Todo list

diplomarbeit

Ingo Nitschke

14. Mai 2014

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung

History: [Whi57] (1957)

2 Diskrete Mannigfaltigkeit

2.1 Primär- und Dualgitter

Zielsetzung. Bei vielen numerischen Methoden werden Gebiete über überabzählbaren Mengen auf denen Gleichungen „leben“ diskretisiert. Ziel dabei ist es endlich viele Gleichungen zuerzeugen, 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 diskretsiert 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 Kanditat für eine Gitterstruktur zu sein. Und das magische daran ist, wie wir später noch in Kapitel 3 sehen werden, dass es mit den Satz von de Rham einen Isomorphismus zwischen den de-Rham- und den simplizialen Kohomologiegruppen existiert und auch praktisch anwendbar ist.

konkreter prüfen, zwecks singularität

algebraische Topologie von Lück als Quelle? auch für die basics.

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.

$$\sigma^p := \left\{ x \in \mathbb{R}^N \,\middle|\, x = \sum_{i=0}^{p} \mu^i v_i \text{ wobei } \mu^i \geq 0 \text{ und } \sum_{i=0}^{p} \mu^i = 1 \right\} \tag{2.1}$$

Geometrisch unabhängig bedeutet dabei, dass die p Vektoren $v_1 - v_0, v_2 - v_0, \ldots, v_p - v_0$ 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 $\sigma^p = v_0 v_1 \ldots v_p$ und sagen „Das Simplex σ^p wird von den Ecken $\{v_0, v_1, \ldots, v_p\}$ aufgespannt.“.

noch bezeichnungen vergessen?

Bemerkung 2.1.2. Die obige Defintion 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

$$\Delta^p := \left\{ \left(\mu^0, \mu^1, \dots, \mu^p\right) \middle| \mu^i \geq 0 \text{ und } \sum_{i=0}^{p} \mu^i = 1 \right\} \subset \mathbb{R}^{p+1} \tag{2.2}$$

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

$$\sigma_{\text{sing}} = \sigma^p_{\text{sing}}\left(v_0, v_1, \dots, v_p\right) : \Delta^p \to \mathbb{R}^N : \left(\mu^0, \mu^1, \dots, \mu^p\right) \mapsto \sum_{i=0}^{p} \mu^i v_i \tag{2.3}$$

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

Von nun an ist mit einem Simplex σ immer die geometrische Realisierung nach Definition 2.1.1 gemeint solange nicht explizit auf etwas anderes hingewiesen wird.

Definition 2.1.3. Für $0 \leq r < p$ definert sich eine Relation zwischen dem $r-$Simplex σ^r und dem $p-$Simplex $\sigma^p := v_0 v_1 \dots v_p$ durch

$$\sigma^r \prec \sigma^p :\Leftrightarrow \sigma^p \succ \sigma^r \tag{2.4}$$
$$:\Leftrightarrow \exists \{v_{i_0}, v_{i_1}, \dots, v_{i_r}\} \subset \{v_0, v_1, \dots, v_p\} : \sigma^r = v_{i_0} v_{i_1} \dots v_{i_r} \tag{2.5}$$

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 2.1.4. 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.

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

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

Definition 2.1.5. Die Vereinigung aller Simplizes eines Simplizialkomplexes über $\mathbb{R}^N$, das heißt

$$|K| := \bigcup_{\sigma \in K} \sigma \subset \mathbb{R}^N, \tag{2.6}$$

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 beschriebt. Dieses führt uns zu folgender Definition.

Definition 2.1.6. 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 Teilräume 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 2.1.7. 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 2.1.8. 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^∞-Mannigfalltigkeit sein. Jedoch kann ein Simplizialkomplex solch eine Mannigfaltigkeit approximieren, d.h.

Definition 2.1.9. Sei K ein mannigfaltigartiger Simplizialkomplex und M eine C^∞-Mannigfaltigkeit, dann

$$K \sim M :\Leftrightarrow \forall \sigma^0 \in K : \sigma^0 \in M\,. \tag{2.7}$$

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

Bemerkung 2.1.10. 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 Differentialformen höheren Grades als 0? Für 2 dimensionale Mannigfaltigkeiten bedeutet das, dass 1-Formen auf Kanten und 2-Formen auf den Volumenformen ausgewertet werden, wie wir später noch sehen werden. Kanten und Dreickflächen liegen aber nur (linear) approximiert im Simplizialkomplex vor, genauso wie auch die Metrik. 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.

link zu diskreten diffformen

Quelle?

$$\begin{tikzcd} \mathbb{R}^{p+1} \supset \Delta^p \arrow[rr, "\sigma_{\text{sing}}"] \arrow[dr, "\hat{\sigma}_{\text{sing}}"'] & & \sigma^p \subset \mathbb{R}^N \arrow[dl, "\pi_\sigma"] \\ & \sigma^p_M \subset M & \end{tikzcd} \tag{2.8}$$

Die Abbildungen σ_{sing} und $\hat{\sigma}_{\text{sing}}$ sind singuläre Simplexe, wie in Bemerkung 2.1.2 definiert. σ^p und σ^p_M sind deren geometrische Realisierungen im $\mathbb{R}^N$ beziehungsweise auf M und es gelte $\sigma^p \sim \sigma^p_M$. π_σ ist ein Homöomorphismus, das heißt bijektiv, stetig und π_σ^{-1} ist ebenfalls stetig. Whitney [Whi57] forderte noch weitere Bedingungen an diese Abbil-

abstr.Simplex als kartenabbildung?

pastingmap?

dung. 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 Isormophismus zwischen dem Simplizialkomplex K und einem abstrakten Simplizialkomplex L mit $|L| = M$ und $K^{(0)} = L^{(0)}$. Wobei

$$K^{(p)} := \{\sigma^p \in K\} \tag{2.9}$$

beweis?

das p-Skelett von K ist. Zu dem ist L somit eindeutig bestimmt falls π bekannt. Wenn solch eine Triangulation L von M exzistiert, dann nennen wir auch K eine (lineare) Triangulation von M.

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 2.1.2 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 $\sigma = (v_0, v_1, \ldots, v_p)$ mit runden Klammern um die Reihenfolge zu würdigen. Somit ergeben sich für einen Satz Ecken $p!$ Simplizes

$$\Sigma^p := \left\{ \left(v_{\tau(0)}, v_{\tau(1)}, \ldots, v_{\tau(p)}\right) \middle| \tau \in S_p \text{ Permutation} \right\}, \tag{2.10}$$

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

Definition 2.1.11. Es sei $\sigma_1 = \tau(\sigma_2) \in \Sigma^p$, dann gelte

$$\sigma_1 \Theta \sigma_2 :\Leftrightarrow \tau \in A_n \text{ gerade Permutation}, \tag{2.11}$$

wobei $\tau(\sigma) := \left(v_{\tau(0)}, v_{\tau(1)}, \ldots, v_{\tau(p)}\right)$ für $\sigma = (v_0, v_1, \ldots, v_p)$.

Ein Element des Faktorraumes Σ^p/Θ heißt orientiertes Simplex und wir schreiben dafür

$$\sigma = [v_0, v_1, \ldots, v_p] \tag{2.12}$$

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 der einfachheithalber nur Simplex sagen, wenn aus dem Kontext klar ist, das dieses Simplex orientiert ist. Für $p > 0$ ergeben sich somit genau 2 Äquivalenzklassen und somit Orientierungen pro Simplex. Wir wollen die Orientierung eineindeutig mit

$$\mathrm{sgn} : \Sigma^p/\Theta \to \{-1, +1\} \tag{2.13}$$

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.

[1] d.h. $\pi|_\sigma = \pi_\sigma$

Definition 2.1.12. Es sei $\sigma^p = [v_0, v_1, \ldots, v_p] \in \Sigma^p/\Theta$ mit $p \geq 1$, dann definiert sich eine induzierte Orientierung für die $(p-1)$-Facetten von σ^p durch

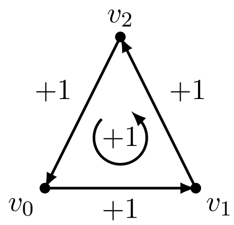
$$\operatorname{sgn}\left([v_0, v_1, \ldots, \hat{v}_i, \ldots, v_p]\right) := \begin{cases} \operatorname{sgn}(\sigma^p) & \text{falls } i \text{ gerade,} \\ -\operatorname{sgn}(\sigma^p) & \text{falls } i \text{ ungerade,} \end{cases} \tag{2.14}$$

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

Beispiel 2.1.13. 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 Orintierung aller Kanten erreicht werden.

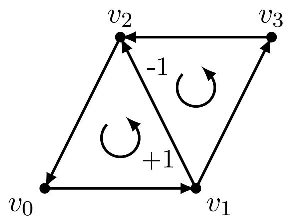
$$\begin{tikzcd} & \operatorname{sgn}\left([v_0, v_1, v_2]\right) := +1 \arrow[dl, Rightarrow] \arrow[d, Rightarrow] \arrow[dr, Rightarrow] & \\ \operatorname{sgn}\left([v_0, v_1]\right) = +1 & \operatorname{sgn}\left([v_0, v_2]\right) = -1 \arrow[d, Rightarrow] & \operatorname{sgn}\left([v_1, v_2]\right) = +1 \\ & \operatorname{sgn}\left([v_2, v_0]\right) = +1 & \end{tikzcd} \tag{2.15}$$

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.



Quelle? vgl. http://de.wikipedia.org/wiki/Korkenzieherregel

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-Simplexe irgendwie „gleichorientiert“ sind. Des Weiteren fällt auf, dass die induzierte Orientierung der gemeinsamen Kante für beide Dreiecke entgegengesetzt ist. Darauf wollen wir im allgemeineneren näher eingehen.



Definition 2.1.14. 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

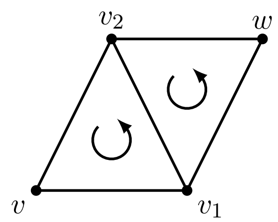
$$\operatorname{sgn}_{\sigma_1^p}(\sigma^{p-1}) = -\operatorname{sgn}_{\sigma_2^p}(\sigma^{p-1})\,, \tag{2.16}$$

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

Bemerkung 2.1.15. Für Simplizialkomplexe der Dimension 2 im $\mathbb{R}^3$ wollen wir nun festlegen, dass die 2-Simplizes die Orientierung $+1$ besitzen genau dann, 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 was „außen“ bezeichnet. In Graphiken kennzeichnen wir die Orientierung mit einem gebogenen Pfeil ebenfalls im mathematisch positiven Drehsinn, wie im Beispiel 2.1.13.

Folgerung 2.1.16. 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 2 Simplizes gegeben mit $\sigma_1 := vv_1v_2$ und $\sigma_2 := wv_1v_2$. Da für 3-elementige 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



$$\sigma_1 = [v, v_1, v_2] \qquad \sigma_2 = [w, v_2, v_1] \tag{2.17}$$

$$\Leftrightarrow \quad \operatorname{sgn}_{\sigma_1}([v_1, v_2]) = +1 \qquad \operatorname{sgn}_{\sigma_2}([v_2, v_1]) = +1 \tag{2.18}$$

$$\Leftrightarrow \quad \operatorname{sgn}_{\sigma_1}([v_1, v_2]) = -\operatorname{sgn}_{\sigma_2}([v_1, v_2]) \tag{2.19}$$

d.h. σ_1 und σ_2 sind gleichorientiert. □

Definition 2.1.17. 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 Primärgitter.

Satz 2.1.18. 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 Untermannigfaltig $|\sigma^n| \subset M$ 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 Umgebeung $U_\varepsilon(p) \subset M$ konstant ist, mit p 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. □

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

Bemerkung 2.1.19 (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 Verantwotung des Benutzers. Die Orientiertheit eines 2D-Gitters, also für Simplizialkomplexe der Dimension 2, ist mit Folgerung 2.1.16 automatisch gegeben, da in AMDiS die Ecken eines Dreieckelemets immer gegen den Uhrzeigersinn aufgetragen werden, siehe [Pra14].

2.1.2 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 Delaunaytriangulierung vor, so ist der duale Zellkomplex gerade das zugehörige Voronoidiagramm. Dieser ist im allgemeinen natürlich kein Simplizialkomplex. Des Weiteren teilt im nichtflachen Fall, das Voronoidiagramm und die Delaunaytriangulierung nicht einmal den selben zugrunde liegenden Raum. Unter gewissen Vorraussetzungen ist es aber möglich ein Primärgitter so simplizial zuverfeinern um so ein Gitter zubekommen welches wieder die Primärgittereigenschaften erfüllt und zudem Gruppierungen von n-Simplizes enthalten, die den zugehörigen Voronoizellen ähneln, als eine Art „Voronoizellen mit Knicken“.

quelle

Definition 2.1.20. 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

$$\forall i = 0, 1, \dots, p : \quad \|v_i - c(\sigma^p)\|^2 = r^2 \tag{2.20}$$

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

$$\mathbb{S}^{-1}(c(\sigma^0)) := \left\{ c(\sigma^0) \right\} , \tag{2.21}$$

und damit ist

$$c(\sigma^0) = \sigma^0 . \tag{2.22}$$

Bemerkung 2.1.21. Obige Definition, stellt ein Spezialfall des Kleinste-Sphäre-Problems dar. Die Ecken von σ^p sind nach Vorraussetzung 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 2.1.20 ist somit wohldefiniert.

Bemerkung 2.1.22 (zur Implementierung)**.** Im $\mathbb{R}^3$ ist die Berechnung der Umkreismittelpunkte für 0- und 1-Simplizes einfach:

$$c(v_0) = v_0 \quad \text{und} \tag{2.23}$$

$$c(v_0 v_1) = \frac{1}{2} (v_0 + v_1) . \tag{2.24}$$

Für ein 2-Simplex nutzen wir die Formel

$$\begin{aligned} c(v_0 v_1 v_2) &= v_0 + a_1 (v_0 - v_1) + a_2 (v_0 - v_2) \quad \text{mit} \\ a_1 &= \frac{\|v_0 - v_2\|^2}{2D^2} (v_1 - v_0) \cdot (v_2 - v_1) \quad \text{und} \\ a_2 &= \frac{\|v_0 - v_1\|^2}{2D^2} (v_0 - v_2) \cdot (v_2 - v_1) . \end{aligned} \tag{2.25}$$

D ist die Determinante des Simplexes, also dessen doppeltes Volumen. Einsetzen in (2.20) für z.B. $r = \|v_0 - c(v_0 v_1 v_2)\|$ und nachrechnen ergibt die Korrektheit der Formel.

2.2 Gittergenerierung für Oberflächen

Zielsetzung. Die Wohlzentriertheit eines Gitters ist Pflicht, da ohne sie kein brauchbares duales Gitter (Voronoigitter) 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

Voronoiknoten $\star\sigma^2$ nicht im Dreieck σ^2. Das Problem dabei ist, dass sich die Werte auf $\star\sigma^2$ und σ^2 nur um einen metrischen Faktor[2] 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 Dreickelementen. 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 optimale[3] Triangulierung Winkel von $\frac{\pi}{2}$ und somit nur Wohlzentriertheit im Limes[4]. 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].

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 Simplizialkomplexes soll dabei erhalten bleiben. Nur die Knotenpunkte werden neu arrangiert. Das setzt natürlich vorraus, dass die Oberfläche exakt, zum Beispiel explizit durch eine Immersion $X : M \to \mathbb{R}^3$ 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 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 wohlzentierte 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] hier $|\sigma^2|$ bzw. dessen Reziproke
[3] bzgl. der maximalen Winkel
[4] für planare äquidistante Gitter kann diese schwächere Restriktion dennoch sinnvoll sein, da somit bekannte Differenzenschematas entstehen können

2.2.1 Mechanisches Modell und dessen Diskretisierung

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

$$\gamma \frac{\mathrm{d}\vec{x}_i}{\mathrm{d}t} = \vec{F}(\vec{x}_i) \tag{2.26}$$

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 (2.26) ist das Explizite Eulerverfahren mit nachgeschalteter Projektion $\pi : \mathbb{R}^3 \to X(M)$ um die Nebenbedingung $\vec{x}_i \in X(M)$ zu erfüllen.

$$\vec{x}_i(t + \Delta t) = \pi\left(\vec{x}_i(t) + h\vec{F}_i\right) \tag{2.27}$$

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) getesten ohne nenneswerten 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 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

$$\vec{F}_i = \sum_{\sigma^1 := [\sigma_j^0, \sigma_i^0] \succ \sigma_i^0} \frac{F_{\sigma_i^0 \prec \sigma^1}}{\|\vec{x}_j - \vec{x}_i\|} (\vec{x}_j - \vec{x}_i) \tag{2.28}$$

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

$$F_{\sigma^0 \prec \sigma^1} = \sum_{\sigma^2 \succ \sigma^1} F_{\sigma^0 \prec \sigma^1 \prec \sigma^2} \tag{2.29}$$

Als praktisch erweist es sich außerdem die Kräfte dimensionslos zuhalten, da somit eventuell auftretende Parameter für unterschiedliche Ausgangsgitter annährend gleich gewählt werden können. Die Schrittweite h in (2.27) hängt somit annährend linear von der Gitterweite ab. Zu beachten ist hierbei, dass sich die Gitterweite, je nach Definition[5], in jedem Eulerschritt ändern kann.

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

[5] z.B. Maximum aller Umkreisradien

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.

$$F^L_{\sigma^0 \prec \sigma^1} := F^L_{\sigma^1} := \frac{|\sigma^1|}{l^*} - k \tag{2.30}$$

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

$$|T^*| = \frac{V(K)}{N_{\sigma^2}} \tag{2.31}$$

sowie unter Ausnutzung, dass T^* gleichseitig ist

$$|T^*| = \frac{l^*\sqrt{3}}{4} \tag{2.32}$$

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

$$l^* = 2\sqrt{\frac{V(K)}{\sqrt{3}N_{\sigma^2}}} \tag{2.33}$$

Für $k = 1$ kann man sich das so vorsellen, 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 $|\sigma^1| = l^*$ gilt (siehe Abb. 2.1). $k = 0$ würde für eine Gitter mit Rand und freien Randknoten[6] 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 von nöten wäre, wo die Oberfläche eine große Krümmung aufweist. Der andere Extremfall, $k = 1$, würde zwar ein annährend gleich grobes Gitter erzeugen, aber in Experimenten zeigte sich, dass (2.27) 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 Dreieckelements. 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 zuverscheibenen Knoten kleiner, et vice versa.

$$F^A_{\sigma^0 \prec \sigma^1_i \prec \sigma^2} := \cos \measuredangle(\vec{e}_0, \vec{e}_1) - c \tag{2.34}$$

$$= \frac{\vec{e}_0 \cdot \vec{e}_1}{\|\vec{e}_0\|\|\vec{e}_1\|} - c \tag{2.35}$$

$$\vec{e}_i := \vec{e}_{\sigma^1_i} = \vec{x}_{v_i} - \vec{x}_{\sigma^0} \tag{2.36}$$

$$\tag{2.37}$$

[6]Randknoten dürfen auch nach innen wandern

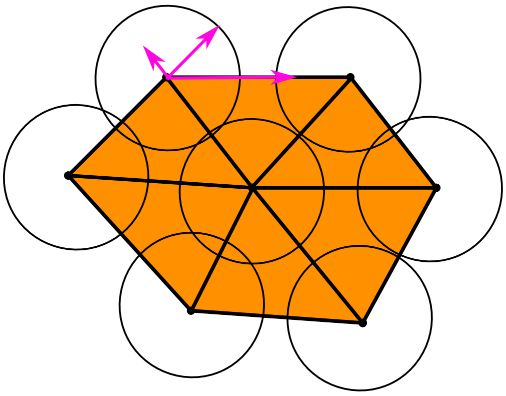


Abbildung 2.1: Kantenkräfte für an einem Knoten $k = 1$. Die eingezeichneten Radii entsprechen $\frac{l^*}{2}$.

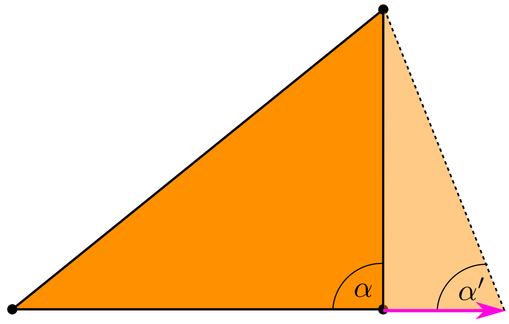


Abbildung 2.2: Eine Verschiebung des Knotens entlang einer Kante verändert den Winkel.

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.

Kombination der Kantenkräfte

Es hat sich gezeigt, dass (2.30) und (2.34) gerade auf komplizierteren Gebieten einzeln entweder nicht das gewünschste Resultat liefern oder insatbil sind. Deshalb kombinieren wir die beiden Kräfte linear:

$$F^{\text{Gesamt}}_{\sigma^0 \prec \sigma^1} := D \cdot F^L_{\sigma^0 \prec \sigma^1} + (1 - D) \cdot F^A_{\sigma^0 \prec \sigma^1} \tag{2.38}$$

mit $D \in [0, 1]$. Algorithmus 4.1.1 zeigt wie die resultierenden Kräfte auf einem Dreieckelement berechnet werden können. Um alle Knotenkräfte[7] 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 projeziert, das heißt

$$\vec{F}_{T_pM,i} = \vec{F}_i - (\vec{F}_i \cdot \vec{\nu}_i)\vec{\nu}_i \tag{2.39}$$

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

$$\vec{\nu}_i = \frac{\nabla\varphi}{\|\nabla\varphi\|}(\vec{x}_i) \tag{2.40}$$

oder über die Elementnormalen approximiert wird

$$\vec{\nu}_i = \frac{1}{|\circlearrowleft \sigma_i^0|} \sum_{\sigma^2 \succ \sigma_i^0} |\sigma^2| \cdot \vec{\nu}_{\sigma^2} \tag{2.41}$$

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

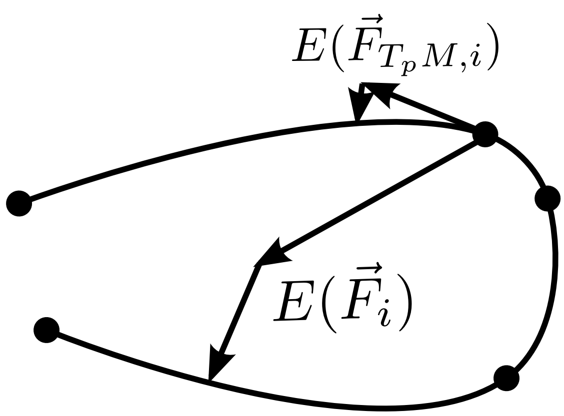


Abbildung 2.3: Eindimensionales Extrembeispiel für ein Schritt Euler-Explizit E (inkl. Nachprojektion π) eines Knotens mit und ohne Vorprojektion des Kraftvektors $\vec{F}_i$ zu $\vec{F}_{T_pM,i}$. Ohne Vorprojektion kann es zu einem unzulässigen Gitter kommen.

Somit kann im expliziten Eulervefahren (2.27) $\vec{F}_{T_pM,i}$ 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 (2.27) oft iterativ gelöst (vgl. 2.3.1) und je weiter weg wir den Knoten von der Mannigfaltigkeit verschieben um so schlechter ist die Startnährung 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 projeziert (vgl. 2.3.1).

Wie in Abbildung 2.4 zu sehen, ist ein wohlzentrierter Simplizialkomplexe nach nur wenigen Eulerschritten (2.27) 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 Winkel der Dreiecke und der größte aller aximalen Winkel $\alpha_{\max}^{\max}$ (`MaxMaxAngle`) nach jedem Iterationsschritt.

$$\bar{\alpha}_{\max} := \frac{\int_{|K|} \alpha_{max}\mu}{\int_{|K|}\mu} = \frac{1}{V(K)} \sum_{\sigma^2 \in K} |\sigma^2| \left\langle \alpha_{max}, \star\sigma^2 \right\rangle \tag{2.42}$$

$$\alpha_{\max}^{\max} := \max\left\{ \left\langle \alpha_{max}, \star\sigma^2 \right\rangle \middle| \sigma^2 \in K \right\} \tag{2.43}$$

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

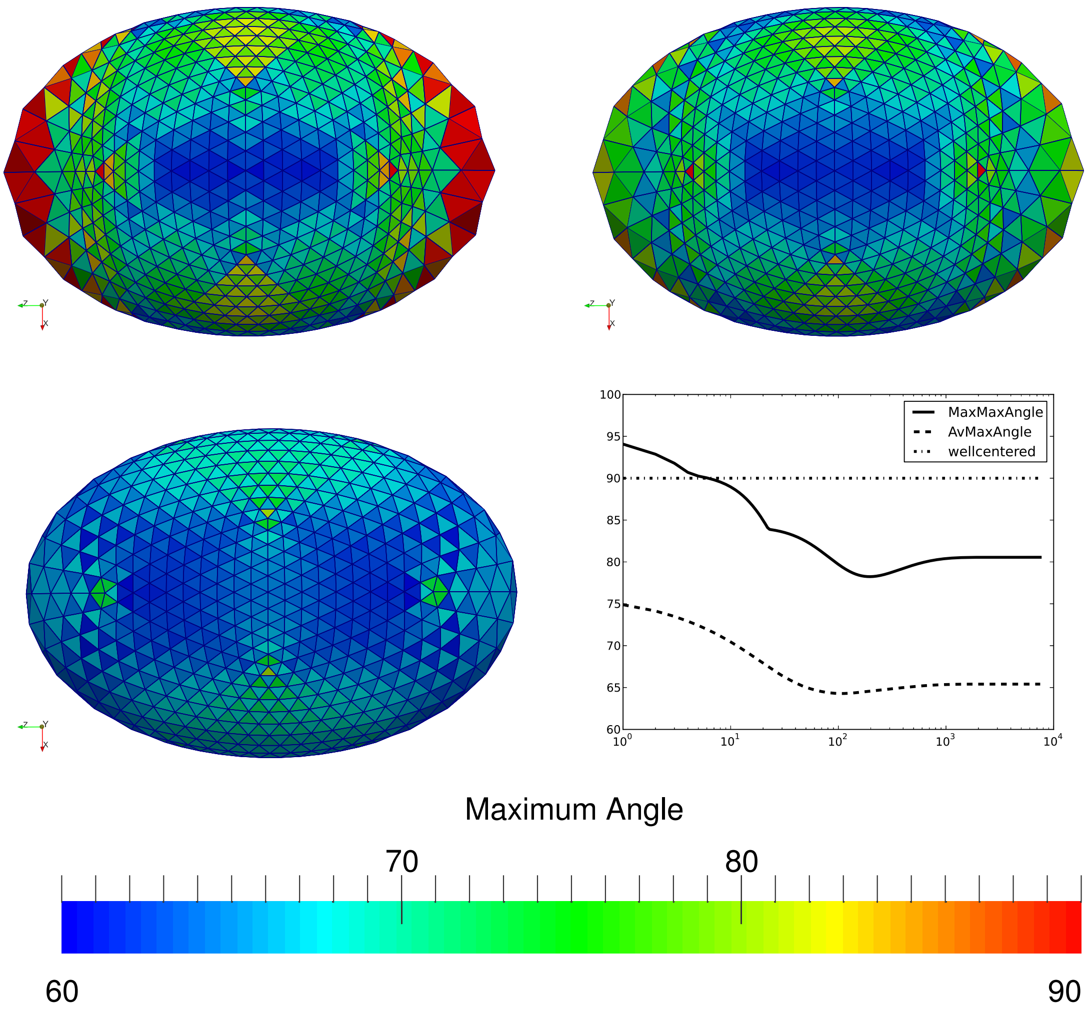


Abbildung 2.4: Parameter: h = 0.01; k = 1; c = 0.7. Von links oben nach rechts unten: Startgitter (keine Wohlzentriertheit, maximaler Winkel ca. 95.9°); nach 7 Eulerschritten (Wohlzentriertheit); nach 1000 Eulerschritten (danach keine signifikanten Veränderungen mehr); (semilog)Eulerschritte-Winkel-Plot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

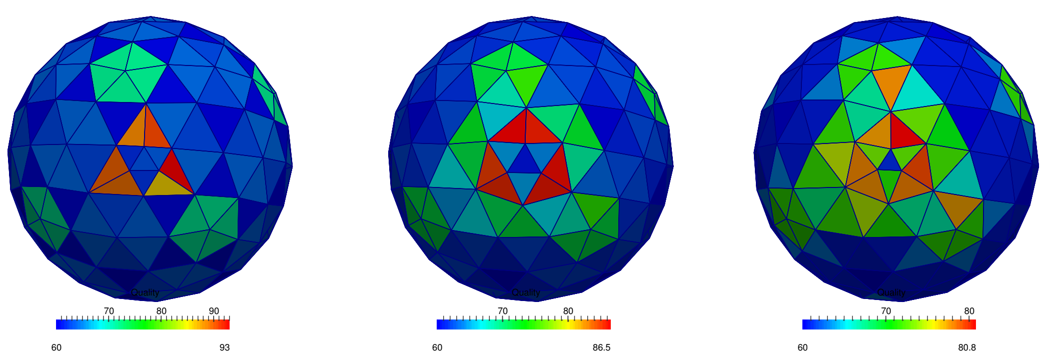


Abbildung 2.5: Von links nach rechts: Startgitter; nach 1 Eulerschritt (h = 0.1, k = 1, c = 0.7, max. Winkel ca. 86.5°); nach 1 Eulerschritt (h = 0.08, k = 0.3, c = 0.7, max. Winkel ca. 80.8°)

Lokale Verfeinerung

Die in der FEM häufig anzutreffende Verfeinerung, nämlich die Halbierung der Dreiecke, führt zu 1-Ringen aus 4 Flächenelementen an den neu enstandenen Knoten und ist somit im Algemeinen 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 enstehen (siehe Abb. 2.5 ganz links). Die somit hängenden Knoten werden beseitigt indem die Nachbarelemente halbiert werden. Das heißt es ensteht 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 projeziert werden ist im Allgemeinen noch nicht sichergestellt, dass ein wohlzentrierte Triangulation vorliegt. Deshalb wenden wir unseren Algorithmus (2.27) 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).

Fazit. blub

2.3 Implizit gegebene Oberflächen

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

$$X : (u, v) \mapsto X(u, v) \in \mathbb{R}^3 \tag{2.44}$$

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

$$\varphi = \pm \mathrm{dist}(\cdot, M) = \pm \inf_{\vec{x} \in M} d(\cdot, \vec{x}) \tag{2.45}$$

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

$$M = \left\{ \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \middle| \varphi(\vec{x}) = 0 \right\}. \tag{2.46}$$

Solche implizit beschriebenen Oberflächen liegen zum Beispiel bei 3D-Phasenfeldproblemen vor (z.B. Allen-Cahn-, Cahn-Hilliard- oder Phase-Field-Crystal-Modell). Die Distanzfunktion[8] $\varphi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ 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 Mannnigfaltigkeit gegeben. In Falle von 2-Mannigfaltigkeiten ohne Rand, ist „innen“ gerade das von der Oberfläche umschlossene Gebiet im $\mathbb{R}^3$.

[8] auch Phasen- oder Ordnungsfunktion genannt

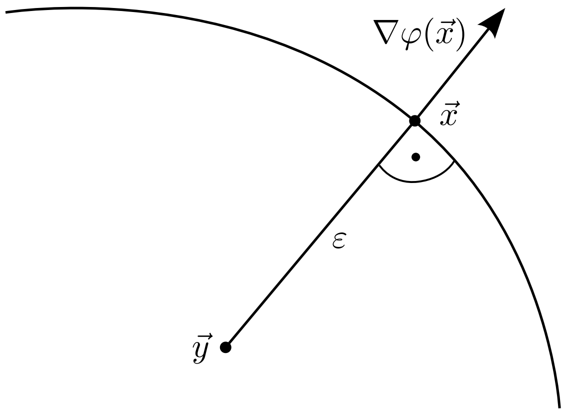


Abbildung 2.6: Darstellung des Punktes $\vec{y}$ und dessen projezierter Punkt $\vec{x}$

2.3.1 Numerische Projektion

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

Gesucht ist also das

$$\operatorname*{argmin}_{\vec{x}\in M} \|\vec{y}-\vec{x}\| \tag{2.47}$$

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).

$$\begin{aligned} \vec{x} &= \vec{y} + \frac{\varepsilon}{\|\nabla\varphi(\vec{x})\|}\nabla\varphi(\vec{x}) && (2.48)\\ &= \vec{y} + h\nabla\varphi(\vec{x}) && (2.49)\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \nabla\varphi(\vec{x}) &= \nabla\varphi(\vec{y}) + H[\varphi](\vec{y})(\vec{x}-\vec{y}) + HOT && (2.50)\\ &= \nabla\varphi(\vec{y}) + \frac{\varepsilon}{\|\nabla\varphi(\vec{x})\|}H[\varphi](\vec{y})\nabla\varphi(\vec{x}) + HOT && (2.51)\end{aligned}$$

wobei HOT für Therme höherer Ordnung (in ε) steht und $H[\varphi]$ ist die (symmetrische) Hessematrix von $\varphi \in C^2\left(\overline{B_\varepsilon(\vec{x})}\right)$. Einsetzen in (2.49) liefert

$$\vec{x} = \vec{y} + h\nabla\varphi(\vec{y}) + \vec{O}(\varepsilon^2) \quad . \tag{2.52}$$

Somit ist für uns die Abschätzung

$$\vec{x}^* := \vec{y} + h\nabla\varphi(\vec{y}) \tag{2.53}$$

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

$$\Phi_{\vec{y}}(h) := \varphi(\vec{x}^*) = \varphi(\vec{y} + h\nabla\varphi(\vec{y})) = 0 \quad . \tag{2.54}$$

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

$$\hat{h} = -\frac{\Phi_{\vec{y}}(0)}{\Phi'_{\vec{y}}(0)} = -\frac{\varphi(\vec{y})}{\|\nabla\varphi(\vec{y})\|^2} \tag{2.55}$$

Damit stellen wir die Iterationsvorschrift

$$\vec{y}_{i+1} := \vec{y}_i - \frac{\varphi(\vec{y}_i)}{\|\nabla\varphi(\vec{y}_i)\|^2}\nabla\varphi(\vec{y}_i) \tag{2.56}$$

auf.

2.4 Kettenkomplexe

3 Diskretes Äußeres Kalkül (DEC)

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

see [Lee97] [Shi14]

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 `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 `project`: $\mathbb{R}^3 \to T_pM \subset \mathbb{R}^3$ 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.

4.2 Krümmungsgrößen für impliziten Oberflächen

Es sei $\varphi \in C^2(\mathbb{R}^3)$ gegeben mit $M = \left\{\vec{x} \in \mathbb{R}^3 \middle| \varphi(\vec{x}) = 0\right\}$. Die Gaußkrümmung $\mathfrak{K}$ und die Mittlere Krümmung $\mathfrak{H}$ von M berechnet sich wie folgt (siehe [Gol05]):

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

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

wobei $H^*[\varphi]$ die Adjunkte[1] des Hessian $H[\varphi]$ ist.

[1] nicht Adjungierte!

4.3 Oberflächenbeispiele

4.3.1 Einheitssphäre

Level-Set-Funktion

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

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

$$H[\varphi] \equiv I \tag{4.5}$$

Krümmungsgrößen

$$\mathfrak{K} \equiv 1 \tag{4.6}$$

$$\mathfrak{H} \equiv 1 \tag{4.7}$$

4.3.2 Ellipsoid

Level-Set-Funktion

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

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

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

Krümmungsgrößen

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

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

Abbildungsverzeichnis

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.

[EH72] D. Jack Elzinga and Donald W. Hearn. The minimum covering sphere problem. *Management Science*, 19(1):96 – 104, 1972.

[Gol05] Ron Goldman. Curvature formulas for implicit curves and surfaces. *Computer Aided Geometric Design*, 22(7):632 – 658, 2005. Geometric Modelling and Differential Geometry.

[Jän05] Klaus Jänich. *Vektoranalysis:*. Springer-Lehrbuch. Springer, 2005.

[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.

[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].

[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.

[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.