

Todo list

konkreter prüfen, zwecks singularität	7
algebraische Topologie von Lück als Quelle? auch für die basics.	7
noch bezeichnungen vergessen?	7

diplomarbeit

Ingo Nitschke

14. April 2014

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	5
2	Diskrete Mannigfaltigkeit	7
2.1	Primal- und Dualkomplex	7
2.1.1	Simplizialkomplex	7
2.2	Gittergenerierung für Oberflächen	8
2.2.1	Mechanisches Modell und dessen Diskretisierung	9
2.2.2	Beispiele	12
2.3	Implizit gegebene Oberflächen	15
2.3.1	Numerische Projektion	15
3	Diskretes Äußeres Kalkül (DEC)	17
3.1	Beispiel: Krümmung Teil 1: Gauß-Bonnet-Operator	17
3.2	Äußere Ableitung	17
3.2.1	Beispiel: Krümmung Teil 2: Weingarten-Abbildung	17
3.3	Hodge-Operator	17
3.4	Laplace-Operator	17
3.4.1	Beispiel: Laplace-Gleichung	17
3.4.2	Beispiel: Krümmung Teil 3: Krümmungsvektor	17
3.5	Lie-Ableitung und Jacobian	17
3.5.1	Beispiel: Wirbelgleichung	17
4	Appendix	19
4.1	Algorithmen	19
4.1.1	Element-Knotenkräfte	19
4.2	Krümmungsgrößen für impliziten Oberflächen	19
4.3	Oberflächenbeispiele	20
4.3.1	Einheitssphäre	20
4.3.2	Ellipsoid	20

1 Einführung

History: [?] (1957)

2 Diskrete Mannigfaltigkeit

2.1 Primal- und Dualkomplex

Zielsetzung. Bei vielen numerischen Methoden werden Gebiete über überabzählbaren 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 wieder spiegeln. 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 des Randoperators auch erzeugen, deshalb scheinen die Simplizialkomplexe als Triangulierung einer Mannigfaltigkeit ein geeigneter Kandidat für eine Gitterstruktur zu sein. Und das magische daran ist, wie wir später noch in Kapitel 3 sehen werden, dass es mit dem Satz von de Rham einen Isomorphismus zwischen den de-Rham- und den simplizialen Kohomologiegruppen existiert und auch praktisch anwendbar ist.

2.1.1 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 2.1.1. Ein p -Simplex ist die konvexe Hülle von $p + 1$ geometrisch unabhängigen Punkten im \mathbb{R}^N , d.h.

$$\sigma^p := \left\{ x \in \mathbb{R}^N \mid x = \sum_{i=0}^p \mu^i v_i \text{ wobei } \mu^i \geq 0 \text{ und } \sum_{i=0}^p \mu^i = 1 \right\} \quad (2.1)$$

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 oder Ecke, σ^1 Kante und σ^2 Dreieck oder Volumenelement nennen. Des Weiteren schreiben wir auch kurz $\sigma^p = v_0 v_1 \dots v_p$ und sagen „Das Simplex σ^p wird von den Ecken $\{v_0, v_1, \dots, v_p\}$ aufgespannt.“.

konkreter
prüfen, zwecks
singularität

algebraische
Topologie von
Lück als Quelle?
auch für die ba-
sics.

noch beze-
ichnungen
vergessen?

Definition 2.1.2. Für $0 \leq r < p$ definiert sich eine Relation zwischen dem r -Simplex σ^r und dem p -Simplex $\sigma^p := v_0 v_1 \dots v_p$ durch

$$\sigma^r \prec \sigma^p :\Leftrightarrow \sigma^p \succ \sigma^r \quad (2.2)$$

$$:\Leftrightarrow \exists \{v_{i_0}, v_{i_1}, \dots, v_{i_r}\} \subset \{v_0, v_1, \dots, v_p\} : \sigma^r = v_{i_0} v_{i_1} \dots v_{i_r} \quad (2.3)$$

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 2.1.3. Ein Simplicialkomplex K über \mathbb{R}^n ist eine Menge von Simplizes, so dass

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

$\dim(K) := \max \{p \in \mathbb{N} \mid \sigma^p \in K\}$ heißt die Dimension von K .

2.2 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 σ^2 . Das Problem dabei ist, dass sich die Werte auf $\star\sigma^2$ und σ^2 nur um einen metrischen Faktor¹ 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 2π ist. Im planaren Fall erhalten wir aber für eine optimale² Triangulierung Winkel von $\frac{\pi}{2}$ und somit nur Wohlzentriertheit im Limes³. 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].

¹hier $|\sigma^2|$ bzw. dessen Reziproke

²bzgl. der maximalen Winkel

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

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 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 Vorderung 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⁺09].

2.2.1 Mechanisches Modell und dessen Diskretisierung

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

$$\gamma \frac{d\vec{x}_i}{dt} = \vec{F}(\vec{x}_i) \quad (2.4)$$

Diese gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung beschreibt eine Viskosedämpfung am Knoten σ_i^0 mit Koordinaten $\vec{x}_i \in X(M) \subset \mathbb{R}^3$ und Viskositätskoeffizient γ . Eine einfache Diskretisierung des Problems (2.4) 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.

$$\vec{x}_i(t + \Delta t) = \pi \left(\vec{x}_i(t) + h \vec{F}_i \right) \quad (2.5)$$

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⁺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 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

$$\vec{F}_i = \sum_{\sigma^1 := [\sigma_j^0, \sigma_i^0] \succ \sigma_i^0} \frac{F_{\sigma_i^0 \prec \sigma^1}}{\|\vec{x}_j - \vec{x}_i\|} (\vec{x}_j - \vec{x}_i) \quad (2.6)$$

$F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}$ 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

$$F_{\sigma^0 \prec \sigma^1} = \sum_{\sigma^2 \succ \sigma^1} F_{\sigma^0 \prec \sigma^1 \prec \sigma^2} \quad (2.7)$$

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 (2.5) hängt somit annähernd linear von der Gitterweite ab. Zu beachten ist hierbei, dass sich die Gitterweite, je nach Definition⁴, 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.

$$F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}^L := F_{\sigma^1}^L := \frac{|\sigma^1|}{l^*} - k \quad (2.8)$$

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 $N_{\sigma^2} = |\{\sigma^2 \in K\}|$

$$|T^*| = \frac{V(K)}{N_{\sigma^2}} \quad (2.9)$$

sowie unter Ausnutzung, dass T^* gleichseitig ist

$$|T^*| = \frac{l^* \sqrt{3}}{4} \quad (2.10)$$

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

$$l^* = 2 \sqrt{\frac{V(K)}{\sqrt{3} N_{\sigma^2}}} \quad (2.11)$$

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

⁴z.B. Maximum aller Umkreisradien

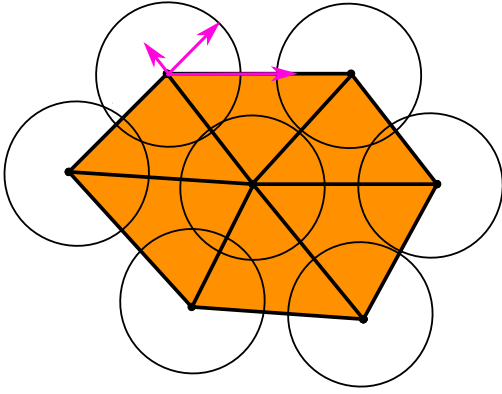


Abbildung 2.1: Kantenkräfte für an einem Knoten $k = 1$. Die eingezeichneten Radii entsprechen $\frac{l^*}{2}$.

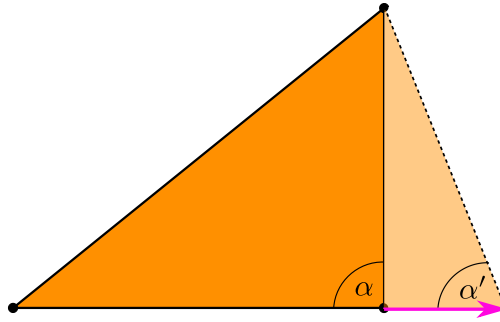


Abbildung 2.2: Eine Verschiebung des Knotens entlang einer Kante verändert den Winkel.

$|\sigma^1| = l^*$ gilt (siehe Abb. 2.1). $k = 0$ würde für eine Gitter mit Rand und freien Randknoten⁵ bedeuten, dass es immer weiter schrumpft. In unserem Fall, also Triangulierung von Oberflächen ohne Rand, zeigt sich, dass sich die Gitter vor allem dort zusammenziehen, 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 (2.5) 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.

$$F_{\sigma^0 \prec \sigma_i^1 \prec \sigma^2}^A := \cos \angle(\vec{e}_0, \vec{e}_1) - c \quad (2.12)$$

$$= \frac{\vec{e}_0 \cdot \vec{e}_1}{\|\vec{e}_0\| \|\vec{e}_1\|} - c \quad (2.13)$$

$$\vec{e}_i := \vec{e}_{\sigma_i^1} = \vec{x}_{v_i} - \vec{x}_{\sigma^0} \quad (2.14)$$

$$(2.15)$$

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.

⁵Randknoten dürfen auch nach innen wandern

Kombination der Kantenkräfte

Es hat sich gezeigt, dass (2.8) und (2.12) gerade auf komplizierteren Gebieten einzeln entweder nicht das gewünschte Resultat liefern oder insatbil sind. Deshalb kombinieren wir die beiden Kräfte linear:

$$F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}^{\text{Gesamt}} := D \cdot F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}^L + (1 - D) \cdot F_{\sigma^0 \prec \sigma^1}^A \quad (2.16)$$

mit $D \in [0, 1]$. Algorithmus 4.1.1 zeigt wie die resultierenden Kräfte auf einem Dreieckselement berechnet werden können. Um alle Knotenkräfte⁶ zu erhalten müssen wir nur noch diese Element-Knotenkräfte aufassemblieren.

Projektion der Kraftvektoren

Des Weiteren, wie im Algorithmus 4.1.1 zu sehen, wird der Kraftvektor \vec{F}_i in den Tangentialraum projiziert, das heißt

$$\vec{F}_{T_p M, i} = \vec{F}_i - (\vec{F}_i \cdot \vec{\nu}_i) \vec{\nu}_i \quad (2.17)$$

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

$$\vec{\nu}_i = \frac{\nabla \varphi}{\|\nabla \varphi\|}(\vec{x}_i) \quad (2.18)$$

oder über die Elementnormalen approximiert wird

$$\vec{\nu}_i = \frac{1}{|\odot \sigma_i^0|} \sum_{\sigma^2 \succ \sigma_i^0} |\sigma^2| \cdot \vec{\nu}_{\sigma^2} \quad (2.19)$$

Somit kann im expliziten Eulerverfahren (2.5) $\vec{F}_{T_p M, i}$ 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 (2.5) oft iterativ gelöst (vgl. 2.3.1) und je weiter weg wir den Knoten von der Mannigfaltigkeit verschieben um so schlechter ist die Startnäherung für das iterative Verfahren.

2.2.2 Beispiele

Ellipsoid

Wir wollen nun ein geeignetes Gitter für ein Ellipsoid erstellen (vgl. Appendix 4.3.2). 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. 2.3.1).

Wie in Abbildung 2.4 zu sehen, ist ein wohlzentrierter Simplizialkomplexe nach nur wenigen Eulerschritten (2.5) 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

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

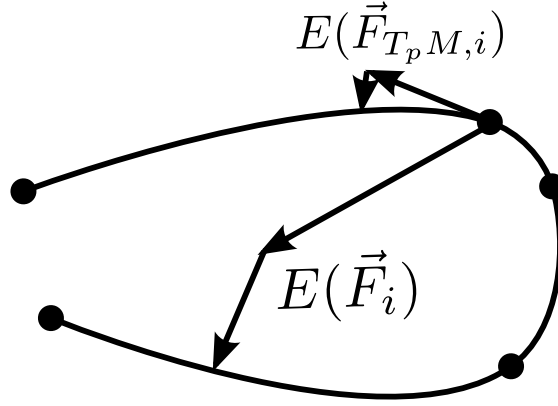


Abbildung 2.3: Eindimensionales Extrembeispiel für ein Schritt Euler-Explizit E (inkl. Nachprojektion π) eines Knotens mit und ohne Vorprojektion des Kraftvektors \vec{F}_i zu $\vec{F}_{T_p M, i}$. Ohne Vorprojektion kann es zu einem unzulässigen Gitter kommen.

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

$$\bar{\alpha}_{\max} := \frac{\int_{|K|} \alpha_{\max} \mu}{\int_{|K|} \mu} = \frac{1}{V(K)} \sum_{\sigma^2 \in K} |\sigma^2| \langle \alpha_{\max}, \star \sigma^2 \rangle \quad (2.20)$$

$$\alpha_{\max}^{\max} := \max \{ \langle \alpha_{\max}, \star \sigma^2 \rangle \mid \sigma^2 \in K \} \quad (2.21)$$

wobei $|K|$ der zugrunde liegende Raum des Simplicialkomplexes K ist und $\mu \in \Lambda^2(|K|)$ die die stückweise konstante Volumenform auf $|K|$. $\langle \alpha_{\max}, \star \sigma^2 \rangle$ 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. 2.5 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 (2.5) darauf an. Wenn vor der Verfeinerung ein zulässiges Gitter vorlag, dann zeigt sich, dass wir nur sehr wenige Iterationsschritte benötigen um ein zulässiges Gitter wieder herzustellen. Abbildung 2.5 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 aber die Winkel besser sind (rechts).

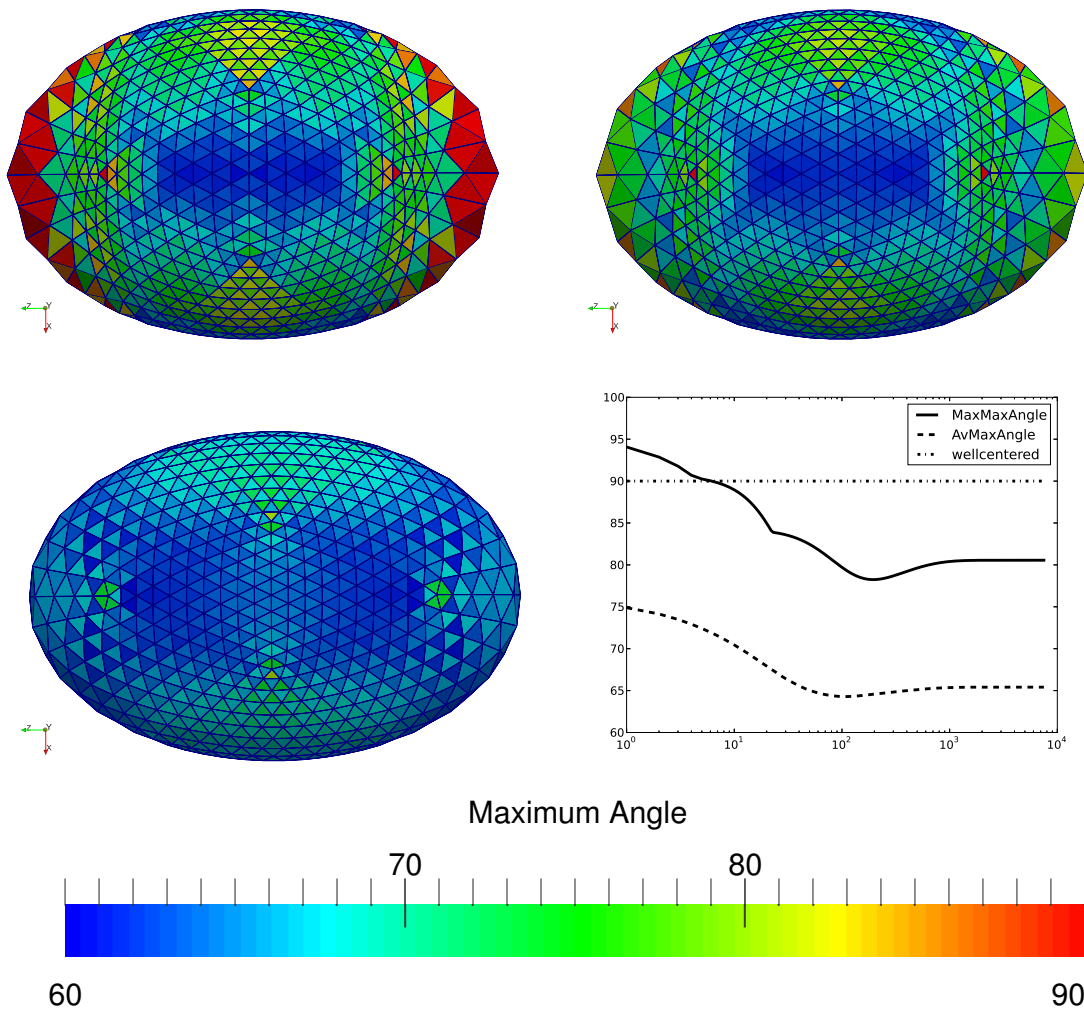


Abbildung 2.4: Parameter: $h = 0.01$; $k = 1$; $c = 0.7$. Von links oben nach rechts unten: Startgitter (keine Wohlzentriertheit, maximaler Winkel ca. 95.9°); nach 7 Eulerschritten (Wohlzentriertheit); nach 1000 Eulerschritten (danach keine signifikanten Veränderungen mehr); (semilog)Eulerschritte-Winkel-Plot (Maximum und Integralmittel)

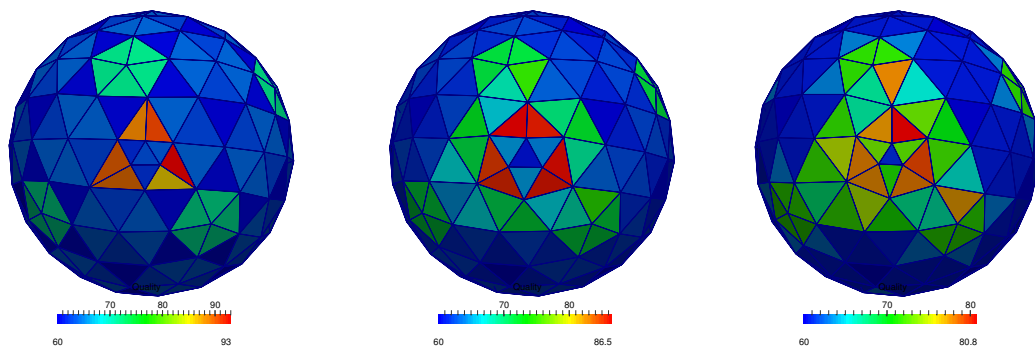


Abbildung 2.5: Von links nach rechts: Startgitter; nach 1 Eulerschritt ($h = 0.1$, $k = 1$, $c = 0.7$, max. Winkel ca. 86.5°); nach 1 Eulerschritt ($h = 0.08$, $k = 0.3$, $c = 0.7$, max. Winkel ca. 80.8°)

Fazit. blub

2.3 Implizit gegebene Oberflächen

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

$$X : (u, v) \mapsto X(u, v) \in \mathbb{R}^3 \quad (2.22)$$

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

$$\varphi = \pm \text{dist}(\cdot, M) = \pm \inf_{\vec{x} \in M} d(\cdot, \vec{x}) \quad (2.23)$$

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

$$M = \{ \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \varphi(\vec{x}) = 0 \}. \quad (2.24)$$

Solche implizit beschriebenen Oberflächen liegen zum Beispiel bei 3D-Phasenfeldproblemen vor (z.B. Allen-Cahn-, Cahn-Hilliard- oder Phase-Field-Crystal-Modell). Die Distanzfunktion⁷ $\varphi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ 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 .

2.3.1 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

$$\underset{\vec{x} \in M}{\text{argmin}} \|\vec{y} - \vec{x}\| \quad (2.25)$$

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.

Der kürzeste Weg mit Länge ε steht im rechten Winkel zur Oberfläche am Punkt \vec{x} (siehe Abb. 2.6).

$$\vec{x} = \vec{y} + \frac{\varepsilon}{\|\nabla \varphi(\vec{x})\|} \nabla \varphi(\vec{x}) \quad (2.26)$$

$$= \vec{y} + h \nabla \varphi(\vec{x}) \quad (2.27)$$

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} :

$$\nabla \varphi(\vec{x}) = \nabla \varphi(\vec{y}) + H[\varphi](\vec{y})(\vec{x} - \vec{y}) + HOT \quad (2.28)$$

$$= \nabla \varphi(\vec{y}) + \frac{\varepsilon}{\|\nabla \varphi(\vec{x})\|} H[\varphi](\vec{y}) \nabla \varphi(\vec{x}) + HOT \quad (2.29)$$

⁷ auch Phasen- oder Ordnungsfunktion genannt

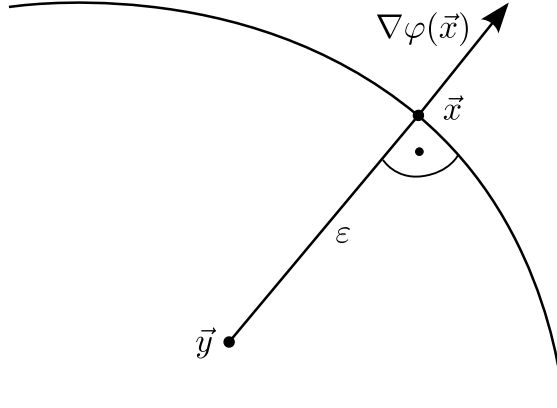


Abbildung 2.6: Darstellung des Punktes \vec{y} und dessen projezierter Punkt \vec{x}

wobei *HOT* für Terme höherer Ordnung (in ε) steht und $H[\varphi]$ ist die (symmetrische) Hessematrix von $\varphi \in C^2(\overline{B_\varepsilon(\vec{x})})$. Einsetzen in (2.27) liefert

$$\vec{x} = \vec{y} + h \nabla \varphi(\vec{y}) + \vec{O}(\varepsilon^2) \quad . \quad (2.30)$$

Somit ist für uns die Abschätzung

$$\vec{x}^* := \vec{y} + h \nabla \varphi(\vec{y}) \quad (2.31)$$

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

$$\Phi_{\vec{y}}(h) := \varphi(\vec{x}^*) = \varphi(\vec{y} + h \nabla \varphi(\vec{y})) = 0 \quad . \quad (2.32)$$

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

$$\hat{h} = -\frac{\Phi_{\vec{y}}(0)}{\Phi'_{\vec{y}}(0)} = -\frac{\varphi(\vec{y})}{\|\nabla \varphi(\vec{y})\|^2} \quad (2.33)$$

Damit stellen wir die Iterationsvorschrift

$$\vec{y}_{i+1} := \vec{y}_i - \frac{\varphi(\vec{y}_i)}{\|\nabla \varphi(\vec{y}_i)\|^2} \nabla \varphi(\vec{y}_i) \quad (2.34)$$

auf. **näher darauf eingehen? Konvergenz etc. beweisen?**

3 Diskretes Äußeres Kalkül (DEC)

3.1 Beispiel: Krümmung Teil 1: Gauß-Bonnet-Operator

see [?] [?]

3.2 Äußere Ableitung

3.2.1 Beispiel: Krümmung Teil 2: Weingarten-Abbildung

3.3 Hodge-Operator

3.4 Laplace-Operator

3.4.1 Beispiel: Laplace-Gleichung

3.4.2 Beispiel: Krümmung Teil 3: Krümmungsvektor

3.5 Lie-Ableitung und Jacobian

3.5.1 Beispiel: Wirbelgleichung

4 Appendix

4.1 Algorithmen

4.1.1 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.

4.2 Krümmungsgrößen 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 \mathfrak{K} und die Mittlere Krümmung \mathfrak{H} von M berechnet sich wie folgt (siehe [?]):

$$\mathfrak{K} = \frac{\nabla^T \varphi \cdot H^*[\varphi] \cdot \nabla \varphi}{\|\nabla \varphi\|_2^4} = - \frac{\det \begin{bmatrix} H[\varphi] & \nabla \varphi \\ \nabla^T \varphi & 0 \end{bmatrix}}{\|\nabla \varphi\|_2^4} \quad (4.1)$$

$$\mathfrak{H} = \frac{1}{2} \nabla \cdot \frac{\nabla \varphi}{\|\nabla \varphi\|} = \frac{\|\nabla \varphi\|_2^2 \cdot \text{Trace}(H[\varphi]) - \nabla^T \varphi \cdot H[\varphi] \cdot \nabla \varphi}{2 \cdot \|\nabla \varphi\|_2^3} \quad (4.2)$$

wobei $H^*[\varphi]$ die Adjunkte¹ des Hessian $H[\varphi]$ ist.

¹nicht Adjungierte!

4.3 Oberflächenbeispiele

4.3.1 Einheitssphäre

Level-Set-Funktion

$$\varphi(\vec{x}) := \frac{1}{2} (\|\vec{x}\|_2^2 - 1) \quad (4.3)$$

$$\nabla \varphi(\vec{x}) = \vec{x} \quad (4.4)$$

$$H[\varphi] \equiv I \quad (4.5)$$

Krümmungsgrößen

$$\mathfrak{K} \equiv 1 \quad (4.6)$$

$$\mathfrak{H} \equiv 1 \quad (4.7)$$

4.3.2 Ellipsoid

Level-Set-Funktion

$$\varphi(x, y, z) := \frac{1}{2} ((3x)^2 + (6y)^2 + (2z)^2 - 9) \quad (4.8)$$

$$\nabla \varphi(x, y, z) = [9x, 36y, 4z]^T \quad (4.9)$$

$$H[\varphi] \equiv \begin{bmatrix} 9 & 0 & 0 \\ 0 & 36 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

Krümmungsgrößen

$$\mathfrak{K}(x, y, z) = \frac{11664}{(81 + 972y^2 - 20z^2)^2} \quad (4.11)$$

$$\mathfrak{H}(x, y, z) = \frac{36(45 + 54y^2 - 10z^2)}{(81 + 972y^2 - 20z^2)^{3/2}} \quad (4.12)$$

Abbildungsverzeichnis

2.1	Kantenkräfte für optimale Kantenlängen	11
2.2	Winkeländerung durch Verschiebung	11
2.3	Euler mit und ohne Vorprojektion	13
2.4	Gittergenerierung: Ellipsoid	14
2.5	Gittergenerierung: Lokale Verfeinerung	14
2.6	Projektion	16

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⁺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.