

Anhang A

Grundlegendes zur Differentialgeometrie

Dieses Kapitel spaltet sich in zwei Abschnitte auf. Erst wollen wir einen kurzen Einblick in die mathematischen Grundlagen der Differentialgeometrie in drei Dimensionen wagen. Dabei sollen nur die zum Verständnis dieser Arbeit nötigsten Begriffe und deren Zusammenhänge eingeführt werden. Für ausführlichere Darstellungen sei auf die Literatur verwiesen [70, 71].

Der zweite Abschnitt hat die numerische Umsetzung der Formeln, die im ersten erarbeitet werden, zum Thema. Im Rahmen dieser Arbeit werden hierzu Standard-Methoden verwendet, wie sie in Formelsammlungen [72] aufgelistet sind.

A.1 Analytische Grundlagen

Wir beginnen diesen Abschnitt mit dem Begriff der Fläche. Dabei greifen wir Definitionen heraus, wie sie in [71] - worauf sich sämtliche Referenzen beziehen, sofern nicht explizit anders angegeben - gegeben sind. Der erste Unterabschnitt wird von einem über Krümmungen gefolgt. Zugunsten der Anschaulichkeit wollen wir darin einen in der mathematischen Literatur zu diesem Thema unüblichen Weg gehen. Zuletzt soll noch kurz der Satz von Gauss-Bonnet erwähnt werden.

A.1.1 Reguläre Flächen

Der Begriff der parametrisierten Kurve im \mathbb{R}^3 ist ein grundlegender und spielt für parametrisierte Flächen bei Tangentialebenen und bei Krümmungen eine wichtige Rolle. Daher beginnen wir mit dem Kurvenbegriff. Dabei soll sowohl die reguläre Kurve, als auch die reguläre Fläche mittels der Parameterdarstellung eingeführt werden, durch die sie beschrieben werden.¹

Für die folgenden Definitionen wollen wir uns an die Analysis erinnern, wo Klassen C^m eingeführt werden. Eine Funktion f gehört zur Klasse C^m ($m \in \mathbb{N}$), wenn alle partiellen Ableitungen von f bis zur Ordnung m stetig sind.

Definition 2 *Eine reguläre Parameterdarstellung der Klasse C^m ($m \geq 1$) einer Kurve \mathcal{C} ist*

¹Eine Definition des eigentlichen Begriffs der regulären Kurve und der regulären Fläche wird z.B. in [70] gegeben.

eine von einem Parameter t abhängige Abbildung \vec{x} vom Intervall $I \subset \mathbb{R}$ in den \mathbb{R}^3 ($\vec{x} : I \rightarrow \mathbb{R}^3$)

$$\vec{x} = \vec{x}(t), \quad t \in I,$$

mit den Eigenschaften

1. $\vec{x}(t)$ ist aus der Klasse C^m in I .
2. $\partial_t \vec{x}(t) \neq 0$ für alle $t \in I$.

In obiger Definition, wie auch im Folgenden, stehe $\partial_t \vec{x}$ für die partielle Ableitung der Vektorfunktion nach t .

Nun können wir uns dem Begriff einer regulären Fläche des \mathbb{R}^3 zuwenden. Dabei würden wir eine solche intuitiv vielleicht als Stücke von \mathbb{R}^2 beschreiben, die im dreidimensionalen Raum derart verbogen und zusammengesetzt sind, dass Objekte entstehen, die keine Spitzen, Kanten oder Selbstdurchschneidungen haben und an dessen Punkte Tangentialebenen gelegt werden können. Etwas mathematischer lässt sich eine parametrisierte Fläche als Abbildung eines zweidimensionalen Parameterraumes in den \mathbb{R}^3 verstehen. Wir definieren für die Fläche \mathcal{A} (Abb. A.1)

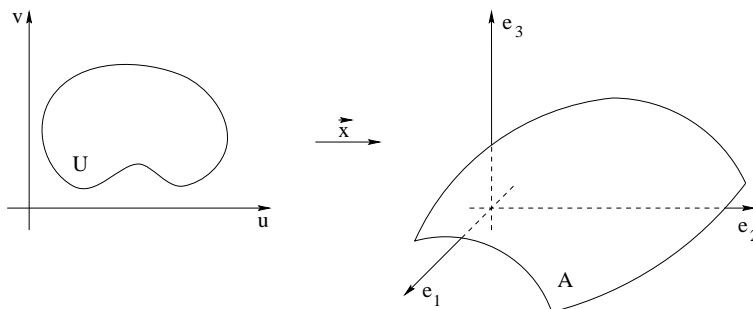


Abbildung A.1: Zum Begriff der regulären Parameterdarstellung der Fläche \mathcal{A} .

Definition 3 Eine reguläre Parameterdarstellung der Klasse C^m ($m \geq 1$) einer Punktmenge \mathcal{A} in \mathbb{R}^3 ist eine Abbildung $\vec{X} = \vec{X}(u, v)$ einer offenen Menge U in der (u, v) -Parameterebene auf \mathcal{A} derart, dass gilt

1. \vec{X} ist von der Klasse C^m in U .
2. $\partial_u \vec{X} \times \partial_v \vec{X} \neq 0$ für alle $(u, v) \in U$.

In dieser Arbeit verwenden wir als reguläre Parameterdarstellung die Monge-Darstellung.² Deshalb soll diese hier als Beispiel eingeführt werden. Wir beschreiben Monge'sche Flächenstücke durch

$$\vec{X}(u, v) = u\vec{e}_1 + v\vec{e}_2 + z(u, v)\vec{e}_3, \quad (\text{A.1})$$

wobei die Funktion $z(u, v)$ von der Klasse C^m und die orthonormalen Vektoren $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ die Einheitsrichtungsvektoren des \mathbb{R}^3 sein sollen. Die Monge-Darstellung ist besonders anschaulich, denn bei ihr wird der zweidimensionale (u, v) -Parameterraum direkt auf die (\vec{e}_1, \vec{e}_2) -Ebene abgebildet; die Parameterwerte sind somit gleichzeitig der Ort, an dem die Fläche um

²In [71] wird bewiesen, dass die Monge-Darstellung tatsächlich eine reguläre Parameterdarstellung ist.

den Wert $z(u, v)$ in \vec{e}_3 -Richtung ausgelenkt ist. Es ist klar, dass der Vorteil dieser Darstellung darin besteht, dass sie sich sehr einfach in Computerprogrammen implementieren lässt. Mehr über die hier verwendete konkrete Implementierung folgt in Abschnitt A.2.

Für den Begriff der Krümmung brauchen wir den Normaleneinheitsvektor und für diesen wiederum Tangentialebenen. Daher betrachten wir eine reguläre Kurve \mathcal{C} aus der Klasse C^m , die in der (u, v) -Parameterebene liegt $\vec{y}(t) = \vec{y}(u(t), v(t))$. Deren Bild auf der Fläche wird durch die Beziehung

$$\vec{x}(t) = \vec{x}(\vec{y}(t)) = \vec{X}(u(t), v(t))$$

beschrieben. Auch $\vec{x}(t)$ ist eine Funktion aus der Klasse C^m , da sie aus Funktionen der Klasse C^m zusammengesetzt ist. Wir können daher differenzieren

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \partial_u \vec{X} \frac{du}{dt} + \partial_v \vec{X} \frac{dv}{dt} \quad (\text{A.2})$$

und es lässt sich mit der 1. Bedingung von Definition 3 zeigen, dass $d\vec{x}/dt \neq 0$ gilt.

Definition 4 Ein Vektor $\vec{T} \neq 0$ heisst Tangente an eine Fläche \mathcal{A} in einem Punkt P , wenn es eine reguläre Kurve $\vec{x}(t)$ aus \mathcal{A} durch P derart gibt, dass $\vec{T} = d\vec{x}/dt$ gilt.

Aufgrund von (A.2) sind alle Tangenten \vec{T} an die Fläche in P linear abhängig von den zwei linear unabhängigen Vektoren $\partial_u \vec{X}$ und $\partial_v \vec{X}$ (Abb. A.2). Die Ebene durch P , die durch die Vektoren $\partial_u \vec{X}$ und $\partial_v \vec{X}$ aufgespannt wird, heisst Tangentialebene an \mathcal{A} in P . Aus unserer Herleitung folgt, dass alle Tangenten \vec{T} an P in der Tangentialebene am Punkt P liegen müssen.

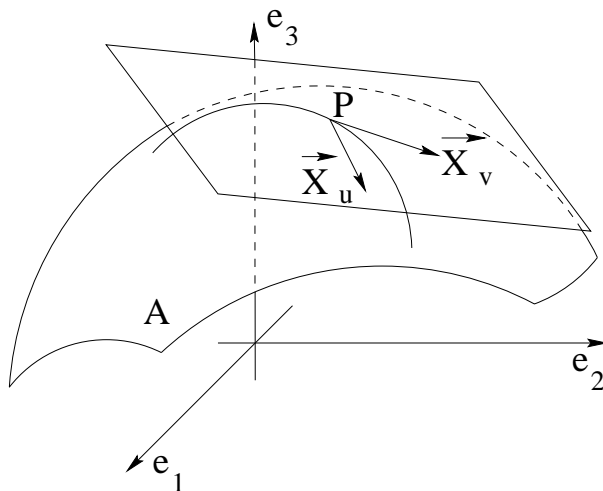


Abbildung A.2: Die Tangentenebene an einen Punkt P der Fläche \mathcal{A} .

Auf der Tangentialebene können zwei Vektoren bestimmt werden, die senkrecht aufeinander stehen und sich nur durch ihre Richtung voneinander unterscheiden. Der Normaleneinheitsvektor soll die Eigenschaft besitzen, dass er mit den, die Tangentialebene aufspannenden Vektoren $\partial_u \vec{X}$ und $\partial_v \vec{X}$ ein Rechtssystem bildet. Dies legt seine Richtung eindeutig fest und wir definieren ihn zu

$$\vec{N} = \frac{\partial_u \vec{X} \times \partial_v \vec{X}}{|\partial_u \vec{X} \times \partial_v \vec{X}|}. \quad (\text{A.3})$$

Um diesen Abschnitt zu beenden, betrachten wir ein differentiell kleines Parallelogramm aus dem Flächenstück \mathcal{A} , dessen Seiten $\Delta\vec{X}_1 = \partial_u\vec{X}du$ und $\Delta\vec{X}_2 = \partial_v\vec{X}dv$ sein sollen. Aus der elementaren Vektorrechnung wissen wir, dass

$$dA_{\text{real}} = |\Delta\vec{X}_1 \times \Delta\vec{X}_2| = |\partial_u\vec{X} \times \partial_v\vec{X}| \cdot dA_{\text{proj}} = \sqrt{\gamma} \cdot dA_{\text{proj}}$$

den Flächeninhalt des Gebietes angibt, das durch die beiden Vektoren $\Delta\vec{X}_1$ und $\Delta\vec{X}_2$ aufgespannt wird. Dabei ist $dA_{\text{proj}} = du \cdot dv$ das auf die Tangentialebene projizierte differentielle Flächenstück des betrachteten Parallelogramms. In erster Näherung steht dA_{real} daher für einen differentiellen Flächeninhalt unseres Flächenstückes \mathcal{A} . Das Integral

$$A_{\text{real}} = \int_{\mathcal{A}} |\partial_u\vec{X} \times \partial_v\vec{X}| \cdot dA_{\text{proj}}$$

definieren wir als Flächeninhalt des Gebietes \mathcal{A} .

Für die Monge–Darstellung lassen sich einige obiger Ausdrücke explizit berechnen. Aus (A.1) bestimmen wir mit

$$\partial_u\vec{X} = (1, 0, \partial_u z) \quad \text{und} \quad \partial_v\vec{X} = (0, 1, \partial_v z)$$

den Normalenvektor (A.3) zu

$$\vec{N} = \frac{(-\partial_u z, -\partial_v z, 1)}{\sqrt{1 + \partial_u z^2 + \partial_v z^2}}. \quad (\text{A.4})$$

Weiter ist

$$\sqrt{\gamma} = |\partial_u\vec{X} \times \partial_v\vec{X}| = \sqrt{1 + \partial_u z^2 + \partial_v z^2} \quad (\text{A.5})$$

und somit gilt für die Berechnung der realen Fläche von \mathcal{A} die wichtige Beziehung

$$A_{\text{real}} = \int_{\mathcal{A}} \sqrt{1 + \partial_u z^2 + \partial_v z^2} \cdot dA_{\text{proj}}$$

oder in differentieller Schreibweise

$$dA_{\text{real}} = \sqrt{1 + \partial_u z^2 + \partial_v z^2} \cdot dA_{\text{proj}}.$$

Jetzt haben wir das Rüstzeug zusammen, um uns um die Begriffe rund um die Krümmung kümmern zu können.

A.1.2 Krümmungen

In der Mathematik ist die Krümmung einer Fläche durch die Krümmung einer Kurve auf dieser Fläche definiert. Dies lässt sich mit Hilfe von allgemeinen Definitionen auf eine formale Art und Weise einführen [71]. Hier soll jedoch ein eigener Weg gewählt werden [48], wobei wir uns auf Krümmungen von Flächen in Monge–Darstellung beschränken. Der Grund hierfür ist neben der Anschaulichkeit darin zu suchen, dass in dieser Arbeit für die Simulationen ausschliesslich diese Darstellung gewählt wird.

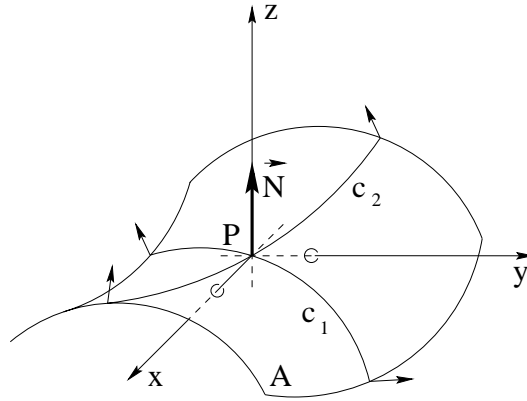


Abbildung A.3: Eine gekrümmte reguläre Fläche A mit lokalem Koordinatensystem im Punkt P .

Ausgangssituation sei eine deformierte, reguläre Fläche des \mathbb{R}^3 , an die im Punkt P ein lokales Koordinatensystem derart gelegt wird, dass dessen (x, y) -Ebene mit der Tangentialebene $(\partial_x \vec{X}, \partial_y \vec{X})$ am Punkt P zusammenfällt (Abb. A.3). In diesem lokalen Koordinatensystem drücken wir die Fläche in Monge-Darstellung (A.1) aus als

$$\vec{X}(x, y) = x\vec{x} + y\vec{y} + z(x, y)\vec{z} ,$$

wobei diesmal \vec{x} , \vec{y} und \vec{z} für die drei Einheitsvektoren des \mathbb{R}^3 stehen. Uns interessiert nur die z -Auslenkung, die wir in einer Taylorreihe um P entwickeln. Es gilt

$$\begin{aligned} z(x, y) = & z(0, 0) + \partial_x z|_{x,y=0} \cdot x + \partial_y z|_{x,y=0} \cdot y \\ & + \frac{1}{2} (\partial_{xx} z|_{x,y=0} \cdot x^2 + 2\partial_{xy} z|_{x,y=0} \cdot xy + \partial_{yy} z|_{x,y=0} \cdot y^2) + R_3 , \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

wobei $\partial_i z$ für die partielle Ableitung von z nach i ($i = x, y$) steht und R_3 das Restglied höherer Ordnung der Taylorreihenentwicklung darstellt [50]. Da P im Ursprung unseres Koordinatensystems und die Tangentialebene bei P parallel zur (x, y) -Ebene liegt, gilt

$$z(0, 0) = 0 \quad \text{und} \quad \partial_x z|_{x,y=0} = 0 , \quad \partial_y z|_{x,y=0} = 0 .$$

Nehmen wir weiter an, dass unsere reguläre Fläche nur leicht deformiert sei,³ können wir die Taylorentwicklung (A.6) nach dem zweiten Glied abbrechen und es folgt

$$z(x, y) \approx \frac{1}{2} (\partial_{xx} z|_{x,y=0} x^2 + 2\partial_{xy} z|_{x,y=0} xy + \partial_{yy} z|_{x,y=0} y^2) .$$

Alternativ schreiben wir diesen Ausdruck mit Hilfe einer Matrix

$$z(x, y) \approx \frac{1}{2} \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_{xx} z & \partial_{xy} z \\ \partial_{yx} z & \partial_{yy} z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} ,$$

wobei wir den Krümmungstensor

$$\tilde{\Omega} = \begin{pmatrix} \partial_{xx} z & \partial_{xy} z \\ \partial_{yx} z & \partial_{yy} z \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

³Die folgenden Beziehungen für den Krümmungstensor und die Hauptkrümmungen gelten allgemein und nicht nur für leicht deformierte Flächen.

eingeführen. Aufgrund der Beziehung $\partial_{xy}z = \partial_{yx}z$ ist $\tilde{\Omega}$ ein symmetrischer Tensor. Aus der linearen Algebra ist bekannt, dass für symmetrische Tensoren stets eine orthogonale Transformation existiert, die sie in Diagonalf orm bringen [50]. Drehen des lokalen Koordinatensystems um die z -Achse $((x, y) \rightarrow (\xi, \eta))$ bringt daher

$$\Omega = \begin{pmatrix} \partial_{\xi\xi}z & 0 \\ 0 & \partial_{\eta\eta}z \end{pmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

Die Diagonalelemente $\partial_{\xi\xi}z$ und $\partial_{\eta\eta}z$, die zugleich Eigenwerte der Matrix (A.7) sind, heissen Hauptkrümmungen und werden zu

$$c_1 = \partial_{\xi\xi}z \quad \text{und} \quad c_2 = \partial_{\eta\eta}z$$

geschrieben (Abb. A.3). Es kann gezeigt werden, dass c_1 und c_2 die maximale und die minimale Krümmung der Fläche im Punkt P darstellen. Da die Eigenvektoren von (A.7) orthogonal zueinander sind, stehen die beiden Hauptkrümmungen in P immer in einem rechten Winkel zueinander.

Eine wichtige, oft verwendete Beziehung liefert eine interessante Interpretation der Hauptkrümmungen. Legen wir nämlich einen Kreis in den Punkt P derart, dass er sich an den Flächenverlauf im Punkt P entlang einer Hauptkrümmungsrichtung anschmiegt, so kann gezeigt werden, dass der Radius des Schmiegekreises R gerade das Reziproke der Krümmung ist. Mit den zwei Schmiegekreisen (R_1 und R_2) an die beiden Hauptkrümmungen gilt also

$$c_1 = \frac{1}{R_1} \quad \text{und} \quad c_2 = \frac{1}{R_2}.$$

In dieser Arbeit spielen die Invarianten des Krümmungstensors eine wichtige Rolle. Deshalb wollen wir hier nach den Invarianten von Ω bezüglich Drehung des lokalen Koordinatensystems fragen. Aus der linearen Algebra ist bekannt, dass eine 2×2 -Matrix genau zwei Invarianten besitzt, nämlich ihre Spur und ihre Determinante. Wir bezeichnen die Spur

$$J = \text{Sp}(\Omega) = c_1 + c_2$$

als mittlere Krümmung und die Determinante

$$K = \text{Det}(\Omega) = c_1 \cdot c_2$$

als Gauss'sche Krümmung. Die numerischen Werte der mittleren und der Gauss'schen Krümmung charakterisieren reguläre Flächen und lassen ihre Klassifizierung zu [50]. Das ist der Grund für ihre Bedeutung in der Differentialgeometrie. Für die Monge-Darstellung lassen sich J und K explizit berechnen. Aus der Mathematik folgen die exakten Ausdrücke für beliebige Punkte $P \in \mathcal{A}$

$$J = \frac{(1 + \partial_x z^2) \partial_{yy}z + (1 + \partial_y z^2) \partial_{xx}z - 2\partial_x z \partial_y z \partial_{xy}z}{\sqrt{(1 + \partial_x z^2 + \partial_y z^2)^3}}, \quad (\text{A.9})$$

$$K = \frac{\partial_{xx}z \partial_{yy}z - \partial_{xy}z^2}{(1 + \partial_x z^2 + \partial_y z^2)^2}. \quad (\text{A.10})$$

Dabei ist interessant zu sehen, dass im quasiebenen Limes ($\partial_x z, \partial_y z \ll 1$) die bekannten Ausdrücke

$$J \approx \partial_{xx}z + \partial_{yy}z \quad \text{und} \quad K \approx \partial_{xx}z \partial_{yy}z - \partial_{xy}z^2$$

als Näherungen folgen.

Für die Überlegungen im Haupttext ist eine zusätzliche Interpretationsmöglichkeit der Krümmung von Nutzen, die an dieser Stelle als Ausklang für diesen Abschnitt stehen soll. Es lässt sich zeigen, dass bei schwach deformierten Flächen, d.h. bei Flächen, bei denen sich die Richtung des Normalenvektors \vec{N} beim Wegrücken vom Ursprungspunkt P nur schwach ändert, in erster Näherung die infinitesimale Änderung der Komponenten des Normalenvektors gleich der Krümmung der Fläche ist. Aus (A.4) können wir für kleine Deformationen ($\partial_x z, \partial_y z \ll 1$) folgern, dass für die x - und y -Komponenten des Normalenvektors

$$N_x \approx -\partial_x z \quad , \quad N_y \approx -\partial_y z$$

gelten muss. Damit können wir den Krümmungstensor (A.7) darstellen als

$$\tilde{\Omega} \approx - \begin{pmatrix} \partial_x N_x & \partial_y N_x \\ \partial_x N_y & \partial_y N_y \end{pmatrix} .$$

Diese Beziehung ist der Ausgangspunkt mehrerer Schritte, wie sie im Hauptteil dieser Arbeit dargelegt werden.

A.1.3 Der Satz von Gauss–Bonnet

Ohne Beweis soll in diesem Unterabschnitt der für die Differentialgeometrie wichtige Satz von Gauss–Bonnet wiedergegeben werden. Für den Beweis verweisen wir auf die Literatur [70, 71]. Wir beginnen mit neuen Begriffen.

Wie wir in Unterabschnitt A.1.1 sehen, besitzt jeder Punkt P einer regulären Fläche \mathcal{A} eine Tangentialebene, die durch die Vektoren $(\partial_u \vec{X}, \partial_v \vec{X})$ aufgespannt wird. Diese Tangentialebene induziert mit Hilfe des Normalenvektors (A.3) eine Orientierung der Tangentialebene. Diese Orientierung lässt sich in Punkte der Umgebung von P fortsetzen. Ist es möglich, eine Orientierung für jedes $P \in \mathcal{A}$ so festzulegen, dass diese im Durchschnitt von je zwei Umgebungen übereinstimmen, so heisst \mathcal{A} orientierbar.⁴

Aus der Analysis kennen wir den Begriff der kompakten Mengen. Eine Menge heisst dort kompakt, wenn sie abgeschlossen und beschränkt ist. Dies gilt analog für Flächen [70].

Für kompakte und orientierbare Flächen \mathcal{A} lässt sich zeigen, dass diese mit einer endlichen Anzahl von Gebieten R_i ($1 \leq i < \infty$) vollständig überdeckt werden können, wobei die R_i durch einen geschlossenen Zug gebogener Polygone gebildet werden sollen. Eine Überdeckung ist dabei derart möglich, dass sich keine zwei solcher Gebiete überlappen. Die Überdeckung heisst Polygonzerlegung von \mathcal{A} . Sei p die Gesamtzahl der Polygone, s die Gesamtzahl der Seiten und e die Gesamtzahl der Eckpunkte der Polygonzerlegung von \mathcal{A} , so lässt sich beweisen, dass die Zahl $\chi(\mathcal{A}) = p - s + e$ nur von der Fläche selbst und nicht von der Polygonzerlegung abhängt. Die Zahl $\chi(\mathcal{A}) \in \mathbb{Z}$ heisst Euler'sche Charakteristik.

Damit sind wir bereit für den berühmten Satz von Gauss–Bonnet.

Satz 1 (Gauss–Bonnet) *Wenn \mathcal{A} eine orientierbare, kompakte Fläche der Klasse C^3 ist, dann gilt*

$$\int_{\mathcal{A}} K \cdot dA = 2\pi\chi(\mathcal{A}) ,$$

mit K als der Gauss'schen Krümmung und $\chi(\mathcal{A})$ als der Euler'schen Charakteristik von \mathcal{A} .

⁴Das klassische Beispiel einer nicht orientierbaren Fläche ist die Möbiusschleife.

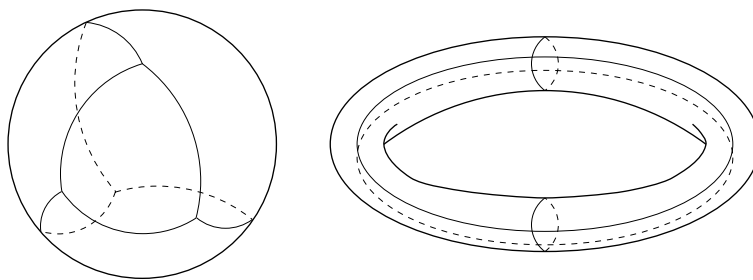


Abbildung A.4: Beliebige Polygonzerlegungen sowohl für eine Kugel (links), als auch für einen Torus (rechts).

Als Beispiele betrachten wir eine Polygonzerlegung auf einer Kugel und auf einem Torus (Abb. A.4). Für die Kugel können wir $p = 4$, $s = 6$ und $e = 4$ zählen. Es folgt für die Euler'sche Charakteristik einer Kugel $\chi(\mathcal{A}_{\text{Kugel}}) = 2$. Für unseren Torus zählen wir $p = 4$, $s = 8$ und $e = 4$ und es folgt $\chi(\mathcal{A}_{\text{Torus}}) = 0$. Bei einem Torus gilt somit für die Gesamtkrümmung

$$\int_{\mathcal{A}} K \cdot dA = 0 .$$

Diesen Sachverhalt machen wir uns bei der Simulation dadurch zu nutze, dass wir periodische Randbedingungen verwenden.

A.2 Numerische Realisierung

Für die Simulationen dieser Arbeit wird zur Beschreibung der Fläche die Monge–Darstellung (A.1) gewählt. Konkret beschreiben wir eine Fläche \mathcal{A} mittels N Stützstellen, die äquidistant auf der (u, v) –Flächenprojektionsebene in einem Rechteckgitter angeordnet sind (Abb. A.5). Während der Simulation bleiben die Stützstellen fest an ihren Plätzen in der projizierten Ebene stehen. Nur der z –Wert der Flächenkoordinaten ändert sich. Dadurch wird die rechnerische Verarbeitung der Fläche einfach, denn wir können die Fläche als Matrix

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} z(1, 1) & z(1, 2) & \cdots & z(1, \sqrt{N}) \\ z(2, 1) & z(2, 2) & \cdots & z(2, \sqrt{N}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & z(u, v) & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ z(\sqrt{N}, 1) & z(\sqrt{N}, 2) & \cdots & z(\sqrt{N}, \sqrt{N}) \end{pmatrix}$$

speichern, deren Elemente die z –Auslenkung aus der Projektionsebene sind.

Die Darstellung einer Fläche auf der Rechenmaschine ist die Grundlage, um Ableitungen und daraus die eigentlich gesuchten Krümmungen der Fläche zu berechnen. Die im Folgenden aufgezeigten Formeln stammen aus [72]. Wir erwähnen dabei nur, was wir im Laufe der Arbeit implementiert und auch getestet haben.

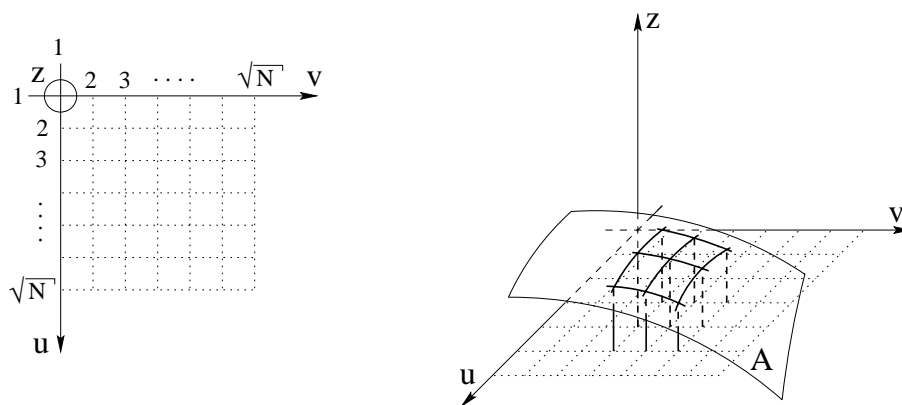


Abbildung A.5: Zur Computerdarstellung der Fläche \mathcal{A} , links mit Blick von oben auf die Projektionsebene und rechts mit Blick von der Seite.

A.2.1 Numerische Ableitungen

Neben der einfachen Rechnerdarstellung besteht ein weiterer Vorteil unserer Vorgehensweise darin, dass numerische Differentiation mittels einfachster Standardmethoden, den Differenzenquotienten, durchgeführt werden können. Für die partielle erste Ableitung einer Funktion $z(u, v)$ stellt uns die Numerik folgende Möglichkeiten zur Verfügung

$$\partial_u z = \frac{z(u+1, v) - z(u-1, v)}{2h} + O(h^2) \quad (\text{A.11})$$

für die Ableitung in u -Richtung und für die Ableitung in v -Richtung gilt entsprechend

$$\partial_v z = \frac{z(u, v+1) - z(u, v-1)}{2h} + O(h^2) . \quad (\text{A.12})$$

Neben diesen einfachen Methoden gibt es weitere Möglichkeiten, die Ableitung einer Funktion in einem Punkt (u, v) zu bestimmen. Eine Möglichkeit besteht darin, die links- und rechtsseitigen Ableitungen an diesen Punkt zu berechnen mittels

$$\begin{aligned} \partial_u z|_+ &= \frac{z(u+1, v) - z(u, v)}{h} + O(h^2) \quad \text{und} \\ \partial_u z|_- &= \frac{z(u, v) - z(u-1, v)}{h} + O(h^2) , \end{aligned}$$

oder

$$\partial_u z|_{\pm} = \frac{-3z(u, v) + 4z(u \pm 1, v) - z(u \pm 2, v)}{2h} + O(h^2) ,$$

bzw. eine grössere Genauigkeit zu verwenden mit

$$\partial_u z = \frac{z(u-2, v) - 8z(u-1, v) + 8z(u+1, v) - z(u+2, v)}{12h} + O(h^4) ,$$

wobei für Ableitungen in v -Richtung die Formeln jeweils analog angesetzt werden.

Bei der partiellen zweiten Ableitung kennen wir zwei Möglichkeiten

$$\begin{aligned}
\partial_{uu}z &= \frac{1}{h^2} [z(u+1, v) - 2 \cdot z(u, v) + z(u-1, v)] + O(h^2) , \\
\partial_{vv}z &= \frac{1}{h^2} [z(u, v+1) - 2 \cdot z(u, v) + z(u, v-1)] + O(h^2) , \\
\partial_{uv}z &= \frac{1}{4h^2} [z(u+1, v+1) - z(u-1, v+1) \\
&\quad - z(u+1, v-1) + z(u-1, v-1)] + O(h^2)
\end{aligned} \tag{A.13}$$

oder genauer

$$\begin{aligned}
\partial_{uu}z &= \frac{-z(u+2, v) + 16z(u+1, v) - 30z(u, v) + 16z(u-1, v) - z(u-2, v)}{12h^2} \\
&\quad + O(h^4) ,
\end{aligned}$$

bei allerdings gleichbleibender gemischter Ableitung.

Obige partiellen Ableitungen werden für Terme gebraucht, wie sie im folgenden Unterabschnitt aufgelistet sind. Für die in dieser Arbeit dargestellten Resultate kommen nur die Formeln (A.11) und (A.12), sowie die drei Ausdrücke von (A.13) zum Einsatz, da die restlichen Möglichkeiten meist zum Teil bedeutend rechenintensiver sind und die Genauigkeit, durch die von uns verwendeten Formeln ausreicht.

A.2.2 Krümmung auf dem diskreten Gitter

Im Laufe der Simulation müssen für jeden Punkt mehrfach die mittlere Krümmung J und die Gauss'sche Krümmung K berechnet werden. Zur Berechnung der mittleren Krümmung J wird Formel (A.9) verwendet, zur Berechnung der Gauss'schen Krümmung K Formel (A.10). Für beide Größen ist es sinnvoll, erst den Faktor (A.5) zu bestimmen. Für die Determinante des metrischen Tensors setzen wir

$$\gamma = 1 + (\partial_u z)^2 + (\partial_v z)^2 . \tag{A.14}$$

Anstelle dieser Beziehung lassen sich aber auch Formeln, gerechnet mit Hilfe der links- und rechtsseitigen Ableitungen

$$\gamma = 1 + \frac{1}{2} \left[(\partial_u z |_+)^2 + (\partial_u z |_-)^2 + (\partial_v z |_+)^2 + (\partial_v z |_-)^2 \right]$$

und sogar $\gamma = 1$ setzen.

Die Krümmungsausdrücke setzen wir an zu

$$\begin{aligned}
J &= \frac{1}{\gamma^{\frac{3}{2}}} \left[\left\{ 1 + (\partial_u z)^2 \right\} \partial_{vv}z - 2\partial_u z \partial_v z \partial_{uv}z + \left\{ 1 + (\partial_v z)^2 \right\} \partial_{uu}z \right] , \\
K &= \frac{1}{\gamma^2} \left[\partial_{uu}z \partial_{vv}z - (\partial_{uv}z)^2 \right] ,
\end{aligned} \tag{A.15}$$

wobei hier für die partiellen Ableitungen neben den Differenzenquotienten (A.11) und (A.12) mit links- und rechtsseitigen Ableitungen und auch mit Differenzenquotienten höherer Genauigkeit simuliert werden kann.

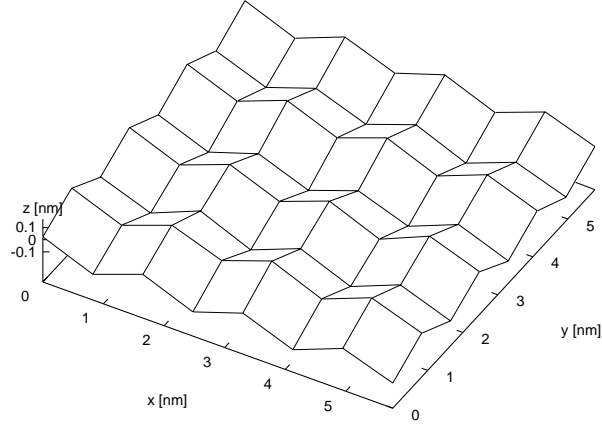


Abbildung A.6: Endkonfiguration eines Laufs, der mit der Formel $(\vec{\nabla}J)^2 = (\partial_u J)^2 + (\partial_v J)^2$ simuliert wird. Die Parameter des Laufs sind: $\kappa_0 = 0.05 \cdot 10^{-18} J$, $\kappa_1 = 0.01 \cdot 10^{-36} Jm^2$, $\kappa_2 = -0.9 \cdot 10^{-36} Jm^2$, $\kappa_4 = 9 \cdot 10^{-72} Jm^6$, Kantenlänge $L = 6.6nm$, 100'000 Sweeps, Starttemperatur $T_s = 398.4K$, Endtemperatur $T_f = 14.5K$ und Erniedrigungsfaktor $f_d = 0.75$. Am Laufende wird das Flächenverhältnis zu $A_{real}/A_{proj} = 1.00$ und die Energiedichte zu $u \approx -0.01 J/m^2$ angegeben. Die negative Energiedichte weist auf Sattelstruktur hin.

Für unsere Simulationen benötigen wir noch die Berechnung des Gradiententerms $(\vec{\nabla}J)^2$. Um eine grössere Glattheit der Membran zu erhalten, berechnen wir erst die links- und rechtsseitigen Ableitungen der mittleren Krümmung

$$\partial_u J|_{+=} = \frac{J(u+1, v) - J(u, v)}{h} \quad \text{und} \quad \partial_u J|_{-} = \frac{J(u, v) - J(u-1, v)}{h}$$

(analog für die v -Richtung) und berechnen dann den gewünschten Term mittels

$$(\vec{\nabla}J)^2 = \frac{1}{2} \left((\partial_u J|_{+=})^2 + (\partial_u J|_{-})^2 + (\partial_v J|_{+=})^2 + (\partial_v J|_{-})^2 \right). \quad (\text{A.16})$$

Anstelle dieser Beziehung können wir auch die direkte Berechnung

$$(\vec{\nabla}J)^2 = (\partial_u J)^2 + (\partial_v J)^2, \quad \text{mit} \quad \partial_u J = \frac{J(u+1, v) - J(u-1, v)}{2h}$$

testen. Leider hat diese schnellere Variante den Effekt, dass Membranformen entstehen können, die im Mittel flach sind, aber an je vier Stützstellen einen Sattel ausbilden. Krümmungsänderungen werden von obigem Term nicht genügend erfasst, die Membran wird deshalb nicht genügend geglättet (Abb. A.6).

Obwohl in unserer letzten Programmversion insgesamt 27 verschiedene Möglichkeiten zur Berechnung der mittleren und der Gauss'schen Krümmung variabel zur Verfügung stehen, werden für die Simulationen, die in dieser Arbeit dargestellt sind, ausschliesslich Formeln (A.14), (A.15) und (A.16) verwendet (mit Ausnahme von Abb. A.6).

