Seminar 'Level Set Methoden'

"Geometric Flows and Variational Methods"

Michael Möller

Institut für Numerische und Angewandte Mathematik
Fachbereich Mathematik und Informatik
WWU Münster

SS 2007

1. Einführung in die Problemstellung

1.1 Motivatioin: Entwicklung von Mikrostrukturen

Verhalten von Microstrukturen, wie zum Beispiel:

- beliebige, flüssige Masse $->$ Oberflächenminimierung
  - Welche Bewegung führt sie aus?
  - Welche Formen kann sie annehmen?

1. Einführung in die Problemstellung

1.1 Motivatioin: Entwicklung von Mikrostrukturen

Verhalten von Microstrukturen, wie zum Beispiel:

- beliebige, flüssige Masse $->$ Oberflächenminimierung
  - Welche Bewegung führt sie aus?
  - Welche Formen kann sie annehmen?
- Eiskristall

1. Einführung in die Problemstellung

1.1 Motivatioin: Entwicklung von Mikrostrukturen

Verhalten von Microstrukturen, wie zum Beispiel:

- beliebige, flüssige Masse $->$ Oberflächenminimierung
  - Welche Bewegung führt sie aus?
  - Welche Formen kann sie annehmen?
- Eiskristall
- Erstarren von Legierungen, z.B. Metall $->$ Movie

1. Einführung in die Problemstellung

1.2 Lösungsansätze

Viele Lösungsansätze arbeiten mit starken Vereinfachungen:

- Isotropie
- Regularität
- Linearität
- Differenzierbarkeit

1. Einführung in die Problemstellung

1.2 Lösungsansätze

Viele Lösungsansätze arbeiten mit starken Vereinfachungen:

- Isotropie
- Regularität
- Linearität
- Differenzierbarkeit

$->$ Häufig ungerechtfertigt
$->$ falsche Beschreibung

1. Einführung in die Problemstellung

1.2 Lösungsansätze

Gesucht: Systematischere Beschreibung

Idee: 'Gradient flow'

Ansatz: Energieminimierung (Thermodynamik)

- Gradient der Energiefunktion
- Zeitliche Entwicklung, die dem Gradienten der Energiefunktion entspricht:

$$\frac{d}{dt}c(\vec{x}, t) = -\nabla F(c) \tag{1}$$

2. Gradienten und Skalarprodukte

2.1 Skalarprodukte für Vektoren

Standardskalarprodukt im R^n: $< x, y >= \sum x_i y_i$

Variationen möglich, z.B $< x, y >_{anders} = \sum a_i x_i y_i$ mit $a_i \in R^+$ beliebig

Aus Analysis II bekannt: Richtungsableitung

$$[\frac{d}{dt} F(\vec{a} + t\vec{v})]_{t=0} =< \nabla F(\vec{a}), \vec{v} >$$

2. Gradienten und Skalarprodukte

2.1 Skalarprodukte für Vektoren

Standardskalarprodukt im R^n: $< x, y >= \sum x_i y_i$

Variationen möglich, z.B $< x, y >_{anders} = \sum a_i x_i y_i$ mit $a_i \in R^+$ beliebig

Aus Analysis II bekannt: Richtungsableitung

$$[\frac{d}{dt} F(\vec{a} + t\vec{v})]_{t=0} =< \nabla F(\vec{a}), \vec{v} >$$

Gleichung für Richtungsableitung mit einem beliebigen Skalarprodukten induziert einen anderen Gradienten:

$$\nabla_{<\cdot,\cdot>_b} = A^{-1} \nabla_{<\cdot,\cdot>}$$

2. Gradienten und Skalarprodukte

2.1 Skalarprodukte für Vektoren

Standardskalarprodukt im R^n: $< x, y >= \sum x_i y_i$

Variationen möglich, z.B $< x, y >_{anders} = \sum a_i x_i y_i$ mit $a_i \in R^+$ beliebig

Aus Analysis II bekannt: Richtungsableitung

$$[\frac{d}{dt} F(\vec{a} + t\vec{v})]_{t=0} =< \nabla F(\vec{a}), \vec{v} >$$

Gleichung für Richtungsableitung mit einem beliebigen Skalarprodukten induziert einen anderen Gradienten:

$$\nabla_{<\cdot,\cdot>_b} = A^{-1} \nabla_{<\cdot,\cdot>}$$

Für obige Problemstellung interessant: Gleichung in Funktionenräumen

2. Gradienten und Skalarprodukte

2.2 Innere Produkte für Funktionen

Analog zu Vektoren: Innere Produkte, z.B. L_2

$$< f, g >_{L_2} = \int_V f \cdot g \; dV$$

Skalarprodukte induzieren Normen:

$$\|f\| = \sqrt{< f, f >}$$

2. Gradienten und Skalarprodukte

2.2 Innere Produkte für Funktionen

Analog zu Vektoren: Innere Produkte, z.B. L_2

$$< f, g >_{L_2} = \int_V f \cdot g \; dV$$

Skalarprodukte induzieren Normen:

$$\|f\| = \sqrt{< f, f >}$$

Im R^n: Anschauliche Vorstellung von der Norm zum Standartskalarprodukt: Länge des Vektors

Was ist dies für eine Funktion?

Wann ist eine Funktion 'nah an 0'?

$->$ Wichtig für unser Verständnis vom Gradienten!

2. Gradienten und Skalarprodukte

2.2 Innere Produkte für Funktionen

Beispielfunktion: Hügel und Senke

2. Gradienten und Skalarprodukte

2.2 Innere Produkte für Funktionen

Beispielfunktion: Hügel und Senke

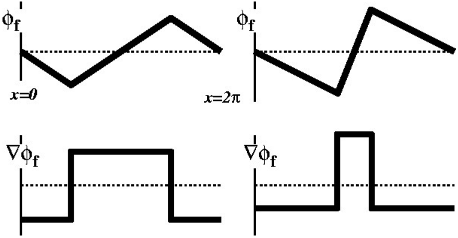


Abbildung: Stammfunktionen von f

2. Gradienten und Skalarprodukte

2.2 Innere Produkte für Funktionen

Beispielfunktion: Hügel und Senke

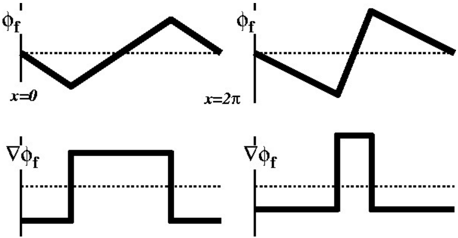


Abbildung: Stammfunktionen von f

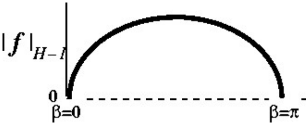


Abbildung: H^{-1} Norm

2. Gradienten und Skalarprodukte

2.2 Innere Produkte für Funktionen

$->$ Beurteilung abhängig vom physikalischen Zusammenhang!

L_2 Norm unabhängig vom Abstand zweier Hügel

H^{-1} Norm ist abhängig von diesem Abstand; $->$ Nützlich für Prozesse in denen etwas hin und her 'fließen' muss

$$< f, g >_{H^{-1}} = \int_V \nabla\phi_f \cdot \nabla\phi_g \, dV$$

$$\nabla^2\phi_f = f(\vec{x})$$

2. Gradienten und Skalarprodukte

2.2 Innere Produkte für Funktionen

Andere Darstellung des H^{-1} Produktes mittels des Satzes von Gauss:

$$< f, g >_{H^{-1}} = -\int_V \phi_f \cdot g \; dV = -\int_V (\nabla^2)^{-1} f \cdot g \; dV$$

$->$ Nützlich zum Finden des 'gradient flow'

3. Prinzip des 'gradient flows' am Beispiel der Diffusion

3.1 Physikalische Ausgangssituation

Energie des Systems abhängig von der Konzentration: F(c)

Freie Energiedichte $f = f(c(\vec{x}), \nabla c(\vec{x}), \vec{x})$

$- > \; F(c) = \int_V f \; dx = \int f(c(\vec{x}), \nabla c(\vec{x}), \vec{x}) \; dx$

Analog zu Vektoren:

$$[\frac{d}{dt}F(c+tv)]_{t=0} =< \nabla F(c), v >$$

3. Prinzip des 'gradient flows' am Beispiel der Diffusion

3.2 Gewichtung von inneren Produkten

Um Physik eines Vorgangs besser beschreiben zu können:

Einführung von gewichteten inneren Produkten

$$< f, g >_{L_2} = \int_v \frac{f \cdot g}{M} \; dV$$

$$< f, g >_{H^{-1}} = -\int_V (\nabla M \nabla)^{-1} f \cdot g \; dV$$

Z.B. bei der Diffusion: Berücksichtigung verschiedener Mobilitäten

3. Prinzip des 'gradient flows' am Beispiel der Diffusion

3.3 Berechnung des Gradienten

Diffusion mit Energiefunktion $F(c) = \frac{1}{2}\int_V c^2 dV$ und gewichtetem H^{-1} Produkt:

3. Prinzip des 'gradient flows' am Beispiel der Diffusion

3.3 Berechnung des Gradienten

Diffusion mit Energiefunktion $F(c) = \frac{1}{2} \int_V c^2 dV$ und gewichtetem H^{-1} Produkt:

$$\nabla F(c) = -M \nabla^2 c$$

3. Prinzip des 'gradient flows' am Beispiel der Diffusion

3.4 Bestimmung des 'gradient flow'

Gesucht: Konzentration c(t) mit

$$\frac{d}{dt}c(t) = -\nabla F(c)$$

3. Prinzip des 'gradient flows' am Beispiel der Diffusion

3.4 Bestimmung des 'gradient flow'

Gesucht: Konzentration c(t) mit

$$\frac{d}{dt}c(t) = -\nabla F(c)$$

Da

$$\nabla F(c) = -M\nabla^2 c$$

erfüllt ein solches c die Gleichung

$$\frac{d}{dt}c(t) = M\nabla^2 c$$

$->$ Diffusionsgleichung (2. Fick'sches Gesetz) Benötigt: Numerisches Verfahren zum Lösen der Gleichung $\frac{d}{dt}c(t) = -\nabla F(c)$

3. Prinzip des 'gradient flows' am Beispiel der Diffusion

3.4 Bestimmung des 'gradient flow'

Fixiere Startkonzentration c(0) und Zeitschritt $\Delta t = 2^{-j}$

3. Prinzip des 'gradient flows' am Beispiel der Diffusion

3.4 Bestimmung des 'gradient flow'

Fixiere Startkonzentration c(0) und Zeitschritt $\Delta t = 2^{-j}$

Konstruiere Folge $c_j(0) = c(0)$, $c_j(\Delta t)$, $c_j(2\Delta t)$, ... so, dass für alle k = 0,1,2,... die (Konzentrations-)Felder $q = c_j((k+1)\Delta t)$ aus den vorherigen Feldern $c = c_j(k\Delta t)$ errechnet werden durch Minimierung von

$$F(q) - F(c) + \frac{1}{(2\Delta t)}(q - c) \bullet (q - c)$$

3. Prinzip des 'gradient flows' am Beispiel der Diffusion

3.4 Bestimmung des 'gradient flow'

Dann gilt: $\frac{q-c}{\Delta t} = -\nabla F(q)$

Dann Interpolation der $c_j(t)$ und $j- > \infty$

c(t) $= lim_{j->\infty} c_j(t)$

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.1 Beispiele für die Herleitung physikalischer Gleichungen

Gesehen:
Diffusionsgleichung mit dem H^{-1} Produkt

Im L^2 Produkt mit

- $F = \frac{1}{2}\int_V y^2 \; - > \dot{y} = -My$
- $F = \frac{1}{2}\int_V (\nabla y)^2 \; - > \dot{y} = M\nabla^2 y$
  (Diffusions-/Wärmeleitungsgleichung)

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.2 Zusammengesetzte freie Energiedichten

Freie Energiedichten der Form $f(y(\vec{x})) = f_{hom}(y) + \epsilon^2\Gamma^2(\nabla y)$

f_{hom}: Energiedichte des homogenen Systems
$\epsilon^2\Gamma^2(\nabla y)$: Berücksichtigung der Energie aufgrund von Gradienten in y

- Im H^{-1} Produkt: Cahn-Hillard Gleichung
  $\dot{y} = -\nabla M \nabla (f'_{hom}(y) - \nabla \cdot \Gamma\Gamma')$
- Im L^2 Produkt: $\dot{y} = -M(f'_{hom}(y) - \nabla \cdot \Gamma\Gamma')$

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.3 Bewegung geometrischer Strukturen

- C_0 glatte Kurve in der Ebene
- Betrachte Vektorfelder $v\ \vec{n}_{C_0}$ senkrecht zu C_0
- $C_t(v)$ Kurve die man aus C_0 mit Geschwindigkeitsfeld v erhält
- Energie: Länge der Kurve

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.3.1 Motion by curvature

Im L^2 Produkt: Minimierung von $LENGTH(C_{\Delta t}(v)) + \frac{1}{2\Delta t}\int_{C_0} v^2$.
Verfahren wie oben beschrieben liefert

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.3.1 Motion by curvature

Im L^2 Produkt: Minimierung von $LENGTH(C_{\Delta t}(v)) + \frac{1}{2\Delta t}\int_{C_0} v^2$.
Verfahren wie oben beschrieben liefert

- $- >$ Bewegung $v = \kappa$ bzw. $v = M\kappa$, κ: Krümmung der Kurve
- $- >$ motion by curvature (Kapitel 4/Jans Vortrag)
- $- >$ Oberflächenbewegung bei denen sich die 'bulk energy' nicht ändert

http://math.berkley.edu/ sethian/2006/Applications/curvecollapse.html

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.3.2 surface diffusion

Energiefunktion: Länge der Kurve
Skalarprodukt: H^{-1}

- $->$ Bewegung $v = -\Delta\kappa$
- $->$ Oberflächendiffusion
- $->$ Oberflächenbewegung bei denen sich die 'bulk energy' nicht ändert
- $->$ Eingeschlossene Fläche bleibt konstant (im Gegensatz zur Kollabierenden 'motion by curvature)

www.math.umd.edu/ rhn/SurfDiff/Movies/

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.3.3 motion by weighted mean curvature

Bislang: Oberflächenenergiedichte für alle Teile der Kurve gleich, Oberflächenenergie war als proportional zur Kurvenlänge angenommen

Treten Unregelmäßigkeiten auf: Gewichtung der Zunahme der Oberfläche mit der Oberflächenenergiedichte.

Anschließende Minimierung liefert 'motion by weighted mean curvature' $v = M\kappa_\gamma$
κ_γ: gewichtete, mittlere Krümmung

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.3.4 Wulff-Formen

Definition Wulff Form: $W = \{x \in R^3 : x \cdot u \leq \phi(u)$ für jeden Einheitsvektor $u \in R^3\}$

Haupteigenschaft:
$\phi(\delta W) \leq \phi(\delta K)$ für jeden Körper K mit dem gleichen Volumen wie W

Elliptisch: W glatt und konvex

Kristallin: W ist ein Polyeder

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.3.5 Beispiel Seifenblasen

Problem: Einteilung eines Gebietes in Regionen $K^1, K^2, K^3, \ldots$ deren Volumen $V_1, V_2, V_3, \ldots$ vorgegeben sind

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.3.5 Beispiel Seifenblasen

Problem: Einteilung eines Gebietes in Regionen $K^1, K^2, K^3, \ldots$ deren Volumen $V_1, V_2, V_3, \ldots$ vorgegeben sind
$->$ Minimierung von

$$\sum_{0 \leq i < j \leq N} \phi^{i,j}(\delta K^i \cap \delta K^j)$$

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.3.5 Beispiel Seifenblasen

Problem: Einteilung eines Gebietes in Regionen $K^1, K^2, K^3, ...$ deren Volumen $V_1, V_2, V_3, ...$ vorgegeben sind
$->$ Minimierung von

$$\sum_{0 \leq i < j \leq N} \phi^{i,j}(\delta K^i \cap \delta K^j)$$

Für Seifenblasen: $\phi^{i,j}(v) = |v|$, also zu minimieren:

$$\frac{1}{2} \sum AREA(\delta K^i)$$

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.3.5 Beispiel Seifenblasen

Problem: Einteilung eines Gebietes in Regionen $K^1, K^2, K^3, \ldots$ deren Volumen $V_1, V_2, V_3, \ldots$ vorgegeben sind
$->$ Minimierung von

$$\sum_{0 \leq i < j \leq N} \phi^{i,j}(\delta K^i \cap \delta K^j)$$

Für Seifenblasen: $\phi^{i,j}(v) = |v|$, also zu minimieren:

$$\frac{1}{2} \sum AREA(\delta K^i)$$

$->$ motion by curvature (mit Randbedingungen)
Konsequenz aus der Oberflächenminimierung:
Dreifachverbindungen treffen sich immer im 120° Winkel.

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.4 Berücksichtigung der 'bulk energy'

Energiefunktion F gegeben durch:

$$F = \sum_{a,b} \int_{\vec{x} \in S_{ab}} \gamma_{ab}(\vec{n}_{ab}(\vec{x}))dA + \sum_{a} \int_{a} F_a dV$$

Im L^2 Produkt folgt daraus die Bewegungsgleichung

$$v = M(\kappa_\gamma + \Delta F)$$

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.5 Eckige Wulff-Formen

Bei Seifenblasen: Wulff-Form ist ein Kreis
$->$ Keine Richtung ist bevorzugt
$->$ Festhalten einer Grenzfläche legt Position der anderen beiden Grenzflächen fest

Bei anderen Wulff-Formen: Mehrere Positionen möglich

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.3.2 Eckige Wulff-Formen

Für Achteck

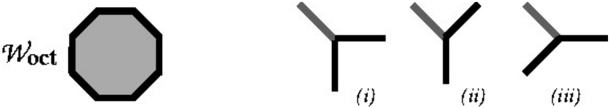


Abbildung: Wulff-Form: Achteck

Für Sechseck:

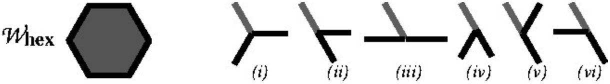


Abbildung: Wulff-Form: Sechseck

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.6 Bewegung eines Trippelpunktes

Auch bei eckigen Wulff-Formen: Vorhersage der Bewegung von Trippelpunkten möglich. Dazu:

Energieänderung beim Verschieben des Verbindungspunktes von (x_n, y_n) auf (x_{n+1}, y_{n+1}) im Zeitintervall Δt
$->$ Wichtig: Berücksichtigung der Energieänderungen aller Grenzflächen
$->$ Übliches Verfahren

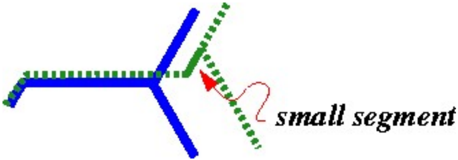
4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.6 Bewegung eines Trippelpunktes

Auch bei eckigen Wulff-Formen: Vorhersage der Bewegung von Trippelpunkten möglich. Dazu:

Energieänderung beim Verschieben des Verbindungspunktes von (x_n, y_n) auf (x_{n+1}, y_{n+1}) im Zeitintervall Δt
$->$ Wichtig: Berücksichtigung der Energieänderungen aller Grenzflächen
$->$ Übliches Verfahren

Weitere Möglichkeit: Einführen kleiner Segmente



4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.7 Innere Produkte als Volumenintegrale

Bei der Minimierung/den Skalarprodukten: Integral über Oberflächen von Kurven.
$->$ Probleme bei Singularitäten

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.7 Innere Produkte als Volumenintegrale

Bei der Minimierung/den Skalarprodukten: Integral über Oberflächen von Kurven.
$->$ Probleme bei Singularitäten

Idee: Ersetze die Beschreibung der Kurve durch eine Beschreibung des eigeschlossenen Volumens
$->$ Oberflächenintegral wird zum Volumenintegral
$->$ Fortsetzbarkeit über Singularitäten hinaus

Wie weit sind zwei gegebene Volumen von einander entfernt?

4. Anwendungen des 'gradient flows'

4.7 Innere Produkte als Volumenintegrale

Bei der Minimierung/den Skalarprodukten: Integral über Oberflächen von Kurven.
$->$ Probleme bei Singularitäten

Idee: Ersetze die Beschreibung der Kurve durch eine Beschreibung des eigeschlossenen Volumens
$->$ Oberflächenintegral wird zum Volumenintegral
$->$ Fortsetzbarkeit über Singularitäten hinaus

Wie weit sind zwei gegebene Volumen von einander entfernt?

Symmetrische Differenz: $K \Delta L = (L - K) \cup (K - L)$

$$\frac{1}{\Delta t} \int_{K_0 \Delta K} dist(x, C_0) dx \approx \frac{1}{2\Delta t} \int_{C_0} v^2$$