

# Diskretes Äußeres Kalkül (DEC) auf Oberflächen ohne Rand

Ingo Nitschke

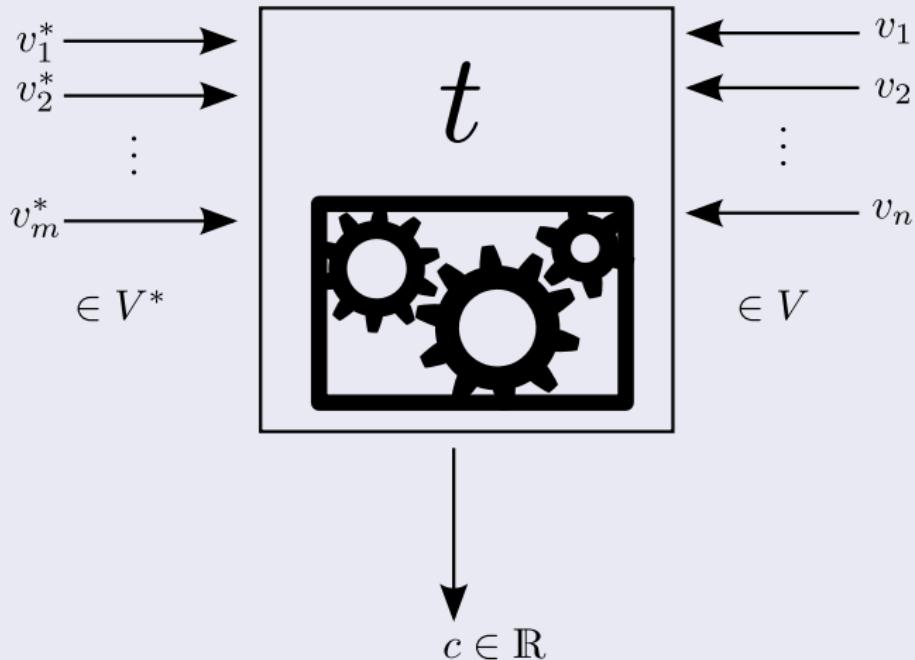
IWR - TU Dresden

25. September 2014

- 1 Differentialformen und Motivation
- 2 Simplizialer Kettenkomplex
- 3 Diskrete Differentialformen
- 4 Krümmungsberechnungen mit DEC
- 5 Fazit und Ausblicke

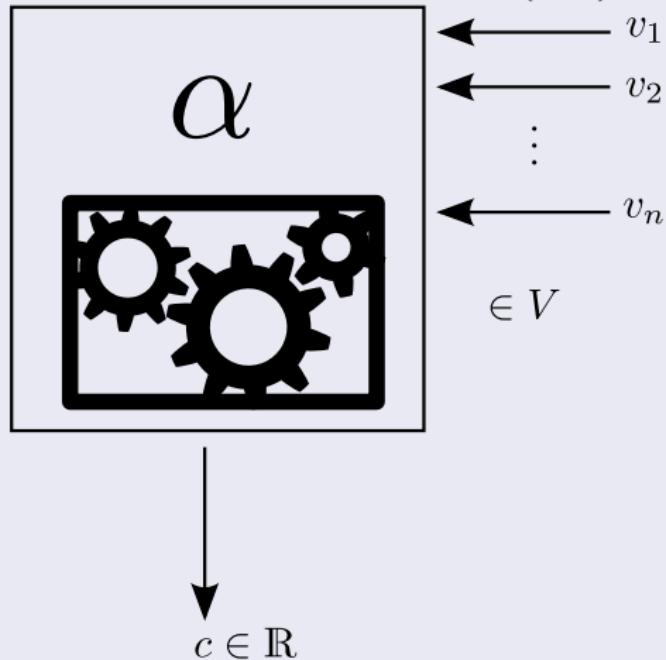
## „Tensor-Maschine“

Für einen Vektorraum  $V$  nimmt ein  $(m, n)$ -Tensor  $t$   $m$  Kovektoren aus  $V^*$  (Dualraum von  $V$ ) und  $n$  Vektoren aus  $V$  und gibt einen Wert aus  $\mathbb{R}$  zurück.



## Differentialform als „Tensor-Maschine“

Eine Differentialform vom Grad  $n$  ist ein antisymmetrischer  $(0, n)$ -Tensor.



Baukasten für lineare Differentialoperatoren 1. Ordnung für  $\dim(M) = 2$ 

- $C^\infty(M)$  glatte Funktionen,  $\mathcal{V}^\infty(M)$  glatte Vektorfelder auf  $M$

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

- $\delta := - * \mathbf{d} *$  Koableitung

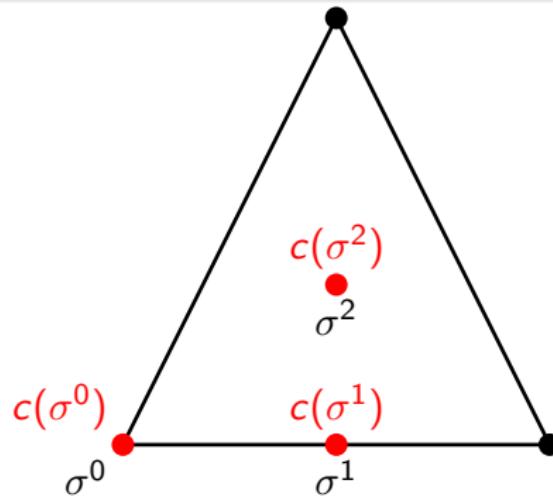
$$\begin{array}{ccccc}
 \Omega^0(M) & \xleftarrow{\delta} & \Omega^1(M) & \xleftarrow{\delta} & \Omega^2(M) \\
 \text{id} \uparrow & & \text{b} \uparrow & \sharp \downarrow & \downarrow * \\
 C^\infty(M) & \xleftarrow{\text{Div}} & \mathcal{V}^\infty(M) & \xleftarrow{-\text{Rot}} & C^\infty(M)
 \end{array}$$

## Diskretisierungen

- Mannigfaltigkeit  $M \rightsquigarrow$  Simplizialkomplex  $K$ , Kettenkomplex  $C_p(K)$
- Differentialformen  $\Omega^p(M) \rightsquigarrow$  Kokettenkomplex  $\Omega_d^p(K) := C^p(K)$
- Operatoren auf  $\Omega^p(M)$  ( $\mathbf{d}$ ,  $*$ , usw.)  $\rightsquigarrow$  Operatoren auf  $\Omega_d^p(K)$ ,  $C_p(K)$

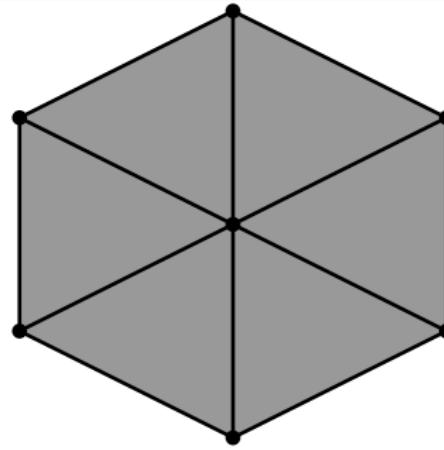
Simplizes  $\sigma^p \dots$ 

- sind **Knoten**, **Kanten**, **Dreiecke**, usw.
- können mit einer Orientierung versehen werden
- besitzen einen Umkreismittelpunkt  $c(\sigma^p)$   
( $c(\sigma^p) \in \text{Int}(\sigma^p) \Rightarrow:$  Wohlzentriertheit)



Zweidimensionales Primärgitter  $K$ 

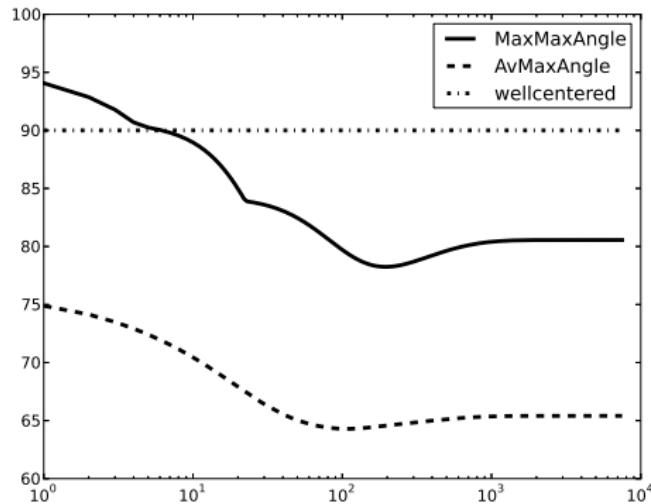
- $K$  besteht aus (orientierten) Simplizes.
- Jede Facette liegt in  $K$ .
- Der Schnitt zweier Simplizes ist leer oder liegt in  $K$ . ( $\Rightarrow$ : Simplizialkomplex)
- Das Polytop  $|K| := \bigcup_{\sigma \in K} \sigma$  ist  $C^0$ -Mannigfaltigkeit. ( $\Rightarrow$ : mannigfaltigartig)
- Alle Dreiecke sind gleichorientiert. ( $\Rightarrow$ : Orientierbarkeit)
- Zusätzlich: Jedes Simplex ist wohlzentriert. ( $\Rightarrow \exists$  Dualgitter)



## Gitter wohlzentrieren

Über einen mechanischen Ansatz  $d_t \vec{x}_i = \vec{F}(\vec{x}_i)$  lassen sich Gitterpunkte u.U. neu arrangieren.  $\vec{F}$  wird nach folgenden Kriterien definiert.

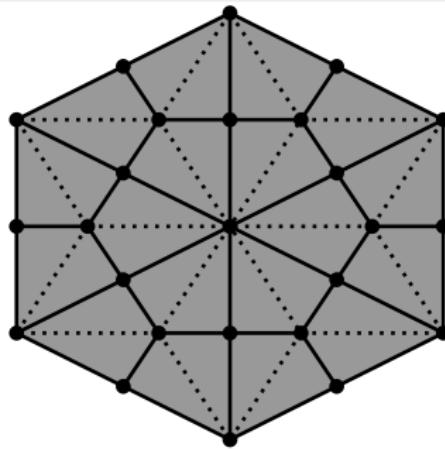
- Optimale Winkel von  $60^\circ$
- Optimale Kantenlänge:  $\forall \sigma^1 \in K : |\sigma^1| = l^*$



## Dualgitter $\text{csd}K$

Das Dualgitter  $\text{csd}K$  ist die Umkreismittelpunktsunterteilung eines wohlzentrierten Primärgitters. Dazu gehören ...

- alle Umkreismittelpunkte  $c(\sigma^P)$
- alle Kanten  $s[c(\sigma^P), c(\sigma^q)]$  mit  $\sigma^P \prec \sigma^q$
- alle Dreiecke  $s[c(\sigma^P), c(\sigma^q), c(\sigma^r)]$  mit  $\sigma^P \prec \sigma^q \prec \sigma^r$



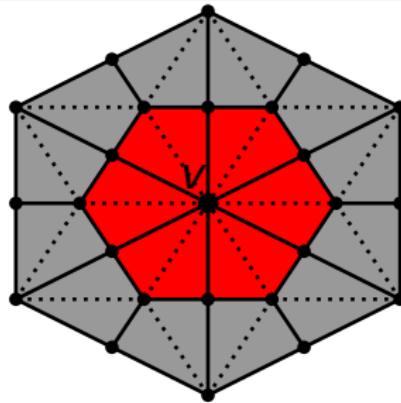
Das Dualgitter ist wieder ein Primärgitter, aber kein wohlzentriertes.

Kettenkomplex  $C_p(K)$ 

- Eine  $p$ -Kette aus  $C_p(K)$  ist eine formale Summe aus  $p$ -Simplizes

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

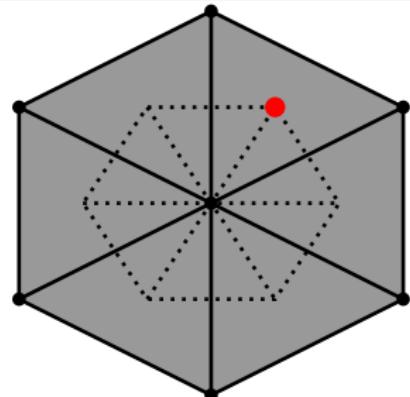
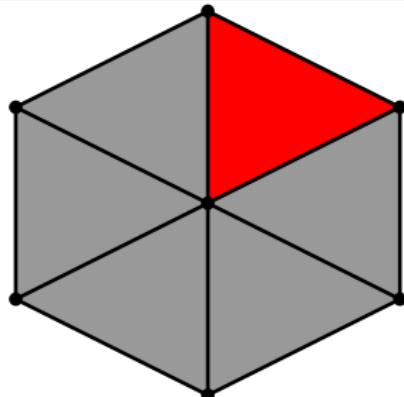
- zB.  $c^1 := \sigma_0^1 - \sigma_1^1 + 2\sigma_2^1 \in C_1(K)$
- zB.  $c^2 := \sum_{\sigma^2 \succ v} \sigma^2 \in C_2(\text{csd}K)$  (1-Ring um  $v$  im  $\text{csd}K$ ,  $\star v$ )



Sternoperator  $\star : C_p(K) \rightarrow C_{n-p}(\star K) < C_{n-p}(\text{csd}K)$

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

- Knoten  $\sigma^0 \mapsto$  Voronoizelle  $\star\sigma^0 \in C_2(\star K)$
- Kante  $\sigma^1 \mapsto$  Voronoikante  $\star\sigma^1 \in C_1(\star K)$
- Dreieck  $\sigma^2 \mapsto$  Voronoiknoten  $\star\sigma^2 \in C_0(\star K)$



Randoperator  $\partial : C_p(\mathcal{K}) \rightarrow C_{p-1}(\mathcal{K}) \quad (\mathcal{K} \in \{K, \star K\})$

- (Primär)  $\partial \sigma^p := \begin{cases} \sum_{i=0}^p (-1)^i [v_0, v_1, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_p] & \text{für } p > 0 \\ 0 & \text{für } p = 0 \end{cases}$
- (Dual)  $\partial_p \star \sigma^{n-p} = \begin{cases} \sum_{\sigma^{n-p+1} \succ \sigma^{n-p}} \star (s_{\sigma^{n-p+1}} \sigma^{n-p+1}) & \text{für } p > 0 \\ 0 & \text{für } p = 0 \end{cases}$
- Es gilt die Komplexeigenschaft  $\partial \circ \partial = 0 \Rightarrow$  Kettenkomplex

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

De-Rham-Abbildung  $\psi^d : \Omega^p(M) \rightarrow \Omega_d^p(\mathcal{K})$ 

- $\Omega_d^p(K) := C_p(K) := \text{Hom}(C_p(K), \mathbb{R})$
- $\psi^p(\alpha) = \left( \sigma^p \mapsto \int_{\pi(\sigma^p)} \alpha =: \psi^p(\alpha)(\sigma^p) =: \langle \psi^p(\alpha), \sigma^p \rangle \right)$

Diskrete äußere Ableitung  $\mathbf{d} : \Omega_d^p(\mathcal{K}) \rightarrow \Omega_d^{p+1}(\mathcal{K})$ 

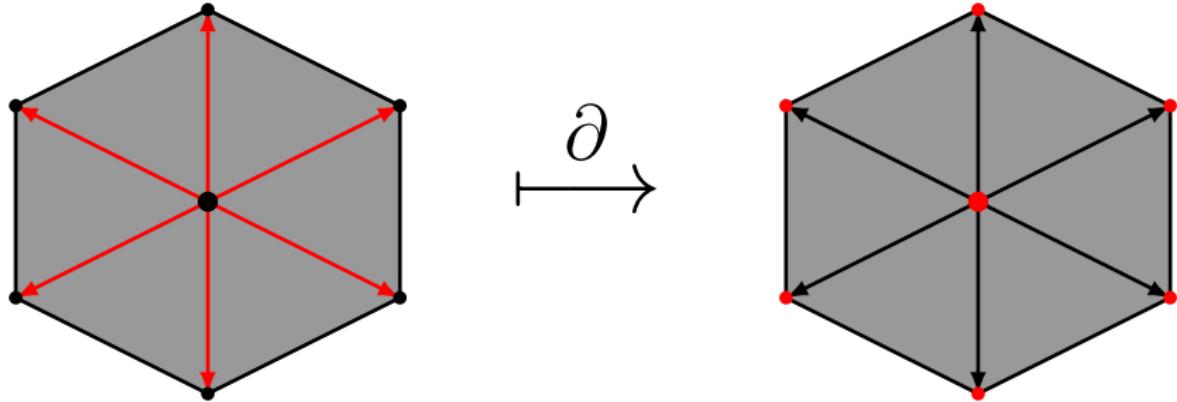
- $\mathbf{d}\psi^p(\alpha) := \psi^{p+1}(\mathbf{d}\alpha) = \psi^p(\alpha) \circ \partial$  (d.h.  $\langle \mathbf{d}\alpha_d, \sigma \rangle = \langle \alpha_d, \partial\sigma \rangle$ )
- Satz von Stokes:  $\int_U \mathbf{d}\alpha = \int_{\partial U} \alpha$
- $\mathbf{d} \circ \mathbf{d} = 0$  ⇒ Kokettenkomplex

Diskreter Hodge-Stern-Operator  $* : \Omega_d^p(K) \rightarrow \Omega_d^{n-p}(\star K) < \Omega_d^{n-p}(\text{csd } K)$ 

- $\langle * \alpha, \star \sigma^p \rangle := \frac{|\star \sigma^p|}{|\sigma^p|} \alpha(\sigma^p)$
- (n=2) Für  $\alpha \in \Omega^p(|K|)$  gilt  $\|*\psi(\alpha) - \psi(*\alpha)\| \leq \mathcal{O}(h^{3-p})$ .

## Beispiel: Diskreter Laplace-Beltrami-Operator

$$\begin{aligned}
 \langle \Delta_B f, v \rangle &= \langle *d * df, v \rangle = \frac{1}{|\star v|} \langle d * df, \star v \rangle \\
 &= \frac{1}{|\star v|} \langle *df, \partial \star v \rangle = \frac{1}{|\star v|} \sum_{\sigma^1 \succ v} \langle *df, \star \sigma^1 \rangle \\
 &= \frac{1}{|\star v|} \sum_{\sigma^1 \succ v} \frac{|\star \sigma^1|}{|\sigma^1|} \langle df, \sigma^1 \rangle = \frac{1}{|\star v|} \sum_{\sigma^1=[v, v_i]} \frac{|\star \sigma^1|}{|\sigma^1|} (f(v_i) - f(v))
 \end{aligned}$$



## Implementierung am Beispiel

- Aufstellen des dualen Problems an einem globalen Knoten  $v_i \in K^{(0)}$ :

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

- Umschreiben als Summe über Dreiecke  $\sigma^2$  und Wechsel zu lokaler (Element)Indizierung:

$$\langle * \Delta_B f, \star v_i \rangle = \sum_{\substack{\sigma^2 = [v_0^{\sigma^2}, v_1^{\sigma^2}, v_2^{\sigma^2}] \\ v_0^{\sigma^2} = v_i}} \sum_{l=1,2} C_{0,l}^{\sigma^2} (f_l^{\sigma^2} - f_0^{\sigma^2})$$

mit den Koeffizienten

$$C_{k,I}^{\sigma^2} = C_{I,k}^{\sigma^2} = \frac{|\star [v_k^{\sigma^2}, v_I^{\sigma^2}] \cap \sigma^2|}{|[v_k^{\sigma^2}, v_I^{\sigma^2}]|}$$

## Implementierung am Beispiel

- Aufstellen der Elementmatrizen für jedes Dreieck  $\sigma^2$ :

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

- Assemblierung der globalen Systemmatrix  $A$   
(oder Rechte-Seite-Vektor)

## Mittlere Krümmung $H$

- Krümmungsvektor:

$$\vec{H} = 2H\vec{\nu} \implies H = \frac{1}{2} \|\vec{H}\|$$

- Inklusionsabbildung:

$$\iota : \mathbb{R}^3|_M \hookrightarrow \mathbb{R}^3, \quad \vec{x} \mapsto \vec{x}$$

- Stetiges Problem:  $(\mathbb{R}^3\text{-vektoriisiertes skalares Problem})$

$$\vec{H} = -\Delta_B \iota$$

- Diskretes Problem: Für alle  $k = 1, 2, 3$  und  $v \in K^{(0)}$ :

$$\langle *H_k, \star v \rangle = -\langle *\Delta_B \iota_k, \star v \rangle$$

## Weingartenabbildung

- ist ein  $(1,1)$ -Tensorfeld:

$$\begin{aligned} S : T_{\vec{x}} M &\rightarrow T_{\vec{x}} M \\ \vec{w} &\mapsto \mathbf{d}\vec{\nu}(\vec{w}) \end{aligned}$$

- Erweiterte Weingartenabbildung:

$$\bar{S} := \nabla \vec{\nu} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$$

Die zwei betragsmäßig größten Eigenwerte sind Hauptkrümmungen.

- Diskretes Problem: Für alle  $i, j \in \{1, 2, 3\}$  und  $v \in K^{(0)}$ :

$$\langle * \vec{\nu}^i, \star v \rangle = \left\langle * \left[ \vec{\nu}^{Av} \right]_i, \star v \right\rangle \quad (1)$$

$$\left\langle * \left[ \nabla^{\overline{pd}} \vec{\nu}^i \right]_j, \star v \right\rangle - \left\langle * \left[ S^{\overline{pd}} \right]_{ij}, \star v \right\rangle = 0 \quad (2)$$

Falls  $\vec{\nu}$  bekannt, dann kann (1) weglassen werden.

## Diskretes Normalenfeld

$$\left\langle * \vec{\nu}^{\text{Av}}, \star v \right\rangle = \sum_{\sigma^2 \succ v} |\star v \cap \sigma^2| \vec{\nu}^{\sigma^2}$$

## Diskreter Primär-Dual-Gradient im Mittel

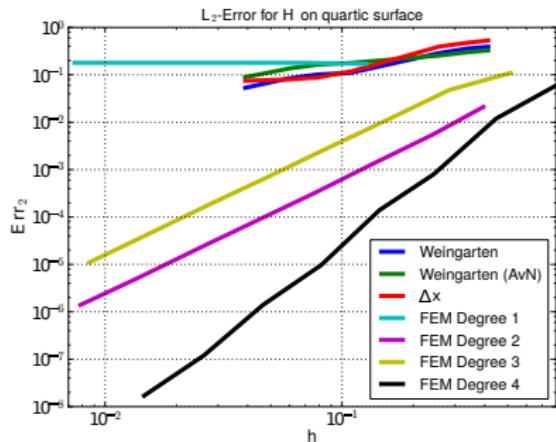
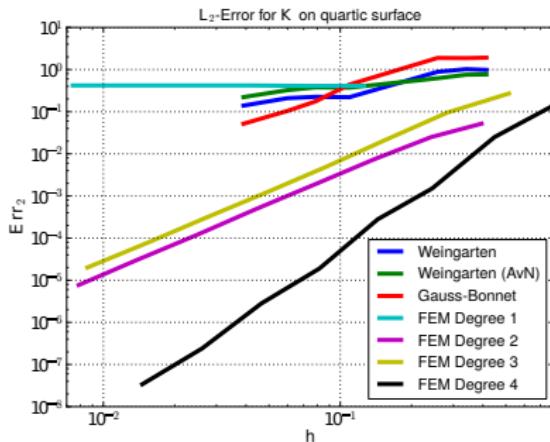
$$\left\langle * \nabla^{\overline{pd}} f, \star v \right\rangle = \sum_{\sigma^2 \succ v} |\star v \cap \sigma^2| \sum_{\sigma^0 \prec \sigma^2} (f(\sigma^0) - f(v)) \nabla \Phi_{\sigma^0}^{\sigma^2}$$

## Gauß-Bonnet-Operator

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

## Oberflächen

- Einheitssphäre:  $K \equiv 1, H \equiv 1$
- Ellipsoid:  $\varphi(x, y, z) := (3x)^2 + (6y)^2 + (2z)^2 - 9$
- Quartische Oberfläche:  $\varphi(x, y, z) := (x - z^2)^2 + (y - z^2)^2 + z^2 - 1$



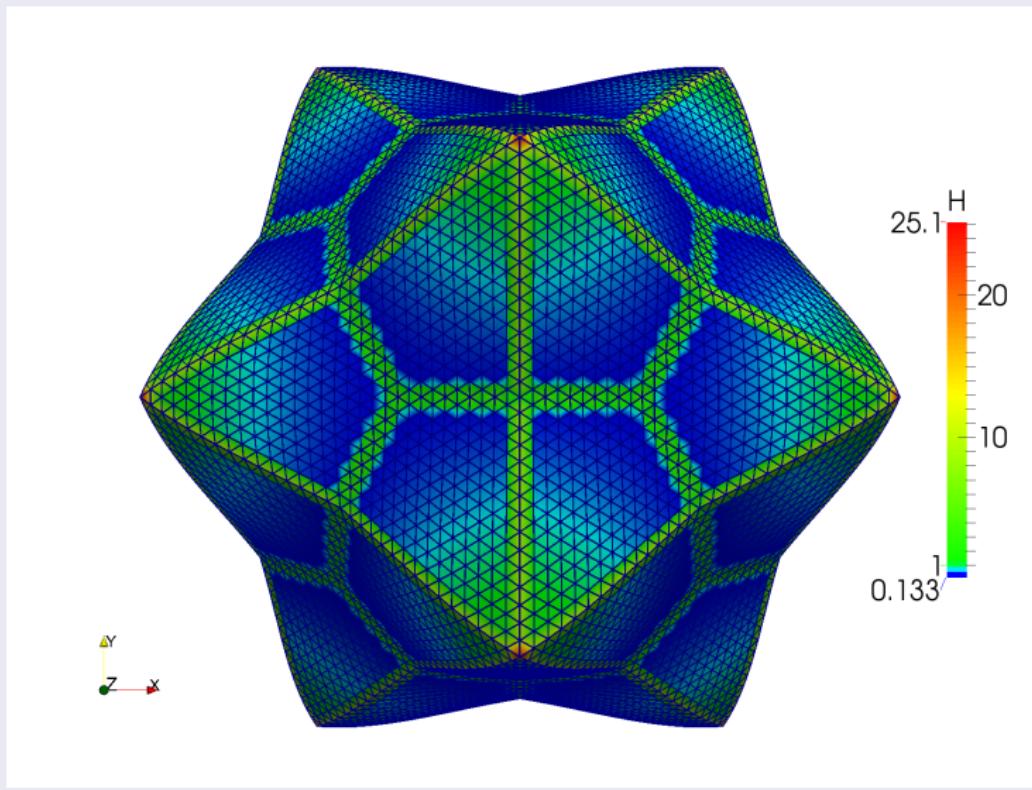
## Pros

- Äußeres Kalkül (Problemformulierung)
- Geringer Aufwand im Vergleich zu Diffuse Domain Ansätzen
- Geringer Aufwand der Krümmungsberechnung im Vergleich zur isoparametrischen FEM
- Gute Integration in AMDiS

## Kontras

- Äußeres Kalkül (Flat, Sharp)
- Wohlzentriertheit
- Lineare Approximation der Mannigfaltigkeit

# Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!



## Ausgewählte Literatur



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.



Anil Nirmal Hirani.

*Discrete Exterior Calculus.*

PhD thesis, California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA, 2003.

AAI3086864.



Klaus Jänich.

*Vektoranalysis.*

Springer-Lehrbuch. Springer, 2005.



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.