# Oberflächenspannung in der Methode der Finiten Massen

Dissertation

zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
der Fakultät für Mathematik und Physik
der Eberhard-Karls-Universität Tübingen

vorgelegt von
Christian Langmann
aus Tübingen

2004

| | |
|---|---|
| Tag der mündlichen Prüfung: | 26. Juli 2004 |
| Dekan: | Professor Dr. Herbert Müther |
| 1. Berichterstatter: | Professor Dr. Harry Yserentant |
| 2. Berichterstatter: | Professor Dr. Christian Lubich |

für Andrea & Jonas

# Inhaltsverzeichnis

**Einleitung** **1**

**1 Die Methode der Finiten Massen** **5**
1.1 Lokale Größen . . . . . 6
1.2 Globale Größen . . . . . 8
1.3 Lagrangeformalismus - Bewegungsgleichungen . . . . . 9
1.4 Diskretisierung der Integrale . . . . . 10
1.5 Zeitdiskretisierung . . . . . 12
1.6 Erhaltungseigenschaften . . . . . 12

**2 Maßtheoretische Grundlagen** **15**
2.1 Ränder beschränkter Teilmengen in $\mathbb{R}^n$ . . . . . 15
2.2 Hausdorff-Maß . . . . . 16
2.3 Perimeter-Formel . . . . . 17

**3 Oberflächenerscheinungen** **21**
3.1 Oberflächenenergie . . . . . 21
3.2 Kapillardruck - Laplacesche Formel . . . . . 22

**4 Modellierung von Oberflächenerscheinungen in der Methode der Finiten Massen** **25**
4.1 Oberfläche eines masseerfüllten Gebietes . . . . . 25
4.2 Oberflächenenergie . . . . . 27
4.3 Kräfte und Momente . . . . . 31
4.4 Erhaltungseigenschaften . . . . . 38
4.5 Interpretation der Bewegungsgleichungen . . . . . 39
4.6 Alternatives Vorgehen zur Modellierung der Oberflächenerscheinungen . 42

**5 Eikonal-Gleichung** **45**
5.1 Viskositätslösungen . . . . . 47
5.2 Numerische Methoden . . . . . 50
5.2.1 Fast Marching Method . . . . . 53

5.2.2 Effizienz . . . . . 56
5.2.3 Initialisierung der Fast Marching Method . . . . . 57

**6 Numerische Umsetzung** **63**
6.1 Diskretisierung der Oberflächenenergie . . . . . 63
6.2 Datenstruktur und Organisation . . . . . 67

**7 Beispielrechnungen** **71**
7.1 Beispiel 1: kreisförmige Oberfläche als Testproblem . . . . . 72
7.2 Beispiel 2: Oberflächenspannung und innerer Druck . . . . . 78
7.3 Beispiel 3: Topologische Änderungen der Oberfläche . . . . . 81
7.4 Diskussion der Ergebnisse . . . . . 84

**A Glättungskern - Glättungen** **87**

**B Bezeichnungen** **89**

**Literaturverzeichnis** **91**

# Einleitung

Die Methode der Finiten Massen ist eine Lagrangesche Teilchenmethode zur Simulation kompressibler Fluide. Dieses Verfahren wurde nach Vorarbeiten von Yserentant ([Yse97], [Yse99b], [Yse99a]) in [GLY00] vorgestellt. Zahlreiche weitere Arbeiten, die sich etwa mit der Schallausbreitung [Yse01], der Modellierung fester Ränder [KLY03] oder der Möglichkeit einer Regularisierung der Teilchenkonfiguration [KLY] beschäftigen, trugen zur Erweiterung der Methode bei.
Ein bisher nicht untersuchter Aspekt ist die Behandlung physikalischer Effekte, welche an freien Rändern von Flüssigkeitsvolumina auftreten, insbesondere der Oberflächenspannung. Die zunehmende Popularität von Level-Set Methoden in der Beschreibung der Evolution von Hyperflächen und die überzeugenden Ergebnisse, verbunden mit äußerst robusten Eigenschaften, ließen die Idee aufkommen, diese Techniken auch zur Beschreibung freier Fluidoberflächen und deren Bewegung unter dem Einfluß von Oberflächenspannung in der Methode der Finiten Massen zu nutzen.
Beschreibungen freier Fluidoberflächen, beziehungsweise freier Grenzflächen verschiedener Fluide und ihrer Bewegung unter dem Einfluß von Oberflächeneffekten im Rahmen der Level-Set Methoden, finden sich beispielsweise bei Brackbill, Kothe und Zemach [BKZ92], Sussman, Smereka und Osher [SSO94] und Chang, Hou, Merriman und Osher [CHMO96]. Dort wird Oberflächenspannung, welche ausschließlich als Funktion einer Level-Set Funktion definiert und nur auf einer bestimmten Niveaufläche von Null verschieden ist, als zusätzlicher Kraftterm in den Navier-Stokes-Gleichungen modelliert.
Ein anderer, dem Charakter der Methode der Finiten Massen ähnlicherer Zugang über eine variationelle Level-Set Formulierung der Bewegung von Grenzflächen von Fluiden findet sich bei Zhao, Chan, Merriman und Osher [ZCMO96]. Das dort beschriebene Energiefunktional für die Energie einer Grenzfläche baut auf der Perimeter-Formel auf.

Der hier verfolgte Ansatz verwendet für die Modellierung der Oberflächenenergie in der Methode der Finiten Massen ebenfalls eine Approximation an die Perimeter-Formel, wobei die dabei benötigte charakteristische Funktion des Fluids mit Hilfe einer geeigneten Level-Set Funktion definiert wird. Dieser Zugang gestattet es, nach der Definition eines Oberflächenbegriffes für Fluide im Rahmen der Methode der Finiten Massen eine Bewegungsgleichung herzuleiten, welche auch Oberflächenspannung an freien Rändern berücksichtigt.

Es können so bei der Modellierung der Oberflächenspannung die entscheidenden Vorteile der Level-Set Formulierung genutzt werden. Das bedeutet, man erhält eine dimensionsunabhängige Formulierung der Oberflächenerscheinungen, welche selbst die Modellierung von topologischen Änderungen der betrachteten Oberfläche ermöglicht.

Von entscheidender Bedeutung für die numerisch stabile Umsetzung der beschriebenen Modellierung ist ein Ausschmieren der Oberflächen und die Definition der Level-Set Funktion als signierter Distanzfunktion zur betrachteten Oberfläche. Diese wird als Viskositätslösung mit Hilfe der sogenannten *Fast Marching Method* aus der Eikonal-Gleichung gewonnen.

Die Arbeit ist nun wie folgt aufgebaut.
In Kapitel 1 wird die Methode der Finiten Massen in dem für das weitere Vorgehen benötigten Umfang vorgestellt. Es werden die grundlegenden Definitionen und Formalismen beschrieben, auf denen schließlich die Modellierung der Oberflächenerscheinungen aufbaut.
In Kapitel 2 werden Hyperflächen als Ränder beschränkter Teilmengen in $\mathbb{R}^n$ betrachtet. Für diese Hyperflächen wird ein geeignetes Maß definiert, das mit der geometrischen Intuition übereinstimmt. Es handelt sich dabei um das Hausdorff-Maß. Mit Hilfe der Perimeter-Formel wird anschließend eine Approximationsformel für das Hausdorff-Maß einer Hyperfläche hergeleitet.
Die physikalischen Eigenschaften einer freien Fluidoberfläche und die dort auftretenden Effekte werden in Kapitel 3 beschrieben. Es wird zudem mit Hilfe der Laplaceschen Formel für den Kapillardruck eine Darstellung der Oberflächenspannung als Flächenkraftdichte motiviert.
In Kapitel 4 wird zunächst eine geeignete Definition einer Fluidoberfläche im Rahmen der Methode der Finiten Massen diskutiert. Damit folgt entsprechend Kapitel 3 eine Definition der Oberflächenenergie eines durch die generalisierten Koordinaten charakterisierten Fluids. Für diese Definition wird, um eine stabile Berechnung zu garantieren, ausgehend von der die Fluidoberfläche beschreibenden Level-Set Funktion eine neue Level-Set Funktion konstruiert. Es handelt sich dabei um die signierte Distanzfunktion zur betrachteten Fluidoberfläche. Mit Hilfe der so definierten Oberflächenenergie wird entsprechend dem in Kapitel 1 beschriebenen Formalismus eine Bewegungsgleichung für das Fluid hergeleitet. Dabei tritt die Schwierigkeit auf, daß die zur Definition der Oberflächenenergie verwendete signierte Distanzfunktion nicht mehr explizit von den generalisierten Koordinaten abhängt.
An die Diskussion der Eigenschaften der Modellierung schließt sich mit Blick auf Kapitel 3 eine Interpretation der gewonnenen Bewegungsgleichungen an. Zum Abschluß des Kapitels wird, motiviert durch die verhältnismäßig schlechte Approximation der oben definierten Oberflächenenergie an das Hausdorff-Maß einer Hyperfläche, eine alternative Modellierung angedacht.

Kapitel 5 beschäftigt sich ausschließlich mit der Eikonal-Gleichung, als beschreibender Differentialgleichung für die signierte Distanzfunktion. Nach der Definition eines geeigneten Lösungsbegriffes wird die *Fast Marching Method* als numerisches Verfahren zur Lösung der Eikonal-Gleichung beschrieben. Es werden zusätzlich Aspekte wie Effizienz und Verfahren zur Initialisierung der *Fast Marching Method* beleuchtet.
In Kapitel 6 wird die Diskretisierung der in der Modellierung der Oberflächenspannung auftretenden Integrale über einem ortsfesten Gitter beschrieben. Außerdem wird auf die Berechnung der benötigten sogenannten assoziierten Punkte eingegangen.
Im Anschluß werden die zur Implementierung verwendeten Datenstrukturen und ihre Einordnung in die bestehende Struktur beschrieben.
Kapitel 7 zeigt abschließend anhand von Beispielrechnungen Möglichkeiten und Grenzen der beschriebenen Modellierung von Oberflächenerscheinungen in der Methode der Finiten Massen.

# Kapitel 1

# Die Methode der Finiten Massen

Die Methode der Finiten Massen beruht auf einem Teilchenmodell für kompressible Fluide, welches von Yserentant in [Yse97], [Yse99b] und [Yse99a] entwickelt wurde. Ausgehend von einer Charakterisierung der Teilchen nur durch ihre Position [Yse97] werden in [Yse99b] Teilchen betrachtet, die ihre Größe und ihre Lage im Raum ändern können. In [GLY00] wird schließlich eine beliebige, lineare, orientierungserhaltende Deformation der Teilchen zugelassen.
Mit dieser Charakterisierung der Teilchen wird die Methode der Finiten Massen als Lagrangesche Methode zur numerischen Simulation kompressibler Fluide in [GLY00] vorgestellt. Die in [Yse97] und [Yse99a] gewonnenen Kompaktheits- und Konvergenzresultate lassen sich dabei direkt auf die in [GLY00] beschriebene Situation übertragen.
Im folgenden wird die Methode der Finiten Massen in der Ausführlichkeit beschrieben, die für die Modellierung der Oberflächenerscheinungen in Kapitel 4 und deren numerische Umsetzung in Kapitel 6 notwendig ist.
Das bedeutet, auf eine Beschreibung der Entropie als zweiter thermodynamischer Größe zur vollständigen Beschreibung des thermodynamischen Zustandes eines Fluids wird hier verzichtet. Ebenso werden die in [Yse97] und [Yse99b] eingeführten viskosen Kräfte, die ihre Ursache in lokalen Schwankungen des Geschwindigkeitsfeldes haben und das Verhalten Newtonscher Fluide modellieren, nicht beschrieben. Die in [Yse99a] eingeführten Reibungskräfte, die ihre Ursache in Geschwindigkeitsdifferenzen überlappender Teilchen haben und dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik Rechnung tragen, werden hingegen kurz beschrieben. Die durch sie verursachte Dämpfung lokaler Geschwindigkeitsdifferenzen nutzt man als stabilisierenden Effekt in den Rechnungen in Kapitel 7.

Die Methode der Finiten Massen beruht auf einer Diskretisierung der Massen und nicht des Raumes. Dabei wird Masse in kleine Massenpakete endlicher Ausdehnung zerlegt, welche als Teilchen bezeichnet werden. Diese Teilchen bewegen sich unter dem Einfluß innerer und äußerer Kräfte und den Gesetzen der Thermodynamik. Sie können dabei beliebig linear deformiert werden, wobei jedoch ihre Orientierung erhalten bleiben muß.

## 1.1 Lokale Größen

Die Grundlage der Methode der Finiten Massen bildet eine stetig differenzierbare Formfunktion $\psi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, welche kompakten Träger hat und nicht negativ ist. Diese Formfunktion beschreibt die interne Massenverteilung innerhalb der Teilchen, in welche das betrachtete Fluid zerlegt wird.
Man nimmt dabei ohne Beschränkung der Allgemeinheit an, daß das Integral der Formfunktion über dem Träger auf eins normiert ist

$$\int \psi(y)\, dy = 1 \tag{1.1}$$

und daß der Schwerpunkt der Teilchen im Ursprung des teilchenbezogenen Körperkoordinatensystems liegt

$$\int \psi(y) y\, dy = 0\,. \tag{1.2}$$

Weiter nimmt man an, daß der Trägheitstensor der Teilchen Diagonalgestalt hat, also

$$\int \psi(y) y_k y_l\, dy = J\delta_{kl}\,. \tag{1.3}$$

Insbesondere fallen so die Koordinatenachsen des Körperkoordinatensystems mit den Hauptträgheitsachsen der Teilchen zusammen.
Für die Wahl der Formfunktion gibt es nun zahlreiche Möglichkeiten. In [GLY00] wird ein Tensorproduktansatz mit B-Splines vorgeschlagen. Dieser Ansatz besitzt gute Approximationseigenschaften und bietet die Möglichkeit einer Unterteilung in gleichartige Funktionen. Eine Rekursionsformel zur Bestimmung von B-Splines gewünschter Ordnung findet sich etwa in [DH93, Sec. 7.4]. Die hier verwendeten B-Splines $\widetilde{\psi}$ haben Ordnung zwei oder drei und sind auf den Träger $[-1, 1]$ mit $\int_{-1}^{1} \widetilde{\psi}(\xi) d\xi = 1$ normiert. Der B-Spline zweiter Ordnung hat die Darstellung

$$\widetilde{\psi}(\xi) = \frac{9}{8} \begin{cases} \frac{3}{2}(1+\xi)^2 & -1 \le \xi \le -\frac{1}{3} \\ 1 - 3\xi^2 & -\frac{1}{3} \le \xi \le \frac{1}{3} \\ \frac{3}{2}(1-\xi)^2 & \frac{1}{3} \le \xi \le 1 \end{cases}$$

und der B-Spline dritter Ordnung die Darstellung

$$\widetilde{\psi}(\xi) = \frac{4}{3} \begin{cases} 2(1+\xi)^3 & -1 \le \xi \le -\frac{1}{2} \\ 1 - 6\xi^2(1+\xi) & -\frac{1}{2} \le \xi \le 0 \\ 1 - 6\xi^2(1-\xi) & 0 \le \xi \le \frac{1}{2} \\ 2(1-\xi)^3 & \frac{1}{2} \le \xi \le 1 \end{cases} .$$

Daraus definiert man die Formfunktion $\psi$ als Tensorprodukt

$$\psi(y) = \prod_{k=1}^{n} \widetilde{\psi}(y_k) \tag{1.4}$$

von B-Splines, wobei je nach benötigter Glattheit B-Splines zweiter oder dritter Ordnung verwendet werden. Die so definierte Formfunktion erfüllt die Bedingungen (1.1) und (1.2). Das Trägheitsmoment $J$ in (1.3) ist für B-Splines zweiter Ordnung $J = \frac{1}{9}$ und für B-Splines dritter Ordnung $J = \frac{1}{12}$.

Ein Teilchen $i$ wird zum Zeitpunkt $t$ durch seine Position $q_i(t) \in \mathbb{R}^n$ und die Deformation $H_i(t) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ charakterisiert. Die Punkte y des Teilchens bewegen sich entlang Trajektorien

$$t \;\mapsto\; q_i(t) + H_i(t)y\,.$$

Entsprechend lassen sich aus den Raumkoordinaten x zum Zeitpunkt $t$ via

$$y = H_i(t)^{-1}(x - q_i(t)) \tag{1.5}$$

die Körperkoordinaten des Teilchens $i$ gewinnen.
Die Punkte $y$ des Teilchens $i$ haben die Geschwindigkeit

$$t \;\mapsto\; q_i'(t) + H_i'(t)y\,. \tag{1.6}$$

Daraus erhält man mit der Darstellung der Körperkoordinaten (1.5) für das Geschwindigkeitsfeld des $i$-ten Teilchens in Raumkoordinaten

$$v_i(x,t) = q_i'(t) + H_i'(t)H_i(t)^{-1}(x - q_i(t))\,. \tag{1.7}$$

Im folgenden bezeichnet man der Übersichtlichkeit halber

$$\psi_i(x,t) := [\det H_i(t)]^{-1}\,\psi\left(H_i(t)^{-1}(x - q_i(t))\right)\,. \tag{1.8}$$

Damit erhält man mit

$$\nabla_x\psi_i(x,t) = [\det H_i(t)]^{-1}\,H_i(t)^{-T}\,[\nabla_x\psi]\left(H_i(t)^{-1}(x - q_i(t))\right) \tag{1.9}$$

für die später bei der Formulierung der Bewegungsgleichung benötigten Ableitungen von $\psi_i$ bezüglich $q_i$

$$\frac{\partial\psi_i}{\partial q_i}(x,t) = -\nabla_x\psi_i(x,t) \tag{1.10}$$

und bezüglich $H_i$ [GLY00]

$$\frac{\partial\psi_i}{\partial H_i}(x,t) = -\left[\nabla_x\psi_i(x,t)\right]\left[H_i(t)^{-1}(x - q_i(t))\right]^T - \psi_i(x,t)H_i(t)^{-T}\,. \tag{1.11}$$

## 1.2 Globale Größen

Bezeichne $m_i > 0$ die Masse des $i$-ten Teilchens. Dann erhält man für ein System aus $N$ Teilchen die Massendichte

$$\rho(x,t) = \sum_{i=1}^{N} m_i \psi_i(x,t) \tag{1.12}$$

als Superposition der Massendichten der einzelnen Teilchen. Analog zur Massendichte $\rho$ erhält man auch die Massenflußdichte

$$j(x,t) = \sum_{i=1}^{N} m_i \psi_i(x,t) v_i(x,t) \tag{1.13}$$

als Superposition der Massenflußdichten der einzelnen Teilchen. Definiert man nun

$$\chi_i(x,t) = \frac{m_i \psi_i(x,t)}{\rho(x,t)} \tag{1.14}$$

als die lokalen Massenanteile des $i$-ten Teilchens, so ist das durch

$$j(x,t) = \rho(x,t) v(x,t) \tag{1.15}$$

definierte Geschwindigkeitsfeld $v$ des Massenflußes eine Konvexkombination

$$v(x,t) = \sum_{i=1}^{n} \chi_i(x,t) v_i(x,t) \tag{1.16}$$

der Geschwindigkeitsfelder der einzelnen Teilchen. Dieses Vorgehen stellt sicher, daß die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \operatorname{div}(\rho v) = 0\,,$$

welche eine differentielle Formulierung der Massenerhaltung ist, erfüllt ist. Das gilt in einer schwachen Formulierung selbst noch für nicht differenzierbare Formfunktionen [Yse00].

Wie bereits erwähnt, wird auf eine Beschreibung der Entropie als zweiter thermodynamischer Größe verzichtet. Damit wird auch die innere Energie $\varepsilon$ pro Einheitsvolumen des Fluids nur als Funktion der Massendichte $\rho$ beschrieben.
Für den einfachsten Fall idealer Gase ist

$$\varepsilon(\rho) \sim \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma},$$

wobei $\rho_0 > 0$ eine konstante charakteristische Massendichte ist und $\gamma > 1$ den Adiabatenexponenten bezeichnet.

## 1.3 Lagrangeformalismus - Bewegungsgleichungen

Mit Hilfe der oben definierten lokalen und globalen Größen definiert man die innere Energie $V$ und die kinetische Energie $E$ des durch die generalisierten Koordinaten $q_i(t)$ und $H_i(t)$ eindeutig bestimmten Systems aus $N$ Teilchen.
Die innere Energie des Systems ist gegeben durch

$$V(t) = \int \varepsilon(\rho(x,t))\, dx\,. \tag{1.17}$$

Die kinetische Energie eines Teilchens $i$ ist gegeben durch

$$E_i(t) = \frac{1}{2}\int m_i \psi_i(x,t)|v_i(x,t)|^2\, dx\,,$$

was sich mit (1.7) auch direkt als

$$E_i(t) = \frac{1}{2} m_i |q_i'(t)|^2 + \frac{1}{2} J m_i |H_i'(t)|_F^2$$

darstellen läßt. Die gesamte kinetische Energie $E$ des Systems aus $N$ Teilchen definiert man dann als Summe der kinetischen Energieen der Teilchen:

$$E(t) = \sum_{i=1}^{N} E_i(t) \tag{1.18}$$

Damit definiert man die Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L} = E - V\,.$$

des Systems. Entsprechend dem Hamiltonschen Prinzip, nach dem die Bewegung des Systems stets so erfolgt, daß die Variation des Wirkungsfunktionals verschwindet, also

$$\delta \int \mathcal{L}\, dt \stackrel{!}{=} 0\,,$$

erhält man die Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i'} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0\,, \quad \frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial H_i'} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial H_i} = 0 \tag{1.19}$$

des Systems.
Im Falle nicht adiabatischer Strömungen müssen zur korrekten Beschreibung der Evolution des Systems zusätzlich die anfangs erwähnten Reibungskräfte berücksichtigt werden. Diese werden entsprechend [GLY00] folgendermaßen formuliert:

$$\begin{aligned} F_i^{(r)} &= -\frac{1}{2}\int R\psi_i\,[v_i - v]\; dx \\ M_i^{(r)} &= -\frac{1}{2}\int R\psi_i\,[v_i - v]\,\left[H_i^{-1}(x - q_i)\right]^T\; dx \end{aligned}$$

Die Reibungskräfte sind für eine Umwandlung von Fluktuationsenergie in innere Energie verantwortlich und reflektieren die Zeitirreversibilität des Systems. Sie haben ihre Ursache in lokalen Geschwindigkeitsdifferenzen überlappender Teilchen und koppeln diese weich aneinander.

Mit den normalisierten Kräften

$$F_i = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial V}{\partial q_i} = -\int \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho}\frac{\partial \psi_i}{\partial q_i}\,dx \tag{1.20}$$

und

$$M_i = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial V}{\partial H_i} = -\int \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho}\frac{\partial \psi_i}{\partial H_i}\,dx \tag{1.21}$$

lassen sich die Bewegungsgleichungen (1.19) somit in der Form

$$q_i'' = F_i + F_i^{(r)} \quad H_i'' = \frac{1}{J}M_i + \frac{1}{J}M_i^{(r)} \tag{1.22}$$

schreiben. Eine Interpretation der Bewegungsgleichungen findet sich in [Yse97].

## 1.4 Diskretisierung der Integrale

Das vorgestellte Teilchenmodell basiert auf einer Lagrangeschen Sichtweise. Dementsprechend soll die Diskretisierung der Integrale derart erfolgen, daß die aus dem Lagrangeschen Ansatz herrührenden Eigenschaften, etwa die Invarianz gegenüber beliebigen linearen Deformationen des Raumes, erhalten bleiben. Man verwendet daher zur Diskretisierung der Integrale eine teilchenbezogene Quadraturformel. Diese wird aus der Transformation des mit der Funktion $f$ gewichteten Integrals über die Massendichte motiviert. Mit (1.8) und (1.12) gilt

$$\int f\rho\,dx \;=\; \sum_{i=1}^{N} m_i \int f(q_i + H_i y)\psi(y)\,dy\,.$$

Das Integral auf der rechten Seite erstreckt sich jetzt nur noch über den kompakten Träger der strikt positiven Formfunktion $\psi$. Dieses Integral wird durch eine Quadraturformel mit festen Gewichten $\alpha_\nu > 0$ und Knoten $a_\nu$ diskretisiert. Man definiert damit die folgende Quadraturformel

$$\int f\rho\,dx \;\longrightarrow\; \sum_{i=1}^{N} m_i \left[\sum_{\nu=1}^{s} \alpha_\nu f(q_i + H_i a_\nu)\right] =: \int f\rho\,d\mu\,.$$

Die Formfunktion $\psi$ übernimmt dabei die Rolle einer Gewichtsfunktion, so daß sie nicht mehr explizit auftritt.

Mit dieser Quadraturformel werden nun die auftretenden Integrale diskretisiert. Anstatt

aber direkt die Ausdrücke für die Kräfte zu diskretisieren, wendet man die Quadraturformel, der diskreten Erhaltungseigenschaften wegen, auf die innere Energie an. Mit $\widetilde{\varepsilon} = \varepsilon/\rho$ erhält man damit

$$V = \int \widetilde{\varepsilon}(\rho)\, d\mu$$

als diskrete Formulierung der inneren Energie (1.17) des Systems. Aus dieser Darstellung leitet man entsprechend (1.20) und (1.21) die normalisierten Kräfte

$$F_i = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial V}{\partial q_i}\,, \quad M_i = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial V}{\partial H_i}$$

her.
Da mit den Teilchen auch die Quadraturpunkte mitbewegt werden, setzen sich die normalisierten Kräfte $F_i$ und $M_i$ aus je zwei Komponenten zusammen:

$$F_i = F_i^{(1)} + F_i^{(2)}\,, \quad M_i = M_i^{(1)} + M_i^{(2)}$$

Die Terme

$$F_i^{(1)} = -\int \frac{\partial \widetilde{\varepsilon}}{\partial \rho}\frac{\partial \psi_i}{\partial q_i}\, d\mu\,, \quad M_i^{(1)} = -\int \frac{\partial \widetilde{\varepsilon}}{\partial \rho}\frac{\partial \psi_i}{\partial H_i}\, d\mu \tag{1.23}$$

werden aus Werten der Quadraturpunkte aller Teilchen berechnet, wohingegen für

$$F_i^{(2)} = -\sum_{\nu=1}^{s} \alpha_\nu \left[\nabla \widetilde{\varepsilon}\right](q_i + H_i a_\nu)\,, \quad M_i^{(1)} = -\sum_{\nu=1}^{s} \alpha_\nu \left[\left[\nabla \widetilde{\varepsilon}\right](q_i + H_i a_\nu)\right][a_\nu]^T \tag{1.24}$$

nur Quadraturpunkte des $i$-ten Teilchens verwendet werden.
Für eine geeignet definierte innere Energie $\varepsilon$ können die Ausdrücke (1.23) und (1.24) wegen der Positivität der Gewichte der Quadraturformel numerisch stabil berechnet werden.

Es stellt sich nun die Frage nach der Wahl einer geeigneten Quadraturformel. Die Erfahrung zeigt, daß es nicht ausreicht, lediglich eine hohe Ordnung der Quadraturformel zu haben. Man benötigt darüber hinaus auch eine hinreichend feine Auflösung des Integrationsgebietes $[-1,1]^n$. Für einen Tensorproduktansatz mit eindimensionalen kubischen B-Splines entsprechend Kapitel 1.1 ist eine Tensorproduktformulierung der folgenden eindimensionalen Quadraturformel, welche Ordnung 6 hat, eine gute Wahl.

| $a_\nu$ | $-\frac{2}{3}$ | $-\frac{1}{3}$ | $0$ | $\frac{1}{3}$ | $\frac{2}{3}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $\alpha_\nu$ | $\frac{41}{1280}$ | $\frac{316}{1280}$ | $\frac{566}{1280}$ | $\frac{316}{1280}$ | $\frac{41}{1280}$ |

## 1.5 Zeitdiskretisierung

Nach der oben beschriebenen Diskretisierung der Integrale bleibt ein großes System gewöhnlicher Differentialgleichungen übrig. Faßt man die generalisierten Koordinaten $q_i$ und $H_i$ zu einem Vektor $y$ der Dimension $N(n + n^2)$ zusammen, so können die Bewegungsgleichungen (1.22) in der Form

$$y'' \;=\; f(y, z) + A(y, z)y'$$

geschrieben werden, wobei $z$ ein $N$-dimensionaler Vektor ist, der die spezifischen Entropieen der Teilchen enthält. Der zweite Summand ist den erwähnten viskosen Kräften und Reibungskräften geschuldet. Um das System vollständig zu beschreiben, muß noch eine weitere Differentialgleichung, welche die zeitliche Entwicklung der Entropie beschreibt, hinzugefügt werden:

$$z' \;=\; w(y, y', z)$$

Dieses System gewöhnlicher Differentialgleichungen löst man mittels eines Splitting-Verfahrens. Die dabei zu lösenden Differentialgleichungen können mit Hilfe bekannter Standardverfahren wie etwa DoPri5 [HNW93, Sec. II.4] gelöst werden. Ein wesentlich geeigneteres Verfahren ist jedoch das in [HLS98] beschriebene exponentielle Integrationsverfahren, da damit steife Anteile, welche etwa durch die viskosen Kräfte und die Reibungskräfte auftreten, derart behandelt werden können, daß sie keine Einschränkungen in der Zeitschrittweite verursachen.

## 1.6 Erhaltungseigenschaften

Die Erhaltung von Energie, Impuls und Drehimpuls ist eine grundlegende Eigenschaft eines jeden abgeschlossenen Systems. Es ist daher eine zwingende Forderung, daß auch in der vorgestellten Methode der Finiten Massen diese Größen Erhaltungsgrößen sind. Insbesondere sind Energieabschätzungen ein wichtiges Hilfsmittel um die Kompaktheits- und Konvergenzresultate aus [Yse97] und [Yse99a] auf die beschriebene Situation zu übertragen.

In [GLY00, Sec. 3, Th. 1] wird unter Berücksichtigung der hier nicht beschriebenen viskosen Kräfte und der Reibungskräfte für ein System aus $N$ Teilchen gezeigt, daß die Gesamtenergie $\mathcal{E} = E + V$ als Summe der kinetischen Energie $E$ (1.18) und der inneren Energie (1.17) eine Erhaltungsgröße ist.
Ebenso wird dort [GLY00, Sec. 3, Th. 2 & Th. 3] gezeigt, daß der Gesamtimpuls

$$P(t) = \int \rho(x, t)v(x, t)\, dx = \sum_{i=1}^{N} m_i q_i'(t)$$

und die mittels schiefsymmetrischer Matrizen $W$ dimensionsunabhängig definierten Komponenten des Drehimpulses

$$L(t) = \int \rho(x,t) x \cdot W v(x,t)\, dx = \sum_{i=1}^{N} \left( m_i q_i(t) \cdot W q_i'(t) + J m_i H_i(t) \cdot W H_i(t)' \right)$$

Erhaltungsgrößen sind.

Diese Erhaltungseigenschaften lassen sich bei dem in Kapitel 1.4 beschriebenen Vorgehen direkt auf den integraldiskretisierten Fall übertragen [GLY00].

# Kapitel 2

# Maßtheoretische Grundlagen

Gegenstand des Kapitels sind Maße auf Hyperflächen. Dabei sollen die betrachteten Hyperflächen stets durch den geeignet definierten Rand einer möglichst allgemeinen beschränkten Teilmenge des $\mathbb{R}^n$ repräsentiert werden. Dazu wird zunächst ein adäquater Randbegriff gegeben und für diesen ein mit der geometrischen Intuition übereinstimmendes Maß entwickelt. Es zeigt sich, daß das Hausdorff-Maß dieser Anforderung genügt. Motiviert durch die geometrische Maßtheorie folgt mit Hilfe der Funktionen mit beschränkter Variation eine Charakterisierung der betrachteten Teilmengen des $\mathbb{R}^n$. Ausgehend von dieser Charakterisierung erhält man eine Darstellung des $(n-1)$-dimensionalen Hausdorff-Maßes durch Funktionen $\chi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ mit beschränkter Variation. Die Approximierbarkeit von Funktionen mit beschränkter Variation durch glatte Funktionen liefert schließlich ein für das numerische Vorgehen wichtiges Approximationsresultat für das Hausdorff-Maß.

## 2.1 Ränder beschränkter Teilmengen in $\mathbb{R}^n$

Bezeichne $M$ eine beschränkte Teilmenge des $\mathbb{R}^n$, wobei $\mathbb{R}^n$ als metrischer Raum mit der durch das euklidische Skalarprodukt induzierten Metrik aufgefaßt wird. Der topologische Rand $\partial M$ der Menge $M \subset \mathbb{R}^n$ ist definiert als

$$\partial M := \{x \in \mathbb{R}^n \,|\, U_\varepsilon(x) \cap M \neq \emptyset \wedge U_\varepsilon(x) \cap (\mathbb{R}^n \setminus M) \neq \emptyset,\, \varepsilon > 0 \,\text{bel.}\}\,.$$

Da nun im folgenden eine aus der geometrischen Maßtheorie motivierte Darstellung des Hausdorff-Maßes behandelt werden soll, betrachtet man statt des topologische Randes $\partial M$ eine Teilmenge $\partial^* M \subseteq \partial M$, welche gerade die Menge derjenigen Punkte ist, in denen eine geeignet definierte maßtheoretische Normale an $M$ existiert ([Zie89, Def. 5.6.4],[EG92, Sec. 5.8]). Falls $M$ glattberandet ist, ist $\partial^* M = \partial M$.

## 2.2 Hausdorff-Maß

Es soll ein Maß auf $\mathbb{R}^n$ definiert werden, das einer Hyperfläche ein mit der geometrischen Intuition übereinstimmendes Maß zuordnet. Dieses Maß ist das Hausdorff-Maß.

**Definition 2.1.** (**Hausdorff-Maß**) *Sei $s \geq 0$, $\varepsilon > 0$ beliebig und $M \subset \mathbb{R}^n$. Mit*

$$\mathcal{H}^s_\varepsilon(M) := \inf \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} \alpha(s) \left( \frac{\operatorname{diam} A_i}{2} \right)^s \mid M \subset \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i, \operatorname{diam} A_i < \varepsilon \right\}$$

*bezeichne*

$$\mathcal{H}^s(M) = \lim_{\varepsilon \to 0} \mathcal{H}^s_\varepsilon(M)$$

*das $s$-dimensionale Hausdorff-Maß von $M$. Hierbei bezeichnet $\alpha(s)$ im Falle ganzzahliger $s$ das Volumen der Einheitskugel in $\mathbb{R}^s$.*

Der Grenzübergang bewirkt, daß sich die Überdeckungen $A_i$ an die lokale Geometrie von $M$ anpassen. Die Normierung mit $\alpha(s)$ stellt sicher, daß das $s$-dimensionale Hausdorff-Maß mit dem intuitiven $s$-dimensionalen Flächeninhalt übereinstimmt. Man zeigt dementsprechend mit Hilfe der Flächen-Formel ([EG92, Sec. 3.3.2, Th. 1]) für eine als Graph einer bijektiven, Lipschitz-stetigen Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ über $[a, b]$ gegebene Kurve $C := f([a, b])$ in $\mathbb{R}^n$

$$\int_a^b |f'| \, dx = \mathcal{H}^1(C) \,,$$

was gerade der intuitiven Länge der Kurve $C$ entspricht. Analog gilt für eine als Graph einer Lipschitz-stetigen Funktion $g : \mathbb{R}^{n-1} \to \mathbb{R}$ über $U \subset \mathbb{R}^{n-1}$ gegebene Fläche $G := \{(x, g(x)) \mid x \in U\}$

$$\int_U \sqrt{1 + |\nabla g|^2} \, dx = \mathcal{H}^{n-1}(G) \,,$$

was wiederum gerade der intuitiven Fläche von $G$ entspricht ([EG92, Sec. 3.3.4]).
Mit Hilfe der isodiametrischen Ungleichung und eines Überdeckungstheorems erhält man, daß das $n$-dimensionale Lebesgue-Maß und das $n$-dimensionale Hausdorff-Maß auf $\mathbb{R}^n$ gerade übereinstimmen ([Zie89, Th. 1.4.2], [EG92, Sec. 2.2, Th. 2]). Neben zahlreichen Gemeinsamkeiten des Lebesgue- und des Hausdorff-Maßes gibt es jedoch einen entscheidenden Unterschied zwischen beiden. Ist $M \subset \mathbb{R}^n$ beschränkt, so ist das Lebesgue-Maß von $M$ endlich, wohingegen $\mathcal{H}^s(M) = \infty$ möglich ist. Dieser Umstand gibt Anlaß zur Definition der Hausdorff-Dimension.

**Definition 2.2.** (**Hausdorff-Dimension**) *Die Zahl $d \in \mathbb{N}$ mit*

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^s(M) &= 0 \quad \text{für } s > d \\ \text{und} \quad \mathcal{H}^s(M) &= \infty \quad \text{für } s < d \end{aligned}$$

*heißt die Hausdorff-Dimension von $M$.*

Die im folgenden untersuchten Hyperflächen haben als Ränder hinreichend regulärer $n$-dimensionaler Mengen in $\mathbb{R}^n$ die Hausdorff-Dimension $(n-1)$.
Als abschließende Bemerkung sei noch erwähnt, daß bei entsprechneder Definition auch reelle Werte für die Hausdorff-Dimension zugelassen werden können, welche etwa bei der Betrachtung von Julia-Mengen eine Rolle spielen.

## 2.3 Perimeter-Formel

Es wird nun eine Darstellung des Hausdorff-Maßes mit Hilfe spezieller, auf offenen Teilmengen des $\mathbb{R}^n$ definierten, Funktionen entwickelt. Diese Darstellung hat den Vorteil, daß damit ganz im Sinne der hier verfolgten Vorgehensweise das Hausdorff-Maß einer Hyperfläche als Rand einer Menge $M \subset \mathbb{R}$ berechnet werden kann, ohne eine explizite Darstellung der Hyperfläche zu benötigen. Die Funktionen, die hierfür betrachtet werden, sind die Funktionen mit beschränkter Variation.

**Definition 2.3.** (**Funktionen mit beschränkter Variation, BV**) *Sei $M \subset \mathbb{R}^n$ offen. Eine Funktion $f \in L^1(M)$, deren partielle Ableitungen im distributionellen Sinne Maße mit endlicher totaler Variation in $M$ sind, heißt Funktion mit beschränkter Variation. Die Klasse dieser Funktionen wird mit $BV(M)$ bezeichnet (bounded variation). Das bedeutet $f \in BV(M)$ gilt genau dann, wenn es für $i = 1, \ldots, n$ auf $M$ definierte Radon-Maße $\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_n$ gibt, so daß $|D\mu_i| < \infty$ $(i = 1, \ldots, n)$ und*

$$\int f \partial_i \varphi dx = -\int \varphi D\mu_i \quad \forall\, \varphi \in C_0^\infty(M).$$

Der Gradient von $f$ ist daher ein vektorwertiges Maß mit endlicher totaler Variation

$$\|\nabla f\| := \sup \left\{ \int_M f \,\mathrm{div} v \, dx \mid v = (v_1, \ldots, v_n) \in C_0^\infty(M, \mathbb{R}^n),\ |v(x)| \leq 1 \text{ für } x \in M \right\} < \infty \,.$$

Der Raum $BV(M)$ ist ein Banach-Raum mit der Norm

$$|f|_{BV(M)} = |f|_{1,M} + \|\nabla f\| \,.$$

Es ist $W^{1,1}(M) \subset BV(M)$, da für $f \in W^{1,1}(M)$ und $v \in C_0^\infty(M, \mathbb{R}^n)$

$$\int\limits_M f \,\mathrm{div} v \, dx = -\int\limits_M \nabla f \cdot v \, dx$$

und damit

$$\begin{aligned} \|\nabla f\|(M) &= \sup \left\{ \int_M f \,\mathrm{div} v \, dx \mid v \in C_0^\infty(M, \mathbb{R}^n),\ |v| \leq 1 \right\} \\ &= \sup \left\{ -\int_M \nabla f \cdot v dx \mid v \in C_0^\infty(M, \mathbb{R}^n),\ |v| \leq 1 \right\} \\ &= \int\limits_M |\nabla f| dx < \infty \end{aligned}$$

gilt. Die Funktion $f \in W^{1,1}(M)$ hat also endliche totale Variation in $M$.
Eine für die weiteren Betrachtungen und insbesondere das numerische Vorgehen wichtige Eigenschaft der Funktionen mit beschränkter Variation ist, daß sie durch glatte Funktionen approximiert werden können.

**Satz 2.4.** (**Approximation von BV-Funktionen**) *Sei $f \in BV(M)$. Dann gibt es eine Folge $\{f_i\} \in C^\infty(M)$ so daß*

$$\lim_{i\to\infty} |f_i - f|_{1,M} = 0$$

*und*

$$\lim_{i\to\infty} \|\nabla f_i\|(M) = \|\nabla f\|(M)\,.$$

*Beweis*: [Zie89, Th. 5.3.3] oder [EG92, Sec. 5.2.2] □

Bevor man nun mit Hilfe der Funktionen mit beschränkter Variation eine Darstellung des $(n-1)$-dimensionalen Hausdorff-Maßes für Hyperflächen als Ränder von Mengen $M \subset \mathbb{R}^n$ einführen kann, muß zunächst die Klasse der Mengen $M$ definiert werden, für die ein vernünftiger Randbegriff existiert. Die allgemeinste Klasse von Mengen, für die ein im maßtheoretischen Sinne definierter Rand $\partial^* M$ (siehe Kapitel 2.1) existiert, ist die Klasse der Mengen mit endlichem Perimeter.

**Definition 2.5.** (**Perimeter**) *Eine Borel-Menge $M \subset \Omega \subset \mathbb{R}^n$ heißt eine Menge mit endlichem Perimeter in $\Omega$, falls die charakteristische Funktion $\chi_M$ von $M$ eine Funktion mit beschränkter Variation in $\Omega$ ist. Das bedeutet, die partiellen Ableitungen von $\chi_M$ sind Radon-Maße auf $\Omega$ und der Perimeter von $M$ in $\Omega$ ist definiert als*

$$P(M,\Omega) := \|\nabla\chi_M\|(\Omega).$$

Insbesondere haben beschränkte Mengen mit glattem Rand endlichen Perimeter. Man zeigt damit zunächst die gesuchte Darstellung des $(n-1)$-dimensionalen Hausdorff-Maßes für den Spezialfall beschränkter, glattberandeter Mengen.

**Satz 2.6.** (**Perimeter-Formel für glattberandete Mengen**) *Sei $M$ eine offene, glattberandete Teilmenge des $\mathbb{R}^n$. Dann ist*

$$P(M,\Omega) = \|\nabla\chi_M\|(\Omega) = \mathcal{H}^{n-1}(\partial M \cap \Omega)\,. \tag{2.1}$$

*Beweis*: Da der Rand $\partial M$ als glatt vorausgesetzt wurde, kann man den Gaußschen Satz anwenden. Für $v \in C_0^\infty(\Omega, \mathbb{R}^n)$ mit $\|v\|_\infty \le 1$ ist

$$\int_M \mathrm{div} v\, dx = \int_{\partial M} v \cdot \nu\, d\mathcal{H}^{n-1} \le \mathcal{H}^{n-1}(\partial M \cap \Omega),$$

wobei $\nu(x)$ die äußere Einheitsnormale an $\partial M$ in $x$ bezeichnet. Damit ist für offene glattberandete Mengen $M$

$$\|\nabla\chi_M\|(\Omega) \leq \mathcal{H}^{n-1}(\partial M \cap \Omega) < \infty. \tag{2.2}$$

Zeige nun die umgekehrte Ungleichung. Da $\partial M$ als glatt vorausgesetzt war, gibt es eine Umgebung $U_\varepsilon(\partial M) \subset \Omega$ von $\partial M$ ($\varepsilon > 0$), so daß die signierte Distanzfunktion $d(x, \partial M)$ zum Rand $\partial M$ von $M$ dort zweimal stetig differenzierbar ist [GT01, App. 14.6]. Es sei $\nabla d(x, \partial M)(x_0) = \nu(y_0)$ für $x_0 \in U_\varepsilon(\partial M)$, wobei $y_0 \in \partial M$ mit $d(x_0, \partial M) = \sigma|x_0 - y_0|$ und $\sigma = \pm 1$. Das bedeutet, es gibt eine Fortsetzung $\tilde{\nu} \in C_0^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$ der äußeren Einheitsnormalen $\nu$ an $M$ mit $|\tilde{\nu}| \leq 1$. Setze dazu etwa $\nu$ außerhalb einer hinreichend kleinen Umgebung von $\partial M$ glatt durch 0 fort. Setzt man nun $v := \eta\tilde{\nu}$ mit $\eta \in C_0^\infty(\Omega)$, so erhält man wiederum mit dem Gaußschen Satz

$$\int\limits_M \mathrm{div} v \, dx = \int\limits_M \mathrm{div}(\eta\tilde{\nu}) \, dx = \int\limits_{\partial M} \eta\tilde{\nu} \cdot \nu d\mathcal{H}^{n-1} = \int\limits_{\partial M} \eta d\mathcal{H}^{n-1},$$

da $\tilde{\nu}|_{\partial M} = \nu$. Daraus folgt

$$\|\nabla\chi_M\|(\Omega) \geq \sup\left\{ \int_{\partial M} \eta d\mathcal{H}^{n-1} \mid \eta \in C_0^\infty(\Omega),\, |\eta(x)| \leq 1 \right\} = \mathcal{H}^{n-1}(\partial M \cap \Omega)$$

und mit (2.2) erhält man damit die Behauptung. □

Für den allgemeinen Fall der Mengen $M \subset \Omega \subset \mathbb{R}^n$ mit lokal endlichem Perimeter in $\Omega$, d.h. $P(M, \Omega) < \infty$, gilt ein analoges Resultat.

**Satz 2.7.** (**Perimeter-Formel für Mengen mit lokal endlichem Perimeter**) *Für Mengen $M \subset \Omega \subset \mathbb{R}^n$ mit lokal endlichem Perimeter in $\Omega$ gilt*

$$\|\nabla\chi_M\|(B) = \mathcal{H}^{n-1}(B), \tag{2.3}$$

*falls $B \subset \partial^* M$ eine Borel-Menge ist.*

*Beweis*: [Zie89, Th. 5.8.1] oder [EG92, Sec. 5.7.3] □

Mit der Approximierbarkeit von BV-Funktionen durch glatte Funktionen, wie in Satz 2.4, erhält man aus obigen Darstellungen (2.1) und (2.3) folgendes Approximationsresultat für das Hausdorff-Maß.

**Satz 2.8.** (**Approximation des Hausdorff-Maßes**) *Für Mengen $M \subset\subset \Omega \subset \mathbb{R}^n$ mit lokal endlichem Perimeter gilt*

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \|\nabla(\varphi_\varepsilon * \chi_M)\|(B) = \lim_{\varepsilon\to 0} \int\limits_\Omega |\nabla(\varphi_\varepsilon * \chi_M)(x)| dx = \mathcal{H}^{n-1}(B), \tag{2.4}$$

*falls $B \subset \partial^* M$ eine Borel-Menge ist.*

*Beweis*: Der Beweis kann analog zum Beweis von Satz 2.4 wie in [Zie89, Th. 5.3.3] oder [EG92, Sec. 5.2.2] geführt werden, da die dort verwendete Folge $\{f_i\}$ ebenfalls durch Glättung der Funktion $f$ gewonnen wird. Da $M \subset\subset \Omega$ vorausgesetzt wurde, es also ein $\delta > \varepsilon > 0$ gibt so daß $d(M, \Omega) > \delta$, kann man jedoch auf eine Zerlegung der Eins im Beweis verzichten.
Für den Spezialfall glattberandeter Mengen $M$ formuliert man (2.4) folgendermaßen um:

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \|\nabla(\varphi_\varepsilon * \chi_M)\|(\Omega) = \mathcal{H}^{n-1}(\partial M \cap \Omega) \tag{2.5}$$

Der Beweis kann analog zum Beweis von Satz 2.6 direkt geführt werden. Für $v \in C_0^\infty(\Omega, \mathbb{R}^n)$ mit $\|v\|_\infty \leq 1$ erhalte mit Hilfe des Satzes von Fubini und des Gaußschen Satzes

$$\int_\Omega (\varphi_\varepsilon * \chi_M) \operatorname{div} v \, dx = \int_\Omega \chi_M \operatorname{div}(\varphi_\varepsilon * v) \, dx = \int_M \operatorname{div}(\varphi_\varepsilon * v) \, dx = \int_{\partial M} (\varphi_\varepsilon * v) \cdot \nu \, d\mathcal{H}^{n-1}$$

wobei $\nu(x)$ die äußere Einheitsnormale an $\partial M$ in $x$ bezeichnet. Da die Funktionen $(\varphi_\varepsilon * v)$ beschränkt sind und gleichmäßig gegen $v$ konvergieren, vertauschen nach dem kleinen Satz von Lebesgue Limes und Integral und man erhält

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\partial M} (\varphi_\varepsilon * v) \cdot \nu \, d\mathcal{H}^{n-1} = \int_{\partial M} v \cdot \nu \, d\mathcal{H}^{n-1} \leq \mathcal{H}^{n-1}(\partial M \cap \Omega) \,. \tag{2.6}$$

Mit einer wie im Beweis zu Satz 2.6 konstruierten Fortsetzung $\tilde{\nu}$ der äußeren Einheitsnormalen an $\partial M$ sei $v = \eta\tilde{\nu}$ mit $\eta \in C_0^\infty(\Omega)$. Wiederum mit dem Gaußschen Satz erhalte damit

$$\int_M \operatorname{div}(\varphi_\varepsilon * v) \, dx = \int_M \operatorname{div}(\varphi_\varepsilon * (\eta\tilde{\nu})) \, dx = \int_{\partial M} (\varphi_\varepsilon * (\eta\tilde{\nu})) \cdot \nu \, d\mathcal{H}^{n-1} \,.$$

Da die Funktionen $(\varphi_\varepsilon * (\eta\tilde{\nu}))$ in einer Umgebung von $\partial M$ beschränkt sind und gleichmäßig gegen $(\eta\tilde{\nu})$ konvergieren, folgt mit dem kleinen Satz von Lebesgue

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\partial M} (\varphi_\varepsilon * (\eta\tilde{\nu})) \cdot \nu \, d\mathcal{H}^{n-1} = \int_{\partial M} (\eta\tilde{\nu}) \cdot \nu \, d\mathcal{H}^{n-1} = \int_{\partial M} \eta \, d\mathcal{H}^{n-1} \,,$$

da $\tilde{\nu}|_{\partial M} = \nu$. Damit erhält man

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \|\nabla(\varphi_\varepsilon * \chi_M)\|(\Omega) \geq \sup \left\{ \int_{\partial M} \eta \, d\mathcal{H}^{n-1} \,|\, \eta \in C_0^\infty(\Omega),\, |\eta(x)| \leq 1 \right\} = \mathcal{H}^{n-1}(\partial M \cap \Omega) \,,$$

woraus mit (2.6) die Behauptung (2.5) für glattberandete Mengen $M$ folgt. □

Dieses Resultat, welches die Approximation des Hausdorff-Maßes durch die totale Variation glatter Funktionen mit kompaktem Träger beschreibt, ist für alle weiteren Kapitel grundlegend, da es mit geeigneten Hilfsmitteln die numerische Approximation des Hausdorff-Maßes einer Hyperfläche erlaubt, ohne für diese eine explizite Darstellung zu benötigen.

# Kapitel 3

# Oberflächenerscheinungen

Dieses Kapitel befaßt sich mit Erscheinungen, welche an Grenzflächen zwischen zwei kontinuierlichen Medien auftreten. Dabei werden nur Effekte berücksichtigt, die durch die geometrischen Eigenschaften der Grenzflächen bedingt sind. Eine Temperatur- oder Konzentrationsabhängigkeit wird nicht untersucht. Die Medien selbst werden durch Mengen repräsentiert, also etwa $G \subset\subset \Xi \subset \mathbb{R}^n$ und $(\Xi \setminus G)$, wobei als Grenzfläche der Rand von $G$ in $\Xi$, also eine Hyperfläche in $\mathbb{R}^n$ betrachtet wird. Diese Hyperfläche wird als Oberfläche von $G$ bezeichnet.
Das bedeutet, unter gewissen Regularitätsbedingungen an die betrachteten Mengen $G$, gelten die Resultate aus Kapitel 2 auch hier. Im folgenden nehme stets an, daß $G$ glattberandet ist. Dann genügt es, statt $\partial^* G$ den topologischen Rand $\partial G$ von $G$ zu betrachten.

## 3.1 Oberflächenenergie

Die Energie $V$ einer freien Oberfläche eines Mediums, welches durch die Menge $G$ mit $G \subset\subset \Xi \subset \mathbb{R}^n$ repräsentiert wird, ist proportional zum Hausdorff-Maß $\mathcal{H}^{n-1}(\partial G)$. Der Proportionalitätsfaktor $\alpha \in \mathbb{R}_+$ wird als Oberflächenspannung bezeichnet. Das bedeutet

$$V = \alpha\, \mathcal{H}^{n-1}(\partial G)\,.$$

Exemplarisch werden die Werte der Oberflächenspannung für die physikalisch einzig relevante Dimension $n = 3$ an der Grenzfläche Wasser-Luft $\alpha_{\mathrm{H_2O}}$ und an der Grenzfläche Benzin-Luft $\alpha_{\mathrm{Benzin}}$ bei 20°C angegeben [LL91]:

$$\alpha_{\mathrm{H_2O}} \approx 72,5 \cdot 10^{-3} \frac{N}{m}\,, \quad \alpha_{\mathrm{Benzin}} \approx 24,0 \cdot 10^{-3} \frac{N}{m}$$

## 3.2 Kapillardruck - Laplacesche Formel

Unter Beachtung der geometrischen Oberflächeneigenschaften der Grenzfläche zweier Medien wird nun eine Bedingung dafür hergeleitet, daß sich diese miteinander im thermodynamischen Gleichgewicht befinden. Die Betrachtungen resultieren in der Laplaceschen Formel für den Kapillardruck, aus welcher sich eine Darstellung der Flächenkraftdichte motivieren läßt. Relevant für die Betrachtungen sind nur die Dimensionen $n = 2$ und $n = 3$. Reale physikalische Medien haben Dimension $n = 3$ und für mathematische Modelle genügt oft die Dimension $n = 2$.

An einer gekrümmten Grenzfläche zweier Medien $\mathcal{M}_1$ und $\mathcal{M}_2$, welche durch die Mengen $G \subset\subset \Xi$ und $(\Xi \setminus G)$ repräsentiert werden, tritt eine Druckdifferenz auf, der sogenannte Kapillardruck. Um diese Druckdifferenz zu bestimmen, betrachtet man eine Variation der Grenzfläche entlang der äußeren Normalen $\nu$ von $G$.
Die Grenzfläche $\partial G$ sei hinreichend glatt, so daß es eine reguläre Parametrisierung $g : U \subset \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3$ gibt. Für eine beschränkte Teilmenge $D \subset U$ sei $h : \overline{D} \to \mathbb{R}$ eine beliebige glatte Funktion. Die Variation von $g(\overline{D})$ in Richtung der Normalen $\nu$ an $g(\overline{D})$ wird dann durch die Abbildung

$$\begin{aligned} \varphi : \overline{D} \times (-\varepsilon, \varepsilon) &\to \mathbb{R}^3 \\ (x, t) &\mapsto \varphi(x, t) = g(x) + th(x)\nu(x) \end{aligned}$$

beschrieben.
Bezeichne $A(t) = \int_{\overline{D}} |\partial_1\varphi \times \partial_2\varphi| dx$ das Maß der Fläche $\varphi(\overline{D}, t)$, insbesondere also $A(0) = \mathcal{H}^2(g(\overline{D}))$. Für hinreichend kleines $\varepsilon$ ist $A(t)$ dann differenzierbar und man erhält für die Variation der Fläche (siehe etwa [dC76, Sec. 3-5.B.])

$$\frac{\partial}{\partial t} A(t)\Big|_{t=0} = -\int_{\overline{D}} 2h(x)H(g(x))|\partial_1 g(x) \times \partial_2 g(x)|\, dx\,.$$

Dabei bezeichnet $H(y)$ die mittlere Krümmung von $g(\overline{D})$ im Punkt $y \in g(\overline{D})$.
Bezeichne nun $p_1$ den Druck in $\mathcal{M}_1$ und $p_2$ den Druck in $\mathcal{M}_2$, so erhält man für die oben betrachtete Variation von $g(\overline{D})$ für die Variation der aufzubringenden Volumenarbeit

$$\int_{\overline{D}} (p_1 - p_2)h(x)|\partial_1 g(x) \times \partial_2 g(x)|\, dx\,.$$

Im thermodynamischen Gleichgewicht muß dann die Variation der gesamten zur Verschiebung der Grenzfläche notwendigen Arbeit gerade verschwinden. Das bedeutet

$$\int_{\overline{D}} \left[(p_1 - p_2) - \alpha 2H(g(x))\right] h(x)|\partial_1 g(x) \times \partial_2 g(x)|\, dx = 0\,.$$

Da $h$ beliebig und glatt gewählt war, folgt daraus unmittelbar

$$p_1 - p_2 = \alpha 2H\,. \tag{3.1}$$

Diese Gleichung bezeichnet man auch als Laplacesche Formel für den Kapillardruck. Man kann daraus direkt ablesen, daß der Druck in dem Medium größer ist, dessen Oberfläche konvex ist. Im Falle einer ebenen Grenzfläche, das bedeutet $H = 0$, sind die Drücke in beiden Medien gleich.

Man kann aus (3.1) ebenfalls unmittelbar einen Ausdruck für die Flächenkraftdichte der Oberflächenspannung motivieren. Der Kapillardruck

$$p := p_1 - p_2 = \alpha 2H$$

ist gerade die Projektion der Kraft pro Flächenelement in einem Punkt $y$ der Grenzfläche an die äußere Normale $\nu(y)$ des Mediums $\mathcal{M}_1$. Das bedeutet, die Flächenkraftdichte $s(y)$ für die Oberfläche des Mediums $\mathcal{M}_1$ hat die Darstellung

$$s(y) := -\tilde{\alpha} H(y)\nu(y)\,,$$

wobei $\tilde{\alpha} := 2\alpha$.

# Kapitel 4

# Modellierung von Oberflächenerscheinungen in der Methode der Finiten Massen

Um nun die im vorigen Kapitel 3 beschriebenen Oberflächenerscheinungen in der Methode der Finiten Massen zu modellieren, wird zunächst eine dem Ansatz der Methode angemessene Charakterisierung der betrachteten Mengen und entsprechend ihrer Oberflächen angegeben. Ausgehend von dieser Charakterisierung wird unter Zuhilfenahme der Ergebnisse aus Kapitel 2 eine Darstellung für die Energie der Oberfläche eines Mediums hergeleitet. Daraus gewinnt man schließlich mit Hilfe der Lagrange-Funktion die Terme für die durch die Oberflächenspannung hervorgerufenen Kräfte und Momente in den Teilchen. Ein Vergleich der Definition der Oberflächenenergie mit der Definition der inneren Energie eines Fluids aus der kalorischen Zustandsgleichung wie in Kapitel 1.2 zeigt, daß auch hier die grundlegenden Erhaltungseigenschaften eines abgeschlossenen Systems erfüllt sind. Abschließend folgt eine Interpretation der mittels der gewonnenen Kraftterme formulierten Bewegungsgleichung im Rahmen der Kontinuumsmechanik.

## 4.1 Oberfläche eines masseerfüllten Gebietes

Die Methode der Finiten Massen beruht, wie in Kapitel 1 beschrieben, auf einer Diskretisierung der Masse und nicht des Raumes. Daher entspricht es dem Charakter der Methode, die betrachteten Mengen $M$ implizit durch die Massendichte $\rho$ zu definieren. Ein beliebiges masseerfülltes Gebiet $M \subset\subset \Omega \subset \mathbb{R}^n$ läßt sich als

$$M = \operatorname{supp} \rho = \bigcup_{c \in \mathbb{R}_+} \{x \in \Omega \,|\, \rho(x) - c = 0\}$$

darstellen. Das bedeutet, die Oberfläche von $M$, welche gerade durch die Grenzfläche zwischen $M$ und $(\Omega \setminus M)$ repräsentiert wird, ist der topoloische Rand des Trägers der

Massendichte. Wegen des Tensorproduktansatzes (1.4) der Formfunktionen, welche sich zur Massendichte aufsummieren, ist dieser im allgemeinen nicht glatt. Die Laplacesche Formel aus Abschnitt 3.2 nutzt jedoch zur Charakterisierung des thermodynamischen Gleichgewichtszustandes zweier Medien die mittlere Krümmung $H$ der Grenzfläche, was, um einen wohldefinierten Ausdruck für den Kapillardruck zu erhalten, eine hinreichende Glattheit der Grenzfläche voraussetzt. Damit ist der topologische Rand des Trägers der Massendichte $\rho$ als Oberfläche von $M$ ungeeignet. Eine naheliegende Alternative ist es, eine Niveaufläche (Level-Set)

$$N(c) := \{x \in \Omega \,|\, \rho(x) - c = 0\}$$

der Massendichte für ein $c > 0$ als Oberfläche von $M$ zu betrachten. Die Wahl eines geeigneten $c > 0$ erfolgt dabei empirisch. Prinzipiell erscheint die Wahl $c = \varepsilon$ mit kleinem $\varepsilon > 0$ geeignet, da $N(c)$ in diesem Fall nahezu mit dem Rand des Trägers der Massendichte übereinstimmt, aber immer noch die nötige Glattheit besitzt.
Die Niveaufläche $N(c)$ hat dann, da $\rho$ als Summe differenzierbarer Formfunktionen differenzierbar ist, nach dem Satz über implizite Funktionen mit Ausnahme singulärer Punkte die nötigen Glattheitseigenschaften. Wo im folgenden die Glattheit der Niveaufläche benötigt wird, setzt man stets voraus, daß es sich um eine reguläre Fläche handelt.
Im anschießenden Abschnitt 4.2 wird die Notwendigkeit diskutiert, für das numerische Vorgehen statt der Massendichte $\rho$ die signierte Distanzfunktion zur Niveaufläche $N(c)$ als Level-Set Funktion zu verwenden. Diese wird dabei, wie in Kapitel 5 beschrieben, als sogenannte Viskositätslösung der Eikonal-Gleichung gewonnen. Es können dann auch singuläre Punkte der Niveaufläche in konsistenter Weise behandelt werden.

Das Vorgehen, die Oberfläche eines masseerfüllten Gebietes als Niveaufläche der Massendichte zu definieren, hat neben der Verträglichkeit mit dem Ansatz der Finiten Massen Methode noch weitere entscheidende Vorteile:

(i) Alle Betrachtungen können dimensionsunabhängig angestellt werden. Die Niveaufläche $N(c)$ ist stets eine $(n-1)$-dimensionale Hyperfläche im $\mathbb{R}^n$.

(ii) Topologische Änderungen der Hyperfläche $N(c)$ fügen sich in natürlicher Weise in die Level-Set Formulierung ein. Die Hyperfläche muß nicht eine einzelne Fläche sein, sie kann verschmelzen oder in mehrere Zusammenhangskomponenten zerfallen. Der entscheidende Punkt ist, daß die Funktion $\rho$ stets wohldefiniert bleibt.

(iii) Charakteristische geometrische Größen der Hyperfläche lassen sich unmittelbar angeben:

$$\text{Normale } \nu(x) = \frac{\nabla\rho(x)}{|\nabla\rho(x)|}, \quad \text{mittlere Krümmung } H(x) = \frac{1}{n-1}\ \text{div}\left(\frac{\nabla\rho(x)}{|\nabla\rho(x)|}\right)$$

Ein Nachteil der impliziten Definition der Oberfläche ist, daß die konkrete Lokalisation der Oberfläche bei Bedarf, etwa zur Visualisierung, erst mit Hilfe geeigneter Verfahren berechnet werden muß. Dies ist jedoch ein Standardproblem im Rahmen der Level-Set Methoden und es existieren eine Reihe von Algorithmen zu dessen Lösung, etwa der Marching Cubes Algorithmus [LC87] oder [KBSS01]. Dabei wird stets die Isofläche $\rho = c$ mittels Interpolation aus Gitterdaten mit bekannten Werten von $\rho$ konstruiert.

## 4.2 Oberflächenenergie

Hat man die Oberfläche eines masseerfüllten Gebietes $M \subset\subset \Omega \subset \mathbb{R}^n$ als Niveaufläche der Massendichte definiert, so kann man mit den Hilfsmitteln aus Kapitel 2 die Energie $V$ dieser Oberfläche berechnen. Es ist

$$V = \alpha \int\limits_{N(c)} d\mathcal{H}^{n-1}\,,$$

wobei $\alpha$ wieder die Oberflächenspannung bezeichnet. Mit Hilfe der Perimeter-Formel (2.1) erhält man

$$V = \alpha \|\nabla \chi_{\widetilde{M}}\|(\Omega)\,, \tag{4.1}$$

wobei $\widetilde{M} := \{x \in M \,|\, \rho(x) - c > 0\}$. Die charakteristische Funktion $\chi_{\widetilde{M}}$ kann mit Hilfe der Heaviside-Funktion $H$ durch die Massendichte $\rho$ dargestellt werden. Mit

$$H : \mathbb{R} \to \{0,1\} : t \mapsto \begin{cases} 1 & \text{für } t > 0 \\ 0 & \text{für } t \leq 0 \end{cases}$$

ist

$$\chi_{\widetilde{M}}(x) = H(\rho(x) - c)\,.$$

Diese Darstellung (4.1) der Oberflächenenergie ist jedoch numerisch nicht zugänglich. Daher verwendet man die Approximation des Hausdorff-Maßes aus Satz 2.8. Man definiert folglich mit einem Glättungsparameter $\varepsilon > 0$

$$\begin{aligned} V_\varepsilon &:= \alpha \left\|\nabla \left[(\varphi_\varepsilon * H)\,(\rho - c)\right]\right\|(\Omega) \\ &= \alpha \int\limits_\Omega \left|\nabla \left[(\varphi_\varepsilon * H)\,(\rho(x) - c)\right]\right| dx\,. \end{aligned}$$

Bezeichnen nun

$$H_\varepsilon(t) := (\varphi_\varepsilon * H)\,(t) \quad \text{und} \quad \delta_\varepsilon(t) = H'_\varepsilon(t) = \left(\varphi'_\varepsilon * H\right)(t) \tag{4.2}$$

die geglättete Heaviside-Funktion und ihre Ableitung. Es ist dabei offensichtlich gerade

$$\delta_\varepsilon(t) = \varphi_\varepsilon(t)\,.$$

Damit erhält man für die Approximation der Oberflächenenergie

$$\begin{aligned} V_\varepsilon &= \alpha \int_\Omega |\nabla [H_\varepsilon(\rho(x) - c)]| \, dx \\ &= \alpha \int_\Omega \delta_\varepsilon(\rho(x) - c) |\nabla \rho(x)| \, dx \, . \end{aligned}$$

Das auftretende Integral kann nun mit Hilfe einer Quadraturformel auf einem ortsfesten Gitter $G$, welches $\Omega$ überdeckt, approximiert werden.

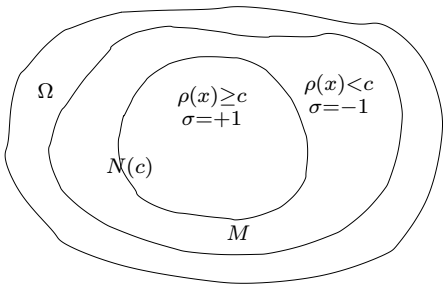
Dieses direkte Vorgehen zur Approximation des Hausdorff-Maßes der Niveaufläche $N(c)$ liefert jedoch keine befriedigenden Ergebnisse. Die Ursache hierfür liegt darin, daß a priori nichts über die Eigenschaften der als Level-Set Funktion verwendeten Massendichte bekannt ist. Eine geeignete Wahl des Glättungsparameters $\varepsilon$ ist ohne Kenntnis der Größenordnung der Funktionswerte der Level-Set Funktion nahezu unmöglich. Insbesondere kann der Durchmesser des Integrationsgebietes $\{x \in \Omega \,|\, |\rho(x) - c| \leq \varepsilon\}$ entlang $N(c)$ stark variieren. Als Folge davon variiert auch die Anzahl der Quadraturpunkte, die zur Approximation des Integrals verwandt werden, entlang $N(c)$. Zudem kann die Level-Set Funktion $\rho$ sehr steile oder sehr flache Gradienten ausbilden, was zu numerischen Instabilitäten in der Rechnung führt.

Abhilfe schafft die Verwendung der signierten Distanzfunktion zur Niveaufläche $N(c)$ als Level-Set Funktion. Definiere also

$$d(\cdot, N(c)) : \mathbb{R}^n \supset \Omega \to \mathbb{R} : x \mapsto d(x, N(c)) = \sigma \min_{y \in N(c)} |x - y| \, ,$$

wobei

$$\sigma := \begin{cases} +1 & \text{falls } \rho(x) - c \geq 0 \\ -1 & \text{falls } \rho(x) - c < 0 \end{cases} \, .$$




Skizze

Damit ist eine direkte Verknüpfung des Glättungsparameters $\varepsilon$ mit der Gitterweite eines ortsfesten Quadraturpunktgitters möglich. Außerdem werden durch $|\nabla d(\cdot, N(c))| \equiv 1$ numerische Instabilitäten in der Rechnung vermieden.

Nun ist jedoch die Wohldefiniertheit der signierten Distanzfunktion und ihres Gradienten auf einem Gebiet $\Omega$ a priori nicht gegeben. Vielmehr gibt es starke Einschränkungen

für die Existenz und Eindeutigkeit von $d(\cdot, N(c))$ als Lösung der Eikonal-Gleichung

$$\begin{cases} |\nabla d(x, N(c))| = 1 & \text{für } x \in \Omega \\ d(x, N(c)) = 0 & \text{für } x \in N(c)\,. \end{cases}$$

Ein geeigneter Lösungsbegriff für schwache Lösungen, sowie Strategieen zur Lösung der Gleichung werden in Kapitel 5 diskutiert. Unter der Voraussetzung, daß die Niveaufläche $N(c)$ hinreichend glatt ist, gibt es jedoch eine Umgebung $U_\varepsilon(N(c))$, in der eine klassische Lösung der Eikonal-Gleichung existiert.

**Satz 4.1.** (**Klassische Lösung der Eikonal-Gleichung**) *Sei $M \subset \mathbb{R}^n$ ein beschränktes Gebiet mit glattem Rand $\partial M \in C^k$ ($k \geq 2$) und bezeichne $d(\cdot, \partial M)$ die signierte Distanzfunktion zum Rand von $M$. Dann ist $d(\cdot, \partial M) \in C^k\left(\{x \in \mathbb{R}^n \,|\, d(x, \partial M) < \mu\}\right)$, wobei $\mu$ eine positive Konstante ist, welche eine obere Schranke für das Reziproke der Hauptkrümmungen von $\partial M$ darstellt.*

*Beweis*: siehe [GT01, App. 14.6] □

Dieses Resultat gestattet nun die endgültige Definition der Oberflächenenergie $V_\varepsilon^S$.

**Definition 4.2.** (**Oberflächenenergie**) *Die Energie $V_\varepsilon^S$ einer als Niveaufläche $N(c)$ der Massendichte $\rho$ definierten Oberfläche eines masseerfüllten Gebietes $M = \operatorname{supp}\rho \subset\subset \Omega \subset \mathbb{R}^n$ ist für einen gegebenen Glättungsparameter $\varepsilon > 0$ definiert durch*

$$V_\varepsilon^S := \alpha \int_\Omega |\nabla\left[H_\varepsilon\left(d(x, N(c))\right)\right]|\, dx = \alpha \int_\Omega \delta_\varepsilon\left(d(x, N(c))\right)\, dx\,,$$

*wobei $\alpha \in \mathbb{R}_+$ die Oberflächenspannung bezeichnet.*

Mit Satz 2.8 erhält man unmittelbar

$$\lim_{\varepsilon \to 0} V_\varepsilon^S = \alpha \mathcal{H}^{n-1}(N(c))\,.$$

Die Ordnung der Approximation beschreibt der folgende Satz.

**Satz 4.3.** (**Approximationsordnung der Oberflächenenergie**) *Unter obigen Voraussetzungen gilt*

$$V_\varepsilon^S = \alpha \mathcal{H}^{n-1}(N(c)) + \mathcal{O}(\varepsilon)\,.$$

*Beweis*: Die Vorgehensweise ist, zunächt mittels elementarer Umformungen $V_\varepsilon^S$ als eine mit dem Glättungskern $\varphi_\varepsilon(t)$ gewichtete Summation des Hausdorff-Maßes der Niveauflächen $\{x \in \Omega \,|\, d(x, N(c)) = t\}$ darzustellen.
Unter Ausnutzung von $|\nabla d(x, N(c))| \equiv 1$ und der Positivität von $\delta_\varepsilon(t)$ läßt sich der Integrand in der ersten Darstellung von $V_\varepsilon^S$ in Definition 4.2 folgendermaßen umformulieren:

$$|\nabla\left[H_\varepsilon(d(x, N(c)))\right]| = \nabla\left[H_\varepsilon(d(x, N(c)))\right] \cdot \nabla d(x, N(c))$$

Wendet man dann auf

$$V_\varepsilon^S = \alpha \int_\Omega \nabla \left[ H_\varepsilon(d(x, N(c))) \right] \cdot \nabla d(x, N(c))\, dx$$

die Greensche Formel an und nutzt dabei aus, daß das Oberflächenintegral mit den Voraussetzungen aus Definition 4.2 für ein hinreichend kleines $\varepsilon$ verschwindet, so erhält man

$$V_\varepsilon^S = -\alpha \int_\Omega H_\varepsilon(d(x, N(c))) \operatorname{div} \left( \nabla d(x, N(c)) \right)\, dx\,.$$

Durch eine einfache Substitution und eine anschließende Anwendung des Satzes von Fubini gelangt man schließlich zu einer Darstellung

$$\begin{aligned} V_\varepsilon^S &= -\alpha \int_{\mathbb{R}} \varphi_\varepsilon(t) \int_\Omega H(d(x, N(c)) - t) \operatorname{div} \left( \nabla d(x, N(c)) \right)\, dx\, dt \\ &= -\alpha \int_{\mathbb{R}} \varphi_\varepsilon(t) \int_{\{x \in \Omega \mid d(x, N(c)) \geq t\}} \operatorname{div} \left( \nabla d(x, N(c)) \right)\, dx\, dt\,, \end{aligned}$$

aus welcher durch Anwendung des Gaußschen Integralsatzes direkt das erste Zwischenergebnis folgt:

$$\begin{aligned} V_\varepsilon^S &= -\alpha \int_{\mathbb{R}} \varphi_\varepsilon(t) \int_{\{x \in \Omega \mid d(x, N(c)) = t\}} \nabla d(x, N(c)) \cdot \nu\, d\mathcal{H}^{n-1}\, dt \\ &= \alpha \int_{\mathbb{R}} \varphi_\varepsilon(t) \int_{\{x \in \Omega \mid d(x, N(c)) = t\}} d\mathcal{H}^{n-1}\, dt\,. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Dabei wurde lediglich noch verwendet, daß $\nabla d(x, N(c)) = -\nu(x)$, wobei $\nu$ die äußere Normale an $\{x \in \Omega \mid d(x, N(c)) = t\}$ bezeichnet.

Mit Hilfe lokaler Parametrisierungen der Niveauflächen $\{x \in \Omega \mid d(x, N(c)) = t\}$ zeigt man nun, daß das Hausdorff-Maß dieser Niveauflächen gerade um einen Term der Ordnung $\mathcal{O}(t)$ vom Hausdorff-Maß der Niveaufläche $N(c)$ abweicht.

Da die Niveaufläche $N(c)$ nach Voraussetzung hinreichend glatt ist, gibt es zu beliebigem $y \in N(c)$ eine Umgebung $U_\gamma(y') \subset \mathbb{R}^{n-1}$ von $y' := (y_1, \ldots, y_{n-1})$, so daß dort eine zweimal stetig differenzierbare Abbildung $p : U_\gamma(y') \to \mathbb{R}$ existiert, so daß

$$\big(y', p(y')\big) \in N(c) \text{ für alle } y' \in U_\gamma(y')\,.$$

Definiere nun für kleine $t \in \mathbb{R}$, d.h. $|t| < \varepsilon$, eine Abbildung

$$\xi_t : N(c) \to \Omega : y \mapsto y + t\, \nu(y)\,,$$

wobei $\nu(y)$ die äußere Normale an $N(c)$ bezeichne. Die Abbildung überführt $\{x \in \Omega \mid d(x, N(c)) = 0\}$ in $\{x \in \Omega \mid d(x, N(c)) = t\}$. Mit Hilfe der lokalen Parametrisierung $p$ erhält man damit eine lokale Parametrisierung $\pi_t$ für $\{x \in \Omega \mid d(x, N(c)) = t\}$:

$$\pi_t : U_\gamma(y') \to \Omega : x' \mapsto \xi_t \begin{pmatrix} x' \\ p(x') \end{pmatrix}$$

Die Gramsche Determinante $|\partial_1\pi_t(x') \times \partial_2\pi_t(x')|$ kann mit Hilfe der Normalen

$$\nu(x) = \frac{1}{\sqrt{1+|\nabla_{x'}p(x')|^2}} \begin{pmatrix} -\nabla_{x'}p(x') \\ 1 \end{pmatrix}$$

an $N(c)$ in $x$ explizit berechnet werden. Man erhält

$$|\partial_1\pi_t(x') \times \partial_2\pi_t(x')| = \left| \begin{pmatrix} -\nabla_{x'}p(x') \\ 1 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(t) \right| .$$

Damit läßt sich das Oberflächenintegral in (4.3) lokal wie folgt abschätzen:

$$\begin{aligned} \int\limits_{\substack{\{x\in\Omega \,|\, d(x,N(c))=t\} \\ x'\in U_\gamma(y')}} d\mathcal{H}^{n-1} &= \int\limits_{x'\in U_\gamma(y')} |\partial_1\pi_t(x') \times \partial_2\pi_t(x')|\, dx' \\ &= \int\limits_{x'\in U_\gamma(y')} \left| \begin{pmatrix} -\nabla_{x'}p(x') \\ 1 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(t) \right| dx' \\ &= \int\limits_{\substack{\{x\in\Omega \,|\, d(x,N(c))=0\} \\ x'\in U_\gamma(y')}} d\mathcal{H}^{n-1} + \mathcal{O}(t)\,, \end{aligned}$$

da $|(-\nabla_{x'}p(x'),1)|$ gerade das skalare Oberflächenelement der Niveaufläche $\{x\in\Omega \,|\, d(x,N(c))=0\}$ ist.
Verwendet man dieses Resultat in der Darstellung der Oberflächenenergie aus (4.3), so erhält man schließlich

$$V_\varepsilon^S = \alpha \int\limits_{\mathbb{R}} \varphi_\varepsilon(t) \left[ \int\limits_{\{x\in\Omega \,|\, d(x,N(c))=0\}} d\mathcal{H}^{n-1} + \mathcal{O}(t) \right] dt = \alpha \int\limits_{\{x\in\Omega \,|\, d(x,N(c))=0\}} d\mathcal{H}^{n-1} + \mathcal{O}(\varepsilon)\,.$$

□

Das bedeutet, der Fehler bei der Approximation des Hausdorff-Maßes einer Fläche durch ein Volumenintegral über eine geglättete charakteristische Funktion ist stets in der Größenordnung des Glättungsparameters. Bei der Diskretisierung des Integrals durch eine Quadraturformel auf einem ortsfesten Gitter mit Gitterweite $h$ folgt daraus, daß der Fehler unabhängig von der Ordnung der verwendeten Quadraturformel stets von der Ordnung $\mathcal{O}(h)$ ist.
Auf Möglichkeiten durch eine andersgeartete Modellierung der Oberflächenintegrale eine höhere Genauigkeit zu erzielen, wird in Abschnitt 4.6 eingegangen.

## 4.3 Kräfte und Momente

Es sollen nun die durch die Oberflächenspannung hervorgerufenen Kräfte und Momente berechnet werden, die auf ein durch die Position $q_i$ und die Deformation $H_i$ definiertes Teilchen wirken. Diese leitet man wie in Kapitel 1 beschrieben aus der Lagrange-Funktion $\mathcal{L} = E - V$ des durch die $q_i$ und $H_i$ definierten Systems her. Dabei setzt man

für die innere Energie $V$ entsprechend die Oberflächenenergie $V_\varepsilon^S$ ein.
Es tritt die Schwierigkeit auf, daß $V_\varepsilon^S$ wegen der Wahl der signierten Distanzfunktion als Level-Set Funktion nicht mehr explizit von den Positionen $q_i$ und den Deformationen $H_i$ abhängt. Um die Bewegungsgleichungen formulieren zu können, benötigt man jedoch die Ableitungen der signierten Distanzfunktion nach $q_i$ und $H_i$. Das Ziel dieses Abschnittes ist es daher, mit Hilfe geeigneter impliziter Funktionen diese Differentiale durch Differentiale der explizit bekannten Level-Set Funktion $\rho$ darzustellen. Damit erhält man aus den Bewegungsgleichungen eine Darstellung der Kräfte und Momente.

Man beginnt mit der Definition der Lagrange-Funktion $\mathcal{L}$ des Systems. Es ist

$$\mathcal{L} = E - V_\varepsilon^S \,,$$

wobei $E$ wie in (1.18) die kinetische Energie des Systems beschreibt. Daraus ergeben sich entsprechend (1.20) und (1.21) die normalisierten Kräfte $F_i^S$ und Momente $M_i^S$:

$$F_i^S = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial V_\varepsilon^S}{\partial q_i} \quad \text{und} \quad M_i^S = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial V_\varepsilon^S}{\partial H_i} \tag{4.4}$$

Um diese berechnen zu können, benötigt man die Ableitungen der signierten Distanzfunktion $d(\cdot, N(c))$ nach den Positionen $q_i$ und den Deformationen $H_i$.

Für die nun folgenden Argumentationen ist es günstig, für jedes Teilchen ein Tupel einzuführen, das die Position $q_i$ eines Teilchens und seine Deformation $H_i$ enthält. Dies erspart eine gesonderte Betrachtung für $q_i$ und $H_i$, zumal die Abhängigkeit in beiden Fällen ohnehin schematisch gleich behandelt werden kann. Die $q_i$ und $H_i$ werden also folgendermaßen zu einem Zeilen-Vektor zusammengefaßt:

$$\left(\alpha_i^q, \alpha_i^H\right) := \left(q_i^T, (H_i e_1, \ldots, H_i e_n)\right) \in \mathbb{R}^{n+n^2} \,,$$

wobei $e_k$ den $k$-ten $n$-dimensionalen Einheitsvektor bezeichnet. Mit Hilfe dieser Tupel, welche ihrerseits wieder zu

$$\alpha := \left( \begin{pmatrix} \alpha_1^q \\ \alpha_1^H \end{pmatrix}, \ldots, \begin{pmatrix} \alpha_N^q \\ \alpha_N^H \end{pmatrix} \right) \in \mathbb{R}^{(n+n^2)\times N} \tag{4.5}$$

zusammengefaßt werden, beschreibt man die explizite Abhängigkeit der Massendichte $\rho$ von den Teilchendaten. Man definiert damit analog zur Definition der Massendichte $\rho$ in (1.12) die Funktion

$$\hat{\rho}(x, \alpha) := \sum_{i=1}^{N} m_i \left[\det \alpha_i^H\right]^{-1} \psi\left((\alpha_i^H)^{-1}(x - \alpha_i^q)\right) \,,$$

die wie $\rho$ $k$-mal stetig differenzierbar ist, und entsprechend die Niveaufläche

$$N(c, \alpha) := \{x \in \mathbb{R}^n \,|\, \hat{\rho}(x, \alpha) - c = 0\} \,.$$

Damit formuliert man den folgenden Satz, der die gesuchten Ableitungen der signierten Distanzfunktion durch Differentiale der bekannten Funktion $\hat{\rho}$ beschreibt. Der Beweis des Satzes verläuft ähnlich wie der Beweis von Satz 4.1, welcher sich bei [GT01, App. 14.6] findet. Allerdings existiert dort keine Abhängigkeit der Distanzfunktion von einem Parameter, sondern es wird lediglich die Differenzierbarkeit derselben untersucht.

**Satz 4.4.** (**Ableitungen der sign. Distanzfunktion**) *Für ein festes $\alpha^*$ wie in (4.5) sei $\hat{\kappa} > 0$ eine obere Schranke für die Hauptkrümmungen der Niveaufläche $N(c, \alpha^*)$. Weiter sei für ein beliebiges $x_0 \in U_\mu(N(c, \alpha^*))$ mit $\mu < 1/\hat{\kappa}$*

$$d(x_0, N(c, \alpha^*)) = \sigma \left| x_0 - y_0 \right| .$$

*Dann ist*

$$\left( \frac{\partial d}{\partial \alpha_{k,i}} \right) (x_0, N(c, \alpha^*)) = \frac{1}{\left| \left[ \nabla_x \hat{\rho} \right] (y_0, \alpha^*) \right|} \left( \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \alpha_{k,i}} \right) (y_0, \alpha^*)$$

*für $k = 1, \ldots, n + n^2$ und $i = 1, \ldots, N$.*

*Beweis*: Der Beweis verläuft wie folgt. Zunächst wird ein Hauptachsensystem in den Punkt $y_0 \in N(c, \alpha^*)$ gelegt. Dadurch erhält man eine besonders einfache Darstellung der charakteristischen geometrischen Größen der Niveaufläche. Mit Hilfe einer geeigneten lokalen Parametrisierung von $N(c, \alpha^*)$ definiert man dann eine differenzierbare Abbildung, die jedem Punkt der Niveaufläche in einer Umgebung von $y_0$ denjenigen Punkt mit Abstand $d$ zuordnet. Daraus wiederum erhält man schließlich eine differenzierbare implizite lokale Darstellung der signierten Distanzfunktion, mit welcher sich die gesuchte Ableitung in bekannten Ausdrücken der Funktion $\hat{\rho}$ darstellen läßt.

Sei $y \in N(c, \alpha^*)$ beliebig. Man legt nun ein Koordinatensystem so in $y$, daß die $x_n$-Koordinate in Richtung der inneren Normalen $\nu_{N(c,\alpha^*)}(y)$ an $N(c, \alpha^*)$ in $y$ liegt. Das bedeutet $\left[ \nabla_x \hat{\rho} \right] (y, \alpha^*)|_n \neq 0$. Dies ist nach einer eventuellen Umstellung der Variablen sicher möglich.

Da $\hat{\rho}$ $k$-mal stetig differenzierbar ist, gibt es dann Umgebungen $U(y') \subset \mathbb{R}^{n-1}$ von $y' := (y_1, \ldots, y_{n-1})$ und $U(\alpha^*)$ von $\alpha^*$ und eine $k$-mal stetig differenzierbare Abbildung

$$\varphi : U(y') \times U(\alpha^*) \to \mathbb{R} : (z', \alpha) \mapsto \varphi(z', \alpha) ,$$

so daß $N(c, \alpha^*)$ in einer Umgebung von $y = (y', y_n)$ durch $(z', \varphi(z', \alpha^*))$ gegeben ist. Insbesondere ist $\varphi$ in $(y', \alpha^*)$ differenzierbar und es gilt

$$\left( \frac{\partial \varphi}{\partial \alpha_{k,i}} \right) (y', \alpha^*) = - \frac{1}{\left[ \nabla_x \hat{\rho} \right] (y, \alpha^*)|_n} \left( \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \alpha_{k,i}} \right) (y, \alpha^*) . \tag{4.6}$$

Wegen der speziellen Wahl des Koordinatensystems ist $\left( \frac{\partial \varphi}{\partial z'} \right) (y', \alpha^*) = 0$.

Nun wird das Koordinatensystem so gedreht, daß die ersten $(n-1)$ Koordinatenrichtungen mit den Hauptkrümmungsrichtungen zu den Hauptkrümmungen $\kappa_i$ $(i = 1, \ldots, n-1)$ zusammenfallen (Hauptachsensystem).

Für ein beliebiges $x_0 \in U_\mu(N(c,\alpha^*))$ mit $\mu < 1/\hat{\kappa}$ gibt es zu gegebenem $\alpha^*$ ein eindeutig bestimmtes $y_0 \in N(c,\alpha^*)$ mit

$$d_0 := d(x_0, N(c,\alpha^*)) = \sigma\,|x_0 - y_0| \tag{4.7}$$

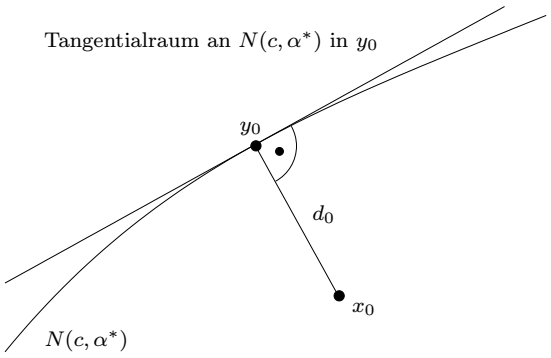
und dem Vorzeichen $\sigma = \operatorname{sign}(\hat{\rho}(x_0,\alpha^*) - c)$. Da obige Betrachtungen für ein beliebiges $y \in N(c,\alpha^*)$ angestellt wurden, gelten sie insbesondere auch für $y_0$.

Betrachte nun die Abbildung

$$\begin{aligned} g : U(y_0') \times U(d_0) \times U(\alpha^*) \to \quad & \mathbb{R}^n \\ (y', d, \alpha) \mapsto \quad & \begin{pmatrix} y' \\ \varphi(y',\alpha) \end{pmatrix} + d\,\nu_{N(c,\alpha)}\begin{pmatrix} y' \\ \varphi(y',\alpha) \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{4.8}$$

wobei $\nu_{N(c,\alpha)}(x)$ die innere Normale an $N(c,\alpha)$ im Punkt $x \in N(c,\alpha)$ bezeichnet. Sie ordnet lokal einem Punkt $(y', \varphi(y',\alpha)) \in N(c,\alpha)$ den Punkt $x \in \mathbb{R}^n$ mit Abstand $d$ zu. Diese Abbildung ist $(k-1)$-mal stetig differenzierbar und mit (4.7) gilt

$$g(y_0', d_0, \alpha^*) = x_0\,.$$




Skizze

Wegen der speziellen Wahl des Koordinatensystems ist nach Definition der Hauptkrümmungen als Eigenwerten des Differentials der Gauß-Abbildung (also des Einheitsnormalenfeldes)

$$\left(\frac{\partial}{\partial z_k}\nu_{N(c,\alpha^*)}\right)(y_0)\Big|_l = \kappa_l \delta_{kl} \quad (k,l = 1,\ldots,n-1)\,,$$

da die Koordinatenrichtungen gerade den Hauptkrümmungsrichtungen entsprechen. Außerdem ist

$$\nu_{N(c,\alpha^*)}(y_0)\big|_n = 1\,.$$

Damit hat die Matrix

$$M := \left[\frac{\partial}{\partial z'}g,\ \frac{\partial}{\partial d}g\right](y_0', d_0, \alpha^*)$$

Diagonalgestalt

$$M = \operatorname{diag}(1 - \kappa_1 d_0, \ldots, 1 - \kappa_{n-1} d_0, 1)\,.$$

Da nach Voraussetzung $x_0 \in U_\mu(N(c, \alpha^*))$ ist, ist $|d_0| < \mu < 1/\hat{\kappa}$ und insbesondere $(1 - \kappa_l d_0) > 0$ für $l = 1, \ldots, n-1$. Das bedeutet, die Matrix $M$ ist invertierbar. Somit gibt es also Umgebungen $\widetilde{U}(y_0') \subset U(y_0')$ von $y_0'$, $\widetilde{U}(d_0) \subset U(d_0)$ von $d_0$, $\widetilde{U}(\alpha^*) \subset U(\alpha^*)$ von $\alpha^*$ und eine $(k-1)$-mal stetig differenzierbare Abbildung

$$\gamma : \widetilde{U}(\alpha^*) \to \widetilde{U}(y_0') \times \widetilde{U}(d_0) : \alpha \mapsto \left(\gamma(\alpha)|_1, \ldots, \gamma(\alpha)|_{n-1}, \gamma(\alpha)|_n\right),$$

so daß

$$g\left(\gamma(\alpha)|_1, \ldots, \gamma(\alpha)|_{n-1}, \gamma(\alpha)|_n, \alpha\right) = x_0$$

für alle $\alpha \in \widetilde{U}(\alpha^*)$. Mit der oben definierten Matrix $M$ kann man die Ableitung der impliziten Funktion $\gamma$ in $\alpha^*$ angeben. Es ist

$$\left(\frac{\partial \gamma}{\partial \alpha_{k,i}}\right)(\alpha^*) = -M^{-1}\left(\frac{\partial g}{\partial \alpha_{k,i}}\right)(y_0', d_0, \alpha^*)\,. \tag{4.9}$$

Die $n$-te Komponente der Abbildung $\gamma$ stellt die signierte Distanzfunktion in $x_0$ als differenzierbare Funktion in $\alpha$ für $\alpha \in \widetilde{U}(\alpha^*)$ dar. Insbesondere ist

$$\left(\frac{\partial d}{\partial \alpha_{k,i}}\right)(x_0, N(c, \alpha^*)) = \left(\frac{\partial \gamma|_n}{\partial \alpha_{k,i}}\right)(\alpha^*)\,.$$

Das bedeutet, die gesuchte Ableitung der signierten Distanzfunktion kann mit Hilfe von (4.9) explizit berechnet werden. Es ist also zunächst

$$\left(\frac{\partial \gamma|_n}{\partial \alpha_{k,i}}\right)(\alpha^*) = -\left(\frac{\partial g|_n}{\partial \alpha_{k,i}}\right)(y_0', d_0, \alpha^*)\,. \tag{4.10}$$

Weiterhin nutzt man wieder die spezielle Gestalt der geometrischen Größen im gewählten Koordinatensystem aus.

Verwendet man in (4.10) direkt die Definition von $g$ entsprechend (4.8) und nutzt aus, daß

$$\left(\frac{\partial}{\partial z_i}\nu_{N(c,\alpha^*)}\right)(y_0)\Big|_n = 0 \quad \text{für } i = 1, \ldots, n$$

und mit $\nu_{N(c,\alpha^*)}(y_0) = (0, \ldots, 0, 1)$ wegen

$$\begin{aligned} 0 = \frac{\partial}{\partial \alpha}\left(|\nu_{N(c,\alpha^*)}(y_0)|^2\right) &= 2\sum_{i=1}^{n} \nu_{N(c,\alpha^*)}(y_0)\big|_i \left(\frac{\partial}{\partial \alpha}\nu_{N(c,\alpha^*)}\right)(y_0)\Big|_i \\ &= 2\,\nu_{N(c,\alpha^*)}(y_0)\big|_n \left(\frac{\partial}{\partial \alpha}\nu_{N(c,\alpha^*)}\right)(y_0)\Big|_n \\ &= 2\left(\frac{\partial}{\partial \alpha}\nu_{N(c,\alpha^*)}\right)(y_0)\Big|_n \end{aligned} \tag{4.11}$$

auch $\left(\frac{\partial}{\partial \alpha}\nu_{N(c,\alpha^*)}\right)(y_0)\big|_n = 0$ ist, so erhält man schließlich aus (4.10)

$$\left(\frac{\partial \gamma|_n}{\partial \alpha_{k,i}}\right)(\alpha^*) = -\left(\frac{\partial \varphi}{\partial \alpha_{k,i}}\right)(y_0', \alpha^*)\,.$$

Setzt man dann entsprechend (4.6)

$$-\left(\frac{\partial\varphi}{\partial\alpha_{k,i}}\right)(y_0',\alpha^*)=\frac{1}{\left[\nabla_x\hat{\rho}\right](y_0,\alpha^*)|_n}\left(\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial\alpha_{k,i}}\right)(y_0,\alpha^*)$$

ein, so ergibt sich damit für die gesuchte Ableitung der Distanzfunktion

$$\left(\frac{\partial d}{\partial\alpha_{k,i}}\right)(x_0,N(c,\alpha^*))=\frac{1}{\left[\nabla_x\hat{\rho}\right](y_0,\alpha^*)|_n}\left(\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial\alpha_{k,i}}\right)(y_0,\alpha^*)\,. \tag{4.12}$$

Diese Darstellung ist in einem wie oben beschriebenen Koordinatensystem gültig. In diesem Fall ist $[\nabla_x\hat{\rho}](y_0,\alpha^*)=(0,\ldots,0,[\nabla_x\hat{\rho}](y_0,\alpha^*)|_n)$. Das bedeutet, es ist somit wegen der Positivität von $[\nabla_x\hat{\rho}](y_0,\alpha^*)|_n$, welche ebenfalls aus der speziellen Wahl des Koordinatensystems folgt, $[\nabla_x\hat{\rho}](y_0,\alpha^*)|_n=|[\nabla_x\hat{\rho}](y_0,\alpha^*)|$. Eine Darstellung für ein beliebiges Koordinatensystem erhält man, indem man geometrische Größen, die von der speziellen Wahl des Koordinatensystems abhängen, durch allgemeingültige Formulierungen ersetzt.
In einem beliebigen Koordiantensystem ist die innere Normale an $N(c,\alpha^*)$ in einem Punkt $y_0$ durch $[\nabla_x\hat{\rho}](y_0,\alpha^*)/|[\nabla_x\hat{\rho}](y_0,\alpha^*)|$ gegeben. Damit erhält man aus (4.12) die von der Wahl des Koordinatensystems unabhängige Darstellung der Ableitung der signierten Distanzfunktion

$$\left(\frac{\partial d}{\partial\alpha_{k,i}}\right)(x_0,N(c,\alpha^*))=\frac{1}{|\left[\nabla_x\hat{\rho}\right](y_0,\alpha^*)|}\left(\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial\alpha_{k,i}}\right)(y_0,\alpha^*)\,.$$

□

Nach diesen Vorarbeiten kann man nun aus (4.4) eine Darstellung der normalisierten Kräfte $F_i^S$ und Momente $M_i^S$ berechnen. Um eine allgemeingültige Formulierung zu erhalten, welche eine Interpretation der Kräfte ermöglicht, werden die speziellen Eigenschaften der signierten Distanzfunktion zunächst außer acht gelassen.

**Satz 4.5.** (**Darstellung der Kräfte und Momente**) *Für einen hinreichend kleinen Glättungsparameter $\varepsilon>0$ haben die aus der Lagrange-Funktion $\mathcal{L}=E-V_\varepsilon^S$ entsprechend (4.4) gewonnenen normalisierten Kräfte $F_i^S$ und Momente $M_i^S$ die Form*

$$F_i^S=\frac{\alpha}{m_i}\int_\Omega\delta_\varepsilon\left(d(x,N(c))\right)\operatorname{div}\left(\frac{\nabla_x d(x,N(c))}{|\nabla_x d(x,N(c))|}\right)\frac{\partial d}{\partial q_i}(x,N(c))\,dx \tag{4.13}$$

*und*

$$M_i^S=\frac{\alpha}{m_i}\int_\Omega\delta_\varepsilon\left(d(x,N(c))\right)\operatorname{div}\left(\frac{\nabla_x d(x,N(c))}{|\nabla_x d(x,N(c))|}\right)\frac{\partial d}{\partial H_i}(x,N(c))\,dx\,, \tag{4.14}$$

*wobei $\frac{\partial d}{\partial q_i}$ und $\frac{\partial d}{\partial H_i}$ entsprechend Satz 4.4 definiert sind.*

*Beweis*: Ausgehend von Definition 4.2 und (4.4) kann man zunächst mit dem Satz über Parameterintegrale die Integration über $\Omega$ und die Differentiation vertauschen.

Im weiteren wird der Übersichtlichkeit halber stets $d(x)$ statt $d(x, N(c))$ geschrieben. Damit ist

$$\frac{m_i}{\alpha} F_i^S = -\int_\Omega \frac{\partial}{\partial q_i} \left|\nabla_x \left[H_\varepsilon(d(x))\right]\right| \, dx \,. \tag{4.15}$$

Um die behauptete Darstellung zu erhalten, darf nun nicht $|\nabla_x d(x)| \equiv 1$ verwendet werden. Es ergibt sich damit aus (4.15) mit $H'_\varepsilon(t) = \delta_\varepsilon(t)$ wie in (4.2)

$$\begin{aligned} \frac{m_i}{\alpha} F_i^S &= -\int_\Omega \frac{\partial}{\partial q_i} \left[\delta_\varepsilon(d(x)) \left|\nabla_x d(x)\right|\right] dx \\ &= -\int_\Omega \left\{ \delta'_\varepsilon(d(x)) |\nabla_x d(x)| \frac{\partial d}{\partial q_i}(x) + \delta_\varepsilon(d(x)) \frac{\nabla_x d(x) \cdot \nabla_x \left[\frac{\partial d}{\partial q_i}(x)\right]}{|\nabla_x d(x)|} \right\} dx \,. \end{aligned} \tag{4.16}$$

Nun wendet man auf den zweiten Summanden die Greensche Formel an:

$$\begin{aligned} &\int_\Omega \left(\delta_\varepsilon(d(x)) \frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|}\right) \cdot \nabla_x \left[\frac{\partial d}{\partial q_i}(x)\right] dx \\ &= \int_{\partial\Omega} \delta_\varepsilon(d(x)) \left(\frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|} \cdot \nu_{\partial\Omega}\right) \frac{\partial d}{\partial q_i}(x) \, d\mathcal{H}^{n-1} - \int_\Omega \operatorname{div}\left(\delta_\varepsilon(d(x)) \frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|}\right) \frac{\partial d}{\partial q_i}(x) \, dx \end{aligned}$$

Da der Glättungsparameter $\varepsilon > 0$ hinreichend klein, insbesondere also $\varepsilon < d(N(c), \Omega)$, vorausgesetzt wurde, verschwindet der erste Term. Der verbleibende Term ergibt zusammen mit dem Restterm aus (4.16) wegen

$$\operatorname{div}\left(\delta_\varepsilon(d(x)) \frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|}\right) = \delta'_\varepsilon(d(x)) |\nabla_x d(x)| + \delta_\varepsilon(d(x)) \operatorname{div}\left(\frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|}\right)$$

gerade

$$F_i^S = \frac{\alpha}{m_i} \int_\Omega \delta_\varepsilon\left(d(x, N(c))\right) \operatorname{div}\left(\frac{\nabla_x d(x, N(c))}{|\nabla_x d(x, N(c))|}\right) \frac{\partial d}{\partial q_i}(x, N(c)) \, dx \,.$$

Behauptung (4.14) zeigt man durch analoge Rechnung, wobei alle Betrachtungen spaltenweise durchgeführt werden, d.h. $\frac{\partial}{\partial H_i}\Big|_{\cdot,k}$ für die $k$-te Spalte. Also ist

$$M_i^S|_{\cdot,k} = \frac{\alpha}{m_i} \int_\Omega \delta_\varepsilon\left(d(x, N(c))\right) \operatorname{div}\left(\frac{\nabla_x d(x, N(c))}{|\nabla_x d(x, N(c))|}\right) \frac{\partial d}{\partial H_i}\Big|_{\cdot,k} (x, N(c)) \, dx \,,$$

was gerade der $k$-ten Spalte von $M_i^S$ in (4.14) entspricht. □

Eine für das numerische Vorgehen relevante Darstellung der Kräfte und Momente erhält man, indem man die Eigenschaften der signierten Distanzfunktion ausnutzt und $|\nabla_x d(\cdot, N(c))| \equiv 1$ einsetzt. Man verwendet für die Herleitung entsprechend (4.4) die vereinfachte Darstellung der Oberflächenenergie aus Definition 4.2

$$V_\varepsilon^S = \alpha \int_\Omega \delta_\varepsilon(d(x, N(c))) \, dx \,,$$

was unmittelbar auf

$$F_i^S = -\frac{\alpha}{m_i} \int_\Omega \delta_\varepsilon'(d(x, N(c))) \frac{\partial d}{\partial q_i}(x, N(c))\, dx \tag{4.17}$$

und

$$M_i^S = -\frac{\alpha}{m_i} \int_\Omega \delta_\varepsilon'(d(x, N(c))) \frac{\partial d}{\partial H_i}(x, N(c))\, dx \tag{4.18}$$

führt. Diese Darstellung erhält man auch aus (4.13) beziehungsweise (4.14), indem man zunächst $|\nabla_x d(x, N(c))| \equiv 1$ einsetzt und für die weiteren Betrachtungen dann wieder ein spezielles Koordinatensystem wie im Beweis von Satz 4.4 wählt. Durch eine anschließende Umformung mit Hilfe der Greenschen Formel, wobei der Randterm verschwindet, erhält man unter Verwendung der Beziehung (4.11) schließlich die Darstellung (4.17) beziehungsweise (4.18).
Die Verwendung dieser Darstellung der normalisierten Kräfte und Momente bei der Diskretisierung der Integrale wird in Kapitel 6.1 diskutiert.

## 4.4 Erhaltungseigenschaften

Die in Kapitel 1.6 beschriebene Erhaltung von Energie, Impuls und Drehimpuls soll natürlich auch mit der beschriebenen Modellierung der Oberflächenerscheinungen gewährleistet sein. Ein Vergleich der Definition der Oberflächenenergie mit der Definition der inneren Energie eines Fluids aus der kalorischen Zustandsgleichung entsprechend Kapitel 1.2 zeigt, daß dies tatsächlich der Fall ist.
Man betrachtet dazu ein System aus $N$ Teilchen, dessen innere Energie allein durch die Oberflächenenergie $V_\varepsilon^S$ entsprechend Definition 4.2 gegeben ist. Dieses System genügt dann nach (1.22) den Bewegungsgleichungen

$$q_i'' = F_i^S\,, \quad H_i'' = M_i^S\,. \tag{4.19}$$

Für diese Situation kann man nun die Erhaltungseigenschaften des Systems formulieren. Die Beweise der Aussagen werden nicht angegeben, da sie analog zu den Beweisen in [GLY00, Sec. 3] geführt werden können, wobei lediglich für die innere Energie pro Einheitsvolumen statt $\varepsilon(x)$ die Funktion $\delta_\varepsilon(d(x, N(c)))$ wie in Definition 4.2 einzusetzen ist.

**Satz 4.6.** *Die Gesamtenergie $\mathcal{E} = E + V_\varepsilon^S$ des oben definierten Systems als Summe aus kinetischer Energie $E$ (1.18) und Oberflächenenergie $V_\varepsilon^S$ ist eine Erhaltungsgröße.*

Der Gesamtimpuls des Systems ist wie in Kapitel 1.6 durch

$$P(t) = \int \rho(x,t) v(x,t)\, dx = \sum_{i=1}^N m_i q_i'(t)$$

definiert. Für ihn gilt der folgende Erhaltungssatz.

**Satz 4.7.** *Der Gesamtimpuls $P$ ist eine Erhaltungsgröße des Systems.*

Um die Erhaltung des Drehimpulses zu zeigen, geht man wie in Kapitel 1.6 über die mittels schiefsymmetrischer Matrizen $W$ definierte skalare Größe

$$L(t) = \int \rho(x,t) x \cdot W v(x,t)\, dx = \sum_{i=1}^{N} \left( m_i q_i(t) \cdot W q_i'(t) + J m_i H_i(t) \cdot W H_i(t)' \right)$$

vor.

**Satz 4.8.** *Für schiefsymmetrische Matizen $W$ ist die skalare Größe $L$ eine Erhaltungsgröße des Systems.*

## 4.5 Interpretation der Bewegungsgleichungen

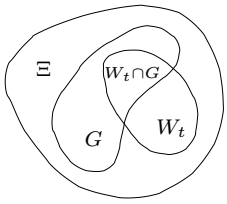
Im vorigen Kapitel wurde mit Hilfe der Lagrange-Funktion $\mathcal{L} = E - V_\varepsilon^S$ eine Darstellung für die Kräfte (4.13) und Momente (4.14) gewonnen. Es soll hier nun gezeigt werden, daß diese Kräfte äquivalent zu den im kontinuierlichen Fall aus der Oberflächenspannung herrührenden Kräften sind.
Man betrachtet dazu zunächst die allgemein formulierten Bewegungsgleichungen für ein Fluid ohne innere Reibung, welche als Differentialgleichungssystem in der Form

$$\rho \left\{ \frac{\partial v}{\partial t} + (\nabla_x v) v \right\} = -\nabla_x p + \rho f$$

geschrieben werden können. Dabei bezeichnet $p$ den Druck und $\rho f$ eine äußere Kraft pro Volumeneinheit. Mit Hilfe des ersten Transportsatzes kann man daraus eine Integralgleichung über einem glattberandeten, mittransportierten Gebiet $W_t$ formulieren. Es ist

$$\frac{d^2}{dt^2} \int_{W_t} \rho x \, dx = -\int_{W_t} \nabla_x p \, dx + \int_{W_t} \rho f \, dx \,. \tag{4.20}$$

Im weiteren läßt man äußere Kräfte außer Acht, also $f \equiv 0$, und setzt für den Druck den in Kapitel 3.2 hergeleiteten Kapillardruck ein, welcher an der Grenzfläche von $G := \operatorname{supp} \rho \subset\subset \Xi \subset \mathbb{R}^n$ zu $(\Xi \setminus G)$ auftritt. Da der Kapillardruck nur an ebendieser Grenzfläche auftritt und im Inneren von $G$ verschwindet, wird das Gebiet $W_t \subset \Xi$ so gewählt, daß $W_t \cap G \neq \emptyset$ und $W_t \cap (\Xi \setminus G) \neq \emptyset$, siehe Skizze.




Skizze

Der Gaußsche Satz gilt nicht nur für glattberandete Mengen, sondern auch für Mengen

mit lokal endlichem Perimeter [Zie89, Sec. 5.8]. Damit lässt sich (4.20) folgendermaßen formulieren:

$$\frac{d^2}{dt^2} \int\limits_{W_t \cap G} \rho x \, dx = - \int\limits_{W_t \cap G} \nabla_x p \, dx = - \int\limits_{W_t \cap \partial G} p \nu_{\partial G} \, d\mathcal{H}^{n-1} = -\widetilde{\alpha} \int\limits_{W_t \cap \partial G} H_{\partial G} \nu_{\partial G} \, d\mathcal{H}^{n-1} \tag{4.21}$$

Es soll nun gezeigt werden, daß sich die in Kapitel 4.3 hergeleiteten Kräfte $F_i^S$ als die in (4.21) angegebenen Druckkräfte interpretieren lassen, beziehungsweise die Bewegungsgleichungen $q_i'' = F_i^S$ $(i = 1, \ldots, N)$ äquivalent zu (4.21) sind.
Dazu betrachtet man ein festes, glattberandetes Gebiet $W$, das zum Zeitpunkt $t = 0$ relativ kompakt im Träger $M \subset\subset \Omega \subset \mathbb{R}^n$ der Massendichte $\rho$ liegt. Sei

$$I(W) := \left\{ i = 1, \ldots, N \,|\, \operatorname{supp} \psi_i \subseteq \overline{W} \right\}$$

die Indexmenge der Teilchen, welche in $W$ enthalten sind. Dieses Gebiet $W$ wird durch den Massenfluß deformiert. Die charakteristische Funktion des deformierten Gebietes $W$ wird dabei durch

$$\chi_W(x) = \sum_{i \in I(W)} \chi_i(x) \quad \text{mit} \quad \chi_i(x) = \frac{m_i \psi_i(x)}{\rho(x)}$$

repräsentiert. Der Schwerpunkt $x_{CM}$ der in $W$ enthaltenen Teilchen ist durch

$$x_{CM} = \frac{1}{m(W)} \sum_{i \in I(W)} m_i q_i$$

gegeben, wobei $m(W) = \sum_{i \in I(W)} m_i$ die Gesamtmasse der in $W$ enthaltenen Teilchen bezeichnet. Da mit (1.2) $q_i = \int \psi_i(x) x \, dx$ ist, erhält man somit

$$m(W) x_{CM} = \int\limits_\Omega \sum_{i \in I(W)} m_i \psi_i(x) x \, dx = \int\limits_\Omega \chi_W(x) \rho(x) x \, dx \,,$$

was nach zweimaliger Differentiation nach der Zeit $t$ gerade der linken Seite von (4.21) entspricht. Nun soll eine Darstellung der Kraft

$$F_W^S := \sum_{i \in I(W)} m_i F_i^S$$

gefunden werden, welche äquivalent zur rechten Seite von (4.21) ist. Die Multiplikation mit $m_i$ muß erfolgen, da die $F_i^S$ in (4.4) als normalisierte Käfte definiert wurden.
Um nun in der Summe der $F_i^S$ die charakteristische Funktion $\chi_W$ zu identifizieren, setzt man für die Ableitung der signierten Distanzfunktion zur Niveaufläche $N(c)$, die der Übersichtlichkeit halber mit $d(\cdot)$ bezeichnet wird, entsprechend Satz 4.4 und (1.10)

$$\frac{\partial d}{\partial q_i}(x) = \frac{-m_i [\nabla_x \psi_i](y(x))}{|[\nabla_x \rho](y(x))|}$$

ein. Dabei bezeichnet $y(x) = x - d(x)\nabla_x d(x)$. So erhält man zunächst

$$m_i F_i^S = -\alpha \int_\Omega \delta_\varepsilon(d(x)) \operatorname{div}\left(\frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|}\right) \frac{m_i[\nabla_x \psi_i](y(x))}{|[\nabla_x \rho](y(x))|}\, dx\,.$$

Nun verwendet man $m_i \nabla_x \psi_i = \chi_i \nabla_x \rho + \rho \nabla_x \chi_i$ und summiert über $i \in I(W)$:

$$F_W^S = -\alpha \int_\Omega \delta_\varepsilon(d(x)) \operatorname{div}\left(\frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|}\right) \frac{1}{|[\nabla_x \rho](y(x))|}\big\{\chi_W(y(x))[\nabla_x \rho](y(x)) + \rho(y(x))[\nabla_x \chi_W](y(x))\big\}\, dx\,. \quad (4.22)$$

In dieser Darstellung nutzt man aus, daß

$$\frac{[\nabla_x \rho](y(x))}{|[\nabla_x \rho](y(x))|} = \frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|}$$

ist. Setzt man dies ein und argumentiert weiter wie im Beweis von Satz 4.3, so erhält man aus (4.22)

$$F_W^S = -\alpha \int_{\mathbb{R}} \varphi_\varepsilon(t) \int_{\{x \in \Omega \,|\, d(x) = t\}} \operatorname{div}\left(\frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|}\right) \left\{\chi_W(y(x)) \frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|} + \frac{\rho(y(x))}{|[\nabla_x \rho](y(x))|}[\nabla_x \chi_W](y(x))\right\} d\mathcal{H}^{n-1}\, dt\,.$$

Da der zweite Summand bezüglich des $(n-1)$-dimensionalen Hausdorff-Maßes fast überall 0 ist, erhält man schließlich wiederum mit einer Argumentation wie im Beweis zu Satz 4.3

$$\begin{aligned} F_W^S &= -\alpha \int_{\mathbb{R}} \varphi_\varepsilon(t) \int_{\{x = y + t\nu_{N(c)}(y) \,|\, y \in W \cap N(c)\}} \operatorname{div}\left(\frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|}\right) \frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|}\, d\mathcal{H}^{n-1}\, dt \\ &= -\alpha \int_{x \in W \cap N(c)} \operatorname{div}\left(\frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|}\right) \frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|}\, d\mathcal{H}^{n-1} + \mathcal{O}(\varepsilon)\,. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Da die Niveaufläche $N(c)$ auch als Niveaufläche der signierten Distanzfunktion zum Niveau 0 interpretiert werden kann, kann mit

$$\nu_{N(c)}(y(x)) = \frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|} = \nabla_x d(x)$$

und

$$H_{N(c)}(y(x)) = \frac{1}{n-1} \operatorname{div}\left(\frac{\nabla_x d(x)}{|\nabla_x d(x)|}\right) = \frac{1}{n-1} \triangle_x d(x)$$

der Kraftterm aus (4.23) auch als

$$F_W^S = -\widetilde{\alpha} \int_{x \in W \cap N(c)} H_{N(c)}(x) \nu_{N(c)}(x)\, d\mathcal{H}^{n-1} + \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (4.24)$$

geschrieben werden. Dabei bezeichnet $\widetilde{\alpha} := (n-1)\alpha$.
Das bedeutet, bis auf einen Term $\mathcal{O}(\varepsilon)$, der der numerischen Modellierung des Oberflächenintegrals geschuldet ist, ist $F_W^S$ äquivalent zur rechten Seite von Gleichung (4.21). Die dort betrachtete Grenzfläche $W_t \cap \partial M$ entspricht hier $W \cap N(c)$, da in Kapitel 4.1 die Niveaufläche $N(c)$ der Massendichte $\rho$ für ein geeignetes $c > 0$ als Oberfläche des massebesetzten Gebietes definiert wurde.

Man beachte, daß wiederum wie für Satz 4.5 nirgends die speziellen Eigenschaften der signierten Distanzfunktion verwendet werden. Das bedeutet, die signierte Distanzfunktion $d$ kann durch eine beliebige andere Level-Set Funktion ersetzt werden, ohne die Aussagen oder Beweise umformulieren zu müssen. Insbesondere kann natürlich auch $\rho(x) - c$ verwendet werden.
Es wird hier ein weiteres mal deutlich, daß das Vorgehen über die signierte Distanzfunktion allein der Numerik geschuldet ist.

## 4.6 Alternatives Vorgehen zur Modellierung der Oberflächenerscheinungen

Die in den Kapiteln 4.2 und 4.3 vorgestellte Modellierung der Oberflächenenergie, beziehungsweise der daraus herrührenden Kräfte und Momente, beruht auf einer Approximation des Hausdorff-Maßes durch eine geglättete charakteristische Funktion entsprechend Satz 2.8. Dieses Vorgehen führt jedoch unabhängig von der Qualität der zur Approximation der Integrale verwendeten Quadraturformel zu einer vergleichsweise schlechten Approximation, siehe Kapitel 4.2 Satz 4.3.

Um eine bessere Approximation zu erhalten, kann man etwa folgendermaßen vorgehen. Mit Hilfe aus der Computergraphik bekannter Algorithmen, etwa dem Marching Cubes Algorithmus [LC87] oder [KBSS01], versucht man auf einem ortsfesten, adaptiv verfeinerten Gitter die als Oberfläche implizit definierte Niveaufläche $N(c)$ möglichst exakt zu lokalisieren. Die so gewonnene explizite, lokal lineare Darstellung der Oberfläche auf durch adaptive Verfeinerung des Gitters gewonnenen Simplize verwendet man dann zur exakten Berechnung der Oberflächenintegrale. Das bedeutet, man approximiert nicht mehr das Maß der Oberfläche durch ein Ausschmieren der charakteristischen Funktion, sondern man approximiert die Parametrisierung der Oberfläche.
Die Berechnung der Kräfte $F_i^S$ könnte damit ohne die Verwendung einer signierten Distanzfunktion etwa wie folgt realisiert werden:

(i) lege ein ortsfestes Gitter $G^{(0)}$ mit Gitterweite $h^{(0)}$, das $\operatorname{supp}\rho$ überdeckt, an und initialisiere dieses mit den Werten der Massendichte $\rho$ und ihrer benötigten Ableitungen in den Gitterpunkten

(ii) wende eine Stufe des Marching Cubes Algorithmus an, erhalte daraus eine Dar-

stellung der Niveaufläche $N(c)$ auf $G^{(k)}$, verfeinere das Gitter adaptiv (etwa in Bereichen mit hoher Krümmung von $N(c)$), erhalte so ein Gitter $G^{(k+1)}$ mit $h^{(k+1)} < h^{(k)}$, berechne dort $\rho$ und die benötigten Ableitungen von $\rho$

(iii) iteriere (ii) bis zur gewünschten Genauigkeit, erhalte ein Gitter $G^{(k+1)}$

(iv) finde alle Gitterzellen $Z_j \in G^{(k+1)}$, die ein Oberflächenelement enthalten und für die $Z_j \cap \operatorname{supp} \psi_i \neq \emptyset$ gilt, fasse die Indize dieser Gitterzellen in $J(i)$ zusammen

(v) berechne mittels der Darstellung des Flächenelements in der Gitterzelle $Z_j$

$$F_i^S = \alpha \int\limits_{N(c)} \operatorname{div} \left( \frac{\nabla_x \rho(x)}{|\nabla_x \rho(x)|} \right) \frac{\nabla_x \psi_i(x)}{|\nabla_x \rho(x)|} \, d\mathcal{H}^{n-1}$$

als Summe über alle Gitterzellen $Z_j$ mit $j \in J(i)$. Dabei werden die Werte der Ableitungen von $\rho$ auf $N(c)$ aus den Gitterdaten von $G^{(k+1)}$ durch Interpolation gewonnen.

Approximationsfehler entstehen hier bei der Bestimmung der Lage der Oberfläche, wobei sich eine mangelnde Regularität der Level-Set Funktion ungünstig auswirkt. Eine weitere Fehlerquelle ist die Interpolation von Werten auf der Oberfläche aus Gitterdaten. Durch die adaptive Verfeinerung des zugrundeliegenden Gitters kann im allgemeinen jedoch eine höhere Genauigkeit als mit der in Kapitel 2.3 vorgestellten Approximation des Hausdorff-Maßes erzielt werden.

Die Berechnung von Oberflächenintegralen aus einer wie oben gewonnenen expliziten Darstellung einer Niveaufläche gestaltet sich äußerst komplex. Insbesondere das Anlegen und Verwalten von Gitterdaten in den Gitterebenen ist sehr aufwendig. Daher wird in dieser Arbeit, trotz der schlechteren Approximation, der auch in der Literatur gebräuchlichere Ansatz verwendet, Oberflächenintegrale mit Hilfe geglätteter charakteristischer Funktionen zu approximieren.

# Kapitel 5

# Eikonal-Gleichung

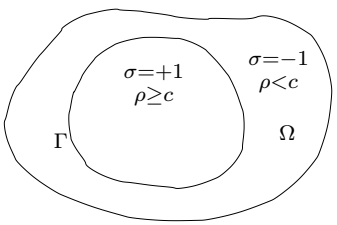
In Kapitel 4.2 wurde bereits die Notwendigkeit diskutiert, für die numerische Approximation der Oberflächenintegrale statt der ursprünglichen Level-Set Funktion die signierte Distanzfunktion zum betrachteten Niveau als Level-Set Funktion zu verwenden. Die Gründe hierfür werden im folgenden noch einmal erläutert:

- Es treten keine Skalierungsprobleme auf.
- Die ursprüngliche Level-Set Funktion kann unter Umständen sehr steile oder sehr flache Gradienten ausbilden, was zu numerischen Instabilitäten in der Rechnung führt. Für die signierte Distanzfunktion $d$ gilt stets $|\nabla d| = 1$.
- Der Durchmesser des zur Approximation der Oberflächenintegrale verwendeten Integrationsgebietes hängt nicht mehr von den Funktionswerten der Level-Set Funktion ab. Er kann durch den verwendeten Glättungsparameter $\varepsilon$ gesteuert werden, bleibt also insbesondere konstant. Damit ist eine direkte Anknüpfung an ein ortsfestes Quadraturpunktgitter möglich.

Bezeichne nun

$$d(\cdot, \Gamma) : \mathbb{R}^n \supset \Omega \to \mathbb{R} : x \mapsto d(x, \Gamma) = \sigma \min_{y \in \Gamma} |x - y|$$

die signierte Distanzfunktion zur Hyperfläche $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$. Dabei ist die Hyperfläche entsprechend Kapitel 4.1 stets als Oberfläche eines massebesetzten Gebietes gegeben, also $\Gamma = N(c) = \{x \in \Omega \,|\, \rho(x) - c = 0\}$. Das Vorzeichen $\sigma$ der Distanzfunktion ist dann entsprechend der relativen Lage von $x$ zur Hyperfläche $\sigma = \text{sign}(\rho(x) - c)$.



Die Distanzfunktion $d(\cdot, \Gamma)$ erhält man als Lösung der Eikonal-Gleichung

$$\begin{cases} |\nabla d(x,\Gamma)| = 1 & \text{für } x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n \\ d(x,\Gamma) = 0 & \text{für } x \in \Gamma\,. \end{cases} \tag{5.1}$$

Die Gleichung besitzt im allgemeinen keine klassische Lösung auf ganz $\Omega$. Der folgende, bereits in Kapitel 4.2 zitierte Satz zeigt, daß selbst im Falle einer glatten Hyperfläche $\Gamma$, die Distanzfunktion nur in einer $\delta$-Umgebung von $\Gamma$ differenzierbar ist. Dabei ist $\delta > 0$ durch das Reziproke der Krümmung von $\Gamma$ nach oben beschränkt.

**Satz 5.1. (Differenzierbarkeit der Distanzfunktion)** *Sei $M \subset \mathbb{R}^n$ ein beschränktes Gebiet mit glattem Rand $\partial M \in C^k$ $(k \geq 2)$ und bezeichne $d(\cdot, \partial M)$ die signierte Distanzfunktion zum Rand von $M$. Dann ist $d(\cdot, \partial M) \in C^k(\{x \in \mathbb{R}^n \mid d(x, \partial M) < \delta\})$, wobei $\delta$ eine positive Konstante ist, welche eine obere Schranke für das Reziproke der Hauptkrümmungen von $\partial M$ darstellt.*

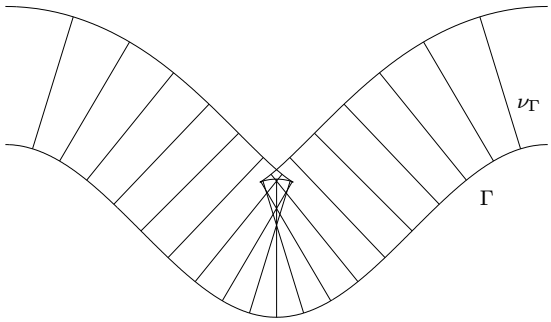
*Beweis:* siehe [GT01, App. 14.6], des Beweis verläuft in weiten Teilen analog zum Beweis von Satz 4.4 □

Da im allgemeinen keine obere Schranke für die Krümmung der Hyperfläche $\Gamma$ bekannt ist, kann a priori auch keine Umgebung von $\Gamma$ angegeben werden, in der eine klassische Lösung existiert.

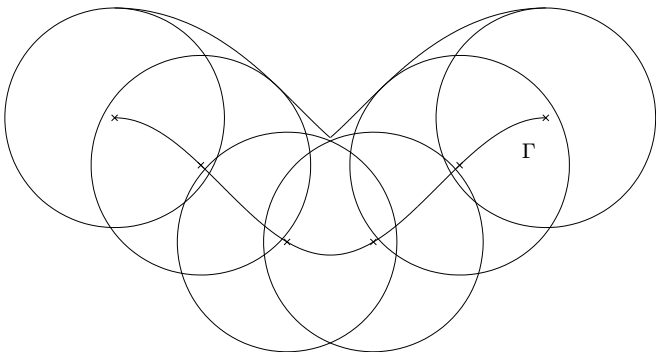
Man geht daher folgendermaßen vor. Zunächst definiert man einen geeigneten schwachen Lösungsbegriff, der auf ganz $\Omega$ definiert ist. Anschließend stellt man die Eindeutigkeit der so definierten Lösung sicher und überprüft, daß sie die gewünschten Eigenschaften besitzt.

## 5.1 Viskositätslösungen

In diesem Kapitel wird nun ein geeigneter schwacher Lösungsbegriff für skalare, nichtlineare partielle Differentialgleichungen erster Ordnung, insbesondere also auch die Eikonal-Gleichung (5.1), angegeben. Um zunächst eine Vorstellung von einer solchen schwachen Lösung zu erhalten, betrachtet man das folgende einfache Beispiel.
Bezeichne $\Gamma$ eine nichtkonvexe, glatte Kurve in $\mathbb{R}^2$. Man kann die Isoflächen der Distanzfunktion $d(\cdot, \Gamma)$ konstruieren, indem man die Punkte $x \in \Gamma$ entlang der Normalen $\nu_\Gamma(x)$ gleichmäßig voranbewegt. Dieses Vorgehen führt auf eine Kurve, welche sich selbst überschneidet, insbesondere also nicht mehr eindeutig ist (*Schwalbenschwanzkonstruktion*).




Eine andere Möglichkeit die Isoflächen der Distanzfunktion $d(\cdot, \Gamma)$ zu konstruieren, besteht in einem Vorgehen, welches auf dem Huygens'schen Prinzip beruht. Das bedeutet, man betrachtet jeden Punkt $x \in \Gamma$ als Ausgangspunkt einer Elementarwelle und verwendet die Einhüllende aller Elementarwellen als Isofläche der Distanzfunktion.




Dies entspricht der Vorstellung der Isoflächen der Distanzfunktion insofern sie die Punkte mit kleinstem Abstand zu $\Gamma$ enthalten.
Um diese Lösungen mathematisch zu modellieren geht man nun wie folgt vor. Man formuliert mit Hilfe einer Funktion $\Phi : \mathbb{R}^+ \times \Omega \to \mathbb{R}$, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen, die Hamilton-Jacobi

Gleichung:

$$\begin{cases} \alpha\Phi_t + H(D\Phi) = 0 & \text{in } \mathbb{R}^+ \times \Omega \\ \Phi = g & \text{auf } (t=0) \times \Omega \end{cases} \tag{5.2}$$

mit dem Hamiltonoperator

$$H : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R},\ D\Phi \mapsto H(D\Phi) := |\nabla\Phi| - (1-\alpha)\,.$$

Für $\alpha = 0$ erhält man daraus mit $g|_\Gamma = 0$ wieder die Eikonalgleichung (5.1). Es ist bekannt, daß diese Gleichung keine klassische Lösung für beliebig große $t \geq 0$ besitzt [Eva98, §3.2], was mit obigen Erläuterungen plausibel ist. Es gibt jedoch Existenzaussagen für schwache Lösungen [Lio82]. Um Aussagen über die Eindeutigkeit einer Lösung machen zu können, bemüht man die Theorie der Viskositätslösungen (*viscosity solutions*), die von Crandall und Lions [CL83] eingeführt wurde und bei Crandall, Evans und Lions [CEL84], Crandall, Ishii und Lions [CIL92] und Evans [Eva98] ausführlich beschrieben wird. Die Motivation für die Definition einer Viskositätslösung ist die folgende. Man regularisiert die Gleichung (5.2) durch den Term $\varepsilon\triangle$:

$$\begin{cases} \alpha\Phi_t^\varepsilon + H(D\Phi^\varepsilon) + \varepsilon\triangle\Phi^\varepsilon = 0 & \text{in } \mathbb{R}^+ \times \Omega \\ \Phi^\varepsilon = g & \text{auf } (t=0) \times \Omega \end{cases} \tag{5.3}$$

Die so erhaltene quasilineare parabolische Differentialgleichung besitzt eine glatte Lösung. Das Vorgehen, durch einen Grenzübergang $\varepsilon \to 0$ aus den glatten Lösungen eine geeignete schwache Lösung zu konstruieren, bezeichnet man als die Methode der verschwindenden Viskosität (*method of vanishing viscosity*). Erwartungsgemäß hängen die Eigenschaften von $\Phi^\varepsilon$ stark von der Regularisierung durch $\varepsilon\triangle$ ab und verschlechtern sich mit $\varepsilon \to 0$. Häufig kann man jedoch zeigen, daß die Folge $\{\Phi^\varepsilon\}_{\varepsilon>0}$ beschränkt und auf kompakten Teilmengen von $\mathbb{R}^+ \times \Omega$ gleichgradig stetig ist. Damit erhält man mit dem Satz von Arzela-Ascoli wenigstens die lokal gleichmäßige Konvergenz

$$\Phi^{\varepsilon_k} \ \to\ \Phi$$

einer geeigneten Teilfolge $\{\Phi^{\varepsilon_k}\}_{\varepsilon_k=1}^\infty$ gegen eine Grenzfunktion

$$\Phi \in C\left(\mathbb{R}^+ \times \Omega\right).$$

Es sind jedoch keine Aussagen bezüglich der Existenz von $D\Phi$ und $\Phi_t$ möglich. Es ist nicht einmal klar, in welchem Sinne von Existenz gesprochen werden kann.

Um zu einer mathematisch handhabbaren Definition der Viskositätslösung zu gelangen, führt man sich zunächst noch einmal die Definition von Differenzierbarkeit vor Augen. Eine Funktion $\Phi : \Omega \to \mathbb{R}$ heißt differenzierbar in $y_0 \in \Omega$ mit $D\Phi(y_0) = p_0 \in \mathbb{R}^n$ falls

$$\Phi(y) = \Phi(y_0) + p_0 \cdot (y - y_0) + \mathcal{O}(|y - y_0|)\,.$$

Diese Bedingung ist sicher erfüllt, falls die beiden Bedingungen

$$\limsup_{y \to y_0} \frac{\Phi(y) - \Phi(y_0) - p_0 \cdot (y - y_0)}{|y - y_0|} \leq 0 \tag{5.4}$$

und

$$\liminf_{y \to y_0} \frac{\Phi(y) - \Phi(y_0) - p_0 \cdot (y - y_0)}{|y - y_0|} \geq 0 \tag{5.5}$$

gleichzeitig erfüllt sind. Für eine stetige Funktion $\Phi$, die in $y_0 \in \Omega$ nicht differenzierbar ist, kann es dennoch Tupel $(y_0, p_0) \in \Omega \times \mathbb{R}^n$ geben, so daß (5.4) oder (5.5) erfüllt sind. Man bezeichnet die Menge aller $p_0 \in \mathbb{R}^n$ so daß (5.4) erfüllt ist als das Superdifferential $D^+\Phi(y_0)$ von $\Phi$ in $y_0$. Und umgekehrt bezeichnet man die Menge aller $p_0 \in \mathbb{R}^n$ so daß (5.5) erfüllt ist als das Subdifferential $D^-\Phi(y_0)$ von $\Phi$ in $y_0$. Damit definiert man die stetige Funktion $\Phi$ als die Viskositätslösung von (5.2), falls sie die Anfangsbedingung erfüllt und sowohl

$$\alpha \Phi_t(y) - H(p) \leq 0 \quad \forall\, y \in \Omega, \forall\, p \in D^+\Phi(y) \tag{5.6}$$

als auch

$$\alpha \Phi_t(y) - H(p) \geq 0 \quad \forall\, y \in \Omega, \forall\, p \in D^-\Phi(y) \tag{5.7}$$

erfüllt ist. Diese Definition ist nach [CEL84, Th. 1.1] äquivalent zur wesentlich gebräuchlicheren Definition der Viskositätslösung, die die Bedingungen (5.6) und (5.7) anhand von Testfunktionen formuliert.

**Definition 5.2. (Viskositätslösung)** *Eine beschränkte, gleichmäßig stetige Funktion $\Phi$ heißt eine Viskositätslösung des Anfangswertproblems (5.2), falls*

(i) $\Phi = g$ *auf* $(t = 0) \times \Omega$ *und*

(ii) *für alle* $v \in C(\mathbb{R}^+ \times \Omega)$

$$\begin{cases} \textit{falls } \Phi - v \textit{ ein lokales Maximum in } (x_0, t_0) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega \textit{ hat,} \\ \textit{so ist } \alpha v_t(x_0, t_0) + H(Dv(x_0, t_0)) \leq 0, \end{cases}$$

*und*

$$\begin{cases} \textit{falls } \Phi - v \textit{ ein lokales Minimum in } (x_0, t_0) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega \textit{ hat,} \\ \textit{so ist } \alpha v_t(x_0, t_0) + H(Dv(x_0, t_0)) \geq 0. \end{cases}$$

Die im folgenden Satz beschriebenen Eigenschaften, welche alle in einer Arbeit von Crandall, Evans und Lions [CEL84] bewiesen sind, belegen, daß obige Definition eine sinnvolle Charakterisierung der schwachen Lösungen der Hamilton-Jacobi Gleichung ist.

**Satz 5.3. (Eigenschaften von Viskositätslösungen)**

(i) *Sei $\Phi \in C^1(\mathbb{R}^+ \times \Omega)$ ein klassische Lösung von (5.2), dann ist $\Phi$ eine Viskositätslösung von (5.2).*

(ii) *Sei $\Phi$ eine Viskositätslösung von (5.2), die in einem Punkt $(s_0, y_0) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega$ differenzierbar ist, so ist*

$$\alpha\Phi_t(s_0, y_0) + H(D\Phi(s_0, y_0)) = 0.$$

(iii) *Sei $0 < T < \infty$ und seien $\Phi$ und $\Psi$ Viskositätslösungen von (5.2) auf $\mathbb{R}^+ \times \Omega$. Dann ist*

$$\sup_{[0,T]\times\Omega} (\Phi - \Psi)^+ = \sup_{x\in\Omega} (\Phi(0, x) - \Psi(0, x))^+ .$$

(iv) *Seien $\Phi^\varepsilon$ für $\varepsilon > 0$ zweimal stetig differenzierbare Lösungen von (5.3), welche auf einer kompakten Teilmenge von $\mathbb{R}^+ \times \Omega$ gleichmäßig gegen eine Funktion $\Phi \in C(\mathbb{R}^+ \times \Omega)$ konvergieren. Dann ist $\Phi$ eine Viskositätslösung der Gleichung (5.2).*

*Beweis:* siehe [CEL84], (i) und (ii) Th. 1.2, (iii) Th. 4.1 und (iv) Th.3.1 □

Die so definierten Viskositätslösungen sind die gesuchten Lösungen, welche gerade dem zu Beginn dieses Kapitels beschriebenen Huygens'schen Prinzip genügen.

## 5.2 Numerische Methoden

Mit den Viskositätslösungen hat man die geeigneten schwachen Lösungen charakterisiert, welche eindeutig sind und nicht notwendigerweise glatt sein müssen. Man sucht jetzt ein numerisches Verfahren zur Lösung von Hamilton-Jacobi Gleichungen, welches gegen die Viskositätslösung konvergiert. Hierbei ist der enge Zusammenhang zwischen Hamilton-Jacobi Gleichungen und hyperbolischen Erhaltungssätzen hilfreich. Im Eindimensionalen können erstere gerade durch Integration aus hyperbolischen Erhaltungssätzen gewonnen werden. Diese Analogie läßt sich zwar nicht auf höhere Dimensionen erweitern, dennoch können durch eine Art komponentenweisen Vorgehens viele Hamiltion-Jacobi Gleichungen mit Hilfe numerischer Verfahren zur Behandlung hyperbolischer Erhaltungssätze diskretisiert werden.

Die folgenden Betrachtungen werden der Übersichtlichkeit halber für Dimension $n = 2$ angestellt, können jedoch in kanonischer Weise für höhere Dimensionen erweitert werden. Betrachte also auf einem festen Gitter in $\mathbb{R}^2$ mit Gitterweiten $\triangle x$, $\triangle y$ und einer Zeitschrittweite $\triangle t$ Verfahren von der Form

$$\alpha\Phi_{ij}^{n+1} = \alpha\Phi_{ij}^n - \triangle t\hat{H}\left(D^{+x}\Phi_{ij}^n, D^{-x}\Phi_{ij}^n, D^{+y}\Phi_{ij}^n, D^{-y}\Phi_{ij}^n\right) . \tag{5.8}$$

Hierbei bezeichnet

$$\begin{aligned} D^{\pm x}\Phi_{ij} &= \pm\frac{\Phi_{i\pm1,j}-\Phi_{ij}}{\triangle x}\,, \\ D^{\pm y}\Phi_{ij} &= \pm\frac{\Phi_{i,j\pm1}-\Phi_{ij}}{\triangle y}\,, \end{aligned}$$

$\hat{H} : \mathbb{R}^4 \to \mathbb{R}$ eine numerische Flußfunktion und $\Phi_{ij}^n$ die numerische Approximation an die Viskositätslösung $\Phi(t^n,(x_i,y_j)) = \Phi(n\triangle t,(i\triangle x, j\triangle y))$ von (5.2). Man verlangt nun, daß $\hat{H}$ folgende *Konsistenzbedingung* mit (5.2) erfüllen soll:

$$\hat{H}(a,a,b,b) = H((a,b)) \quad \text{für } (a,b)\in\mathbb{R}^2$$

Darüberhinaus soll $\hat{H}$ *monoton* sein. Das bedeutet, $\hat{H}$ ist im ersten und dritten Argument nichtwachsend und im zweiten und vierten nichtabnehmend. Für numerische Verfahren (5.8), die konsistent mit (5.2) und monoton sind, zeigen Crandall und Lions in [CL84], daß unter gewissen schwachen Bedingungen an $H$ und an $g$ Konvergenz gegen die Viskositätslösung von (5.2) auftritt.

Ein Beispiel für ein solches monotones, konsistentes Verfahren ist das *Lax-Friedrichs*-Verfahren ([CL84],[OS91]). Hierbei ist die numerische Flußfunktion $\hat{H}$ folgendermaßen gegeben:

$$\hat{H}(a^+,a^-,b^+,b^-) = H\left(\left(\frac{a^+-a^-}{2},\frac{b^+-b^-}{2}\right)\right) - \frac{1}{2}\alpha^x(a^+-a^-) - \frac{1}{2}\alpha^y(b^+-b^-)\,,$$

wobei

$$\alpha^x = \max_{\substack{A\le a\le B\\ C\le b\le D}} |H_1((a,b))|\,, \quad \alpha^y = \max_{\substack{A\le a\le B\\ C\le b\le D}} |H_2((a,b))|$$

$H_i((a,b))$ bezeichnet die partielle Ableitung von $H$ nach dem $i$-ten Argument. Die Flußfunktion $\hat{H}$ ist monoton für $A\le a\le B$, $C\le b\le D$ und konsistent mit (5.2):

$$\hat{H}(a,a,b,b) = H\left(\left(\frac{a+a}{2},\frac{b+b}{2}\right)\right) = H((a,b))$$

Weitere Beispiele monotoner Verfahren finden sich bei Osher und Shu [OS91]. Monotone Verfahren sind jedoch meistens nur exakt von erster Ordnung und herkömmliche Verfahren mit höherer Ordnung eigenen sich nicht zur Lösung von (5.2), da sie im Falle nichtstetiger Ableitungen zu künstlichen Oszillationen führen. Um Verfahren mit höherer Ordnung zu konstruieren, verwendet man sogenannte ENO-Verfahren (*essentially nonoscillating*). Die Idee hierbei ist, durch ein adaptives Interpolationsverfahren, welches automatisch lokal die glattesten Daten verwendet, aus den Werten von $D\Phi$ in den Gitterpunkten eine Approximation hoher Ordnung, welche keine künstlichen Oszillationen enthält, an stückweise glatte Funktionen berechnen. Diese Approximation wird dann als Argument der numerischen Flußfunktion verwandt.

Um nun eine Lösung zweiter Ordnung der Eikonalgleichung (5.1) zu erhalten, geht man

wie oben beschrieben vor. Man definiert die von Rouy und Tourin [RT92] beschriebene Flußfunktion

$$\hat{H}(a,b,c,d) := \left[\max(a^+,b^-)^2 + \max(c^+,d^-)^2\right]^{\frac{1}{2}} - 1\,.$$

Als Argumente der Flußfunktion verwendet man falls möglich die in [BD74] mittels Operatorenkalkül hergeleiteten Vorwärts- und Rückwärtsapproximationen

$$\Phi_x(x_i,y_j) \approx D^{\pm x}\Phi_{ij} \mp \frac{\triangle x}{2}\left(D^{\pm x}\right)^2\Phi_{ij} \quad \text{und} \quad \Phi_y(x_i,y_j) \approx D^{\pm y}\Phi_{ij} \mp \frac{\triangle y}{2}\left(D^{\pm y}\right)^2\Phi_{ij}$$

zweiter Ordnung an die Komponenten des Gradienten von $\Phi$. Die Wahl, ob Approximationen erster oder zweiter Ordung verwendet werden, geschieht durch die unten definierten Schalter $s_{ij}^{\pm x}$ und $s_{ij}^{\pm y}$:

$$s_{ij}^{\pm x} := \begin{bmatrix} 1 & \textit{falls } \Phi_{i\pm 2,j} \textit{ und } \Phi_{i\pm 1,j} \textit{ bekannt sind und } \Phi_{i\pm 2,j} \le \Phi_{i\pm 1,j} \\ 0 & \textit{sonst} \end{bmatrix}$$

$$s_{ij}^{\pm y} := \begin{bmatrix} 1 & \textit{falls } \Phi_{i,j\pm 2} \textit{ und } \Phi_{i,j\pm 1} \textit{ bekannt sind und } \Phi_{i,j\pm 2} \le \Phi_{i,j\pm 1} \\ 0 & \textit{sonst} \end{bmatrix}$$

Damit erhält man folgende von Sethian in [Set99b] beziehungsweise [Set99a] vorgeschlagene Diskretisierung der Eikonalgleichung (5.1):

$$\left[\begin{array}{lll} & \max\Big( & \left(D^{-x}\Phi_{ij} + s_{ij}^{-x}\frac{\triangle x}{2}\left(D^{-x}\right)^2\Phi_{ij}\right), \quad -\left(D^{+x}\Phi_{ij} - s_{ij}^{+x}\frac{\triangle x}{2}\left(D^{+x}\right)^2\Phi_{ij}\right), \quad 0 \quad \Big)^2 \\ + & \max\Big( & \left(D^{-y}\Phi_{ij} + s_{ij}^{-y}\frac{\triangle y}{2}\left(D^{-y}\right)^2\Phi_{ij}\right), \quad -\left(D^{+y}\Phi_{ij} - s_{ij}^{+y}\frac{\triangle y}{2}\left(D^{+y}\right)^2\Phi_{ij}\right), \quad 0 \quad \Big)^2 \end{array}\right]^{\frac{1}{2}}$$

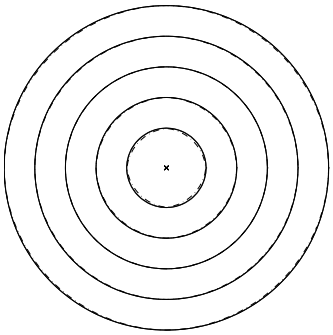
$$= 1\,. \tag{5.9}$$

Es stellt sich die Frage, ob diese Diskretisierung tatsächlich exakt von zweiter Ordnung ist, da sie durch die Schalter $s_{ij}^{\pm x}$ und $s_{ij}^{\pm y}$ auf eine Formulierung erster Ordnung zurückfallen kann. Die Antwort hängt davon ab, wie oft $s_{ij}^{\pm x} = 0$ und $s_{ij}^{\pm y} = 0$ sind und wie die Anzahl der Gitterpunkte, in denen dies der Fall ist, sich verändert, wenn das Gitter verfeinert wird. Man beobachtet, daß in vielen Berechnungen der Fall $s_{ij}^{\pm x} = 0$ und $s_{ij}^{\pm y} = 0$ nur sehr selten auftritt und die Anzahl dieser Gitterpunkte gegenüber der Gesamtzahl bei einer Verfeinerung des Gitters häufig abnimmt.

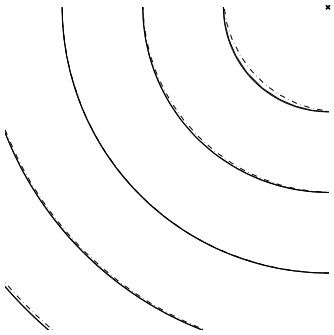
Die folgenden Abbildungen illustrieren die Viskositätslösungen der Eikonal-Gleichung anhand zweier Testprobleme, für die die exakten nach dem Huygens'schen Prinzip gewonnenen Lösungen bekannt sind.

Für das erste Testproblem bezeichnet die Niveaulinie $\Gamma$ gerade den Einheitskreis bezüglich der euklidischen Norm. Damit sind die Lösungen der Eikonal-Gleichung konzentrische Kreise. Die mit obiger Diskretisierung (5.9) auf einem $100 \times 100$-Gitter erhaltene Lösung zweiter Ordnung stimmt so gut mit der exakten Lösung überein, daß man in

der Abbildung keinen Unterschied zwischen beiden erkennen kann. Die strichpunktierte Lösung erster Ordnung weicht dagegen insbesondere in Richtung der Raumdiagonalen von der exakten Lösung ab.

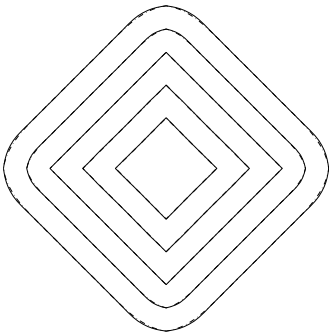


Isolinien der signierten Distanzfunktion

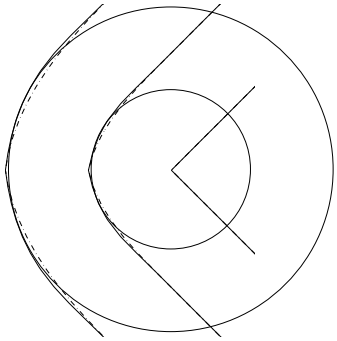


Vergrößerung

Im zweiten Testproblem bezeichnet $\Gamma$ den Einheitskreis bezüglich der Einsnorm, ist also insbesondere nicht glatt. Die exakte Lösung besteht aus konzentrischen Kreisen bezüglich der Einsnorm, wobei im äußeren entsprechend dem Huygens'schen Prinzip die Ecken durch entsprechende Kreissegmente ersetzt werden.



Isolinien der signierten Distanzfunktion



Vergrößerung

Die Lösungen wurden wie im ersten Beispiel mit Hilfe der Diskretisierung (5.9) auf einem $100 \times 100$-Gitter gewonnen. Auch hier weicht die strichpunktierte Lösung erster Ordnung insbesondere entlang der Raumdiagonalen von der exakten Lösung ab.

### 5.2.1 Fast Marching Method

Mit Gleichung (5.9) hat man eine geeignete diskrete Formulierung der Eikonal-Gleichung auf einem festen Gitter. Es stellt sich nun die Frage, wie diese Gleichung gelöst werden kann.

Eine Möglichkeit besteht in einer Iteration über dem gesamten Gitter, wie sie von Rouy und Tourin [RT92] vorgeschlagen wurde. Dieses Vorgehen ist jedoch sehr teuer, der benötigte Aufwand verhält sich bei einem zweidimensionalen Gitter mit $N$ Gitterpunkten pro Dimension wie $\mathcal{O}(N^3)$.

Eine andere, wesentlich schnellere und elegantere Möglichkeit besteht darin, wieder ite-

rativ vorzugehen, dabei jedoch die besonderen Kausalitätsbedingungen der Iteration auszunutzen. Dieses Vorgehen führt auf die sogenannte *Fast Marching Method* [Set96]. Die grundlegende Idee hinter dieser Methode ist die Beobachtung, daß sich bei dem in Gleichung (5.9) angegebenen Differenzenverfahren Information in den Gitterpunkten nur in einer Richtung ausbreitet, nämlich von kleineren Werten der Distanzfunktion $d$ zu größeren. Entsprechend geht man folgendermaßen vor. Ausgehend vom kleinsten Wert $d$ baut man durch Lösen der Gleichung (5.9) schichtweise eine Lösung auf dem gesamten Gitter auf. Dieses schichtweise Vorgehen, nämlich die Lösung von (5.9) stets nur in unmittelbarer Nachbarschaft der bereits bekannten Lösung zu berechnen, ist der Schlüssel für einen schnellen Algorithmus.

Die *Fast Marching Method* zur Lösung der Eikonal-Gleichung auf einem festen Gitter kann also wie folgt beschrieben werden:

Zuerst werden alle Gitterpunkte, die mindestens einen Nachbarpunkt mit verschiedenem Vorzeichen der Level-Set Funktion haben, mit einem Wert $d$ initialisiert und mit dem Flag *Known* versehen. Anschließend werden alle Gitterpunkte, die von diesen einen Gitterpunkt entfernt sind, mit dem Flag *Trial* versehen. Die übrigen Gitterpunkte werden mit dem Flag *Far* versehen. Nun wird sukzessive die Distanzfunktion $d$ aufgebaut. Dies geschieht in folgender Schleife:

(i) Wähle denjenigen Gitterpunkt $A$ aus *Trial*, der den kleinsten Wert $d$ hat.

(ii) Füge diesen Punkt zu *Known* hinzu und entferne ihn aus *Trial*.

(iii) Versehe alle benachbarten Gitterpunkte von $A$, die nicht in *Known* enthalten sind, mit dem Flag *Trial*. Falls sie in *Far* enthalten sind, entferne sie und füge sie zu *Trial* hinzu.

(iv) Berechne alle Werte $d$ in den mit dem Flag *Trial* versehenen Nachbarpunkten von $A$ entsprechend Gleichung (5.9).

(v) Beginne wieder bei (i)

Die Abbildungen 1 bis 6 illustrieren das beschriebene Vorgehen.

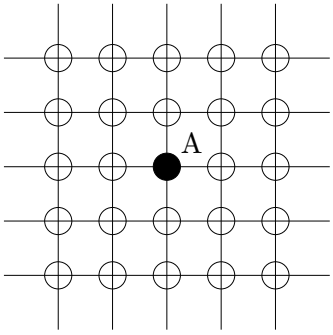



Abbildung 1: sei A derjenige Gitterpunkt aus *Trial* mit kleinstem Wert $d$, füge A zu *Known* hinzu

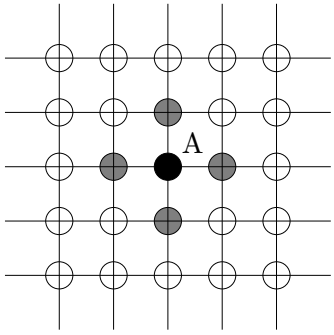



Abbildung 2: berechne die Werte $d$ in den Gitterpunkten aus *Trial* entsprechend Gleichung (5.9)

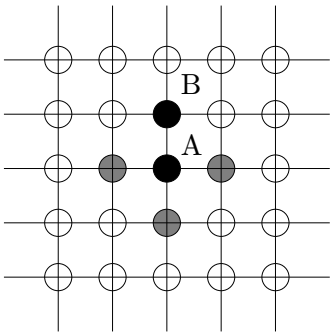



Abbildung 3: der Gitterpunkt B habe von allen Gitterpunkten aus *Trial* den kleinsten Wert $d$, entferne B aus *Trial* und füge es zu *Known* hinzu

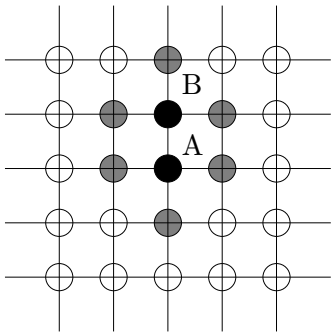



Abbildung 4: berechne die Werte $d$ in den mit dem Flag *Trial* versehenen Nachbarpunkten von B entsprechend Gleichung (5.9)

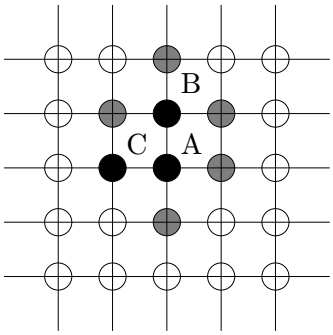



Abbildung 5: der Gitterpunkt C habe von allen Gitterpunkten aus *Trial* den kleinsten Wert $d$, entferne C aus *Trial* und füge es zu *Known* hinzu

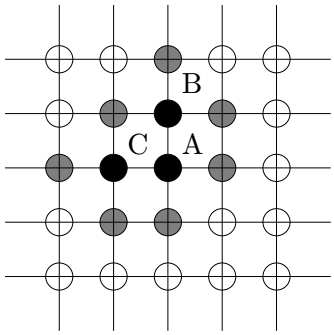
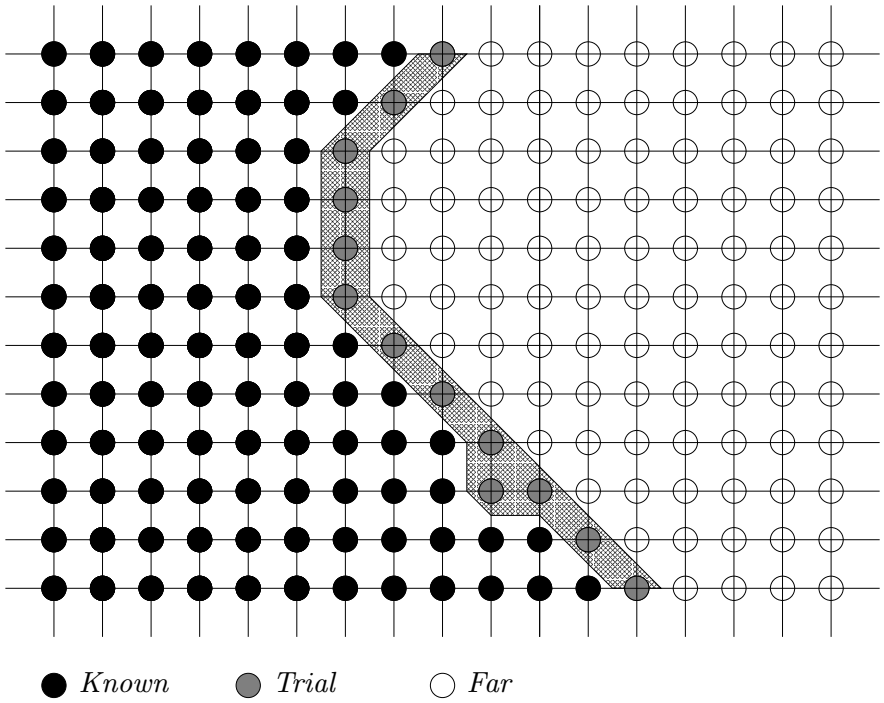



Abbildung 6: berechne die Werte $d$ in den mit dem Flag *Trial* versehenen Nachbarpunkten von C entsprechend Gleichung (5.9)

Durch dieses Vorgehen wird tatsächlich schichtweise eine Lösung auf dem Gitter berechnet. Der Fall, daß der Algorithmus auf der Stelle stehen bleibt, kann nicht auftreten, da die jeweils neu berechneten Werte $d$ in *Trial* nicht kleiner sein können als bereits bekannte Werte $d$ in *Known*. Das bedeutet, es wird stets einen Gitterpunkt aus *Trial* mit minimalem Wert $d$ geben, so daß der Algorithmus in beschriebener Weise fortlaufen kann.




Um die signierte Distanzfunktion auf einem Gitter aufzubauen, muß die *Fast Marching Method* getrennt für die Bereiche mit positivem und mit negativem Vorzeichen der Level-Set Funktion angewandt werden. Die so erhaltenen Werte sind stets positiv, das bedeutet, die Werte $d$ in den Gitterpunkten müssen entsprechend ihrer relativen Lage zur Niveaufläche mit dem Vorzeichen $\sigma$ versehen werden.

### 5.2.2 Effizienz

Der entscheidende Vorteil der *Fast Marching Method* gegenüber der von Rouy und Tourin [RT92] vorgeschlagenen Iteration über das gesamte Gitter liegt in der Beschränkung auf eine kleine Teilmenge der Gitters (*Trial*). Jedoch muß bei der *Fast Marching Method* in jedem Iterationsschritt derjenige Gitterpunkt aus *Trial* mit minimalem Wert $d$ gefunden werden. Das bedeutet, ein entscheidender Punkt für die Effizienz des Verfahrens ist die Organisation der Daten in den Gitterpunkten.
Mit der Menge *Trial* muß eine relativ kleine Teilmenge der Gitterpunkte so organisiert werden, daß zum einen der Eintrag mit minimalem Wert $d$ mit geringem Aufwand gefunden werden kann und zum anderen nach Ändern beziehungsweise Hinzufügen einiger weniger Einträge die Ordnung der Struktur einfach wieder hergestellt werden kann.

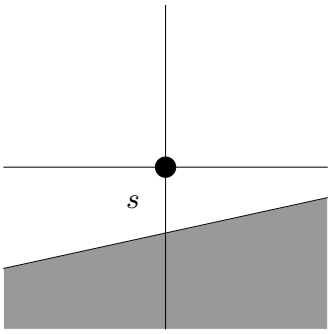
Diese Anforderungen führen direkt auf sogenannte *Heaps* und entsprechende Algorithmen [Sed92, Kap. 11]. Für die oben beschriebenen, speziellen Anfordeungen ist ein sogenannter *Min-Heap* die geeignete Struktur. Das ist ein vollständiger binärer Baum, wobei der Eintrag $d$ in jedem Knoten kleiner ist als die Einträge in den Nachfolgern. Somit steht das minimale Element stets in der Wurzel des Baumes. Neben den Werten $d$ enthalten die Knoten auch noch die Gitterkoordinaten des jeweiligen Gitterpunktes. Die Reorganisation des Baumes nach Entnehmen des Eintrags mit minimalem Wert $d$ oder Einfügen eines zusätzlichen Eintrags wird mit Hilfe der ebenfalls bei Sedgewick [Sed92, Kap. 11] beschriebenen Routinen `DownHeap` und `UpHeap` bewerkstelligt. Diese Routinen benötigen bei einer Anzahl von $M$ Einträgen $O(\log M)$ Operationen. Das Entnehmen des minimalen Eintrags benötigt damit nur $O(1)$ Operationen, was ohne diese spezielle Datenstruktur $O(M)$ Operationen benötigte.

Damit reduziert sich der Aufwand für das Lösen der Eikonal-Gleichung (5.9) mit Hilfe der *Fast Marching Method* auf einem zweidimensionalen Gitter mit $N$ Gitterpunkten pro Dimension auf $\mathcal{O}(N^2 \log N)$ im Vergleich zu $\mathcal{O}(N^3)$ für die von Rouy und Tourin [RT92] vorgeschlagene Iteration.

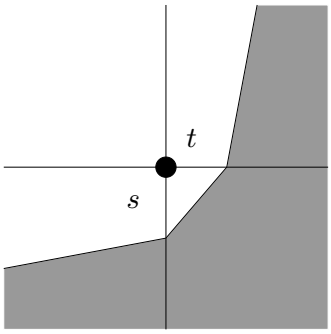
### 5.2.3 Initialisierung der Fast Marching Method

Die in Kapitel 5.2.1 beschriebene *Fast Marching Method* startet ausgehend von einer Teilmenge *Trial* der Gitterpunkte. Um diese Teilmenge als Startpunkte der Iteration festlegen und dort Gleichung (5.9) lösen zu können, benötigt man eine Approximation der Werte $d$ in all denjenigen Gitterpunkten, die wenigstens einen Nachbarn mit verschiedenem Vorzeichen der Level-Set Funktion haben. Da die Hyperfläche $\Gamma$, zu welcher die Distanzfunktion berechnet werden soll, als Niveaufläche $N(c)$ der Massendichte $\rho$ gegeben ist, identifiziert man diese Punkte anhand des Vorzeichens der Level-Set Funktion $\rho(x) - c$. Um nun eine Approximation der Werte $d$ in den beschriebenen Punkten zu erhalten, gibt es die folgenden Möglichkeiten.

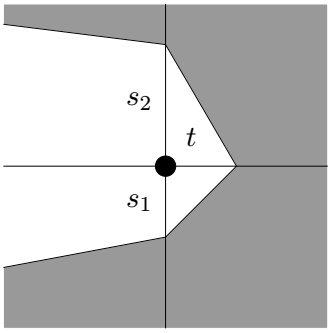
Man berechnet je nach Situation das Minimum der Abstände des untersuchten Gitterpunktes zu den Schnittpunkten der Gitterlinien mit der linearen Interpolanten der Level-Set Funktion. Oder man löst mit einem mittels dieser Abstände approximierten Gradienten der Distanzfunktion die Eikonal-Gleichung. Die folgenden Abbildungen illustrieren das jeweilige Vorgehen, wobei bis auf Rotation alle möglichen Fälle gezeigt werden.



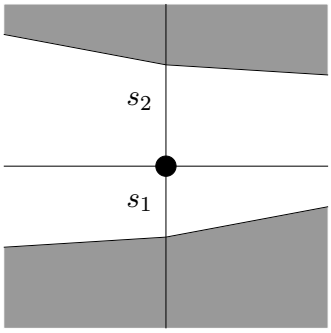

$d = s$



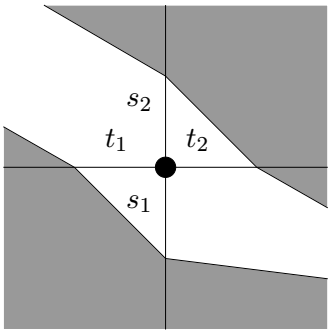

$\left(\frac{d}{s}\right)^2 + \left(\frac{d}{t}\right)^2 = 1$




$\left(\frac{d}{\min(s_1,s_2)}\right)^2 + \left(\frac{d}{t}\right)^2 = 1$




$d = \min(s_1, s_2)$




$\left(\frac{d}{\min(s_1,s_2)}\right)^2 + \left(\frac{d}{\min(t_1,t_2)}\right)^2 = 1$

Dieses von Adalsteinsson und Sethian [AS99] vorgeschlagene Verfahren liefert eine Approximation erster Ordnung der Werte $d$ in den Gitterpunkten aus *Trial*.

Das bedeutet, obwohl die Diskretisierung (5.9) zweiter Ordnung exakt ist, ist die damit formulierte *Fast Marching Method* mit obiger Initialisierung in einer Umgebung der betrachteten Niveaufläche nur erster Ordnung exakt. Da aber für die Approximation der Oberflächenenergie entsprechend Definition 4.2 nur eine $\varepsilon$-Umgebung der Niveaufläche $N(c)$ betrachtet wird, ist insbesondere dort eine Approximation zweiter Ordnung der Distanzfunktion $d$ von Interesse. Überdies bürgt eine möglichst exakte Lokalisation der Niveaufläche auch für eine exaktere Erhaltung des eingeschlossenen Masse.
Ein entsprechendes Verfahren, welches weitgehend dem von Chopp [Cho01] vorgestellten modifizierten Newton-Verfahren entspricht, wird im folgenden vorgestellt. Es wird

jedoch statt der von Chopp vorgeschlagenen Hermite-Interpolation der Level-Set Funktion eine Newton-Interpolation verwandt. Außerdem wird statt der Mononomialbasis aus Gründen der numerischen Stabilität eine geeignete Basis von Orthonormalpolynomen verwendet.
Ausgehend von den Werten der Level-Set Funktion $\widetilde{\rho} := \rho - c$ in den Gitterpunkten auf der Gitterzelle $[x_{u-1}, x_{u+1}] \times [y_{v-1}, y_{v+1}] \times [z_{w-1}, z_{w+1}]$ wird das Interpolationspolynom $p : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ an $\widetilde{\rho}$ berechnet. Es ist

$$p(x,y,z) = \sum_{k,l,m=0}^{2} a_{klm}\, q_k\big(\varphi_u^x(x)\big) q_l\big(\varphi_v^y(y)\big) q_m\big(\varphi_w^z(z)\big) \quad \text{mit } a_{klm} \in \mathbb{R}\,, \tag{5.10}$$

wobei für $t \in \mathbb{R}$

$$q_0(t) := \sqrt{\frac{1}{2}}\,, \quad q_1(t) := \sqrt{\frac{3}{2}}t\,, \quad q_2(t) := \sqrt{\frac{45}{8}}(t^2 - \frac{1}{3})\,,$$

ein Satz von Orthonormalpolynomen auf $[-1,1]$ bezüglich des Skalarproduktes $\langle q_i, q_j \rangle := \int_{-1}^{1} q_i(t) q_j(t) dt$ ist. Weiter bezeichnet

$$\begin{array}{rccc} \varphi_{uvw}: & [x_{u-1}, x_{u+1}] \times [y_{v-1}, y_{v+1}] \times [z_{w-1}, z_{w+1}] & \to & [-1,1]^3 \\ & (x,y,z) & \mapsto & \varphi_{uvw}(x,y,z) \end{array} \tag{5.11}$$

mit

$$\begin{aligned} \varphi_{uvw}(x,y,z) &= (\varphi_u^x(x), \varphi_v^y(y), \varphi_w^z(z)) \\ &= (-1,-1,-1) + 2\left(\tfrac{x-x_{u-1}}{x_{u+1}-x_{u-1}}, \tfrac{y-y_{v-1}}{y_{v+1}-y_{v-1}}, \tfrac{z-z_{w-1}}{z_{w+1}-z_{w-1}}\right) \end{aligned}$$

die Transformation der Gitterzelle $[x_{u-1}, x_{u+1}] \times [y_{v-1}, y_{v+1}] \times [z_{w-1}, z_{w+1}]$ auf $[-1,1]^3$. Die Interpolationsbedingungen an $p$ sind damit die folgenden:

$$p(x_r, y_s, z_t) = \sum_{k,l,m=0}^{2} a_{klm}\, q_k\big(\varphi_u^x(x_r)\big) q_l\big(\varphi_v^y(y_s)\big) q_m\big(\varphi_w^z(z_t)\big) = \widetilde{\rho}(x_r, y_s, z_t)$$

für $r = u-1, u, u+1$, $s = v-1, v, v+1$ und $t = w-1, w, w+1$. Dies führt auf ein lineares Gleichungssystem mit 27 Unbekannten (für Dimension $n = 2$ mit 9 Unbekannten). Die Verwendung der oben definierten Orthonormalpolynome sichert eine numerisch stabile Lösung des Gleichungssystems. Im Gegensatz dazu führt eine Verwendung der Mononomialbasis, wie sie von Chopp vorgeschlagen wird, wegen der sich ergebenden Hilbertmatrix auf ein schlecht konditioniertes Problem. Das Newton-Interpolationspolynom $p$ hat Ordnung 3. Die von Chopp vorgeschlagene Hermite-Interpolation hätte lediglich Ordnung 2, da hier statt exakter Werte Approximationen zweiter Ordnung an die Ableitungen verwendet werden. Der Gedanke ebendiese Hermite-Interpolation wie bei Chopp zu verwenden, wobei statt der Approximationen die exakten Werte der Ableitungen der Level-Set Funktion verwendet werden könnten, liegt nahe, insbesondere da der Gradient der Level-Set Funktion in den Gitterpunkten ohnehin bekannt ist. Da

wegen der speziellen Gestalt der Level-Set Funktion jedoch trotz des Tensorproduktansatzes der Formfunktion $\psi$ die partiellen Ableitungen $\nabla^2_{x,y}\rho, \nabla^2_{x,z}\rho, \nabla^2_{y,z}\rho$ und $\nabla^3_{x,y,z}\rho$ Ableitungen höherer Ordnung von $\psi$ beinhalten, ist dieses Vorgehen nicht praktikabel. Es müßte dafür eventuell ein höherer Grad der in den Formfunktionen verwendeten B-Splines verwendet werden.
Die für das unten definierte Newton-Verfahren notwendigen Ableitungen der Interpolante $p$ können aus den ohnehin in den Gitterpunkten bekannten Gradienten der Level-Set Funktion $\rho$ ebenfalls durch Newton-Interpolation gewonnen werden. Der Vorteil gegenüber einer direkten Differentiation der Interpolante $p$ liegt in der höherern Ordnung der Approximation.
Mit Hilfe dieser Interpolanten $p$ bestimmt man durch ein modifiziertes Newton-Verfahren zu jedem Gitterpunkt $z^0 := (x_u, y_v, z_w)$, der mindestens einen benachbarten Gitterpunkt mit umgekehrtem Vorzeichen der Level-Set Funktion $\widetilde{\rho}$ hat, denjenigen Punkt $z \in \mathbb{R}^3$ mit $d(z^0) = \text{sign}\left(p(z^0)\right)|z^0 - z|$. Für diesen Punkt $z$ gilt dann

$$p(z) = 0 \tag{5.12}$$

$$\nabla p(z) \times (z^0 - z) = 0\,. \tag{5.13}$$

Dabei bedeutet (5.12), daß $z$ auf der 0-Niveaulinie von $p$ liegt, und (5.13), daß die Normale $\nabla p(z)$ an die 0-Niveaulinie kolinear zu $(z^0 - z)$ ist. Um (5.12) und (5.13) zu lösen, geht man folgendermaßen vor. Zur Lösung von (5.12) wendet man ein Newton-Verfahren auf die Funktion $g_1 : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ mit

$$g_1(t) := p(z^k + t\nabla p(z^k)) = 0$$

an, und erhält aus der Iterierten $t^1$ mit $t^0 = 0$

$$z^{k+\frac{1}{2}} = z^k + t^1\nabla p(z^k) = z^k - p(z^k)\frac{\nabla p(z^k)}{\nabla p(z^k)\cdot\nabla p(z^k)}\,.$$

Da das Inkrement in Richtung des Gradienten von $p$ liegt, bleibt dabei die linke Seite von (5.13) nahezu unverändert. Zur Lösung von (5.13) definiert man die Funktion $g_2 : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ mit

$$g_2(t) := v \cdot \left(\nabla p(z^k) \times \left(\zeta^0 - \left(\zeta^k + t(v \times \nabla p(z^k))\right)\right)\right)\,,$$

wobei $v \in \mathbb{R}^3$ ein beliebiger Vektor ist, der nicht kolinear zu $\nabla p(z^k)$ ist. Durch das Kreuzprodukt $v \times \nabla p(z^k)$ wird sichergestellt, daß das Inkrement orthogonal zum Gradienten von $p$ liegt. Dies gilt, da $a \times b$ stets senkrecht auf der durch $a, b \in \mathbb{R}^3$ aufgespannten Ebene steht. Man wendet auf $g_2(t) = 0$ wieder ein Newton-Verfahren an und erhält aus der Iterierten $t^1$ mit $t^0 = 0$ nach Umformung

$$z^{k+1} = z^{k+\frac{1}{2}} + t^1\left(v \times \nabla p(z^k)\right) = z^{k+\frac{1}{2}} + (z^0 - z^k) - \frac{\left(z^0 - z^k\right)\cdot\nabla p(z^k)}{\nabla p(z^k)\cdot\nabla p(z^k)}\nabla p(z^k)\,.$$

Die Praxis zeigt, daß das Verfahren in der Regel nach wenigen Schritten ($< 10$) konvergiert, wobei das von Chopp [Cho01] vorgeschlagene Konvergenzkriterium

$$\sqrt{|\delta_1|^2 + |\delta_2|^2} < 10^{-3} \triangle x \triangle y \triangle z$$

verwandt wurde. Dabei bezeichnen $\triangle x, \triangle y$ und $\triangle z$ die Gitterweiten des zugrundeliegenden Quadraturpunktgitters. Als Approximation für die Distanzfunktion $d$ in $z^0$ setze dann $d(z^0) = \text{sign}\left(p(z^0)\right) |z^0 - z^\infty|$. Konvergiert das Verfahren nicht, etwa weil aufgrund irregulärer Daten, die Interpolante $p$ nicht korrekt bestimmt werden kann, so setzt man für diesen Gitterpunkt $d = \pm\infty$ oder greift auf das oben erwähnte Verfahren zurück. Mit dieser Initialisierung erhält man eine *Fast Marching Method*, welche auch in einer Umgebung der Niveaufläche $N(c)$ zweiter Ordnung exakt ist.
Das Verfahren kann durch kanonische Einbettung der Größen analog auch für ein zweidimensionales Gitter verwendet werden.

# Kapitel 6

# Numerische Umsetzung

## 6.1 Diskretisierung der Oberflächenenergie

Ausgehend von der Definition der Oberflächenenergie $V_\varepsilon^S$ in Kapitel 4.2 sucht man nun eine diskrete Formulierung derselben. Das bedeutet, man benötigt in erster Linie eine Diskretisierung des Integrals durch eine geeignete Quadraturformel.
Entsprechend dem Lagrangeschen Charakter der Methode der Finiten Massen wird, wie in Kapitel 1 erläutert, für die bisher definierten Kräfte und Momente, das heißt für ihre Potentiale, sofern es sich um Potentialkräfte handelt, eine teilchenbezogene Quadraturformel verwendet. Da die Definition der Oberfläche und entsprechend der Oberflächenenergie dagegen auf einer Eulerschen Sichtweise beruht, wird für die Diskretisierung der Integrale eine Quadraturformel über einem ortsfesten Gitter verwendet.

In Satz 4.3 in Kapitel 4.2 wurde gezeigt, daß die Oberflächenenergie $V_\varepsilon^S$ einer Hyperfläche eine Approximation erster Ordnung an das mit der Oberflächenspannung $\alpha$ gewichtete Hausdorff-Maß der Hyperfläche ist. Das bedeutet, der Fehler einer Diskretisierung der Oberflächenenergie $V_\varepsilon^S$ auf einem ortsfesten Gitter $G_h$ mit Gitterweite $h$ ist unabhängig von der verwendeten Quadraturformel stets $\mathcal{O}(h)$. Es ist daher unter diesem Aspekt nicht sinnvoll, Quadraturformeln mit hoher Ordnung zu verwenden, da diese nicht zu einer besseren Approximation des Hausdorff-Maßes führen. Lenkt man das Augenmerk jedoch auf die diskreten Erhaltungseigenschaften entsprechend Kapitel 4.4, so ist zwar die diskrete Gesamtenergie bei dieser ortsfesten Integraldiskretisierung unabhängig von der verwendeten Quadraturformel eine Erhaltungsgröße. Hingegen wird der Fehler in der diskreten Erhaltung von Impuls und Drehimpuls durch die Ordnung der Quadraturformel mitbestimmt.
Man verwendet hier die zusammengesetzte Mittelpunktsregel. Diese ist mit nur einem Quadraturknoten pro Gitterzelle billig zu berechnen und als lokal quadratisches Verfahren ist der Quadraturfehler von der Ordnung $\mathcal{O}(h)$.

Der Übersichtlichkeit halber werden die folgenden Betrachtungen für Dimension $n = 2$ angestellt, lassen sich aber in kanonischer Weise auf höhere Dimensionen erweitern.

Da die Lage der betrachteten Oberfläche beliebig sein kann, ist keine Raumrichtung vor einer anderen ausgezeichnet. Man verwendet daher stets ein uniformes Quadraturpunktgitter.
Bezeichne also $G_h$ ein ortsfestes, uniformes Quadraturpunktgitter der Gitterweite $h$, welches den Träger der Massendichte $M := \operatorname{supp}\rho \subset\subset \Omega$ überdeckt. Es sei ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\Omega := [a,b]^2$. Man definiert dann das Quadraturpunktgitter wie folgt:

$$G_h := \left\{ g_{kl} = (a,a) + h\left(k+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}\right) \mid k,l = 0,\ldots,n \right\},$$

wobei $n := \left\lfloor \frac{b-a}{h} \right\rfloor$. Die Gewichte $\omega_{kl}$ der Quadraturformel sind entsprechend der Mittelpunktsregel dann gerade $\omega_{kl} = h^2$ für $k,l = 0,\ldots,n$.
Damit erhält man unter obigen Voraussetzungen entsprechend der Definition 4.2 für die diskrete Formulierung der Oberflächenenergie einer Niveaufläche $N(c)$

$$V^S_{\varepsilon,h} := \alpha h^2 \sum_{k,l=0}^{n} \delta_\varepsilon(d_{kl}), \tag{6.1}$$

wobei $d_{kl} := d(g_{kl}, N(c))$ den Wert der signierten Distanzfunktion zur Niveaufläche $N(c)$ in $g_{kl}$ bezeichnet. Die Gitterweite $h$ des Quadraturpunktgitters muß natürlich in Relation zum Glättungsparameter $\varepsilon$ gewählt werden. Typischerweise wählt man $\varepsilon = \mu h$ mit $1.5 \le \mu \le 3$, so daß der Durchmesser des Integrationsgebietes etwa drei bis sechs Zellen des Quadraturpunktgitters entspricht.

Aus der diskreten Formulierung (6.1) der Oberflächenenergie erhält man analog zum Vorgehen in Kapitel 4.3 durch Differentiation nach $q_i$ und $H_i$ die diskrete Darstellung der Kräfte und Momente in den Teilchen. Es ist also

$$F^S_{i,h} = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial}{\partial q_i} V^S_{\varepsilon,h} = -\frac{\alpha}{m_i} h^2 \sum_{k,l=0}^{n} \delta'_\varepsilon(d_{kl}) \frac{\partial}{\partial q_i} d_{kl} \tag{6.2}$$

und

$$M^S_{i,h} = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial}{\partial H_i} V^S_{\varepsilon,h} = -\frac{\alpha}{m_i} h^2 \sum_{k,l=0}^{n} \delta'_\varepsilon(d_{kl}) \frac{\partial}{\partial H_i} d_{kl}, \tag{6.3}$$

wobei $\delta'_\varepsilon(t) = (\varphi''_\varepsilon * H)(t)$ entsprechend Gleichung (4.2). Mit der Darstellung der Ableitung der signierten Distanzfunktion aus Satz 4.4 und (1.10) ist

$$\frac{\partial}{\partial q_i} d_{kl} = \frac{-m_i}{|[\nabla_x \rho](\hat{g}_{kl})|} [\nabla_x \psi_i](\hat{g}_{kl}) \tag{6.4}$$

und

$$\frac{\partial}{\partial H_i} d_{kl} = \frac{-m_i}{|[\nabla_x \rho](\hat{g}_{kl})|} \left( \left[ [\nabla_x \psi_i](\hat{g}_{kl}) \right] \left[ H_i^{-1}(\hat{g}_{kl} - q_i) \right]^T + \psi_i(\hat{g}_{kl}) H_i^{-T} \right). \tag{6.5}$$

Dabei bezeichnet $\hat{g}_{kl}$ entsprechend Satz 4.4 denjenigen Punkt mit

$$d_{kl} = d(g_{kl}, N(c)) = \sigma |g_{kl} - \hat{g}_{kl}| \,.$$

Man erhält also aus (6.2) und (6.3) mit (6.4) und (6.5) für die diskrete Formulierung der Kräfte und Momente schließlich

$$F^S_{i,h} = \alpha h^2 \sum_{k,l=0}^{n} \delta'_\varepsilon(d_{kl}) \frac{[\nabla_x \psi_i](\hat{g}_{kl})}{|[\nabla_x \rho](\hat{g}_{kl})|} \tag{6.6}$$

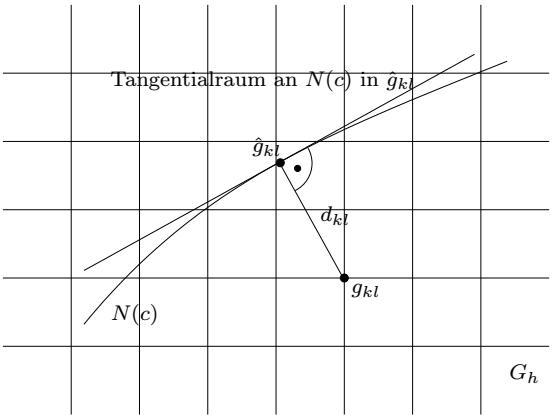
und

$$M^S_{i,h} = \alpha h^2 \sum_{k,l=0}^{n} \delta'_\varepsilon(d_{kl}) \frac{\left[[\nabla_x \psi_i](\hat{g}_{kl})\right] \left[H_i^{-1}(\hat{g}_{kl} - q_i)\right]^T + \psi_i(\hat{g}_{kl}) H_i^{-T}}{|[\nabla_x \rho](\hat{g}_{kl})|} \,. \tag{6.7}$$

Es stellt sich nun die Frage, wie ausgehend vom Gitterpunkt $g_{kl}$ der Punkt $\hat{g}_{kl}$ konstruiert werden kann. Da dieser im allgemeinen nicht im Quadraturpunktgitter liegen wird, muß darüberhinaus geklärt werden, wie dort die Werte $\nabla_x \rho$ berechnet werden können. Die folgende Beziehung stellt mit Hilfe der signierten Distanzfunktion einen Zusammenhang zwischen den Punkten $g_{kl}$ und $\hat{g}_{kl}$ her:

$$g_{kl} = \hat{g}_{kl} + d_{kl} \nu_{N(c)}(\hat{g}_{kl}) = \hat{g}_{kl} + d_{kl} \nabla_x d_{kl} \tag{6.8}$$

Dabei wird verwendet, daß für $d(g_{kl}, N(c)) = \sigma |g_{kl} - \hat{g}_{kl}|$ der Gradient der signierten Distanzfunktion gerade $\nabla_x d(g_{kl}, N(c)) = \nu_{N(c)}(\hat{g}_{kl})$ ist.




Skizze

Der Wert $d_{kl}$ der signierten Distanzfunktion in $g_{kl}$ ist aus der Lösung der Eikonal-Gleichung bekannt. Der Gradient $\nabla_x d_{kl}$ der signierten Distanzfunktion wird mit Hilfe der bereits in Kapitel 5.2 zur Lösung der Eikonal-Gleichung in (5.9) verwendeten finiten Differenzen approximiert. Das bedeutet, es ist

$$\nabla_x d_{kl} \approx \nabla_d d_{kl} =$$
$$\begin{pmatrix} \max\big( & (D^{-x} d_{kl} + s^{-x}_{kl} \frac{h}{2} (D^{-x})^2 d_{kl}), & -(D^{+x} d_{kl} - s^{+x}_{kl} \frac{h}{2} (D^{+x})^2 d_{kl}), & 0 & \big) \\ \max\big( & (D^{-y} d_{kl} + s^{-y}_{kl} \frac{h}{2} (D^{-y})^2 d_{kl}), & -(D^{+y} d_{kl} - s^{+y}_{kl} \frac{h}{2} (D^{+y})^2 d_{kl}), & 0 & \big) \end{pmatrix} . \tag{6.9}$$

Diese Approximation des Gradienten hat den Vorteil, daß sie auch dort einen im Sinne des Huygens'schen Prinzips sinnvollen Wert $\nabla_d d_{kl}$ liefert, wo der klassische Gradient nicht existiert. Das bedeutet, das Verfahren bleibt unabhängig von einer zu großen Wahl des Glättungsparameters $\varepsilon$ konsistent. Damit kann der Punkt $\hat{g}_{kl}$ mit Hilfe der Beziehung (6.8) berechnet werden. Es ist also

$$\hat{g}_{kl} = g_{kl} - d_{kl}\nabla_d d_{kl}\,. \tag{6.10}$$

Wie oben bereits erwähnt, wird $\hat{g}_{kl}$ im allgemeinen nicht im Quadraturpunktgitter liegen. Daher muß der Funktionswert von $\nabla_x \rho$ an der Stelle $\hat{g}_{kl}$ durch Interpolation aus den Gitterdaten $\nabla_x \rho(g_{kl})$ gewonnen werden. Dies kann durch eine Newton-Interpolation, wie sie in Kapitel 5.2.3 beschrieben ist, mit ausreichender Genauigkeit geschehen.

Die Funktionen $\psi_i$ und $\delta'_\varepsilon$ liegen explizit vor, so daß ihre Funktionswerte für beliebige Argumente jederzeit berechnet werden können.
Damit lassen sich die diskreten, normalisierten Kräfte $F^S_{i,h}$ und Momente $M^S_{i,h}$ entsprechend den Gleichungen (6.6) und (6.7) auf einem ortsfesten, uniformen Quadraturpunktgitter $G_h$ berechnen.

Die Diskussion eines geeigneten Niveaus $c > 0$ der Massendichte $\rho$ als Oberfläche eines masseerfüllten Gebietes aus Kapitel 4.1 wird hier noch einmal aufgegriffen. Wie dort bereits angedeutet, führt die Wahl $c = \varepsilon$ mit kleinem $\varepsilon > 0$ zu numerischen Instabilitäten in der Berechnung der Kräfte und Momente. Die Ursache hierfür ist die folgende.
Für $c = \varepsilon$ mit kleinem $\varepsilon > 0$ stimmt die Niveaufläche $N(c)$ nahezu mit dem Rand des Trägers der Massendichte $\rho$ überein. Nun hat $\rho$ aber als mit den Teilchenmassen $m_i$ gewichtete Summe der Ansatzfunktionen $\psi_i$ wie diese die Eigenschaft, daß es glatt über den Träger hinaus durch 0 fortgesetzt werden kann. Bezeichnet also $M := \operatorname{supp}\rho$, so ist $\nabla_x \rho|_{\partial M} = 0$. Damit wird die Bestimmung der Approximation von $\nabla_x \rho$ in den assoziierten Punkten $\hat{g}_{kl}$ als Quelle der numerischen Instabilitäten offensichtlich. Bereits kleinste Fehler in der Berechnung der $\hat{g}_{kl}$ können so durch Werte $|\nabla_x \rho| \approx 0$ zum vorzeitigen Abbruch der Rechnung führen.
Man trifft hier auf ähnliche Schwierigkeiten, die bei der Definition der Oberflächenenergie die Verwendung der signierten Distanzfunktion $d(\cdot, N(c))$ als Level-Set Funktion notwendig machten. Man könnte nun versuchen, durch die Definition einer neuen von den generalisierten Koordinaten $q_i$ und $H_i$ abhängigen Funktion und der Verwendung einer geeigneten Niveaufläche dieser Funktion, die obengenannten Schwierigkeiten zu umgehen. Da diese Funktion aber, um die nötige Glattheit zu gewährleisten, wieder eine Superposition differenzierbarer, teilchenbezogener Ansatzfunktionen mit den oben beschriebenen Fortsetzungseigenschaften enthalten muß, führt dieses Vorgehen nicht zum Ziel.

Man verfolgt statt dessen eine wesentlich einfachere Taktik, die ebenfalls die nötige Stabilität gewährleistet und in Rechnungen, die in Kapitel 7 präsentiert werden, gute

Ergebnisse liefert. Man wählt dazu in Abhägigkeit vom Maximalwert $\rho_{max}$ der Massendichte $\rho$ für den Wert $c \approx 0.1 \cdot \rho_{max}$, wobei 0.1 ein empirisch gewonnener Wert ist.

## 6.2 Datenstruktur und Organisation

Nachdem im vorigen Kapitel eine diskrete Formulierung der Kräfte und Momente angegeben wurde, wird hier nun ihre implementatorische Umsetzung in der bestehenden Realisation der Methode der Finiten Massen beschrieben.

Die Umsetzung erfolgt derart, daß sich die Berechnung der Kräfte und Momente weitgehend in die bei Leinen [Lei02] beschriebene Struktur einfügt. Das bedeutet, man arbeitet auch hier mit zwei Datenstrukturen, den Teilchen (durch $P$ bezeichnet) und den Quadraturpunkten. Die Quadraturpunkte sind nun jedoch nicht teilchenbezogen, sondern gerade die Knoten eines ortsfesten Quadraturpunktgitters $G_h$. Folglich geschieht der Aufbau des Quadraturpunktgitters $G_h$ nur einmal zu Beginn der Rechnung und wird dann im weiteren beibehalten, solange der Träger der Massendichte $\rho$ vollständig durch das Quadraturpunktgitter überdeckt bleibt.

Die Berechnung der Kräfte und Momente orientiert sich an dem bei Leinen [Lei02, Sec. 4.2] beschriebenen schrittweisen Vorgehen. Der erste Schritt, das Anlegen der Quadraturpunkte wird hier jedoch, wie bereits erwähnt, nur einmal zu Beginn der Rechnung ausgeführt.
In einem zweiten Schritt werden die Funktionswerte der Massendichte $\rho$ und des Gradienten $\nabla_x \rho$ in den Quadraturpunkten berechnet. Dabei wird Information von einem Teilchen $i$ auf alle Quadraturpunkte im Träger von $\psi_i$ übertragen. Dies geschieht in einer Schleife über alle Teilchen.
Im dritten Schritt wird durch Lösen der Eikonal-Gleichung mit Hilfe der *Fast Marching Method* die signierte Distanzfunktion bis zu Werten $|d_{kl}| = \varepsilon + mh$ berechnet. Dabei bezeichnet $\varepsilon$ den Glättungsparameter aus Definition 4.2 und $m \in \mathbb{N}$ gibt an, um wieviele Gitterzellen die signierte Distanzfunktion über das eigentliche Integrationsgebiet $U_\varepsilon(N(c))$ hinaus berechnet werden soll. Typischerweise wählt man $m$ zwischen zwei und fünf, um sicher genügend Quadraturpunkte für die anschließende Approximation des Gradienten $\nabla_d d_{kl}$ entsprechend (6.9) zu haben.
Damit legt man zu jedem Quadraturpunkt $g_{kl}$ mit $|d_{kl}| \leq \varepsilon$ einen assoziierten Punkt $\hat{g}_{kl} = g_{kl} - d_{kl} \nabla_d d_{kl}$ entsprechend (6.10) an und berechnet für diesen durch Newton-Interpolation eine Approximation für $\nabla_x \rho(\hat{g}_{kl})$. Idealerweise wird in diesem Schritt nur auf Quadraturpunkte in einer Umgebung mit Radius $\varepsilon + mh$ der betrachteten Niveaufläche zugegriffen.
Im vierten und letzten Schritt werden die Kräfte $F^S_{i,h}$ und Momente $M^S_{i,h}$ entsprechend (6.6) und (6.7) aus den in den vorigen Schritten bereitgestellten Daten berechnet. Dies geschieht in einer Schleife über alle Teilchen. Dabei wird Information aus den Quadra-

turpunkten $g_{kl}$, deren assoziierte Punkte $\hat{g}_{kl}$ im Träger von $\psi_i$ liegen, zurück auf das Teilchen $i$ übertragen.

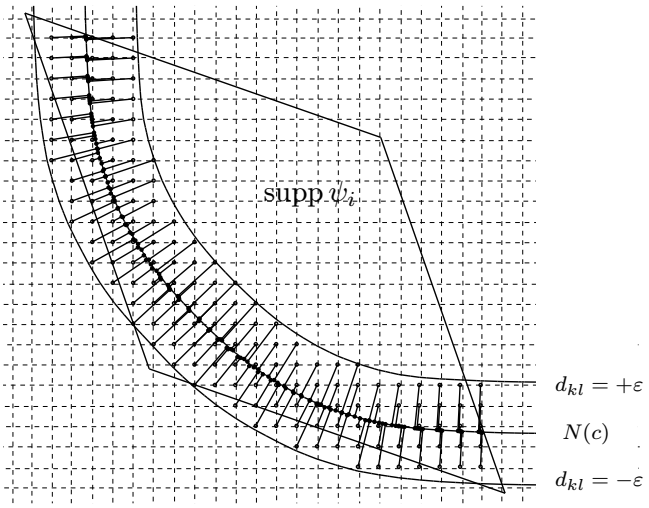
Um in Schritt 2 und in Schritt 4 ein schnelles Auffinden aller Quadraturpunkte $g_{kl}$ beziehungsweise aller assoziierten Punkte $\hat{g}_{kl}$ im Träger eines Teilchens zu ermöglichen, verwendet man wie in der bestehenden Implementierung die von Leinen [Lei02, Sec. 4.3] vorgeschlagenen Suchbäume.
Dabei wird nach Schritt 3 ein neuer Suchbaum für die Quadraturpunkte aus $\overline{G_h}$ angelegt, wobei die sensitive Größe hier nicht die Quadraturpunkte $g_{kl}$ selbst, sondern die assoziierten Punkte $\hat{g}_{kl}$ sind. Damit kann schließlich auch in Schritt 4 eine effiziente Berechnung der Kräfte und Momente entsprechend (6.6) und (6.7) bewerkstelligt werden.

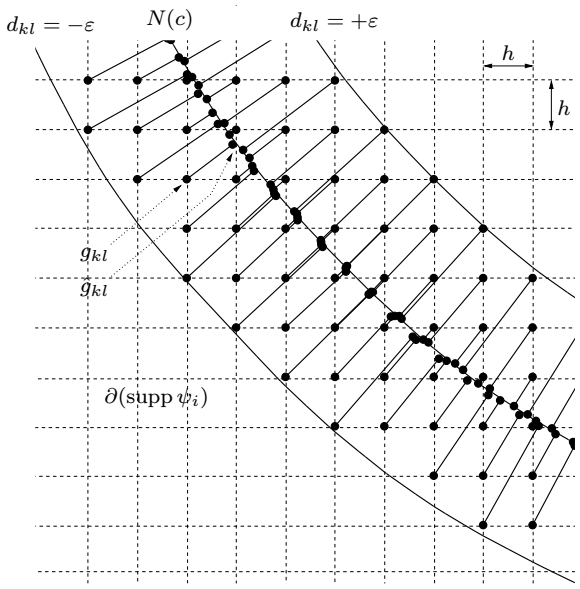
Das folgende Schema faßt das Vorgehen noch einmal zusammen, wobei in der rechten Spalte der Informationsfluß zwischen den verschiedenen Datenstrukturen dargestellt ist.

| | | |
|---|---|---|
| Schritt 1 | Anlegen des Quadraturpunktgitters $G_h$,<br>nur zu Beginn der Rechnung oder<br>falls $G_h$ den Träger von $\rho$ nicht mehr überdeckt | |
| Schritt 2 | $\forall$ Teilchen $i$<br>$\forall\, g_{kl} \in G_h$ mit $\psi_i(g_{kl}) > 0$<br>$\rho(g_{kl}) \leftarrow \rho(g_{kl}) + m_i\psi_i(g_{kl})$<br>$\nabla_x\rho(g_{kl}) \leftarrow \nabla_x\rho(g_{kl}) + m_i\nabla_x\psi_i(g_{kl})$ | $P \to G_h$ |
| Schritt 3 | Lösen der Eikonal-Gleichung auf $G_h$ mit Hilfe der<br>*Fast Marching Method* bis zu $\lvert d_{kl}\rvert = \varepsilon + mh$<br>$\forall\, g_{kl}$ mit $\lvert d_{kl}\rvert \le \varepsilon + mh$<br>Approximation von $\nabla_d d_{kl}$ entsprechend (6.9),<br>bezeichne die Teilmenge der Gitterpunkte<br>mit $\lvert d_{kl}\rvert \le \varepsilon$ durch $\overline{G_h}$<br>$\forall\, g_{kl} \in \overline{G_h}$<br>Anlegen der assoziierten Punkte $\hat{g}_{kl}$<br>entsprechend (6.10),<br>Approximation von $\nabla_x\rho(\hat{g}_{kl})$ | $G_h \to \overline{G_h}$ |
| Schritt 4 | $\forall$ Teilchen $i$<br>$\forall\, g_{kl} \in \overline{G_h}$ mit $\psi_i(\hat{g}_{kl}) > 0$<br>$F^S_{i,h} \leftarrow F^S_{i,h} + \alpha h^2 \delta'_\varepsilon(d_{kl}) \frac{\partial}{\partial q_i} d_{kl}$<br>$M^S_{i,h} \leftarrow M^S_{i,h} + \alpha h^2 \delta'_\varepsilon(d_{kl}) \frac{\partial}{\partial H_i} d_{kl}$<br>wobei $\frac{\partial}{\partial q_i} d_{kl}$ und $\frac{\partial}{\partial H_i} d_{kl}$ entsprechend<br>(6.4) und (6.5) berechnet werden | $\overline{G_h} \to P$ |

Ein entscheidender Unterschied zur bestehenden Implementierung ist neben der Verwendung eines ortsfesten Quadraturpunktgitters die Tatsache, daß die zur Berechnung

der Kräfte und Momente in einem Teilchen $i$ verwendeten Quadraturpunkte $g_{kl} \in \overline{G_h}$ nicht mehr notwendigerweise im Träger $\operatorname{supp} \psi_i$ des Teilchens liegen müssen. Das Kriterium für die Verwendung eines Quadraturpunktes $g_{kl}$ ist nun die Lage des assoziierten Punktes $\hat{g}_{kl}$. Die folgenden Abbildungen illustrieren dies an einem exemplarisch herausgegriffenen Teilchen. Dabei ist zu jedem Quadraturpunkt $g_{kl} \in \overline{G_h}$ mit $\psi_i(\hat{g}_{kl}) > 0$ der assoziierte Punkt $\hat{g}_{kl}$ abgebildet und diese beiden sind durch eine Linie verbunden. Die zweite Abbildung zeigt einen vergrößerten Ausschnitt der ersten.



# Kapitel 7

# Beispielrechnungen

Nach den theoretischen Vorarbeiten zur Modellierung der Oberflächenspannung freier Ränder werden nun anhand von drei ausgesuchten Beispielproblemen exemplarisch Möglichkeiten und Grenzen des Ansatzes untersucht.
Die Modellierung wurde dimensionsunabhängig formuliert, das bedeutet es können sowohl zwei- als auch dreidimensionale Probleme untersucht werden. Da wesentliche geometrische Effekte bereits in zwei Dimensionen auftreten und der Aufwand bei der Organisation der Daten für Dimension drei ungleich höher ist als für Dimension zwei, beschränken sich die betrachteten Beispiele auf zweidimensionale Probleme.
Es wird zuerst ein Fluidvolumen betrachtet, dessen Oberfläche durch einen Kreis beschrieben wird. Die Evolution des Systems wird allein durch die Oberflächenspannung verursacht. Anhand dieses Beispiels können so grundlegende Eigenschaften der Modellierung untersucht werden.
In einem weiteren Beispiel wird unter dem zusätzlichen Einfluß einer inneren Energie, die lediglich von der Dichte abhängt, die Evolution eines Systems mit einer ellipsenförmigen Ausgangsoberfläche untersucht.
Das dritte Beispiel illustriert anhand zweier sich aufeinander zubewegender disjunkter Fluidvolumina die Fähigkeit der Modellierung, auch topologische Änderungen der Oberfläche zu behandeln.

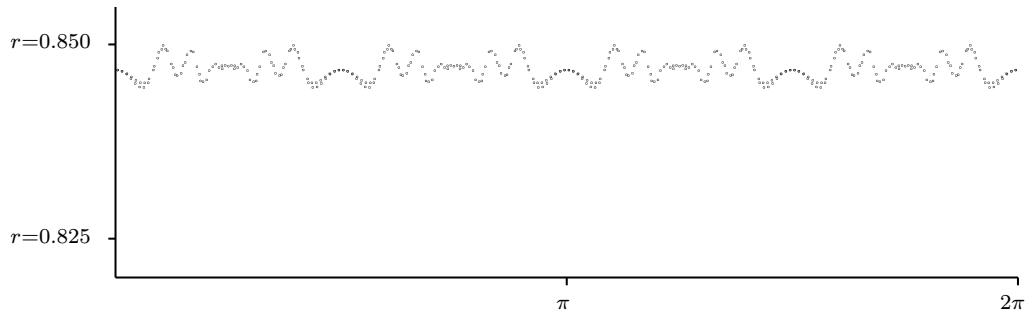
In allen Rechnungen, außer den Plausibilitätsbetrachtungen zu Beispiel 1, wirkt zusätzlich zu den explizit beschriebenen Kräften stets auch die in Kapitel 1 erwähnte Reibungskraft. Dieser Kraftterm, mit dessen Hilfe die Umsetzung von Fluktuationsenergie in innere Energie beschrieben wird, sorgt durch ein weiches Aneinanderkoppeln der Teilchen für die nötige Stabilität der Rechnungen. Die damit verbundene Wärmeerzeugung wird außer Acht gelassen. Den skalaren Reibungskoeffizienten $R \geq 0$ wählt man stets in der Größenordnung der reziproken Zeitschrittweite.

Für die Zeitintegration wurden in den untersuchten Beispielen gute Erfahrungen mit einem Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung 4 und dem schrittweitengesteuerten Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung 5 von Dormand und Prince (DoPri5 [HNW93]) gemacht.

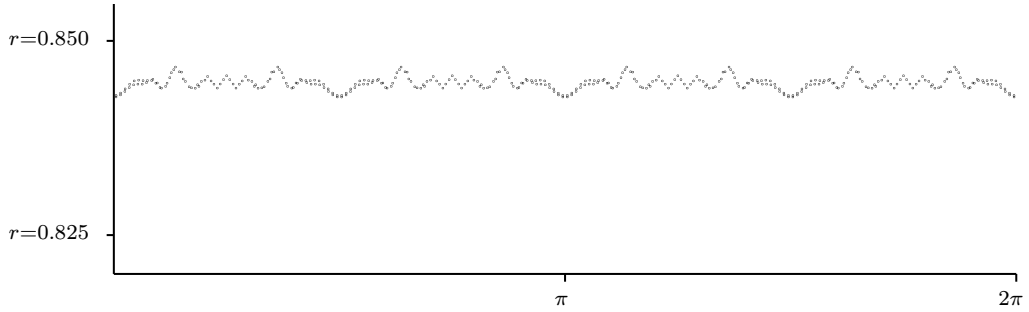
## 7.1 Beispiel 1: kreisförmige Oberfläche als Testproblem

Wie bereits erwähnt, dient dieses erste Beispiel hauptsächlich dazu, das grundsätzliche Verhalten der Modellierung zu untersuchen. Es wird ein System aus $25 \times 25$ Teilchen (3B-Splines) betrachtet, dessen Dichteverteilung zum Zeitpunkt $t = 0$ derart definiert ist, daß die Niveaulinie $N(0.8) = \{x \in \mathbb{R}^2 \,|\, \rho(x) = 0.8\}$ gerade einen Kreis bildet. In die Rechnung fließen dann effektiv nur 481 Teilchen ein. Die Approximation der Integrale erfolgt entsprechend Kapitel 6.1 über einem ortsfesten Quadraturpunktgitter mit $100 \times 100$ Punkten, welches $[-1.3, 1.3]^2$ überdeckt. Das bedeutet, daß ein Teilchen zum Zeitpunkt $t = 0$ etwa 100 Quadraturpunkte überdeckt. Diese verhältnismäßig hohe Anzahl ist dadurch gerechtfertigt, daß bedingt durch starke Deformation einzelne Teilchen im Laufe der Rechnung nur noch etwa 20 Quadraturpunkte überdecken. Da das Quadraturpunktgitter nur einmal, nämlich zum Zeitpunkt $t = 0$, angelegt wird und im Laufe der Rechnung keine lokale Verfeinerung möglich ist, muß bereits hier eine hinreichende räumliche Approximation für den gesamten betrachteten Zeitraum sichergestellt werden.

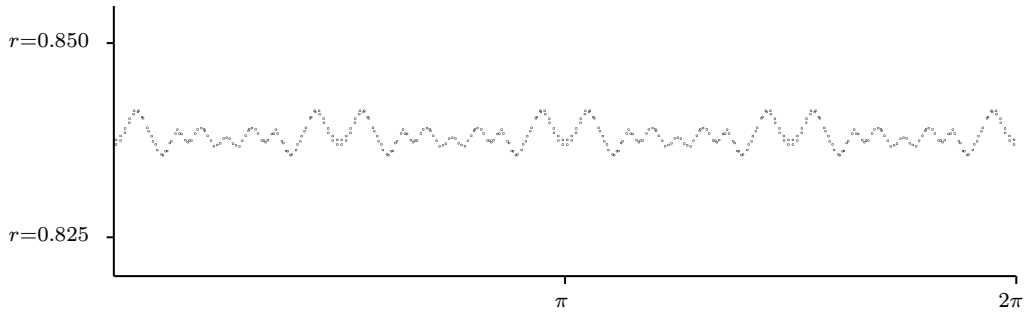
Bevor man nun im weiteren Simulationsergebnisse untersucht, die die Reibungskraft als stabilisierenden Effekt beinhalten, betrachtet man zuerst für ein entsprechend kurzes Zeitintervall das beschriebene System unter dem ausschließlichen Einfluß der Oberflächenspannung. Man erwartet dann, daß die Oberfläche des Fluids weiterhin durch einen Kreis, jedoch mit zunehmend kleinerem Radius beschrieben wird. Es zeigt sich in der Tat, daß die geometrische Form der Oberfläche im Rahmen des räumlichen Approximationsvermögens, welches durch die Anzahl der verwendeten Teilchen bestimmt wird, erhalten bleibt. Die folgenden Abbildungen illustrieren dies anhand von $(r, \varphi)$-Diagrammen der für die Initialisierung der *Fast Marching Method* gemäß Kapitel 5.2.3 berechneten Punkte auf der Niveaulinie $N(0.8)$. Es werden die Zeitpunkte $t = 0$, $t = 5 \cdot 10^{-3}$, $t = 10 \cdot 10^{-3}$ und $t = 15 \cdot 10^{-3}$ herausgegriffen, wobei mit einem Runge-Kutta-Verfahren mit einer Zeitschrittweite $\tau = 10^{-4}$ gerechnet wurde. Als Maß für die Güte, mit der die Kreisform erhalten bleibt, kann etwa die Varianz $\sigma^2$ der aufgetragenen Punkte dienen. Man erkennt, daß diese in etwa in derselben Größenordnung bleibt, mit der die Niveaulinie $N(0.8)$ zum Zeitpunkt $t = 0$ initialisiert wird.



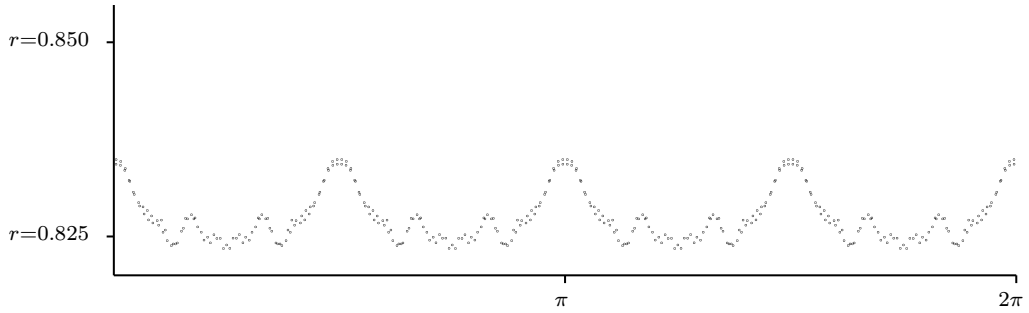

$t = 0, \quad \sigma^2 = 1.95 \cdot 10^{-6}$




$$t = 5 \cdot 10^{-3}, \quad \sigma^2 = 6.79 \cdot 10^{-7}$$




$$t = 10 \cdot 10^{-3}, \quad \sigma^2 = 2.13 \cdot 10^{-6}$$




$$t = 15 \cdot 10^{-3}, \quad \sigma^2 = 10.96 \cdot 10^{-6}$$

Verwendet man statt der 3B-Splines als Ansatzfunktionen die weniger glatten 2B-Splines, so erhält man für die Varianz $\sigma^2$ zu den betrachteten Zeitpunkten deutlich schlechtere Ergebnisse: :

| $t/10^{-3}$ | 0.0 | 5.0 | 10.0 | 15.0 |
|---|---|---|---|---|
| $\sigma^2/10^{-6}$ | 2.44 | 1.75 | 9.08 | 40.34 |

*Entwicklung der Varianz bei Verwendung von 2B-Splines*

Weiterhin ist die Erhaltung der eingeschlossenen Masse

$$m = \int\limits_{\{x \in \mathbb{R}^2 \mid \rho(x) \geq 0.8\}} \rho(x)\, dx \approx h^2 \sum_{k,l=0}^{n} \rho(g_{kl})$$

von Interesse. Sie muß im Verlauf der Rechnung weitgehend konstant bleiben. An diesem Punkt kommt nun die höhere Ordnung der in Kapitel 5.2.3 vorgestellten Initialisierung der *Fast Marching Method* nach Chopp [Cho01] zum Tragen. Durch ein Verfahren zweiter Ordnung, das eine genauere Lokalisierung der Niveaulinie ermöglicht, welche als Ausgangspunkt für die Lösung der Eikonal-Gleichung dient, erhält man direkt auch eine höhere Genauigkeit bei der Erhaltung der eingeschlossenen Masse. Die folgenden Werte geben in einem direkten Vergleich die prozentuale Abweichung der eingeschlossenen Masse vom Ausgangswert zu den bereits oben betrachteten Zeitpunkten für die in Kapitel 5.2.3 beschriebenen Initialisierungen erster und zweiter Ordnung an:

| $t/10^{-3}$ | 0.0 | 5.0 | 10.0 | 15.0 |
|---|---|---|---|---|
| erster Ordn. | 0.00% | 0.20% | 0.69% | 1.26% |
| zweiter Ordn. | 0.00% | 0.14% | 0.27% | 0.52% |

*Abweichung der eingeschlossenen Masse bei Verwendung verschiedener Initialisierungsverfahren*

Es wird in der Tat ein deutlicher Unterschied beider Verfahren sichtbar. Dabei weicht bei der in Kapitel 5.2.3 vorgestellten Initialisierung zweiter Ordnung die eingeschlossene Masse nach 150 Zeitschritten deutlich weniger als ein Prozent vom Anfangswert ab.

Diese Betrachtungen dienen als eine Plausibilitätsüberprüfung der Modellierung, bevor nun komplexere Effekte untersucht werden, deren Evolution sich nicht mehr so unmittelbar vorhersagen läßt.

Im folgenden betrachtet man wiederum die Evolution des oben beschriebenen Systems unter dem Einfluß der Oberflächenspannung, jedoch wird jetzt die Reibungskraft als zusätzlicher, stabilisierender Effekt hinzugenommen. Man betrachtet das System über einen Zeitraum $0 \leq t \leq 7 \cdot 10^{-2}$, wobei man ein Runge-Kutta-Verfahren mit einer Zeitschrittweite $\tau = 10^{-4}$ verwendet. Für den Koeffizienten $R$ der Reibung setzt man $R = 10^4$, so daß $R\tau = 1$.

Abbildung 1, $t = 0$

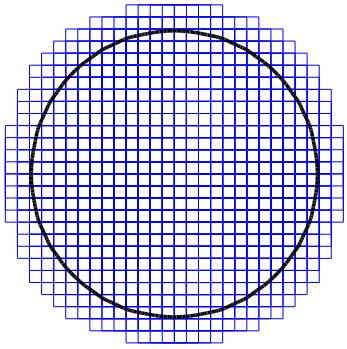


Abbildung 2, $t = 1 \cdot 10^{-2}$

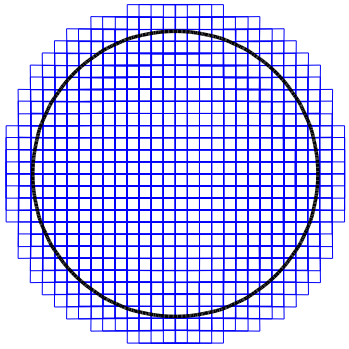


Abbildung 3, $t = 2 \cdot 10^{-2}$

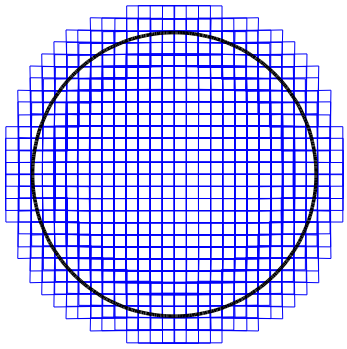


Abbildung 4, $t = 3 \cdot 10^{-2}$

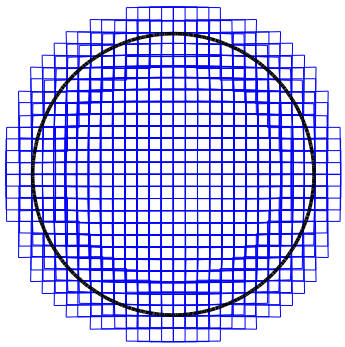


Abbildung 5, $t = 4 \cdot 10^{-2}$

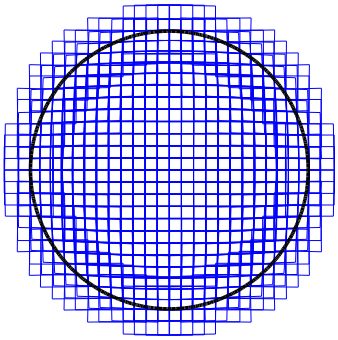


Abbildung 6, $t = 5 \cdot 10^{-2}$

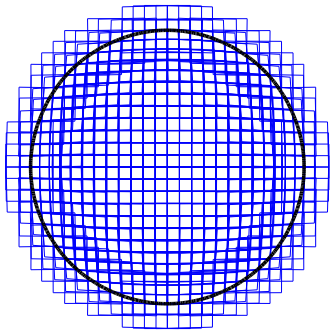


Abbildung 7, $t = 6 \cdot 10^{-2}$

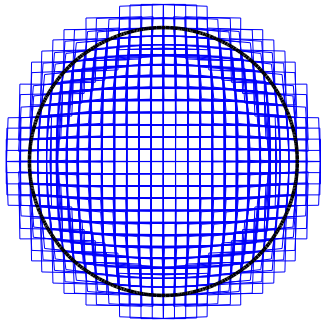
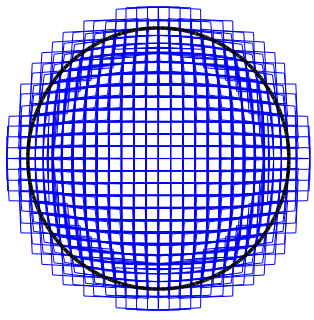
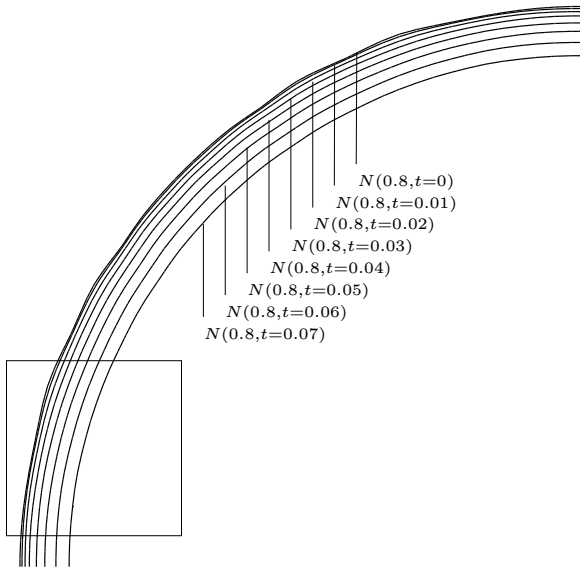


Abbildung 8, $t = 7 \cdot 10^{-2}$



Anhand der Abbildungen eins bis acht erkennt man, daß innere Teilchen, welche einen nichtleeren Schnitt mit der als Oberfläche definierten Niveaulinie $N(0.8)$ haben, sich durch Verformung der Oberfläche anpassen. Es gibt jedoch auch Teilchen, die nicht diesem Verhalten folgen, sondern sich gerade umgekehrt, entgegen der Krümmung der Oberfläche deformieren. Das sind diejenigen Teilchen, deren Schwerpunkt außerhalb der durch $N(0.8)$ definierten Oberfläche liegt.

Die folgende Abbildung illustriert das Verhalten der Oberfläche anhand eines vergrößerten Ausschnittes. Es wird die Niveaulinie $N(0.8)$ zu den bereits oben gezeigten Zeitpunkten aufgetragen. Man erkennt wiederum wie in der vorangegangenen Plausibilitätsbetrachtung, daß die geometrische Form der Oberfläche nahezu erhalten bleibt und der Radius über der Zeit zunehmend kleiner wird. Die Abbildung enthält zusätzlich ein für den untersuchten Zeitraum repräsentatives Teilchen des Systems, um einen Anhaltspunkt für die Qualität der räumlichen Approximation zu geben.



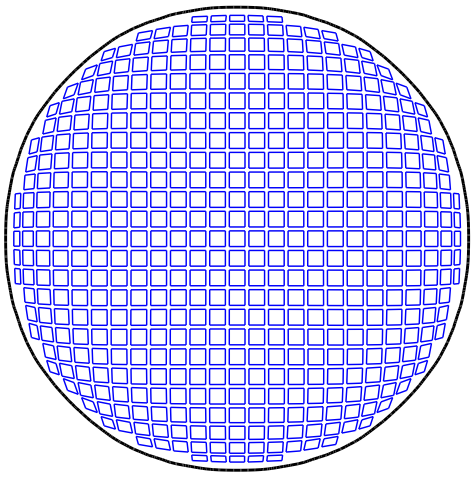

Die prozentuale Abweichung der eingeschlossenen Masse vom Ausgangswert zu den betrachteten Zeitpunkten zeigt die folgende Tabelle. Diese liefert noch einmal einen Anhaltspunkt für die Güte der Massenerhaltung bei der in allen Rechnungen verwandten Initialisierung zweiter Ordnung nach Chopp [Cho01].

| $t/10^{-2}$ | 0.0 | 1.0 | 2.0 | 3.0 | 4.0 | 5.0 | 6.0 | 7.0 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\triangle m/\%$ | 0.00 | 0.09 | 0.03 | 0.13 | 0.21 | 0.23 | 0.38 | 0.55 |

*Abweichung $\triangle m$ der eingeschlossenen Masse vom Anfangswert*

Das bedeutet, auch nach 700 Zeitschritten bleibt die Abweichnung bei der Initialisierung zweiter Ordnung deutlich unter einem Prozent.

Abschließend zu diesem Beispiel sei erwähnt, daß durch die Wahl eines kleinen Dichtewertes für die Definition der Oberfläche ein intuitiveres Verhalten der Teilchen erreicht werden kann. Liegen die Schwerpunkte der Teilchen allesamt im Inneren des von der Niveaulinie eingeschlossenen Volumens, so erhält man etwa für $N(0.08)$ nach 250 Zeitschritten die folgende Situation.



Niveaulinie $N(0.08)$ als Oberfläche

Für die Abbildung wurden die Deformationen $H_i$ der Teilchen mit dem Faktor 0.2 skaliert, so daß die relative Lage ihrer Schwerpunkte $q_i$ zur Oberfläche übersichtlicher verfolgt werden kann.
Dieses Vorgehen, mit Hilfe eines verhältnismäßig kleinen Dichtewertes ein intuitiveres Verhalten der zur Modellierung des Fluids verwendeten Teilchen zu erzwingen, ist wegen der damit verbundenen, in Kapitel 6.1 beschriebenen, Instabilität in der Approximation des Gradienten der Dichte in der Oberfläche jedoch nur bedingt praktikabel.

## 7.2 Beispiel 2: Oberflächenspannung und innerer Druck

Nach dem Testproblem im vorigen Abschnitt untersucht man nun in einer komplexeren Situation das Zusammenspiel von Oberflächenspannung und innerem Druck. Dieses Beispiel illustriert die Anwendbarkeit der beschriebenen Modellierung der Oberflächenspannung in Simulationen realer physikalischer Prozesse.
Ausgehend von einem Fluidvolumen mit konvexer Oberfläche betrachtet man dessen Evolution unter dem Einfluß von Oberflächenspannung und innerem Druck. Die Oberfläche wird zum Zeitpunkt $t = 0$ als Ellipse initialisiert, kann also als Störung der stabilen Gleichgewichtsform des Systems aufgefaßt werden.
Für den Druck $\pi$ als eine aus einer kalorischen Zustandsgleichung für die innere Energie $\varepsilon$ abgeleitete Größe gilt:

$$\pi = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho}\rho - \varepsilon$$

Man nimmt an, daß es sich bei dem Fluid um ein ideales Gas handelt. Es läßt sich dann direkt eine analytische Formulierung der kalorischen Zustandsgleichung angeben:

$$\varepsilon(\rho) = \frac{\pi_0}{\gamma - 1}\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma} \tag{7.1}$$

Die Abhängigkeit der inneren Energie $\varepsilon$ von einer zweiten thermodynamischen Variablen bleibt hier unbeachtet.
Abgesehen von der zu Stabilisierung der Rechnung verwendeten Reibungskraft entspricht die Situation etwa einem von einer dünnen Seifenhaut eingeschlossenen Gasvolumen.

Das Fluidvolumen wird durch ein System aus $31 \times 31$ Teilchen (3B-Splines) so modelliert, daß die als Oberfläche definierte Niveaulinie $N(0.8)$ der Dichte gerade die Form einer Ellipse mit einer numerischen Exzentrizität von circa 0.54 hat.
Die Approximation der Integrale erfolgt über einem Quadraturpunktgitter mit $200 \times 200$ Punkten, welches $[-1.3, 1.3]^2$ überdeckt. Wie schon im vorigen Beispiel ist auch hier die hohe Anzahl an Quadraturpunkten durch die im Verlauf der Rechnung auftretenden Deformationen der Teilchen und die damit verbundene geringere Anzahl überdeckter Quadraturpunkte gerechtfertigt.
Die Parameter zur Modellierung des Druckes anhand der Zustandsgleichung (7.1) wurden wie folgt gewählt:

$$\pi_0 = 0.03, \quad \rho_0 = 0.8, \quad \gamma = 1.4$$

Für den Koeffizineten $R$ der Reibung setzt man $R = 10^4$, so daß dieser in der Größenordnung der reziproken Zeitschrittweite liegt.

Man berechnet nun Evolution des beschriebenen Systems in einen Zeitintervall $0 \leq t \leq 22.0$, wobei für die Zeitintegration das DoPri5-Verfahren verwendet wurde.
Anhand der Abbildungen eins bis zwölf erkennt man, daß das Zusammenspiel aus Ober-

flächenspannung und innerem Druck zu einem Schwingen des Fluidvolumens führt. Dabei vertauschen die Halbachsen der Ellipse wechselweise ihre Rolle und bedingt durch die aus der Reibung herrührende Dämpfung nähert sich die geometrische Gestalt der Oberfläche des Fluids zunehmend einem Kreis an. Die Rechnung wurde bei $t = 22.0$ abgebrochen, kann aber vermutlich ohne Schwierigkeiten bis zu wesentlich größeren Werten $t$ weitergeführt werden. Um die Teilchensituation übersichtlicher darzustellen, wurden die Deformationen $H_i$ der Teilchen mit dem Faktor 0.2 skaliert.

Abbildung 1, $t = 0$

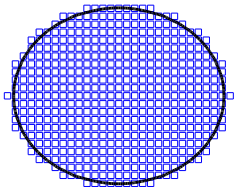


Abbildung 2, $t = 2.0$

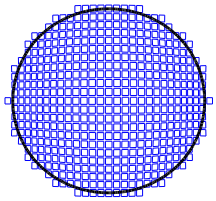


Abbildung 3, $t = 4.0$

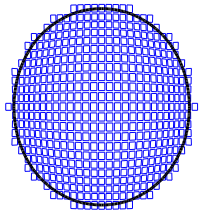


Abbildung 4, $t = 6.0$

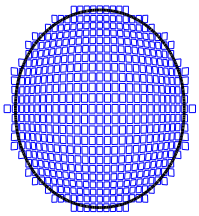


Abbildung 5, $t = 8.0$

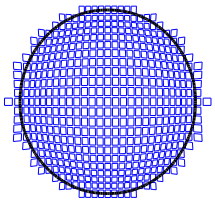


Abbildung 6, $t = 10.0$

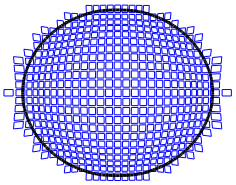


Abbildung 7, $t = 12.0$

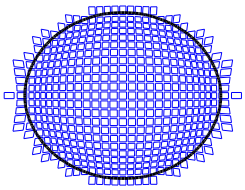


Abbildung 8, $t = 14.0$

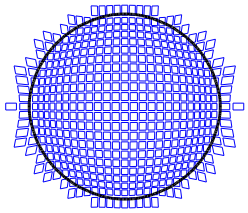


Abbildung 9, $t = 12.0$

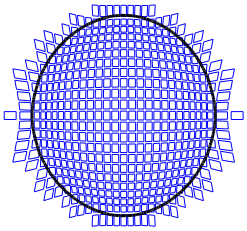


Abbildung 10, $t = 18.0$

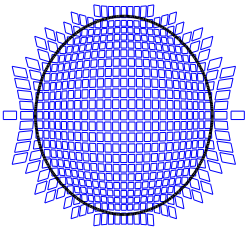


Abbildung 11, $t = 20.0$

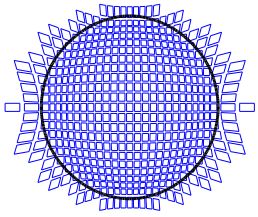
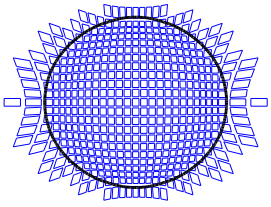


Abbildung 12, $t = 22.0$



Die folgende Tabelle enthält die prozentuale Abweichung der eingeschlossenen Masse vom Ausgangswert zu den betrachteten Zeitpunkten:

| $t$ | 0.0 | 2.0 | 4.0 | 6.0 | 8.0 | 10.0 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $\triangle m/\%$ | 0.00 | 0.15 | 0.23 | 0.00 | 0.16 | 0.40 |
| $t$ | 12.0 | 14.0 | 16.0 | 18.0 | 20.0 | 22.0 |
| $\triangle m/\%$ | 0.78 | 1.50 | 2.07 | 2.34 | 2.46 | 2.58 |

*Abweichung $\triangle m$ der eingeschlossenen Masse vom Anfangswert*

Das bedeutet, bei einer durchschnittlichen Zeitschrittweite von circa $5 \cdot 10^{-4}$ bewegt sich die Abweichnung nach ungefähr $5 \cdot 10^4$ Zeitschritten noch im deutlich einstelligen Prozentbereich.

Das beobachtete Verhalten entspricht der Intuition und illustriert die Kompatibilität der Modellierung der Oberflächenspannung zu der bestehenden Methode der Finiten Massen.

## 7.3 Beispiel 3: Topologische Änderungen der Oberfläche

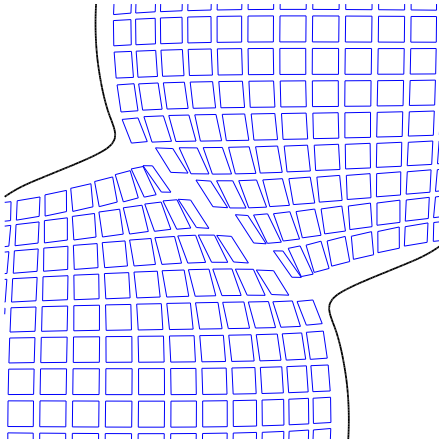
In den beiden vorangegangenen Beispielen bestand die Oberfläche der betrachteten Fluidvolumina stets aus nur einer Zusammenhangskomponenten. Im dritten Beispiel wird nun anhand zweier disjunkter Fluidvolumina die Vereinigung ihrer Oberflächen aus zwei zu einer Zusammenhangskomponenten simuliert. Dieses Beispiel zeigt eine wesentliche Eigenschaft der beschriebenen Modelliereung freier Ränder und der dort auftretenden Kräfte, nämlich die Fähigkeit topologische Änderungen der Oberflächen in konsistenter Weise zu behandeln.

Es werden zwei Fluidvolumina aus je 212 Teilchen (3B-Splines) so modelliert, daß die als Oberfläche definierte Niveaulinie $N(0.08)$ der Dichte gerade zwei disjunkte Kreise darstellt.
Die verhältnismässig kleine Wahl von $c = 0.08$ als Niveau zur Definition der Oberfläche liegt deutlich unter dem in Kapitel 6.1 vorgeschlagenen Wert $c \approx 0.1 \cdot \rho_{max}$. Sie ist der zur Stabilisierung der Rechnung verwendeten Reibung geschuldet. Die Befürchtung hierdurch die in Kapitel 6.1 beschriebenen Instabilitäten in Kauf nehem zu müssen ist nicht gerechtfertigt.
Durch ein feines Quadraturpunktgitter mit $300 \times 300$ Punkten, welches $[-1.3, 1.3]^2$ mit eines Gitterweite $h = 2.6/300$ überdeckt, wird bei einem Glättungsparameter $\varepsilon = 2.5 \cdot h$ für das verwendete Potential (6.1) den numerischen Instabilitäten vorgebeugt. Das durch den Glättungsparameter $\varepsilon$ in seiner Ausdehnung charakterisierte Integrationsgebiet liegt so bei einer hinreichend regulären Teilchenkonfiguration stets kompakt im Träger der Massendichte. Wegen der verhältnismäßig starken Deformation der Teilchen im Laufe der Rechnung wird ohnehin ein ausreichend feines Quadraturpunktgitter benötigt.
Behielte man in dieser Situation die in Kapitel 6.1 vorgeschlagene Wahl für das als Oberfläche definierte Niveau der Dichte mit $c \approx 0.1 \cdot \rho_{max}$ bei, so käme es auf Grund der verwendeten Reibung bereits bevor sich die Oberflächen der Fluidvolumina berühren zu signifikanten Wechselwirkungen.

Man betrachtet nun die Evolution des beschriebenen Systems über einen Zeitraum $0 \leq t \leq 18 \cdot 10^{-2}$, wobei für die Zeitintegration das DoPri5-Verfahren verwendet wurde. Der Reibungskoeffizient ist mit $R = 10^4$ wiederum so gewählt, daß das Produkt aus Reibungskoeffizient und Zeitschrittweite durch eins nach oben beschränkt bleibt. Zum Zeitpunkt $t = 0$ bewegen sich die beiden Fluidvolumina mit einem Versatz von circa $1.5 \cdot r_0$ aufeinander zu. Dabei bezeichnet $r_0$ den Radius der kreisförmigen Oberflächen der Fluidvolumina zum Zeitpunkt $t = 0$.
Die Abbildungen eins bis acht auf Seite 83 zeigen nun das Verschmelzen der beiden Oberflächen und das durch die Oberflächenspannung bedingte, schnelle Aufweiten der Kontaktstelle. Da dieses Aufweiten wegen der an der Kontaktstelle anfangs auftretenden starken Krümmungen und der damit verbundenen hohen Kräfte im Vergleich zur

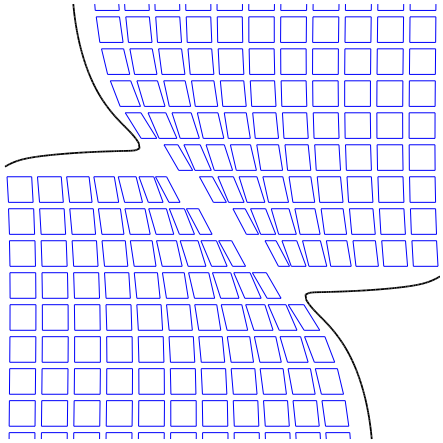
Gesamtbewegung des Systems sehr schnell erfolgt, beobachtet man in diesem Zeitraum ein steifes Verhalten des Systems. Dies drückt sich entsprechend in einer sehr kleinen Zeitschrittweite des expliziten Integrators aus.
Um das prinzipielle Verhalten der Teilchen besser beurteilen zu können, zeigen die folgenden Abbildungen zum Zeitpunkt $t = 80 \cdot 10^{-3}$ einen Ausschnitt der Teilchenkonfiguration bei einer Skalierung der Deformationen $H_i$ mit dem Faktor 0.2, welche auch bei den Abbildungen auf auf Seite 83 verwendet wurde. Dabei gibt Abbildung 2 die Teilchenkonfiguration für den Fall wieder, daß ausschließlich Reibungskräfte wirken. Es läßt sich so die Wirkung der Oberflächenspannung in Abbildung 1 leichter beurteilen.

Abbildung 1, $t = 80 \cdot 10^{-3}$



mit Oberflächenspannung

Abbildung 2, $t = 80 \cdot 10^{-3}$



ohne Oberflächenspannung

Bedingt durch das Fehlen eines inneren Druckes wird die Gesamtoberfläche des Fluidvolumens rasch kleiner. Hauptsächlich die damit verbundene Deformation der Teilchen setzt dem Zeitintervall, in dem die Evolution des Systems berechnet werden kann, Grenzen.
Neben den durch die Oberflächenspannung bedingten Effekten, läßt sich ansatzweise in einer leichten Rotationsbewegung des vereinigten Fluidvolumens Drehimpulserhaltung beobachten.

Auch im Falle topologischer Änderungen der Oberfläche muß natürlich die eingeschlossen Masse erhalten bleiben. Die folgende Tabelle zeigt die prozentuale Änderung der eingeschlossenen Masse in Relation zur Ausgangsmasse:

| $t/10^{-3}$ | 0.0 | 15.0 | 17.0 | 25.0 | 40.0 | 80.0 | 130.0 | 180.0 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\triangle m/\%$ | 0.00 | 0.03 | 0.04 | 0.07 | 0.13 | 0.24 | 0.35 | 0.40 |

*Abweichung $\triangle m$ der eingeschlossenen Masse vom Anfangswert*

Das bedeutet, bei einer durchschnittlichen Zeitschrittweite, welche deutlich unterhalb $10^{-4}$ liegt, liegt die Abweichnung nach weit mehr als 1000 Zeitschritten noch unter einem halben Prozent.

Abbildung 1, $t = 0$

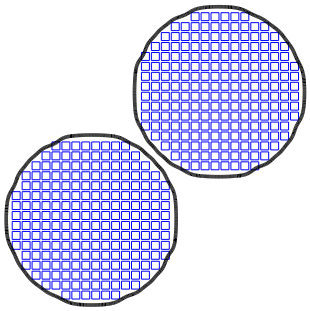


Abbildung 2, $t = 15 \cdot 10^{-3}$

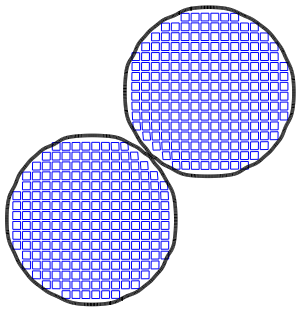


Abbildung 3, $t = 17 \cdot 10^{-3}$

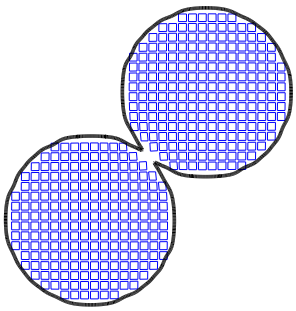


Abbildung 4, $t = 25 \cdot 10^{-3}$

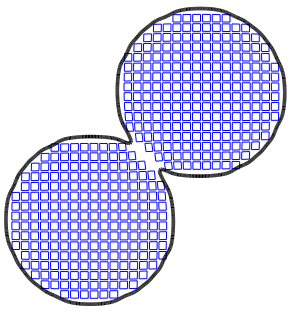


Abbildung 5, $t = 40 \cdot 10^{-3}$

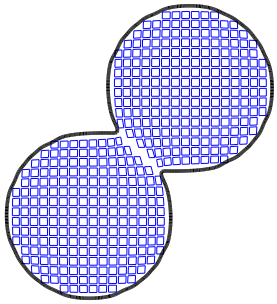


Abbildung 6, $t = 80 \cdot 10^{-3}$

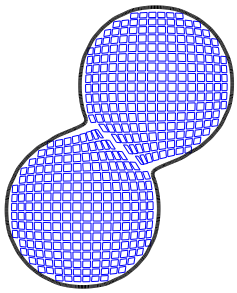


Abbildung 7, $t = 130 \cdot 10^{-3}$

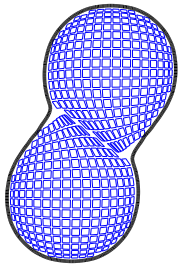
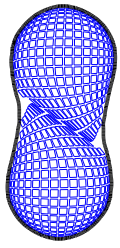


Abbildung 8, $t = 180 \cdot 10^{-3}$



## 7.4 Diskussion der Ergebnisse

Die drei in diesem Kapitel untersuchten Beispiele illustrieren Effekte der beschriebenen Modellierung freier Ränder und der dort auftretenden Oberflächenspannung. Neben der grundsätzlichen Wirkungsweise wurde auch das Zusammenspiel der Oberflächenspannung mit anderen Kräften und die Vereinigung zweier disjunkter Fluidvolumina untersucht.

Bereits in Kapitel 6.1 wurde die Schwierigkeit einer geeigneten Wahl des als Oberfläche definierten Niveaus $c$ der Dichte diskutiert. Entsprechend zeigt sich auch anhand der Beispiele, daß die Wahl des Niveaus $c$ stets im Kontext des betrachteten Teilchensystems mehr oder minder empirisch getroffen werden muß. Dabei ist wie bereits erwähnt $c \approx 0.1 \cdot \rho_{max}$ ein guter Anhaltspunkt. Diese Situation ist unbefriedigend und somit Motivation für die Suche nach einer kontextunabhängigen Definition der Oberfläche eines durch eine Teilchenkonfiguration beschriebenen Fluidvolumens. Eine alternative Definition sollte jedoch weiterhin die konsistente Behandlung topologischer Änderungen der Oberfläche ermöglichen. Level-Set Formulierungen genügen dieser Anforderung bereits durch ihr mathematisches Konzept. Die Herausforderung besteht besteht hier also in einer geeigneten Konstruktion einer kontextunabhängigen Level-Set Funktion, welche differenzierbar von den generalisierten Koordinaten $q_i$ und $H_i$ abhängt. Die Aussagen und Ergebnisse des Kapitels 4 können nahezu direkt auf beliebige Level-Set basierte Modellierungen freier Ränder übertragen werden.

Ein weiterer Punkt, der bei der Betrachtung der Beispiele eins bis drei auffällt, ist der Umstand, daß bei einer hinreichend feinen Ortsauflösung auf Grund der fixen Wahl des Quadraturpunktgitters ein unnötiger Mehraufwand bei der Berechnung der Feldgrößen in Kauf genommen werden muß. Der damit verbundene Rechen- und Speicheraufwand wird zwar durch ein geeignetes implementatorisches Vorgehen möglichst gering gehalten, kann jedoch nicht die konzeptionellen Nachteile eines nichtadaptiven Gitters wett machen. Wünschenswert wäre etwa ein adaptives Quadraturpunktgitter, welches sensitiv für Bereiche mit hoher Krümmung der Oberfläche ist. Ein mögliches Vorgehen zur Erzeugung und entsprechende Verfahren zur Lösung der Eikonal-Gleichung auf solchen Gittern finden sich etwa bei Sethian [Set99b, Chap. 9].

In allen Beispielen, außer den Plausibilitätsbetrachtungen im ersten Beispiel, wurde Reibung als stabilisierender Effekt eingesetzt. Dies ist notwendig, da die Oberflächenspannung nur auf Teilchen wirkt, die einen nichtleeren Schnitt mit der als Oberfläche definierten Niveaufläche der Dichte haben. Dadurch bilden sich in der Umgebung dieser Teilchen schnell Shocks und Irregularitäten aus, welche zu Instabilitäten und somit schließlich zum Abbruch der Rechnung führen. Durch das weiche Aneinanderkoppeln der Teilchen, welches durch die Reibung verursacht wird, können diese Effekte zum Teil aufgefangen werden. Dennoch bleibt die Ausbildung von Irregularitäten in der Teilchenkonfiguration der hauptsächliche limitierende Faktor bei der Simulation von

Oberflächenspannung.
Eine neue Arbeit von Klingler, Leinen und Yserentant [KLY], welche ein Verfahren zur Regularisierung der Teilchenkonfiguration eines gegebenen Teilchensystems beschreibt, kann hier aller Wahrscheinlichkeit nach Abhilfe schaffen. Jedoch bleibt die geeignete Wahl eines Niveaus $c$ der Dichte zur Definition der Oberfläche weiterhin ein sensibles Thema, da etwa eine zu kleine Wahl $c$ zu einer schlechten Approximation der Niveaufläche durch die regularisierte Teilchenkonfiguration führen kann.

Der Schlüssel für eine robuste und damit auch über lange Zeitintervalle hinweg berechenbare Simulation der Oberflächenspannung liegt also neben der Verwendung eines adaptiven Quadraturpunktgitters sicher in einem wie in [KLY] beschriebenen Verfahren zur Regularisierung der Teilchenkonfiguration.

# Anhang A

# Glättungskern - Glättungen

Ein Glättungskern $\varphi_\varepsilon$ ist eine nicht negative Funktion $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ mit Träger $\overline{U_\varepsilon(0)}$, die die Integralnormierung $\int \varphi_\varepsilon = 1$ erfüllt. Ein typisches Beispiel einer solchen Funktion ist die mit Hilfe der Funktion

$$\varphi(x) = \begin{cases} c \exp\left(\frac{1}{|x|^2-1}\right) & \text{für } |x| \leq 1 \\ 0 & \text{für } |x| > 1 \end{cases}$$

definierte Funktion

$$\varphi_\varepsilon : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} : x \mapsto \varphi_\varepsilon(x) = \varepsilon^{-n}\varphi(x/\varepsilon)\,. \tag{A.1}$$

Dabei ist $c$ so zu wählen, daß die Integralnormierung erfüllt ist.
Damit können die geglättete Heaviside-Funktion und die geglättete Delta-Distribution als deren Ableitung entsprechend (4.2) direkt aus der Faltung mit $\varphi_\varepsilon$ beziehungsweise $\varphi'_\varepsilon$ entsprechend (A.1) berechnet werden.

Für die numerische Umsetzung der Oberflächenerscheinungen entsprechend Kapitel 6.1 wurde direkt die folgende zweimal stetig differenzierbare Approximation der Heaviside-Funktion $H_\varepsilon$ und deren Ableitung als Approximation der Delta-Distribution $\delta_\varepsilon$ verwandt:

$$H_\varepsilon(t) := \begin{cases} 0 & \text{für } t < -\varepsilon \\ \frac{1}{2} + \frac{t}{2\varepsilon} + \frac{1}{2\pi}\sin\left(\frac{\pi t}{\varepsilon}\right) & \text{für } -\varepsilon \leq t \leq \varepsilon \\ 1 & \text{für } t > \varepsilon \end{cases} \tag{A.2}$$

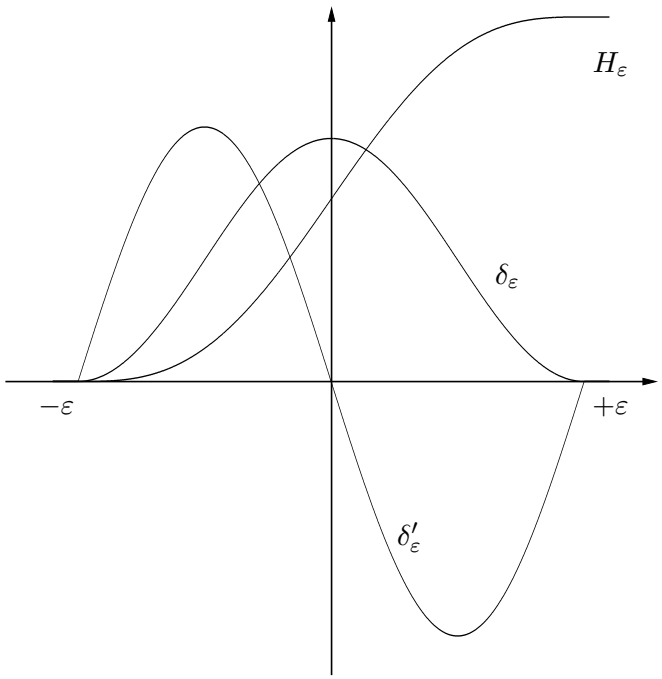
und entsprechend

$$\delta_\varepsilon(t) = H'_\varepsilon(t) := \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon} + \frac{1}{2\varepsilon}\cos\left(\frac{\pi t}{\varepsilon}\right) & \text{für } |t| \leq \varepsilon \\ 1 & \text{für } |t| > \varepsilon \end{cases}$$

Diese Approximationen, die in zahlreichen Arbeiten ([OF03], [ZCMO96], [CHMO96]) zum Thema Level-Set Methoden Verwendung finden, erfüllen die Anforderungen an die geglättete Heaviside-Funktion und die geglättete Delta-Distribution im benötigten

Rahmen. Das bedeutet, die strikt positive Funktion $\delta_\varepsilon$ verschwindet außerhalb $U_\varepsilon(0)$ und die Integralnormierung $\int \delta_\varepsilon = 1$ ist erfüllt. Die zur Berechnung der Kraftterme entsprechend (6.2) und (6.3) benötigte Ableitung $\delta'_\varepsilon$ existiert und ist stetig.

Die folgende Abbildung zeigt den Graphen der Approximation der Heaviside-Funktion $H_\varepsilon$ (A.2) und ihrer Ableitungen $\delta_\varepsilon = H'_\varepsilon$ und $\delta'_\varepsilon = H''_\varepsilon$ auf dem Intervall $[-\varepsilon, \varepsilon]$.



# Anhang B

# Bezeichnungen

| | |
|---|---|
| $x \cdot y$ | euklidisches Skalarprodukt der Vektoren $x, y \in \mathbb{R}^n$ |
| $x \times y$ | Vektorprodukt der Vektoren $x, y \in \mathbb{R}^3$ |
| $\|x\|$ | euklidische Norm von $x \in \mathbb{R}^n$ |
| $A \cdot B = \operatorname{tr}(A^T B)$ | Frobenius-Skalarprodukt der Matrizen $A$ und $B$ |
| $\|A\|_F = \big(\operatorname{tr}(A^T A)\big)^{\frac{1}{2}}$ | Frobenius-Norm der Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ |
| supp | Träger |
| $D$ | Ableitung |
| $\alpha$ | Multiindex $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$ |
| $\|\alpha\|$ | $\|\alpha\| = \alpha_1 + \ldots + \alpha_n$ |
| $x^\alpha$ | $x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \cdot \ldots \cdot x_n^{\alpha_n}$ |
| $\partial_i$ | $i$-te partielle Ableitung $\partial_i = \partial / \partial x_i$ |
| $D^\alpha$ | $D^\alpha = \frac{\partial^{\|\alpha\|}}{\partial_1^{\alpha_1} \cdot \ldots \cdot \partial_n^{\alpha_n}}$ |
| $\nabla$ | Gradient $\nabla = (\partial_1, \ldots, \partial_n)$ |
| $C^0(\Omega)$ | Raum der stetigen Funktionen $f : \Omega \to \mathbb{R}$ |
| $C^k(\Omega)$ | $C^k(\Omega) = \big\{ f \mid D^\alpha f \in C^0(\Omega),\ \|\alpha\| \leq k \big\}$ |
| $C^k(\Omega, \mathbb{R}^n)$ | $\mathbb{R}^n$-wertige Funktionen, wobei jede Komponente aus $C^k(\Omega)$ ist |
| $C_0^k(\Omega)$ | $C_0^k(\Omega) = C^k(\Omega) \cap \{ f \mid \operatorname{supp} f \text{ kompakt}, \operatorname{supp} f \ \subset \Omega \}$ |
| $\|v\|_\infty$ | $\|v\|_\infty = \sup_{x \in \Omega} \|v(x)\|$ |
| $L^p(\Omega)$ | Raum der bis zur $p$-ten Potenz integrierbaren Funktionen auf $\Omega$ |
| $L^p_{\text{loc}}(\Omega)$ | $f \in L^p(K)$ für jedes Kompaktum $K \subset \Omega$ |
| $\|f\|_{L^p(\Omega)}$ | Norm auf $L^p(\Omega)$ |
| $\|f\|_{L^p_{\text{loc}}(\Omega)}$ | Norm auf $L^p_{\text{loc}}(\Omega)$ |
| $W^{k,p}(\Omega)$ | Sobolev Raum auf $\Omega$ |
| $\|f\|_{W^{k,p}(\Omega)}$ | Norm auf $W^{k,p}(\Omega)$ |
| $\Omega' \subset\subset \Omega$ | $\overline{\Omega'} \subset \Omega$, $\overline{\Omega'}$ kompakt |

| | |
|---|---|
| $d(x, \Omega)$ | Abstand von $x$ zu $\Omega$ |
| $d(E, \Omega)$ | Abstand der Mengen E und $\Omega$ |
| $\mathcal{H}^n$ | $n$-dimensionales Hausdorff-Maß |
| $U_\varepsilon(x)$ | offene Umgebung von $x$ mit Radius $\varepsilon > 0$ |
| $U_\varepsilon(M)$ | $U_\varepsilon(M) = \bigcup_{x \in M} U_\varepsilon(x)$ |
| $\varphi_\varepsilon$ | Glättungskern (*mollifier*), d.h. $\varphi_\varepsilon \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ mit $\varphi_\varepsilon \geq 0$, $\operatorname{supp} \varphi_\varepsilon \in \overline{U_\varepsilon(0)}$ und $\int \varphi_\varepsilon = 1$ |
| $f_\varepsilon$ | $f_\varepsilon = \varphi_\varepsilon * f$, Faltung von $f$ mit $\varphi_\varepsilon$ |
| $BV(\Omega)$ | Raum der Funktionen mit beschränkter Variation in $\Omega$ |
| $\|\nabla f\|$ | totale Variation von $f \in BV(\Omega)$ |

# Literaturverzeichnis


[AS99] D. Adalsteinsson and J. A. Sethian. The fast construction of extension velocities in level set methods. *J. Comput. Phys.*, 148(1):2–22, 1999.

[BD74] Å. Björck and G. Dahlquist. *Numerical methods*. Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1974. Translated from the Swedish by Ned Anderson, Prentice-Hall Series in Automatic Computation.

[BKZ92] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, 100(2):335–354, 1992.

[CEL84] M. G. Crandall, L. C. Evans, and P.-L. Lions. Some properties of viscosity solutions of Hamilton-Jacobi equations. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 282(2):487–502, 1984.

[CHMO96] Y. C. Chang, T. Y. Hou, B. Merriman, and S. Osher. A level set formulation of Eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. *J. Comput. Phys.*, 124(2):449–464, 1996.

[Cho01] D. L. Chopp. Some improvements of the fast marching method. *SIAM J. Sci. Comput.*, 23(1):230–244 (electronic), 2001.

[CIL92] M. G. Crandall, H. Ishii, and P.-L. Lions. User's guide to viscosity solutions of second order partial differential equations. *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)*, 27(1):1–67, 1992.

[CL83] M. G. Crandall and P.-L. Lions. Viscosity solutions of Hamilton-Jacobi equations. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 277(1):1–42, 1983.

[CL84] M. G. Crandall and P.-L. Lions. Two approximations of solutions of Hamilton-Jacobi equations. *Math. Comp.*, 43(167):1–19, 1984.

[dC76] M. P. do Carmo. *Differential geometry of curves and surfaces*. Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1976. Translated from the Portuguese.

[DH93] P. Deuflhard and A. Hohmann. *Numerische Mathematik. I.* de Gruyter Lehrbuch. [de Gruyter Textbook]. Walter de Gruyter & Co., Berlin, second

edition, 1993. Eine algorithmisch orientierte Einführung. [An algorithmically oriented introduction].

[EG92] L. C. Evans and R. F. Gariepy. *Measure theory and fine properties of functions*. Studies in Advanced Mathematics. CRC Press, Boca Raton, FL, 1992.

[Eva98] L. C. Evans. *Partial differential equations*, volume 19 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, Providence, RI, 1998.

[GLY00] C. Gauger, P. Leinen, and H. Yserentant. The finite mass method. *SIAM J. Numer. Anal.*, 37(6):1768–1799 (electronic), 2000.

[GT01] D. Gilbarg and N. S. Trudinger. *Elliptic partial differential equations of second order*. Classics in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 2001. Reprint of the 1998 edition.

[HLS98] M. Hochbruck, C. Lubich, and H. Selhofer. Exponential integrators for large systems of differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(5):1552–1574 (electronic), 1998.

[HNW93] E. Hairer, S. P. Nørsett, and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations. I*, volume 8 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, second edition, 1993. Nonstiff problems.

[KBSS01] L. P. Kobbelt, M. Botsch, U. Schwanecke, and H.-P. Seidel. Feature-sensitive surface extraction from volume data. In Eugene Fiume, editor, *SIGGRAPH 2001, Computer Graphics Proceedings*, pages 57–66. ACM Press / ACM SIGGRAPH, 2001.

[KLY] M. Klingler, P. Leinen, and H. Yserentant. A restart procedure for the finite mass method. *to appear*.

[KLY03] M. Klingler, P. Leinen, and H. Yserentant. The finite mass method on domains with boundary. *SFB 382, SFB-Reports*, 184, 2003.

[LC87] W. E. Lorensen and H. E. Cline. Marching cubes: A high resolution 3d surface construction algorithm. In Maureen C. Stone, editor, *SIGGRAPH 1987, Computer Graphics Proceedings*, volume 21, pages 163–169. ACM SIGGRAPH, 1987.

[Lei02] P. Leinen. Realization of the finite mass method. In P.M.A. Sloot et al., editor, *International Conference on Computational Science (ICCS 2002), Amsterdam, The Netherlands, April 21-24, 2002. Proceedings, Part II*, pages 470–479, 2002.

[Lio82] P.-L. Lions. *Generalized solutions of Hamilton-Jacobi equations*, volume 69 of *Research Notes in Mathematics*. Pitman (Advanced Publishing Program), Boston, Mass., 1982.

[LL91] L.D. Landau and E.M. Lifschitz. *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band VI. Hydrodynamik*. Akademie Verlag, Berlin, 1991.

[OF03] S. Osher and R. Fedkiw. *Level set methods and dynamic implicit surfaces*, volume 153 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 2003.

[OS91] S. Osher and C.-W. Shu. High-order essentially nonoscillatory schemes for Hamilton-Jacobi equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 28(4):907–922, 1991.

[RT92] E. Rouy and A. Tourin. A viscosity solutions approach to shape-from-shading. *SIAM J. Numer. Anal.*, 29(3):867–884, 1992.

[Sed92] R. Sedgewick. *Algorithmen in C++*. Addison-Wesley Publishing Company, 1992.

[Set96] J. A. Sethian. A fast marching level set method for monotonically advancing fronts. *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.*, 93(4):1591–1595, 1996.

[Set99a] J. A. Sethian. Fast marching methods. *SIAM Rev.*, 41(2):199–235 (electronic), 1999.

[Set99b] J. A. Sethian. *Level set methods and fast marching methods*, volume 3 of *Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics*. Cambridge University Press, Cambridge, second edition, 1999. Evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science.

[SSO94] M. Sussman, P. Smereka, and S. J. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comput. Phys.*, 114:146–159, 1994.

[Yse97] H. Yserentant. A particle model of compressible fluids. *Numer. Math.*, 76(1):111–142, 1997.

[Yse99a] H. Yserentant. Entropy generation and shock resolution in the particle model of compressible fluids. *Numer. Math.*, 82(1):161–177, 1999.

[Yse99b] H. Yserentant. Particles of variable size. *Numer. Math.*, 82(1):143–159, 1999.

[Yse00] H. Yserentant. A convergence analysis for the finite mass method for flows in external force and velocity fields. *SFB 382, SFB-Reports*, 136, 2000.

[Yse01] H. Yserentant. The propagation of sound in particle models of compressible fluids. *Numer. Math.*, 88(3):581–601, 2001.

[ZCMO96] H.-K. Zhao, T. Chan, B. Merriman, and S. Osher. A variational level set approach to multiphase motion. *J. Comput. Phys.*, 127(1):179–195, 1996.

[Zie89] W. P. Ziemer. *Weakly differentiable functions*, volume 120 of *Graduate Texts in Mathematics*. Springer-Verlag, New York, 1989. Sobolev spaces and functions of bounded variation.

## Danksagung

Ich danke Herrn Professor Dr. Harry Yserentant für seine Unterstützung und die Möglichkeit, die vorliegende Dissertation im Rahmen des SFB 382 anfertigen zu können. Bei Herrn Dr. Peter Leinen bedanke ich mich für die Hilfe bei implementatorischen Fragen.

## Lebenslauf

Christian Langmann,
geboren am 29. Dezember 1973 in Esslingen am Neckar
als Sohn der Christl Langmann geb. Maurer und des Ing. grad. Peter Langmann

**1980-1984** Besuch der Schiller-Grundschule in Göppingen-Faurndau

**1984-1993** Besuch des Mörike-Gymnasiums in Göppingen

**Mai 1993** Abitur am Mörike-Gymnasium in Göppingen

**Sept. 1993 - Nov. 1994** Zivildienst im "Heil- und Erziehungsinstitut für seelenpflegebedürftige Kinder Eckwälden e.V." in Boll-Eckwälden

**WS 1994/95 - WS 2000/01** Lehramtsstudium der Fächer Mathematik und Physik an der Eberhard-Karls-Universität Tübingen

**ab WS 1997/98** wiederholte Tätigkeit als wissenschaftliche Hilfskraft in den Arbeitsbereichen Numerische Mathematik bei Professor Dr. Christian Lubich und Professor Dr. Harry Yserentant

**Nov. 2000** Staatsexamen in den Fächern Mathematik und Physik

**seit Jan. 2001** wissenschaftlicher Mitarbeiter am Sonderforschungsbereich 382 "Verfahren und Algorithmen zur Simulation physikalischer Prozesse auf Höchstleistungsrechnern", Teilprojekt C17, Mitarbeiter im Arbeitsbereich Numerische Mathematik bei Professor Dr. Harry Yserentant