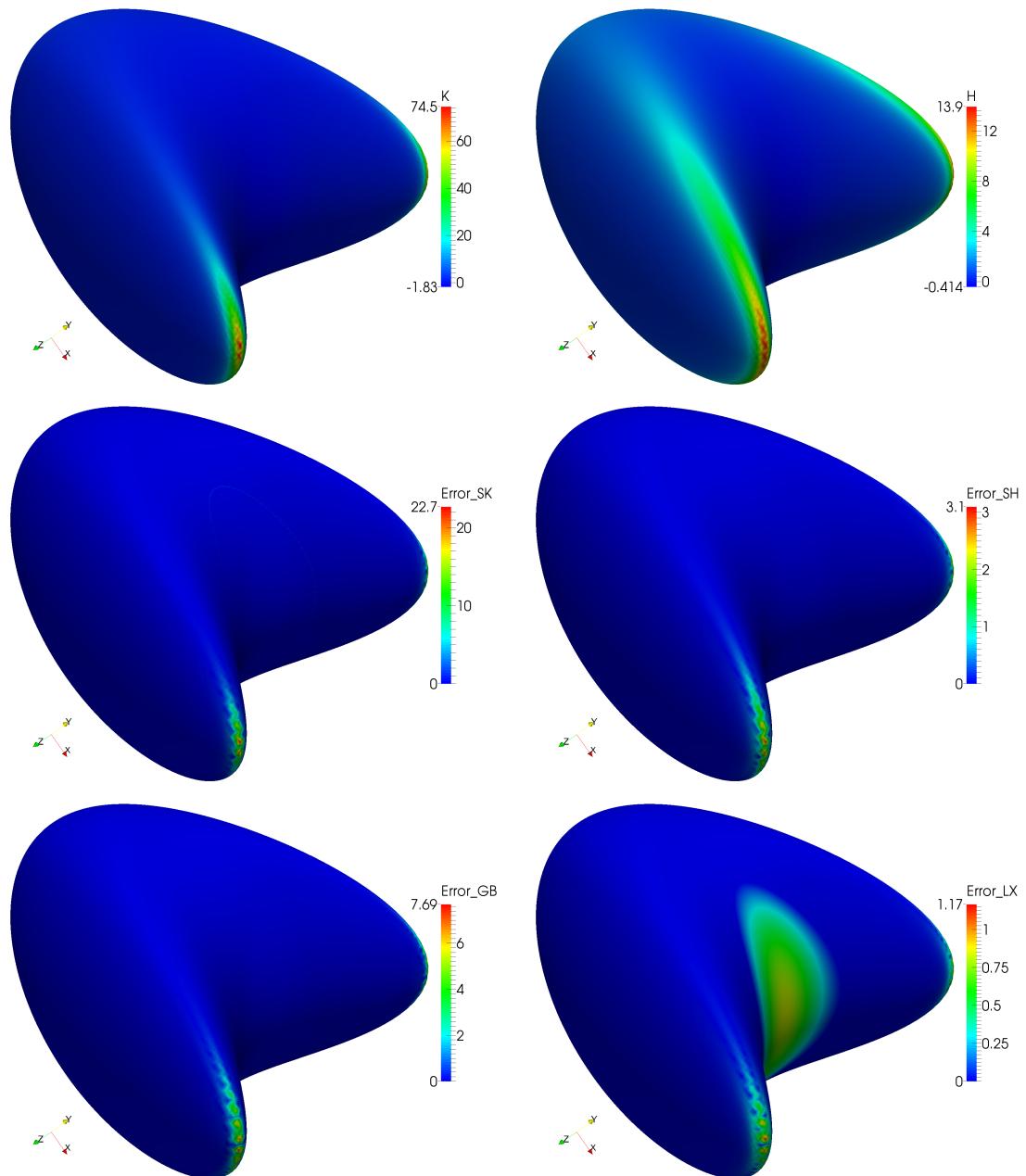


Abbildung 3.7: Absolute lokale Fehler für die Gaußsche Krümmung (links) und mittlere Krümmung (rechts) auf einer quadratischen Oberfläche ermittelt aus den Eigenwerten der diskreten Weingartenabbildung (Mitte), dem Gauß-Bonnet-Operator (unten links) bzw. dem Krümmungsvektor (unten rechts). (249642 DOFs, $h \approx 0.04$)

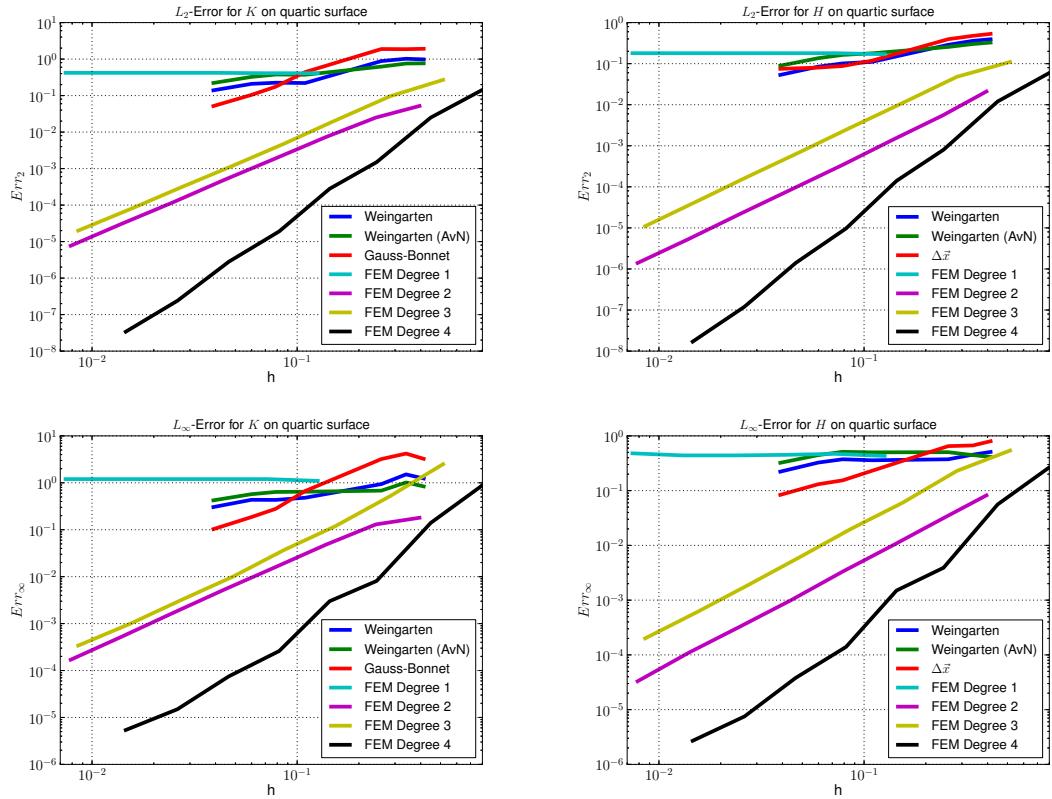


Abbildung 3.8: Log-Log-Plot der relativen diskreten L_2 -Fehler (oben) und Maximumsfehler (unten) für die Gaußsche Krümmung (links) und mittlere Krümmung (rechts) auf einer quadratischen Oberfläche.

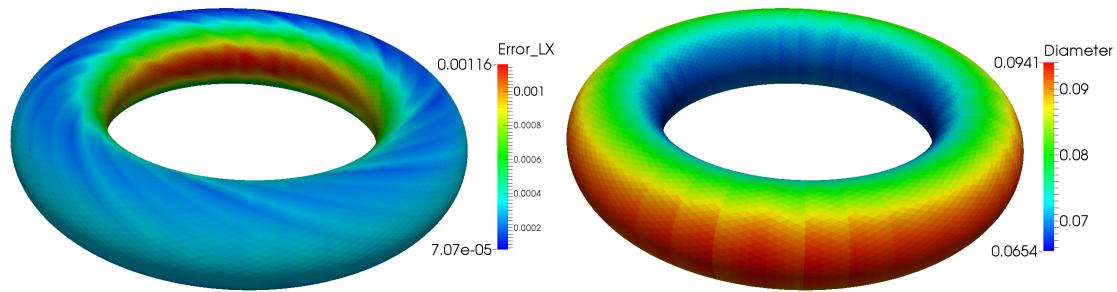


Abbildung 3.9: Absolute lokale Fehler für die mittlere Krümmung berechnet aus dem Krümmungsvektor (links) und die Umkreisdurchmesser der Dreieckselemente (rechts).

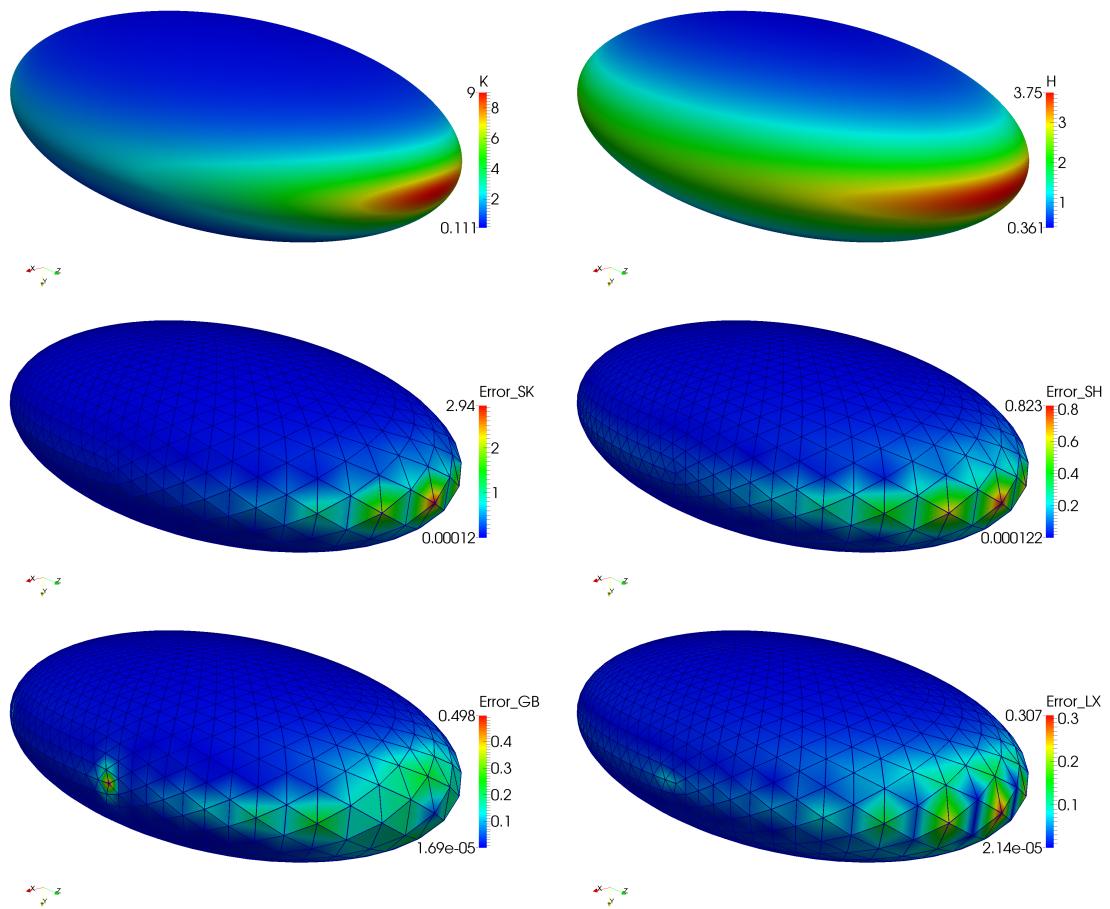


Abbildung 3.10: Absolute lokale Fehler für die Gaußsche Krümmung (links) und mittlere Krümmung (rechts) auf einem Ellipsoid ermittelt aus den Eigenwerten der diskreten Weingartenabbildung (Mitte), dem Gauß-Bonnet-Operator (unten links) bzw. dem Krümmungsvektor (unten rechts). (1962 DOFs, $h \approx 0.18$)

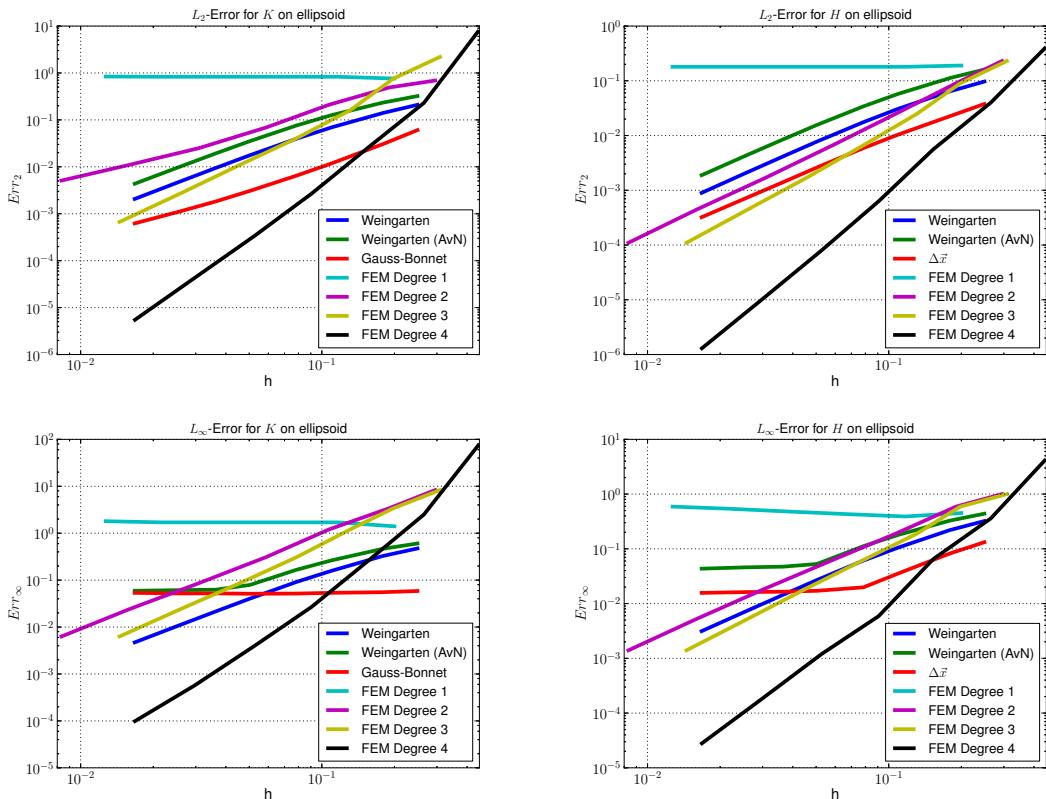


Abbildung 3.11: Log-Log-Plot der relativen diskreten L_2 -Fehler (oben) und Maximumsfehler (unten) für die Gaußsche Krümmung (links) und mittlere Krümmung (rechts) auf einem Ellipsoid.

4 Fazit und Ausblicke

Wir haben nun einen kleinen Einblick in die Welt des Diskreten Äußeren Kalküls bekommen. Innerhalb des Rechnens mit Differentialformen behält das DEC deren Leichtigkeit bei, denn es werden keine Karten herangezogen auf denen gerechnet wird, sondern es wird direkt im (flachen) Ambienterraum gearbeitet und das ohne das sonst übliche „Nachkorrigieren“ der dortigen Differentialoperatoren durch Projektionen oder ähnlichem. Die diskrete Metrik der Mannigfaltigkeit ergibt sich ganz natürlich aus der Geometrie des zugehörigen Simplizialkomplexes. Somit gelten die DEC-hergeleiteten Operatoren immer in der Formulierung, unabhängig von der kontinuierlichen Metrik. Auch dass es möglich ist direkt das Differentialkalkül der äußeren Algebra zu nutzen ist sehr angenehm, denn es macht zum Beispiel für den Laplace-Beltrami-Operator schon einen Unterschied, ob es

$$\Delta_B = \frac{1}{\sqrt{|\det g|}} \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x^j} \left(g^{ij} \sqrt{|\det g|} \frac{\partial}{\partial x^i} \right) \quad (4.1)$$

oder

$$\Delta_B = * \mathbf{d} * \mathbf{d} \quad (4.2)$$

zu diskretisieren gilt, obwohl beides der gleiche Operator ist. Ganz abgesehen von der Komplexität der Ausdrücke, ist beim Ersten die Metrik schon festgelegt, beim Zweiten noch nicht. Auch ist eine DEC-Formulierung unabhängig von der Dimension N des Ambiente Raumes, das heißt das es keinen Unterschied macht ob eine Oberfläche in einem dreidimensionalen Raum oder einem 20-dimensionalen Raum eingebettet ist. Skalarfelder bleiben weiterhin eindimensional und Vektorfelder n -dimensional. Nur der Speicher- und Auswertungsaufwand wird linear steigen. Die Rechenkosten ist ein zusätzliches Argument, welches für das DEC spricht wie wir im Anwendungsteil sehen konnten. Hier konnte mit vergleichsweisen kleinem Aufwand gute Ergebnisse in der Berechnung der Krümmungen erzielt werden.

Wir haben uns hier vor allem auf das diskretisieren der linearen Operatoren $*$ und \mathbf{d} beschränkt. Für einen vollen Satz von Operatoren, mit denen wir alle üblichen Gleichungen für Differentialformen im Diskreten berechnen können, werden noch das Dach-Produkt \wedge und die Übersetzungsismorphismen \flat und \sharp benötigt.

Eines der größten Probleme mit denen wir in dieser Arbeit konfrontiert waren, ist die Wohlzentriertheit des Primärgitters bezüglich des Umkreismittelpunktes. Das ist eine Anforderung, die in dieser Art und Weise in zukünftigen Arbeiten nicht haltbar ist. Ein Ausweg bietet hierbei die schon angesprochene baryzentrische Wohlzentriertheit. Hierbei ist jedes Simplex wohlzentriert und wir erhalten immer ein baryzentrischen Dualgitter. Für die äußere Ableitung spielt das keine Rolle, jedoch muss der diskrete Hodge-Stern-Operator neu formuliert werden, da hier die Orthogonalität der Simplexe zu ihren dualen Ketten nicht mehr ausgenutzt werden kann. Für Ecken und Volumenformen ändert sich freilich nichts, aber für die Kanten wäre es ein Ansatz nur über den „orthogonalen Anteil“ der dualen Form zu integrieren. Denn es gilt $dx^2 = \sin(\gamma_i) d\xi$, wobei (x^1, x^2) die orthogonalen Koordinaten sind, bei der $\frac{\partial}{\partial x^1}$ in Richtung der Kante σ^1 zeigt, ξ die Koordinate entlang $*\sigma^1 \cap \sigma_i^2$ ist und γ_i die Winkel zwischen σ^1 und den elementaren

Dualkanten $\star\sigma^1 \cap \sigma_i^2 = \pm [c(\sigma^1), c(\sigma_i^2)]$ sind. Somit kann man sich leicht überlegen, dass für eine diskrete Form $\alpha \in \Omega_d^1(K)$

$$\langle * \alpha, \star \sigma^1 \rangle = \frac{\sin(\gamma_1) |\star \sigma^1 \cap \sigma_1^2| + \sin(\gamma_2) |\star \sigma^1 \cap \sigma_2^2|}{|\sigma^1|} \langle \alpha, \sigma^1 \rangle \quad (4.3)$$

den Hodge-Stern-Operator in dem von uns verwendeten Sinne für uniforme Gitter approximiert. Dieses gilt dann für jeglichen Wohlzentriertheitsbegriff, nicht nur für den baryzentrischen oder bzgl. des Umkreismittelpunktes.

Interessant wäre auch eine Approximation der Oberfläche besser als nur linear, z.B. durch diverse Spline-Ansätze, und deren Auswirkung auf das Konvergenzverhalten und Stabilität bei DEC-Problemen. Alleine schon durch Differenzierbarkeit des zugrundeliegenden diskreten Raumes für den resultierenden (quasiabstrakten) Simplizialkomplex könnten die Tangentialräume an jeden beliebigen Punkt zweifelsfrei definiert werden. Das wiederum hätte große Vorteile für die Definition der diskreten Flat- und Sharp-Operatoren und der Interpolation von Vektorfeldern.

Die Behandlung von Randbedingungen stellt ebenfalls noch eine große Herausforderung in zukünftigen Arbeiten dar.

Auch das Lösen von höher dimensionalen Problemen ist denkbar. Zum Beispiel die Behandlung von vierdimensionalen Problemen (Raumzeit), wie sie in der Astrophysik vorkommen. Dabei wäre zu überlegen (wie bei allen raumzeitartigen Formulierungen) ob die Zeit „kontravariant herausgeholt“ oder mit zur raumzeit-gekrümmten Mannigfaltigkeit gehören sollte. Bei letzterem wären Simplizes eher unpraktisch, da wir gerade Schnitte in der Zeit haben möchten. Hier wären entsprechende Hyperprismen (mit gleichlangen Kanten in der Zeitrichtung) wesentlich sinnvoller.

Das Potential eines allgemeinen DECs ist enorm und da der Modus Operandi inzwischen klar ist, lassen sich unzählige Modifikationen und Anwendungsmöglichkeiten finden, so dass es eine Freude sein wird zu verfolgen welche Wege das noch in den Kinderschuhen steckende Diskrete Äußere Kalkül gehen wird.

5 Appendix

5.1 Häufige Bezeichner

N	Dimension des Ambienteraumes \mathbb{R}^N
n	Dimension der Mannigfaltigkeit
σ^p	p -Simplex
K	Simplizialkomplex
L	abstrakter Simplizialkomplex
$ K $	Polytop von K ($n = 2$: Polyeder)
$\pi : K \rightarrow L $	„Klebeabbildung“ mit $\pi(\sigma) \in L$ für $\sigma \in K$.
$K^{(p)}$	p -Skelett von K
$\pi : \mathbb{R}^N \rightarrow T_{\vec{x}} M$	Projektion eines \mathbb{R}^N -Vektors in den Tangentialraum im Punkt $\vec{x} \in M$
$ \sigma^p $	p -Volumen von σ^p
N_{σ^p}	Anzahl aller p -Simplizes in K
μ, dA	Volumenform $\sqrt{ \det g } dx \wedge dy = *1 \in \Omega^2(M)$
∇	Oberflächen Gradient $\nabla_M = \sharp \circ \mathbf{d} = (I - \vec{\nu} \vec{\nu}^T) \nabla_{\mathbb{R}^3}$
$\nabla_{\mathbb{R}^3}$	gewöhnlicher \mathbb{R}^3 -Gradient
$C^\infty(M)$	Raum der glatten Funktionen auf M
$\mathcal{V}^\infty(M)$	Raum der glatten Tangentialvektorfelder auf M
m_v	Anzahl der Dreiecke im 1-Ring um $v \in K^{(0)}$
1-Ring	eines Knoten sind alle Dreiecke, die diesen Knoten besitzen

5.2 Algorithmen

5.2.1 Element-Knotenkräfte

Berechnung der Knotenkräfte $\text{Force} \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ für ein Element $T \in K^{(2)}$:

```

for all v in T:
    T <-> [v,v0,v1]

    E0 = X(v0) - X(v)
    l0 = length(E0)
    forceLength = d * (l0/lRef - k)

    E1 = X(v1) - X(v)
    l1 = length(E1)
    forceAngle = (d - 1) * ((E0.E1) / (l0*l1) - c);

    Force(v) += project( (forceLength + forceAngle)*(E0/l0)
                           + forceAngle *(E1/l1) )

```

Parameter $c, d, k \in \mathbb{R}$, Koordinatenabbildung $X: \sigma^0 \mapsto \vec{x} \in M \subset \mathbb{R}^3$ und Tangentialprojektion $\text{project}: \mathbb{R}^3 \rightarrow T_p M \subset \mathbb{R}^3$ sind (approximativ oder exakt) gegeben.

Zu Beachten ist hierbei, dass die Kantenkraft `forceLength` nur auf einem Knoten aufgetragen wird. Der andere Knoten, der ebenfalls zu dieser Kante gehört, bekommt die gleiche Kantenkraft aufdatiert, wenn die Knotenkräfte auf dem 2. Dreieckelement, das sich diese Kante teilt, berechnet werden.

5.2.2 Laplace-Beltrami-Operator

Berechnung der Elementmatrix $\mathbf{AT} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ für das Dreieckelement $T \in K^{(2)}$:

```
for all k in {0,1,2}:
  for all l in {k+1,k+2} mod 3:
    C = T.dualLength(k,l) / T.length(k,l)
    AT(k,k) -= C
    AT(k,l) += C
```

Wobei $T.length(k,l)$ bzw. $T.dualLength(k,l)$ die Länge von $[v_k^T, v_l^T]$ bzw. dessen Dualkante eingeschränkt auf T ist.

5.2.3 Gradient

Berechnung der q -ten Elementmatrix $\mathbf{AT} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ für das Dreieckelement $T \in K^{(2)}$:

```
for all k in {0,1,2}:
  vol = T.dualVolume(k)
  for all l in {k+1,k+2} mod 3:
    C = vol * (T.Grad(l)) [q]
    AT(k,k) -= C
    AT(k,l) += C
```

Wobei $T.dualVolume(k)$ das Volumen der Voronoi-Zelle der Ecke v_k eingeschränkt auf T ist und $T.Grad(l)$ der von AMDiS bereitgestellte Gradient der linearen Ansatzfunktion zu v_l auf dem Element.

5.2.4 Gauß-Bonnet-Operator

Aufstellung des Elementvektors $\mathbf{bT} \in \mathbb{R}^3$ für das Dreieckelement $T \in K^{(2)}$:

```
for all k in {0,1,2}:
  bT(k) += 2 * Pi / mv(T.globalIndex(k))
  for all l in {k+1,k+2} mod 3:
    bT(k) -= atan2(2 * T.dualLength(k,l), T.length(k,l))
```

Wobei $T.length(k,l)$ bzw. $T.dualLength(k,l)$ die Länge von $[v_k^T, v_l^T]$ bzw. dessen Dualkante eingeschränkt auf T ist. $mv(i) \in \mathbb{N}$ gibt die Anzahl der Dreieckelemente des 1-Ringes um den Knoten v_i an. Durch $T.globalIndex(k)$ erhalten wir den globalen Index zum lokalen Index k auf T .

5.3 Krümmungen für impliziten Oberflächen

Es sei $\varphi \in C^2(\mathbb{R}^3)$ gegeben mit $M = \{\vec{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \varphi(\vec{x}) = 0\}$. Die Gaußkrümmung K und die Mittlere Krümmung H von M berechnet sich im \mathbb{R}^3 wie folgt (siehe [Gol05]):

$$K = \frac{\nabla^T \varphi \cdot \mathcal{H}^*[\varphi] \cdot \nabla \varphi}{\|\nabla \varphi\|_2^4} = -\frac{\det \begin{bmatrix} \mathcal{H}[\varphi] & \nabla \varphi \\ \nabla^T \varphi & 0 \end{bmatrix}}{\|\nabla \varphi\|_2^4} \quad (5.1)$$

$$H = \frac{1}{2} \nabla \cdot \frac{\nabla \varphi}{\|\nabla \varphi\|} = \frac{\|\nabla \varphi\|_2^2 \cdot \text{Trace}(\mathcal{H}[\varphi]) - \nabla^T \varphi \cdot \mathcal{H}[\varphi] \cdot \nabla \varphi}{2 \cdot \|\nabla \varphi\|_2^3} \quad (5.2)$$

wobei $\mathcal{H}^*[\varphi]$ die Adjunkte¹ der Hesse-Matrix $\mathcal{H}[\varphi]$ ist. Alle hier verwendeten Differentialoperatoren sind keine Oberflächenoperatoren sondern die aus dem flachen \mathbb{R}^3 , dass heißt z.B. $\nabla = \nabla_{\mathbb{R}^3}$.

5.4 Ausgewählte Oberflächen

5.4.1 Einheitssphäre

Parametrisierung

$$\vec{x} : (0, \pi) \times [0, 2\pi) \rightarrow \mathbb{S}^2 \subset \mathbb{R}^3$$

$$(u, v) \mapsto \begin{bmatrix} x(u, v) \\ y(u, v) \\ z(u, v) \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} \sin u \cos v \\ \sin u \sin v \\ \cos u \end{bmatrix} \quad (5.3)$$

u heißt Breitengrad und v Längengrad.

Riemannsche Metrik

$$\frac{\partial}{\partial u} \vec{x} = \begin{bmatrix} \cos u \cos v \\ \cos u \sin v \\ -\sin u \end{bmatrix} \perp_{\mathbb{R}^3} \quad \frac{\partial}{\partial v} \vec{x} = \begin{bmatrix} -\sin u \sin v \\ \sin u \cos v \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

$$\Rightarrow g = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sin^2 u \end{bmatrix} =: \text{diag}(g_u, g_v) \quad (5.5)$$

Laplace-Beltrami

$$\Delta_B \stackrel{(2.98)}{=} \sqrt{g^u g^v} \left(\frac{\partial}{\partial u} \left(\sqrt{g^u g_v} \frac{\partial}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\sqrt{g^u g^v} \frac{\partial}{\partial v} \right) \right) \quad (5.6)$$

$$= \frac{1}{\sin u} \left(\frac{\partial}{\partial u} \left(\sin u \frac{\partial}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{1}{\sin u} \frac{\partial}{\partial v} \right) \right) \quad (5.7)$$

$$= \cot u \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{1}{\sin^2 u} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \quad (5.8)$$

¹nicht Adjungierte!

Krümmungen

$$K \equiv 1 \quad (5.9)$$

$$H \equiv 1 \quad (5.10)$$

5.4.2 Torus

Parametrisierung

$$\vec{x} : [0, 2\pi)^2 \rightarrow \mathbb{T}^2 \subset \mathbb{R}^3$$

$$(t, p) \mapsto \begin{bmatrix} x(t, p) \\ y(t, p) \\ z(t, p) \end{bmatrix} := R \begin{bmatrix} \cos t \\ \sin t \\ 0 \end{bmatrix} + r \begin{bmatrix} \cos t \cos p \\ \sin t \cos p \\ \sin p \end{bmatrix} \quad (5.11)$$

wobei alle Punkte des Torus von der Kreislinie mit Radius R den Abstand $r < R$ haben, das heißt r ist der Radius der Torusröhre.

Nützliche Identitäten

$$\left(R - \sqrt{x^2 + y^2} \right)^2 + z^2 = r^2 \quad (R + r \cos p)^2 = x^2 + y^2 \quad (5.12)$$

$$\sin p = \frac{z}{r} \quad \cos p = \frac{1}{r} \left(\sqrt{x^2 + y^2} - R \right) \quad (5.13)$$

$$\sin t = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \quad \cos t = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \quad (5.14)$$

Riemannsche Metrik

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{x} = R \begin{bmatrix} -\sin t \\ \cos t \\ 0 \end{bmatrix} + r \begin{bmatrix} -\sin t \cos p \\ \cos t \cos p \\ 0 \end{bmatrix} \perp_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial}{\partial p} \vec{x} = r \begin{bmatrix} -\cos t \sin p \\ -\sin t \sin p \\ \cos p \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

$$\Rightarrow g = \begin{bmatrix} (R + r \cos p)^2 & 0 \\ 0 & r^2 \end{bmatrix} =: \text{diag}(g_t, g_p) \quad (5.16)$$

Laplace-Beltrami

$$\Delta_B \stackrel{(2.98)}{=} \sqrt{g^t g^p} \left(\frac{\partial}{\partial t} \left(\sqrt{g^t g_p} \frac{\partial}{\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial p} \left(\sqrt{g_t g^p} \frac{\partial}{\partial p} \right) \right) \quad (5.17)$$

$$= \frac{1}{r(R + r \cos p)} \left(\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{r}{R + r \cos p} \frac{\partial}{\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{R + r \cos p}{r} \frac{\partial}{\partial p} \right) \right) \quad (5.18)$$

$$= \frac{1}{(R + r \cos p)^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} - \frac{\sin p}{r(R + r \cos p)} \frac{\partial}{\partial p} \quad (5.19)$$

Normalen

$$\vec{\nu} = \begin{bmatrix} \cos t \cos p \\ \sin t \cos p \\ \sin p \end{bmatrix} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} x(1 - R/\sqrt{x^2 + y^2}) \\ y(1 - R/\sqrt{x^2 + y^2}) \\ z \end{bmatrix} \quad (5.20)$$

Krümmungen

$$K = \frac{\cos p}{r(R + r \cos p)} = \frac{1}{r^2} \left(1 - \frac{R}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) \quad (5.21)$$

$$H = \frac{R + 2r \cos p}{2r(R + r \cos p)} = \frac{1}{2r} \left(2 - \frac{R}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) \quad (5.22)$$

5.4.3 Quartische Oberfläche

Level-Set-Funktion

$$\varphi(x, y, z) := \frac{1}{2} ((x - z^2)^2 + (y - z^2)^2 + z^2 - 1) \quad (5.23)$$

$$\nabla \varphi(x, y, z) = \begin{bmatrix} x - z^2 \\ y - z^2 \\ z + 2z(2z^2 - x - y) \end{bmatrix} \quad (5.24)$$

$$\mathcal{H}[\varphi] \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2z \\ 0 & 1 & -2z \\ -2z & -2z & 12z^2 - 2x - 2y + 1 \end{bmatrix} \quad (5.25)$$

Krümmungsgrößen

$$K(x, y, z) = -\frac{1 + 2x - 2x^2 + 2y - 2y^2 + 2(-3 + x + y)z^2}{1 - 4(-2 + x + x^2 + y - 2xy + y^2)z^2} \quad (5.26)$$

$$H(x, y, z) = -\frac{x - x^2 + y - y^2 + (-7 + 3x + 3y)z^2}{1 - 4(-2 + x + x^2 + y - 2xy + y^2)z^2} \quad (5.27)$$

5.4.4 Ellipsoid

Level-Set-Funktion

$$\varphi(x, y, z) := \frac{1}{2} ((3x)^2 + (6y)^2 + (2z)^2 - 9) \quad (5.28)$$

$$\nabla \varphi(x, y, z) = [9x, 36y, 4z]^T \quad (5.29)$$

$$\mathcal{H}[\varphi] \equiv \begin{bmatrix} 9 & 0 & 0 \\ 0 & 36 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \quad (5.30)$$

Krümmungsgrößen

$$K(x, y, z) = \frac{11664}{(81 + 972y^2 - 20z^2)^2} \quad (5.31)$$

$$H(x, y, z) = \frac{36(45 + 54y^2 - 10z^2)}{(81 + 972y^2 - 20z^2)^{3/2}} \quad (5.32)$$

Literaturverzeichnis

- [AD09] Marino Arroyo and Antonio DeSimone. Relaxation dynamics of fluid membranes. *Physical Review E*, 79(3):031915+, March 2009.
- [AMR88] R. Abraham, J.E. Marsden, and T.S. Ratiu. *Manifolds, Tensor Analysis, and Applications*. Number Bd. 75 in Applied Mathematical Sciences. Springer New York, 1988.
- [BG88] M. Berger and B. Gostiaux. *Differential geometry: manifolds, curves, and surfaces*. Graduate texts in mathematics. Springer-Verlag, 1988.
- [Che84] B. Chen. *Total Mean Curvature and Submanifolds of Finite Type*. Pure Mathematics Series. World Scientific, 1984.
- [CX04] Long Chen and Jinchao Xu. Optimal Delaunay triangulations. *Journal of Computational Mathematics*, 22(2):299–308, 2004.
- [DFG99] Qiang Du, Vance Faber, and Max Gunzburger. Centroidal voronoi tessellations: Applications and algorithms. *SIAM Rev.*, 41(4):637–676, December 1999.
- [DHLM05] M. Desbrun, A. N. Hirani, M. Leok, and J. E. Marsden. Discrete Exterior Calculus. *ArXiv Mathematics e-prints*, August 2005.
- [DKT05] Mathieu Desbrun, Eva Kanso, and Yiying Tong. Discrete differential forms for computational modeling. In *ACM SIGGRAPH 2005 Courses*, SIGGRAPH '05, New York, NY, USA, 2005. ACM.
- [Eck09] M. Eckardt. *Cinema 4D R11: inklusive Module und BodyPaint 3D ; [3D-Modellierung, Texturierung, Animation und Rendern an einem durchgehenden Filmprojekt ; Einstieg in die Module und BodyPaint 3D ; auf CD: Demoversion von Cinema 4D R11 und alle Projekt-Dateien]*. mitp bei Redline. mitp-Verlag, 2009.
- [EH72] D. Jack Elzinga and Donald W. Hearn. The minimum covering sphere problem. *Management Science*, 19(1):96 – 104, 1972.
- [ES05] Sharif Elcott and Peter Schröder. Building your own dec at home. In *ACM SIGGRAPH 2005 Courses*, SIGGRAPH '05, New York, NY, USA, 2005. ACM.
- [Gol05] Ron Goldman. Curvature formulas for implicit curves and surfaces. *Computer Aided Geometric Design*, 22(7):632 – 658, 2005. Geometric Modelling and Differential Geometry.
- [Gut93] Martin H. Gutknecht. Variants of bicgstab for matrices with complex spectrum. *SIAM J. Sci. Comput.*, 14(5):1020–1033, September 1993.
- [Hei04] C.-J. Heine. Isoparametric finite element approximation of curvature on hypersurfaces. *Preprint Fak. f. Math. Phys. Univ. Freiburg*, (26), 2004.

- [Hir03] Anil Nirmal Hirani. *Discrete Exterior Calculus*. PhD thesis, California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA, 2003. AAI3086864.
- [Jän05] Klaus Jänich. *Vektoranalysis*. Springer-Lehrbuch. Springer, 2005.
- [KLY⁺08] M. Kimura, P. Laurençot, S. Yazaki, M. Beneš, E. Feireisl, and Univerzita Karlova. Matematicko fyzikální fakulta. *Topics in Mathematical Modeling*. Nečas Center for Mathematical Modeling: Lecture notes. Matfyzpress, 2008.
- [Kno13] M. Knorrer. *Numerische Mathematik: Eine beispielorientierte Einführung*. Mathematik-Studienhilfen. Carl Hanser Verlag GmbH & Company KG, 2013.
- [Lee97] John Marshall Lee. *Riemannian manifolds : an introduction to curvature*. Graduate Texts in mathematics. Springer, New York, 1997.
- [Lü05] Wolfgang Lück. *Algebraische Topologie: Homologie und Mannigfaltigkeiten*. Vieweg, 1 edition, 2005.
- [MDSB03] Mark Meyer, Mathieu Desbrun, Peter Schröder, and Alan H. Barr. Discrete differential-geometry operators for triangulated 2-manifolds. In Hans-Christian Hege and Konrad Polthier, editors, *Visualization and Mathematics III*, Mathematics and Visualization, pages 35–57. Springer Berlin Heidelberg, 2003.
- [MMP⁺11] P. Mullen, A. McKenzie, D. Pavlov, L. Durant, Y. Tong, E. Kanso, J.E. Marsden, and M. Desbrun. Discrete lie advection of differential forms. *Foundations of Computational Mathematics*, 11(2):131–149, 2011.
- [Mun84] J.R. Munkres. *Elements of Algebraic Topology*. Advanced book classics. Perseus Books, 1984.
- [NVW12] I. Nitschke, A. Voigt, and J. Wensch. A finite element approach to incompressible two-phase flow on manifolds. *Journal of Fluid Mechanics*, 708:418–438, 10 2012.
- [OF02] Stanley Osher and Ronald Fedkiw. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces (Applied Mathematical Sciences)*. Springer, 2003 edition, November 2002.
- [PCF⁺09] P Pathmanathan, J Cooper, A Fletcher, G Mirams, P Murray, J Osborne, J Pitt-Francis, A Walter, and S J Chapman. A computational study of discrete mechanical tissue models. *Physical Biology*, 6(3):036001, 2009.
- [Pra14] Simon Praetorius. AMDiS Tutorial. <https://fusionforge.zih.tu-dresden.de/plugins/mediawiki/wiki/amdis/index.php/Hauptseite#Tutorial>, 2014. [Online; accessed 08-May-2014].
- [PS06] Konrad Polthier and Markus Schmies. Straightest geodesics on polyhedral surfaces. In *ACM SIGGRAPH 2006 Courses*, SIGGRAPH ’06, pages 30–38, New York, NY, USA, 2006. ACM.
- [SAM68] Robert Sadourny, Akio Arakawa, and Yale Mintz. Integration of the nondivergent barotropic vorticity equation with an icosahedral-hexagonal grid for the sphere1. *Monthly Weather Review*, 96(6):351–356, June 1968.

- [SG09] Gerd Sußner and Gunther Greiner. Hexagonal delaunay triangulation. In *Proceedings, 18th International Meshing Roundtable*, pages 519–538. Springer, 2009.
- [Shi14] Theodore Shifrin. *DIFFERENTIAL GEOMETRY: A First Course in Curves and Surfaces*. University of Georgia, 2014.
- [SSSA00] Samik Sen, Siddhartha Sen, James C. Sexton, and David H. Adams. Geometric discretization scheme applied to the abelian chern-simons theory. *Phys. Rev. E*, 61:3174–3185, Mar 2000.
- [VHGR08] Evan VanderZee, Anil N. Hirani, Damrong Guoy, and Edgar A. Ramos. Well-centered triangulation. *CoRR*, abs/0802.2108, 2008.
- [Whi57] H. Whitney. *Geometric Integration Theory*. Princeton mathematical series. University Press, 1957.
- [WV10] T. Witkowski and A. Voigt. A multi-mesh finite element method for Lagrange elements of arbitrary degree. *ArXiv e-prints*, May 2010.
- [Xu04] Guoliang Xu. Discrete laplace–beltrami operators and their convergence. *Computer Aided Geometric Design*, 21(8):767 – 784, 2004. Geometric Modeling and Processing 2004.