

Oberflächen unter Einfluss von äußeren und inneren Geschwindigkeitsfeldern

Jan Hegemann
j.hegemann@uni-muenster.de

12.04.2007

Inhaltsverzeichnis

① Motion in an Externally Generated Velocity Field

Convection

Upwind Differencing

Hamilton-Jacobi ENO

Hamilton-Jacobi WENO

TVD Runge-Kutta

② Motion Involving Mean Curvature

Equation of Motion

Numerical Discretization

Convection-Diffusion-Equations

Motion in an Externally Generated Velocity Field

Gegeben:

- implizite Darstellung einer Oberfläche durch eine Level-Set-Funktion ϕ
- äußeres Geschwindigkeitsfeld $\vec{V}(\vec{x}, t) = (u, v, w)$ für gesamte Oberfläche mit $\phi(\vec{x}) = 0$

Motion in an Externally Generated Velocity Field

Convection

Erster Ansatz: Lagrangesche Formulierung

Lösen von $\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{V}(\vec{x})$ für jeden Punkt der Oberfläche

Dazu notwendig: Unendliche Anzahl der Punkte auf endlich viele reduzieren \rightarrow Diskretisierung

Problem: Auftretende Verformungen erfordern eine ständige Anpassung der Diskretisierung, um Genauigkeit aufrecht erhalten zu können

Verfahren dieser Art heißen front tracking.

Motion in an Externally Generated Velocity Field

Convection

⇒ anderer Ansatz erscheint sinnvoll: Eulersche Formulierung
 ϕ nicht nur zur Beschreibung, sondern auch für zeitliche
 Entwicklung nutzen

⇒ Konvektionsgleichung / Level-Set-Gleichung:

$$\frac{d}{dt}\phi + \vec{V} \cdot \nabla\phi = 0$$

$$\frac{d}{dt}\phi + u\phi_x + v\phi_y + w\phi_z = 0$$

Motion in an Externally Generated Velocity Field

Convection

Dazu notwendig: Definition von \vec{V} nicht nur auf, sondern zumindest in einem gewissen Band der Breite ϵ um die Oberfläche mit $\epsilon \gg \Delta x$, da sonst keine Chance besteht, die exakte Lösung des Problems anzunähern.

Um die Änderung des Geschwindigkeitsfeldes und damit den Fehler klein zu halten, hilft folgende Beobachtung:

- die tangentielle Abl. bestimmt die Geschwindigkeit der Oberfläche
- die Abl. in Normalenrichtung ist bedeutungslos

$\Rightarrow \vec{V}$ konstant in Normalenrichtung; setze Geschwindigkeit außerhalb als die des nächsten Oberflächenpunktes: $\vec{V}(\vec{x}) = \vec{V}(\vec{x}_C)$

Motion in an Externally Generated Velocity Field

Upwind Differencing

Sei nun $\vec{V} = \vec{V}(\vec{x}, t)$.

Erste Methode für Zeit-Diskretisierung: Vorwärts-Euler

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} + \vec{V}^n \cdot \nabla \phi^n = 0$$

1dim. Ortsdiskretisierung: $\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + u_i^n (\phi_x)_i^n = 0$

⇒ Vorzeichen von u_i bestimmt die Richtung der Bewegung:

$$u_i < 0: \text{ von R. nach L. } \Rightarrow \phi_x \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} =: D^+ \phi =: \phi_x^+$$

$$u_i > 0: \text{ von L. nach R. } \Rightarrow \phi_x \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} =: D^- \phi =: \phi_x^-$$

Eine solche Unterscheidung der Approximation der räumlichen Ableitung nach Vorzeichen heißt „upwinding“ oder „upwind differencing“ und liefert ein konsistentes Verfahren 1. Ordnung (Fehler $O(\Delta x)$).

Motion in an Externally Generated Velocity Field

Upwind Differencing

Die zur Konvergenz noch nötige Stabilität erreicht man mit Hilfe der CFL-Bedingung:

$$1\text{dim.}: \quad \alpha = \Delta t \left(\frac{\max\{|u|\}}{\Delta x} \right)$$

$$3\text{dim.}: \quad \alpha = \Delta t \max\left\{ \frac{|u|}{\Delta x} + \frac{|v|}{\Delta y} + \frac{|w|}{\Delta z} \right\}$$

mit $0 < \alpha < 1$. Gebräuchlich: $\alpha = 0.9$. Konservativ: $\alpha = 0.5$

Man erhält also: $\Delta t \sim \Delta x$.

Benutzung des zentralen Differenzenquotienten würde stärkere Beschränkung, nämlich $\Delta t \sim (\Delta x)^2$ erfordern.

Weitere Möglichkeit: Künstliche Dissipation: $\phi_t + \vec{V} \cdot \nabla \phi = \mu \Delta \phi$
mit $\mu \sim \Delta x$, also $\mu \rightarrow 0$ für $\Delta x \rightarrow 0$.

Motion in an Externally Generated Velocity Field

Hamilton-Jacobi ENO

ENO = „essentially nonoscillatory“ polynomial interpolation

Idee: ϕ durch ein möglichst glattes Polynom zu interpolieren, um Verfahren höherer (räumlicher) Ordnungen zu konstruieren.

Dividierte Differenzen nach Newton-Interpolation:

$$D_i^0 = \phi_i$$

$$D_{i+1/2}^1 \phi = \frac{D_{i+1}^0 \phi - D_i^0 \phi}{\Delta x} \Rightarrow D_{i+1/2}^1 \phi = (D^+ \phi)_i, \quad D_{i-1/2}^1 \phi = (D^- \phi)_i$$

$$D_i^2 \phi = \frac{D_{i+1/2}^1 \phi - D_{i-1/2}^1 \phi}{2\Delta x}$$

$$D_{i+1/2}^3 \phi = \frac{D_{i+1}^2 \phi - D_i^2 \phi}{3\Delta x}$$

\Rightarrow Interpolationspolynom der Form

$$\begin{aligned} \phi(x) &= Q_0 + Q_1(x) + Q_2(x) + Q_3(x) \\ \Rightarrow \phi_x(x) &= Q'_1(x) + Q'_2(x) + Q'_3(x) \end{aligned}$$

Motion in an Externally Generated Velocity Field

Hamilton-Jacobi ENO

Bestimmung der Q_i :

$$Q_1(x) := (D_{k+1/2}^1 \phi)(x - x_i), \quad k = i - 1 \text{ für } \phi_x^-, \quad k = i \text{ für } \phi_x^+$$

$$\Rightarrow Q_1'(x_i) := D_{k+1/2}^1 \phi$$

→ Nichtbeachten von $Q_2(x)$ und $Q_3(x)$ liefert hier genau das upwinding Verfahren (1. Ordnung)

$Q_2(x), Q_3(x)$:

Beobachtung: Kleine Änderungen der Kurven verursachen (betragsmäßig) kleine dividierte Differenzen

→ Wahl möglichst kleiner dividierter Differenzen

Motion in an Externally Generated Velocity Field

Hamilton-Jacobi ENO

Bestimmung der Q_i :

$$|D_k^2 \phi| \leq |D_{k+1}^2 \phi| \quad \Rightarrow c := |D_k^2 \phi|, k^* := k - 1$$

$$|D_k^2 \phi| > |D_{k+1}^2 \phi| \quad \Rightarrow c := |D_{k+1}^2 \phi|, k^* := k$$

$$\Rightarrow Q_2(x) := c(x - x_k)(x - x_{k+1})$$

$$\Rightarrow Q_2'(x_i) = \Delta x \cdot c(2(i - k) - 1)$$

Abbruch hier ergibt Verfahren 2. Ordnung

$$c^* := \min \{|D_{k^*+1/2}^3 \phi|, |D_{k^*+3/2}^3 \phi|\}$$

$$\Rightarrow Q_3(x) = c^*(x - x_{k^*})(x - x_{k^*+1})(x - x_{k^*+2})$$

$$\Rightarrow Q_3'(x_i) = (\Delta x)^2 \cdot c^*(3(i - k^*) - 6(i - k^*) + 2)$$

→ Verfahren 3. Ordnung

Motion in an Externally Generated Velocity Field

Hamilton-Jacobi WENO

Bei der Berechnung von $(\phi_x^-)_i$ können $\phi_{i-3}, \phi_{i-2}, \phi_{i-1}, \phi_i, \phi_{i+1}$ und ϕ_{i+2} auftreten

Mit Definition von

$v_1 := D^- \phi_{i-2}, v_2 := D^- \phi_{i-1}, v_3 := D^- \phi_i, v_4 := D^- \phi_{i+1}, v_5 := D^- \phi_{i+2}$
ergeben sich genau die 3 Möglichkeiten:

$$\begin{aligned}\phi_x^1 &= \frac{v_1}{3} - \frac{7v_2}{6} + \frac{11v_3}{6} \\ \phi_x^2 &= -\frac{v_2}{6} + \frac{5v_3}{6} + \frac{v_4}{3} \\ \phi_x^3 &= \frac{v_3}{3} + \frac{5v_4}{6} - \frac{v_5}{6}\end{aligned}$$

Idee: Günstige konvexe Kombination der ϕ_x^i zu ϕ_x , um Fehler zu minimieren und so Verfahren höherer Ordnung zu erhalten:

$$\phi_x = \omega_1 \phi_x^1 + \omega_2 \phi_x^2 + \omega_3 \phi_x^3 \quad , \quad \text{mit } 0 \leq \omega_i \leq 1 \text{ und } \sum_i \omega_i = 1$$

Ziel: Interpoliert eine der Möglichkeiten etwa über eine Unstetigkeitsstelle, so sollte ihr Einfluss minimiert werden

Motion in an Externally Generated Velocity Field

Hamilton-Jacobi WENO

Ein Verfahren 5. Ordnung in glatten Gebieten erhält man mit

$$\omega_1 = 0.1, \omega_2 = 0.6 \text{ und } \omega_3 = 0.3$$

Dies bleibt der Fall bei:

$$\omega_1 = 0.1 + C_1(\Delta x)^2, \omega_2 = 0.6 + C_2(\Delta x)^2 \text{ und } \omega_3 = 0.3 + C_3(\Delta x)^2$$

Denn:

$$\phi_x = \underbrace{0.1\phi_x^1 + 0.6\phi_x^2 + 0.3\phi_x^3}_{O((\Delta x)^5)} + \underbrace{(\Delta x)^2(C_1\phi_x^1 + C_2\phi_x^2 + C_3\phi_x^3)}_{=:(*) , \text{ z.Z. } O((\Delta x)^5)}$$

Da die ϕ_x^i jeweils die exakte Lösung ϕ_x^E sowie einen $O((\Delta x)^3)$ -Fehler liefern, ergibt sich:

$$\begin{aligned} (*) &= C_1(\Delta x)^2\phi_x^E + C_2(\Delta x)^2\phi_x^E + C_3(\Delta x)^2\phi_x^E + \underbrace{O((\Delta x)^2)O((\Delta x)^3)}_{O((\Delta x)^5)} \\ &= \phi_x^E \underbrace{[C_1(\Delta x)^2 + C_2(\Delta x)^2 + C_3(\Delta x)^2]}_{=0, \text{ da } \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 = 1} + O((\Delta x)^5) \end{aligned}$$

Dies erlaubt nun eine flexible Definition der Gewichte.

Motion in an Externally Generated Velocity Field

Hamilton-Jacobi WENO

Dazu Definition von Glattheiten („smoothness“) der ϕ_x^i :

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{13}{12}(v_1 - 2v_2 + v_3)^2 + \frac{1}{4}(v_1 - 4v_2 + 3v_3)^2 \\ S_2 &= \frac{13}{12}(v_2 - 2v_3 + v_4)^2 + \frac{1}{4}(v_2 - v_4)^2 \\ S_3 &= \frac{13}{12}(v_3 - 2v_4 + v_5)^2 + \frac{1}{4}(3v_3 - 4v_4 + v_5)^2 \end{aligned}$$

Weiterhin (mit $\epsilon = 10^{-6} \max\{v_1^2, v_2^2, v_3^2, v_4^2, v_5^2\} + 10^{-99}$):

$$\alpha_1 = \frac{0.1}{(S_1 + \epsilon)^2}$$

$$\alpha_2 = \frac{0.6}{(S_2 + \epsilon)^2}$$

$$\alpha_3 = \frac{0.3}{(S_3 + \epsilon)^2}$$

→ Gewichte:

$$\omega_1 = \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3}$$

$$\omega_2 = \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3}$$

$$\omega_3 = \frac{\alpha_3}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3}$$

Motion in an Externally Generated Velocity Field

Hamilton-Jacobi WENO

Vorteile der so definierten Gewichte:

- in Gebieten mit geringer Änderung der Daten sind die S_i klein gegenüber ϵ und damit (annähernd) zu den optimalen ω_i
- selbst wenn die S_i groß, aber alle in der gleichen Größenordnung, ergeben sich (annähernd) die optimalen ω_i
- bei einer großen Änderung in einer/zwei der ϕ_x^i ist das entsprechende α_i klein und das Gewicht nimmt ab
- im Falle von drei großen ϕ_i sind die Daten schlecht konditioniert - dies kommt aber i.d.R. nicht oder nur lokal vor

Für Approximation von $(\phi_x^+)_i$; völlig analog mit:

$$v_1 := D^- \phi_{i+2}, v_2 := D^- \phi_{i+1}, v_3 := D^- \phi_i, v_4 := D^- \phi_{i-1}, v_5 := D^- \phi_{i-2}$$

Motion in an Externally Generated Velocity Field

TVD Runge-Kutta

TVD = „total variation diminishing“

Bisher erreicht: Verfahren, das die räumliche Ableitung in 5. Ordnung approximiert, doch die Zeitdiskretisierung ist weiter 1. Ordnung.

Dies ist in den meisten, aber nicht in allen Fällen auch ausreichend.

Idee: Mit Hilfe von Runge-Kutta-Verfahren die zeitliche Ordnung erhöhen

TVD RK-Verfahren 1. Ordnung ist das Euler-Verfahren

→ auch durch verschiedene, konvex kombinierte Euler-Schritte erzeugte Verfahren sind TVD

Da HJ (W)ENO nicht TVD, ist Gesamtverfahren nicht TVD, aber noch TVB („total variation bounded“).

Motion in an Externally Generated Velocity Field

TVD Runge-Kutta

Verfahren 2. Ordnung: Mittelpunktsregel, verbesserter Euler

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{n+1}-\phi^n}{\Delta t} + \vec{V}^n \cdot \nabla \phi^n &= 0 \\ \frac{\phi^{n+2}-\phi^{n+1}}{\Delta t} + \vec{V}^{n+1} \cdot \nabla \phi^{n+1} &= 0 \\ \Rightarrow \phi^{n+1} &= \frac{1}{2}\phi^n + \frac{1}{2}\phi^{n+2} \end{aligned}$$

Verfahren 3. Ordnung:

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{n+1}-\phi^n}{\Delta t} + \vec{V}^n \cdot \nabla \phi^n &= 0 \\ \frac{\phi^{n+2}-\phi^{n+1}}{\Delta t} + \vec{V}^{n+1} \cdot \nabla \phi^{n+1} &= 0 \\ \phi^{n+1/2} &= \frac{3}{4}\phi^n + \frac{1}{4}\phi^{n+2} \\ \frac{\phi^{n+3/2}-\phi^{n+1/2}}{\Delta t} + \vec{V}^{n+1/2} \cdot \nabla \phi^{n+1/2} &= 0 \\ \Rightarrow \phi^{n+1} &= \frac{1}{3}\phi^n + \frac{2}{3}\phi^{n+3/2} \end{aligned}$$

Motion Involving Mean Curvature

Nun soll ein Geschwindigkeitsfeld betrachtet werden, das von der Oberfläche selbst, beispielsweise von der mittleren Krümmung κ abhängt:

$$\vec{V} = -b\kappa\vec{N} \quad \text{mit } b > 0$$

Dabei bewegt sich die Oberfläche in Richtung von Konkavitäten:

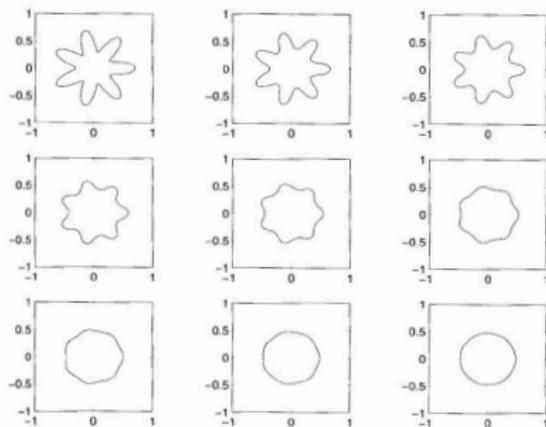


Figure 4.2. Evolution of a star-shaped interface in a curvature-driven flow. The tips of the star move inward, while the gaps in between the tips move outward.

Motion Involving Mean Curvature

Equation of Motion

Von der mittleren Krümmung abhängige Bewegung enthält nur einen Anteil in Normalenrichtung:

$$\Rightarrow \vec{T} \cdot \nabla \phi = 0 \quad \text{für jeden Tangentialvektor } \vec{T}$$

Für $\phi_t + \vec{V} \cdot \nabla \phi = \phi_t + (V_n \vec{N} + V_t \vec{T}) \cdot \nabla \phi = 0$ gilt also:

$$\Rightarrow \phi_t + V_n \vec{N} \cdot \nabla \phi = 0$$

Mit $\vec{N} \cdot \nabla \phi = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \cdot \nabla \phi = \frac{|\nabla \phi|^2}{|\nabla \phi|} = |\nabla \phi|$ folgt: $\phi_t + V_n |\nabla \phi| = 0$

Für $V_n = -b\kappa$ erhält man:

$$\phi_t = b\kappa |\nabla \phi|$$

Ist ϕ eine signed distance function, so wird daraus die Wärmeleitungsgleichung: $\phi_t = b\Delta \phi$

Doch nach der Berechnung eines Schritts mit einem Euler-Verfahren muss ϕ erst wieder zu einer solchen gemacht werden \rightarrow Vortrag über Kapitel 7

Motion Involving Mean Curvature

Numerical Discretization

Die Bewegungsgleichung ist diesmal parabolisch und muss mit Hilfe des zentralen Differenzenquotienten $D_x^0 \phi := \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x}$ gelöst werden.

Erinnerung:

$$\kappa = \frac{\phi_x^2 \phi_{yy} - 2\phi_x \phi_y \phi_{xy} + \phi_y^2 \phi_{xx} + \phi_x^2 \phi_{zz} - 2\phi_x \phi_z \phi_{xz} + \phi_z^2 \phi_{xx} + \phi_y^2 \phi_{zz} - 2\phi_y \phi_z \phi_{yz} + \phi_z^2 \phi_{yy}}{|\nabla \phi|^3}$$

Lösen mit $\phi_{xx} \approx D_x^+ D_x^- \phi$, $\phi_{xy} \approx D_x^0 D_y^0 \phi$, Rest analog.

⇒ Verfahren 2. (räumlicher) Ordnung

Bei Kombination mit dem Vorwärts-Euler ist für die Stabilität nötig:

$$\Delta t \left(\frac{2b}{(\Delta x)^2} + \frac{2b}{(\Delta y)^2} + \frac{2b}{(\Delta z)^2} \right) < 1$$

Man erhält $\Delta t \sim (\Delta x)^2$, also insgesamt einen Fehler $O((\Delta x)^2)$.

Motion Involving Mean Curvature

Numerical Discretization

Alternativ ist eine Kombination mit dem impliziten Rückwärts-Euler möglich:

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = b \Delta \phi^{n+1}$$

Dies erfordert nur $\Delta t = O(\Delta x)$, was die Gesamtgenauigkeit jedoch auf $O(\Delta x)$ verringert.

Diese kann durch Verwenden der Trapezregel auf $O((\Delta x)^2)$ verbessert werden:

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = b \frac{\phi^n + \phi^{n+1}}{2}$$

→ Crank-Nicolson-Verfahren

Bei Benutzen des impliziten Euler-Verfahrens ist in jedem Schritt ein LGS zu lösen.

Motion Involving Mean Curvature

Convection-Diffusion-Equations

Der Einfluss eines inneres und eines äußeres Geschwindigkeitsfeldes sind enthalten in der Konvektions-Diffusions-Gleichung:

$$\phi_t + \vec{V} \cdot \nabla \phi = b \Delta \phi$$

Die Level-Set-Version:

$$\phi_t + \vec{V} \cdot \nabla \phi = b \kappa |\nabla \phi|$$

Lösung kann über den zentralen Differenzenquotienten für den $b \kappa |\nabla \phi|$ -Term und einem upwinding-Verfahren für den $\vec{V} \cdot \nabla \phi$ -Term erfolgen. Für ein TVD RK-Verfahren für die Zeit-Diskretisierung ist eine Stabilitätsbedingungen zu erfüllen:

$$\Delta t \left(\frac{|u|}{\Delta x} + \frac{|v|}{\Delta y} + \frac{|w|}{\Delta z} + \frac{2b}{(\Delta x)^2} + \frac{2b}{(\Delta y)^2} + \frac{2b}{(\Delta z)^2} \right) < 1$$