

# **diplomarbeit**

Ingo Nitschke

21. Februar 2014



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Äußeres Kalkül</b>	<b>5</b>
1.1	Einleitung . . . . .	5
1.2	Äußere Algebra . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Diskrete Mannigfaltigkeit</b>	<b>7</b>
2.1	Gittergenerierung für Oberflächen . . . . .	7
2.1.1	Mechanisches Modell und dessen Diskretisierung . . . . .	8
2.2	Implizit gegebene Oberflächen . . . . .	12
2.2.1	Numerische Projektion . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Appendix</b>	<b>15</b>
3.1	Algorithmen . . . . .	15
3.1.1	Element-Knotenkräfte . . . . .	15



# 1 Äußeres Kalkül

## 1.1 Einleitung

blub blub tensormachineenbild einfügen

## 1.2 Äußere Algebra

def sdf

sadsa

## 2 Diskrete Mannigfaltigkeit

### 2.1 Gittergenerierung für Oberflächen

**Zielsetzung.** Die Wohlzentriertheit eines Gitters ist Pflicht, da ohne sie kein brauchbares duales Gitter (Voronogitter) erzeugt werden kann. Diese zur Triangulierung duale Gebietsdiskretisierung wird aber benötigt um zum Beispiel ein diskreten Hodge-Stern-Operator sinnvoll zu entwickeln. Bei einem nicht wohlzentrierten Dreieck liegt der Voronoi-Knoten  $\star\sigma^2$  nicht im Dreieck  $\sigma^2$ . Das Problem dabei ist, dass sich die Werte auf  $\star\sigma^2$  und  $\sigma^2$  nur um einen metrischen Faktor<sup>1</sup> 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 Dreieckselementen. Für eine nicht planare Triangulierung mag ein 1-Ring aus vier Flächenelementen gerade noch funktionieren, da die Innenwinkelsumme der inneren Kanten weniger als  $2\pi$  ist. Im planaren Fall erhalten wir aber für eine optimale<sup>2</sup> Triangulierung Winkel von  $\frac{\pi}{2}$  und somit nur Wohlzentriertheit im Limes<sup>3</sup>. Damit sind oft genutzte lokale und globale Verfeinerungsstrategien 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].

Im Folgenden wollen wir davon ausgehen, dass zu mindest 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 Simplicialkomplexes soll dabei erhalten bleiben. Nur die Knotenpunkte werden neu arrangiert. 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

---

<sup>1</sup>hier  $|\sigma^2|$  bzw. dessen Reziproke

<sup>2</sup>bzgl. der maximalen Winkel

<sup>3</sup>für planare äquidistante Gitter kann diese schwächere Restriktion dennoch sinnvoll sein, da somit bekannte Differenzenschematas entstehen können

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 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 Simplicialkomplex 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<sup>+</sup>09].

### 2.1.1 Mechanisches Modell und dessen Diskretisierung

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

$$\gamma \frac{d\vec{x}_i}{dt} = \vec{F}(\vec{x}_i) \quad (2.1)$$

Diese gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung beschreibt eine Viskosedämpfung am Knoten  $\sigma_i^0$  mit Koordinaten  $\vec{x}_i \in X(M) \subset \mathbb{R}^3$  und Viskositätskoeffizient  $\gamma$ . Eine einfache Diskretisierung des Problems (2.1) ist das Explizite Eulerverfahren mit nachgeschalteter Projektion  $\pi : \mathbb{R}^3 \rightarrow X(M)$  um die Nebenbedingung  $\vec{x}_i \in X(M)$  zu erfüllen.

$$\vec{x}_i(t + \Delta t) = \pi \left( \vec{x}_i(t) + h\vec{F}_i \right) \quad (2.2)$$

wobei  $h := \frac{\Delta t}{\gamma}$  und  $\vec{F}_i := \vec{F}(\vec{x}_i(t))$ . Der Kraftvektor  $\vec{F}_i$  resultiert aus Interaktion mit den anderen Knoten. Im Overlapping-Sphere-Modell(OS) [PCF<sup>+</sup>09] sind das all die Knoten  $\sigma_j^0$ , die einen bestimmten Abstand zu  $\sigma_i^0$  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  $\pi$  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 nennenswerten besseren Resultaten, dafür wesentlich (linear) höheren Aufwand. 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 Simplicialkomplexes 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

$$\vec{F}_i = \sum_{\sigma^1 := [\sigma_j^0, \sigma_i^0] \succ \sigma_i^0} \frac{F_{\sigma_i^0 \prec \sigma^1}}{\|\vec{x}_j - \vec{x}_i\|} (\vec{x}_j - \vec{x}_i) \quad (2.3)$$

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

$$F_{\sigma^0 \prec \sigma^1} = \sum_{\sigma^2 \succ \sigma^1} F_{\sigma^0 \prec \sigma^1 \prec \sigma^2} \quad (2.4)$$

Als praktisch erweist es sich außerdem die Kräfte dimensionslos zuhalten, da somit eventuell auftretende Parameter für unterschiedliche Ausgangsgitter annähernd gleich gewählt werden können. Die Schrittweite  $h$  in (2.2) hängt somit annähernd linear von der Gitterweite ab. Zu beachten ist hierbei, dass sich die Gitterweite, je nach Definition<sup>4</sup>, 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  $\sigma^1$  an, die für alle Knoten  $\sigma^0 \prec \sigma^1$  gleich ist.

$$F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}^L := F_{\sigma^1}^L := \frac{|\sigma^1|}{l^*} - k \quad (2.5)$$

mit  $k \in [0, 1]$ .  $l^*$  ist die Referenzlänge des Dreiecks  $T^*$ . Sie resultiert aus der Annahme, dass wir ein äquidistantes flache Triangulierung haben mit hexagonaler Struktur. Das heißt alle Dreiecke  $\sigma^2$  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  $N_{\sigma^2} = |\{\sigma^2 \in K\}|$

$$|T^*| = \frac{V(K)}{N_{\sigma^2}} \quad (2.6)$$

sowie unter Ausnutzung, dass  $T^*$  gleichseitig ist

$$|T^*| = \frac{l^* \sqrt{3}}{4} \quad (2.7)$$

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

$$l^* = 2 \sqrt{\frac{V(K)}{\sqrt{3} N_{\sigma^2}}} \quad (2.8)$$

---

<sup>4</sup>z.B. Maximum aller Umkreisradien

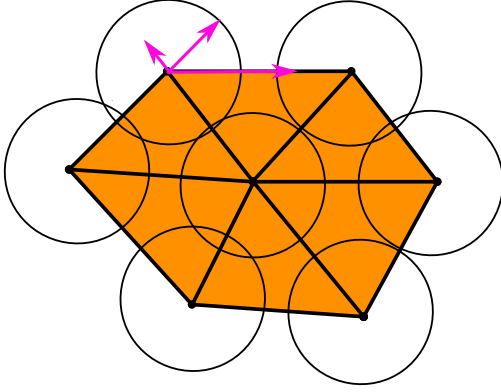


Abbildung 2.1: Kantenkräfte für an einem Knoten  $k = 1$ . Die eingezeichneten Radii entsprechen  $\frac{l^*}{2}$ .

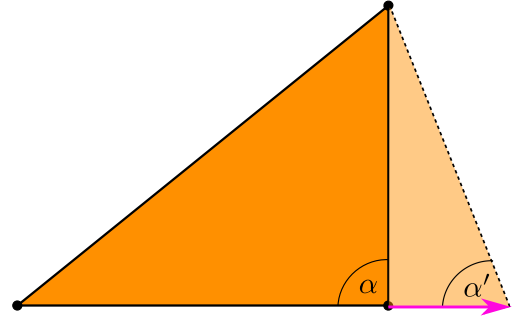


Abbildung 2.2: Eine Verschiebung des Knotens entlang einer Kante verändert den Winkel.

Für  $k = 1$  kann man sich das so vorstellen, dass die beiden Knoten einer Kante  $\sigma^1$  sich abstoßen falls  $|\sigma^1| < l^*$ , sich anziehen falls  $|\sigma^1| > l^*$  oder keine Kräfte wirken wenn  $|\sigma^1| = l^*$  gilt (siehe Abb. 2.1).  $k = 0$  würde für eine Gitter mit Rand und freien Randknoten<sup>5</sup> 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 Dreieckelementen befinden und zum anderen wo die Krümmung der Mannigfaltigkeit klein ist. Letzteres ist allerdings keine gute Eigenschaft, da gerade dort ein feineres Gitter vonnöten 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 (2.2) dadurch instabil wird. Stabilisierend wirkt sich aber das Zuaddieren des folgenden Kraftansatzes aus.

### Optimale Winkel

Ein weiterer heuristischer Ansatz bezieht sich direkt auf die inneren Winkel eines Dreieckselements. Wie in Abbildung 2.2 angedeutet bewirkt eine Verschiebung entlang der Kante eine Änderung des Winkels. Wird dabei, wie in Abbildung 2.2, die Kante länger, dann wird der Winkel an dem zuverschiebenden Knoten kleiner, et vice versa.

$$F_{\sigma^0 \prec \sigma_i^1 \prec \sigma^2}^A := \cos \angle(\vec{e}_0, \vec{e}_1) - c \quad (2.9)$$

$$= \frac{\vec{e}_0 \cdot \vec{e}_1}{\|\vec{e}_0\| \|\vec{e}_1\|} - c \quad (2.10)$$

$$\vec{e}_i := \vec{e}_{\sigma_i^1} = \vec{x}_{v_i} - \vec{x}_{\sigma^0} \quad (2.11)$$

$$(2.12)$$

<sup>5</sup>Randknoten dürfen auch nach innen wandern

mit  $i \in \{0, 1\}$  und  $c \in [-1, 1]$ .  $v_i$  ist also der Knoten, der mit  $\sigma^0$  die gemeinsame Kante  $\sigma_i^1$  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.

### Kombination der Kantenkräfte

Es hat sich gezeigt, dass (2.5) und (2.9) gerade auf komplizierteren Gebieten einzeln entweder nicht das gewünschte Resultat liefern oder instabil sind. Deshalb kombinieren wir die beiden Kräfte linear:

$$F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}^{\text{Gesamt}} := D \cdot F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}^L + (1 - D) \cdot F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}^A \quad (2.13)$$

mit  $D \in [0, 1]$ . Algorithmus 3.1.1 zeigt wie die resultierenden Kräfte auf einem Dreieckelement berechnet werden können. Um alle Knotenkräfte<sup>6</sup> zu erhalten müssen wir nur noch diese Element-Knotenkräfte aufassemblieren.

### Projektion der Kraftvektoren

Des Weiteren, wie im Algorithmus 3.1.1 zu sehen, wird der Kraftvektor  $\vec{F}_i$  in den Tangentialraum projiziert, das heißt

$$\vec{F}_{T_p M, i} = \vec{F}_i - (\vec{F}_i \cdot \vec{\nu}_i) \vec{\nu}_i \quad (2.14)$$

wobei der Normalenvektor  $\vec{\nu}_i$  am Knoten  $\sigma_i^0$  entweder als bekannt vorausgesetzt ist, über eine signierte Distanz Funktion  $\varphi$  ermittelt wird, also

$$\vec{\nu}_i = \frac{\nabla \varphi}{\|\nabla \varphi\|}(\vec{x}_i) \quad (2.15)$$

oder über die Elementnormalen approximiert wird

$$\vec{\nu}_i = \frac{1}{|\cup \sigma_i^0|} \sum_{\sigma^2 \succ \sigma_i^0} |\sigma^2| \cdot \vec{\nu}_{\sigma^2} \quad (2.16)$$

Somit kann im expliziten Eulerverfahren (2.2)  $\vec{F}_{T_p M, i}$  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. 2.3), zum anderen wird die Projektion in (2.2) oft iterativ gelöst (vgl. ??) und je weiter weg wir den Knoten von der Mannigfaltigkeit verschieben um so schlechter ist die Startnäherung für das iterative Verfahren.

---

<sup>6</sup>d.h.  $(\vec{F}_i)_{i=1, \dots, N_{\sigma^0}} \in (\mathbb{R}^3)^{N_{\sigma^0}}$

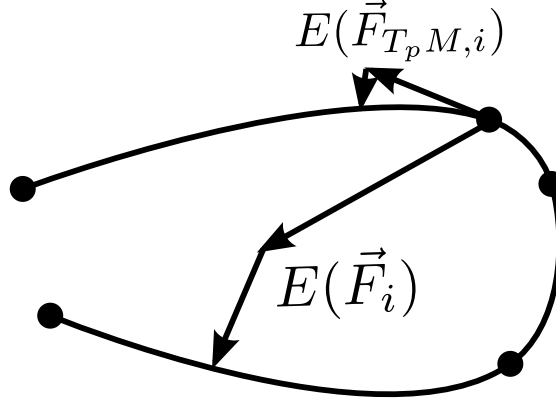


Abbildung 2.3: Eindimensionales Extrembeispiel für ein Schritt Euler-Explizit  $E$  (inkl. Nachprojektion  $\pi$ ) eines Knotens mit und ohne Vorprojektion des Kraftvektors  $\vec{F}_i$  zu  $\vec{F}_{T_p M, i}$ . Ohne Vorprojektion kann es zu einem unzulässigen Gitter kommen.

## 2.2 Implizit gegebene Oberflächen

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

$$X : (u, v) \mapsto X(u, v) \in \mathbb{R}^3 \quad (2.17)$$

gegeben, sondern über den 0-Level-Set einer signierten Distanzfunktion

$$\varphi = \pm \text{dist}(\cdot, M) = \pm \inf_{\vec{x} \in M} d(\cdot, \vec{x}) \quad (2.18)$$

mit einer beliebigen (ausreichend glatten) Metrik  $d$  im  $\mathbb{R}^3$ . Die 2-Mannigfaltigkeit ist dann definiert durch

$$M = \{\vec{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \varphi(\vec{x}) = 0\}. \quad (2.19)$$

Solche implizit beschriebenen Oberflächen liegen zum Beispiel bei 3D-Phasensfeldproblemen vor (z.B. Allen-Cahn-, Cahn-Hilliard- oder Phase-Field-Crystal-Modell). Die Distanzfunktion<sup>7</sup>  $\varphi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  ist dort gerade die Lösung dieser Probleme und das 0-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  $\mathbb{R}^3$ .

### 2.2.1 Numerische Projektion

Wenn bei einem Simplicialkomplex, 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

---

<sup>7</sup>auch Phasen- oder Ordnungsfunktion genannt

den Simplicialkomplex ist, dass die Knoten dort und auf dem abstrakten Simplicialkomplex übereinstimmen.

Gesucht ist also das

$$\operatorname{argmin}_{\vec{x} \in M} \|\vec{y} - \vec{x}\| \tag{2.20}$$

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

**Fazit.** dfsd



# 3 Appendix

## 3.1 Algorithmen

### 3.1.1 Element-Knotenkräfte

Berechnung der Knotenkräfte  $\text{Force} \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$  für ein Element:

```
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. Dreieckselement, das sich diese Kante teilt, berechnet werden.





# Abbildungsverzeichnis

2.1	Kantenkräfte für optimale Kantenlängen . . . . .	10
2.2	Winkeländerung durch Verschiebung . . . . .	10
2.3	Euler mit und ohne Vorprojektion . . . . .	12



# Literaturverzeichnis

- [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.
- [OF02] Stanley Osher and Ronald Fedkiw. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces (Applied Mathematical Sciences)*. Springer, 2003 edition, November 2002.
- [PCF<sup>+</sup>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.
- [SG09] Gerd Sußner and Gunther Greiner. Hexagonal delaunay triangulation. In *Proceedings, 18th International Meshing Roundtable*, pages 519–538. Springer, 2009.
- [VHGR08] Evan VanderZee, Anil N. Hirani, Damrong Guoy, and Edgar A. Ramos. Well-centered triangulation. *CoRR*, abs/0802.2108, 2008.
- [WV10] T. Witkowski and A. Voigt. A multi-mesh finite element method for Lagrange elements of arbitrary degree. *ArXiv e-prints*, May 2010.