

Mathematische Modellierung der Oberflächenänderung von Erythrozyten aufgrund mechanischer Einwirkungen

Dissertation

zur Erlangung des Grades des Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
der Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät I
- Mathematik und Informatik -
der Universität des Saarlandes

von

Elisabeth Krämer

Saarbrücken, 2014

Tag des Kolloquiums: 11. Dezember 2014
Dekan der Fakultät: Prof. Dr. Markus Bläser
Vorsitzender: Prof. Dr. Jörg Eschmeier
1. Berichterstatter: Prof. Dr. Sergej Rjasanow
2. Berichterstatter: Prof. Dr. Roland Duduchava
akademischer Beisitzer: Dr. Richards Grzibovskis

Inhaltsverzeichnis

1. Überblick	9
2. Einleitung	17
2.1. Physikalische und biologische Experimente	17
2.2. Das Modell	20
2.3. Differentialgeometrische Grundlagen	22
2.4. Stationäre Formen und Variation	29
2.5. Methode der finiten Elemente	30
3. Variation der freien Energie	39
3.1. Variation des Willmore-Funktional	39
3.2. Normale Variation der mittleren Krümmung	49
3.3. Normale Variation der Fläche	51
3.4. Normale Variation des Kontakt-Funktional	52
3.5. Normale Variation des Flächen- und Volumenerhaltungsterms	53
3.6. Zusammenfassung der Variation des gesamten Funktional	53
4. Evolution	55
4.1. Willmore-Evolution	55
4.2. Evolution mit mittlerer Krümmung	58
4.3. Gauß-Krümmung	59
4.4. Flächen- und Volumenerhaltung	61
5. Verringerung von Approximationsfehlern	63
5.1. Lokale Flächenerhaltung	63
5.2. Verringerung der Flächen- und Volumenerhaltungsfehler	65
6. Axialsymmetrische Formen	67
7. Numerische Ergebnisse	73
7.1. Konvergenzuntersuchungen	73
7.2. Verringerung von Approximationsfehlern	82
7.3. Helfrich-Evolution	84
7.4. Kontakt mit einer Ebene	87
7.5. Kontakt mit einem Zylinder	90
7.6. Auseinanderziehen eines Erythrozyten	91
7.7. Kontakt zweier Erythrozyten	92

Inhaltsverzeichnis

8. Fazit	95
A. Anhang	97
B. Bezeichnungen	99

Zusammenfassung

Erythrozyten zeigen abhängig von ihrer Umgebung viele verschiedene Formen. Unter normalen Bedingungen haben sie die Form einer bikonkaven Scheibe, in engen Kapillaren sind sie becherförmig umgestülpt. Bei Kontakt mit Objekten wie einer Glasplatte, Mikrofasern oder anderen Erythrozyten zeigen sich wieder neue Formen. Sie werden über die Biegeenergie ihrer Membran, deren Hauptterm das Helfrich-Funktional ist, mit Zusatztermen für Flächen- und Volumenerhaltung modelliert. Die Membran wird als zweidimensionale Oberfläche beschrieben und die Energie hängt nur von ihren geometrischen Größen ab. Der Kontakt wird durch einen weiteren Zusatzterm zur Energie modelliert, der das Wechselwirkungspotential enthält.

Die Formen stellen die Minima der Energie dar. Um sie zu bestimmen, muss die Variation berechnet werden. Die Euler-Lagrange-Gleichung beschreibt die Minimalbedingung, dass die Variation verschwindet. Für axialsymmetrische Formen kann die Symmetrie ausgenutzt und die Euler-Lagrange-Gleichung für eine Kurve in der x - z -Ebene, die um die y -Achse rotiert wird, gelöst werden. Im allgemeinen dreidimensionalen Fall kann die Gleichung nicht direkt gelöst werden. Deshalb nimmt man eine Anfangsoberfläche, die mit dem Gradientenfluss bewegt wird, der sich aus der Variation ergibt, bis eine Oberfläche entsteht, deren Energie minimal ist. Es ergibt sich dabei ein Anfangswertproblem für die Parametrisierung der Oberfläche, welches Ableitungen vierter Ordnung enthält. Um diese zu reduzieren, wird der mittlere Krümmungvektor, der der Laplace-Beltrami-Operator der Parametrisierung ist, als zusätzliche Unbekannte eingeführt und man erhält schließlich in schwacher Formulierung ein Differentialgleichungssystem erster Ordnung. Zur Lösung des Anfangswertproblems wird die Methode der Finiten Elemente verwendet, wobei die Oberfläche meist linear trianguliert ist.

Die axialsymmetrische Methode hat den Vorteil, dass sie wesentlich schneller minimierende Formen liefert, da die Euler-Lagrange-Gleichung gelöst wird und keine zeitintensive Evolution durchgeführt werden muss. Jedoch können nicht axialsymmetrische Formen nicht bestimmt werden. Dafür muss die rechenintensivere Evolution angewendet werden.

Um eine Entartung der Dreiecke während der Evolution zu reduzieren, kann im dreidimensionalen Fall zusätzlich eine tangentielle Korrektur durchgeführt werden, die lokal die Fläche erhält. Um Approximationsfehler bei der Flächen- und Volumenerhaltung zu verringern, ändert man die ursprüngliche Bedingung, dass die zeitlichen Änderungen der Fläche und des Volumens verschwinden, dahingehend, dass sie der mit einem positiven Vorfaktor multiplizierten Differenz zwischen dem aktuellen Wert und dem Anfangswert entsprechen.

Die Flächen der Dreiecke der Diskretisierung ändern sich ohne Korrektur im Laufe der Evolution. Im Vergleich dazu gibt es bei Berechnungen mit einer tangentialen Korrektur zur lokalen Flächenerhaltung jedoch kaum Änderungen. Diese Korrektur ermöglicht Berechnungen, die ohne sie nicht

durchführbar sind, da an manchen Stellen durch die wachsende Größe der Dreiecke zu viel Genauigkeit verloren geht. Durch die Abwandlung der Bedingung für die Flächen- und Volumenerhaltung ist die Erhaltung während der Evolution durch Verringerung von Approximationsfehlern besser erfüllt.

Es ist möglich, in der Natur vorkommende Formen wie Diskozyten und Stomatozyten durch Minimierung des Helfrich-Funktional zu erhalten. Eine Einordnung einiger Formen für verschiedene Werte der spontanen Krümmung und des reduzierten Volumens in ein Phasendiagramm, das aus axialsymmetrischen Berechnungen erhalten wurde, zeigt, dass die dreidimensionalen Berechnungen mit den axialsymmetrischen übereinstimmen. Des Weiteren konnte festgestellt werden, dass eine axialsymmetrische Form, die durch Lösung der Euler-Lagrange-Gleichung berechnet wurde, ebenfalls minimal unter der dreidimensionalen Evolution ist.

Durch den Kontakt mit einer Ebene erhält man eine sphärozytische Form, welche in Experimenten mit Glasoberflächen beobachtet werden kann. In anderen Experimenten werden Erythrozyten in ein Netz aus Mikrofasern gegeben, deren Formen sich durch Simulation des Kontaktes mit einem Zylinder ebenfalls bestimmt werden konnte. Diese sind nicht axialsymmetrisch und können nur mit der dreidimensionalen Evolution gefunden werden. Des Weiteren ist es nicht nur möglich, den Kontakt eines Erythrozyten mit einer künstlichen Oberfläche zu simulieren, sondern auch den Kontakt zweier Erythrozyten untereinander.

Übersicht

Erythrozyten zeigen in ihrer natürlichen Umgebung und unter Laborbedingungen viele verschiedene Formen. Normalerweise haben sie die Form einer bikonkaven Scheibe, sie können sich jedoch becherförmig umstülpen, um auch enge Kapillaren passieren zu können. Bei Kontakt mit Objekten wie einer Glasplatte, Mikrofasern oder anderen Erythrozyten zeigen sich wieder neue Formen. Durch Modellierung der Biegeenergie ihrer Membran mit Zusatztermen für Flächen- und Volumenerhaltung sowie den Kontakt lassen sich bereits viele Formen erklären. Die Membran wird dabei als zweidimensionale Oberfläche beschrieben und die Biegeenergie hängt nur von ihren geometrischen Größen ab. Die gesuchten Formen stellen die Minima dieser Energie dar. Sie werden gefunden, indem eine Startoberfläche mit dem Gradientenfluss bewegt wird, also einer Geschwindigkeit, die die Energie verkleinert. Dadurch erhält man eine partielle Differentialgleichung vierter Ordnung, die mit Hilfe der Methode der Finiten Elemente numerisch gelöst wird. Es können die bikonkave Scheibe und die Becherform reproduziert werden. Auch die Formen durch den Kontakt mit der Glasplatte oder Mikrofasern gleichen denen in der Natur. Der Kontakt zweier Erythrozyten untereinander kann ebenfalls simuliert werden.

Abstract

In a natural and laboratory environment, erythrocytes show many different shapes. Their normal shape is a biconcave disc, but, for passing through capillaries, they can assume a cup-like shape. When in contact with objects like a glass slide, microfibers or other erythrocytes, new shapes are observed. Through modeling of the bending energy of their membrane with additional terms for area and volume conservation and the contact, it is possible to explain many of the shapes. The membrane is described as a two-dimensional surface and the bending energy is a function of its geometrical properties. The resulting shapes are the minima of this energy. They are found through moving a starting surface with the gradient flow, i. e. a velocity which minimizes the energy. This involves a partial differential equation of order four which is solved numerically by the means of the finite element method. The biconcave disk and the cup-like shape are observed. The shapes for the contact with a glass slide or microfibers are similar to these in nature. The contact of two erythrocytes with each other is also simulated.

1. Überblick

Erythrozyten sind von grundlegender Bedeutung für den Stoffwechselzyklus des Menschen. Sie transportieren Sauerstoff und Kohlenstoffdioxid als passive Transportmittel im zirkulierenden Blut. Aufgrund ihrer wichtigen biologischen Funktion, ihrer Formenvielfalt und ihres relativ einfachen Aufbaus herrscht durch viele Disziplinen wie Medizin, Physik und Mathematik hindurch großes Interesse an ihrer Untersuchung.

Das Innere der Erythrozyten enthält flüssiges Zytoplasma. Dieses ist von einer Membran umgeben, deren schematischer Aufbau in Abbildung 1.1 dargestellt ist. Wie bei den meisten Biomembranen sind die Membranlipide in einer Doppelschicht angeordnet. Erythrozyten besitzen kein Zytoskelett, sondern nur ein Membranskelett unter der Lipid-Doppelschicht [13].

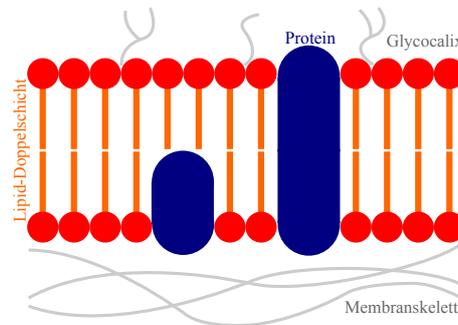


Abbildung 1.1.: Schematischer Aufbau der Membran eines Erythrozyten.

In den siebziger Jahren des vorherigen Jahrhunderts wurden die ersten mathematischen Modelle für Erythrozyten aufgestellt. Sie verwenden dabei nur die Membran-Doppelschicht, da das Membranskelett höchst kompressibel ist [6]. Es werden also eigentlich Vesikel, das heißt mit Flüssigkeit gefüllte geschlossene Doppelschicht-Membranen, modelliert [27]. Dies ist weit verbreitet, da man aus diesem Modell die meisten Formen, die ein Erythrozyt annimmt, erhalten kann. Die Membran wird als eine geschlossene zweidimensionale Oberfläche Γ in \mathbb{R}^3 modelliert. Ihre Energie wird als

$$\mathcal{F} = \frac{k_c}{2} F_h + \frac{k_g}{2} F_K + F_{A,V} + F_k = \frac{k_c}{2} \int_{\Gamma} (H - H_0)^2 dS + \frac{k_g}{2} \int_{\Gamma} K dS + \lambda A + \mu V + W_0 \int_{\Gamma} W(|\mathbf{r}|) dS$$

dargestellt. Die ersten beiden Terme, $\frac{k_c}{2} F_h + \frac{k_g}{2} F_K$, stellen dabei die Biegeenergie der Membran dar, der dritte Term, $F_{A,V}$, sorgt in Form von Lagrange-Parametern für Flächen- und Volumenerhaltung und der letzte Term, F_k , beschreibt den Kontakt der Erythrozyten mit anderen Objekten.

1. Überblick

Das erste Modell für die Biegeenergie von Membranen wurde 1970 von Canham aufgestellt [3]. Es beschreibt dabei die Biegeenergie der Membran durch das Oberflächenintegral über die Summe der quadrierten Hauptkrümmungen, jedoch existiert keine physikalische Herleitung für dieses Modell. 1973 wurde von Helfrich ein modifiziertes Energiefunktional für die Biegeenergie der Membran hergeleitet [6]. Dieses sogenannte Modell der spontanen Krümmung ist heute weit verbreitet und bildet die Grundlage dieser Arbeit. Die Biegeenergie der Membran wird hergeleitet, indem man die Membran als eine dünne Platte ansieht, deren Tension dem Hookeschen Gesetz gehorcht. Die Membran wird durch eine Oberfläche Γ dargestellt, deren Biegeenergie das Oberflächenintegral

$$F_b = \frac{k_c}{2} F_h + \frac{k_g}{2} F_K$$

mit den Biegemodulen k_c und k_g ist [6]. Das Funktional wird auch freie Energie genannt, obwohl es entgegen der physikalischen Definition weder Temperatur noch Entropie beinhaltet. Das Theorem von Gauß-Bonnet [18] besagt, dass für eine kompakte zweidimensionale orientierbare Untermannigfaltigkeit Γ von \mathbb{R}^3 mit Geschlecht, also der Anzahl "Löcher", \mathcal{G}

$$F_K = \int_{\Gamma} K \, dS = 4\pi(1 - \mathcal{G})$$

gilt. Deshalb ist das Integral über die Gauß-Krümmung F_K eine topologische Invariante und kann bei der Energieminimierung vernachlässigt werden. Der andere Term,

$$F_h = \int_{\Gamma} (H - H_0)^2 \, dS,$$

ist das Helfrich-Funktional mit der doppelten mittleren Krümmung H . Die spontane Krümmung H_0 beschreibt die Tatsache, dass sich die Schichten der Membran unterscheiden. Außerdem sind die in der Membran vorkommenden Proteine zum Teil unterschiedlich dick in den beiden Schichten. Dadurch bekommen die beiden Schichten verschieden große Flächen, sodass die Membran auf jeden Fall gebogen ist (siehe Abbildung 1.2).

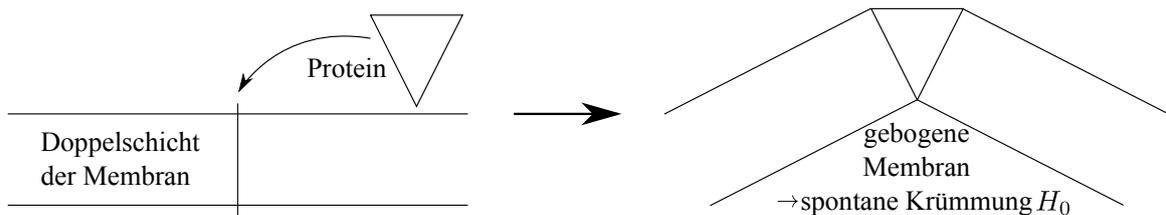


Abbildung 1.2.: Erläuterung der spontanen Krümmung.

Andere Modelle für die Biegeenergie sind das Doppelschicht-Kopplungs-Modell [33], das das Modell von Canham um eine starke Bedingung für den Flächenunterschied der beiden Schichten erweitert,

und das Flächenunterschied-Elastizitäts-Modell [29], das noch zusätzlich die Differenz der Anzahl der Moleküle in den Schichten berücksichtigt. Zudem gibt es auch Arbeiten wie beispielsweise [2], die das Membranskelett mit modellieren.

In der vorliegenden Arbeit soll nur das Helfrich-Funktional verwendet werden, da dieses die meisten Formen beschreiben kann.

Oberflächentension und Druckunterschied zwischen dem Inneren und dem Äußeren führen zu Zusatztermen zur freien Energie,

$$F_{A,V} = \lambda A + \mu V,$$

mit der Oberflächentension λ , dem osmotischen Druck μ , der Fläche A und dem Volumen V [6]. Wenn λ und μ nicht bekannt sind und gefordert ist, dass Fläche und Volumen während einer Evolution erhalten bleiben, so werden λ und μ zu Lagrange-Parametern.

Neben freien können durch einen Zusatzterm auch adhärierte rote Blutkörperchen beschrieben werden. Im Experiment werden Erythrozyten in Kontakt mit anderen Objekten wie zum Beispiel einem Objektträger gebracht. In diesem Fall nehmen die Erythrozyten eine runde Form an [1]. Der Kontakt wird durch das Wechselwirkungspotential W , das vom Betrag des Abstandsvektors zum Hindernis \mathbf{r} abhängt, modelliert. Er wird durch die Kontaktenergie

$$F_k = W_0 \int_{\Gamma} W(|\mathbf{r}|) dS$$

als zusätzlicher Term beschrieben [32]. W_0 ist dabei die Adhäsionsstärke. In [28] wird der axialsymmetrische Kontakt mit einer Ebene über den Term $-W_0 A_k$ mit der Kontaktfläche A_k modelliert und es konnte die runde Form reproduziert werden. In dieser Arbeit soll der Kontakt mit Hilfe des Wechselwirkungspotentials beschrieben werden.

Um aus der Energie Bedingungen für Formen von Oberflächen zu erhalten, muss das Energiefunktional minimiert werden. Dazu wird die erste Variation des Energie-Funktionals \mathcal{F} berechnet:

$$\delta_{\phi\nu}\mathcal{F} = \left. \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}(\underline{\Gamma}) \right|_{t=0}$$

mit der um $t\phi$ in Normalenrichtung gestörten Oberfläche

$$\underline{\Gamma} = \{ \mathbf{P} + t\phi(\mathbf{P})\boldsymbol{\nu}(\mathbf{P}), \mathbf{P} \in \Gamma \},$$

wobei ϕ eine glatte Funktion und $\boldsymbol{\nu}(\mathbf{P})$ der äußere Einheitsnormalenvektor an Γ in \mathbf{P} ist. Im Minimum ist die Variation Null und man erhält die Euler-Lagrange-Gleichung

$$\delta_{\phi\nu}\mathcal{F} = 0.$$

Es gibt zwei Möglichkeiten, das Minimum des Energiefunktionals zu finden [26]: durch Lösung der Euler-Lagrange-Gleichung oder durch direkte Minimierung des Energiefunktionals, das heißt man verschiebt die Punkte einer Anfangsoberfläche so, dass die Energie kleiner wird.

1. Überblick

Bis in die neunziger Jahre hinein wurden nur axialsymmetrische Formen betrachtet. Mit dieser Einschränkung sind viele Formen, die Erythrozyten annehmen können, reproduzierbar, da die meisten axialsymmetrisch sind. So kann die Berechnung der Fläche Γ auf das Finden einer Kurve in der x - z -Ebene beschränkt werden [27]. In diesem Fall wird direkt die Euler-Lagrange-Gleichung gelöst. Diese führt auf eine gewöhnliche Differentialgleichung dritter Ordnung. Die Lösung ergibt für verschiedene Parameter viele unterschiedliche Formen, die sich zum Teil auch in der Natur wiederfinden. Die volle 3D-Berechnung war zu dieser Zeit wegen der zu geringen Rechenleistung der Computer nicht möglich. Mit der Verfügbarkeit leistungstärkerer Computer können heute auch dreidimensionale Oberflächen durch direkte Energieminimierung gefunden werden. Gegenstand dieser Arbeit ist primär die dreidimensionale Modellierung, welche zur Überprüfung durch axialsymmetrische Formen ergänzt wird.

Die spontane Krümmung, das Volumen und die Fläche bestimmen im axialsymmetrischen Fall eindeutig die Form [7]. Deshalb fixiert man für eine dreidimensionale Berechnung H_0 und evolviert eine geschlossene Startoberfläche so, dass Fläche und Volumen konstant bleiben und die Biegeenergie kleiner wird. Um die Normalengeschwindigkeit, den sogenannten Gradientenfluss, für eine solche Evolution zu erhalten, berechnet man die erste Variation der gesamten freien Energie und stellt sie in der Form

$$\delta_{\phi\nu}\mathcal{F} = - \int_{\Gamma} \phi v_{\nu} dS$$

dar. Wird die Oberfläche mit der Geschwindigkeit $\phi = v_{\nu}$ in Normalenrichtung bewegt, ist die Variation immer nicht positiv, das heißt die Energie kann nicht steigen.

Es müssen also die Oberflächen $\Gamma(t)$ gefunden werden, die folgendes Anfangswertproblem lösen

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = v_{\nu}(\mathbf{X})\nu(\mathbf{X}) \quad , \quad \mathbf{X}(\Omega, 0) = \Gamma_0 ,$$

wobei $\mathbf{X} : \Omega \times [0, t^*] \rightarrow \Gamma(t)$ mit $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ die Parametrisierung und t^* der Zeitpunkt, zu dem die Evolution gestoppt wird, und einer gegebenen Anfangsoberfläche Γ_0 .

Um Flächen- und Volumenerhaltung zu gewährleisten, werden λ und μ als zeitabhängige Lagrange-Multiplikatoren verwendet. Ihre Werte erhält man aus der Bedingung, dass ihre Zeitableitung verschwindet:

$$\frac{dV}{dt} = \int_{\Gamma} v_{\nu} dS = 0 \quad \text{und} \quad \frac{dA}{dt} = \int_{\Gamma} H v_{\nu} dS = 0 .$$

Der anspruchsvollste Teil des Helfrich-Funktional ist das Willmore-Funktional

$$F_w = \frac{1}{2} \int_{\Gamma} H^2 dS .$$

Durch Variation erhält man als Geschwindigkeit für die Oberflächenevolution zu seiner Minimierung

$$v_w = - \left(\Delta_{\Gamma} H + \frac{1}{2} H^3 - 2KH \right) .$$

Es wird also der Laplace-Beltrami-Operator Δ_Γ auf die mittlere Krümmung, die selbst wiederum der Laplace-Beltrami-Operator der Parametrisierung ist,

$$H = \Delta_\Gamma \mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\nu},$$

angewendet. Man erhält somit eine Differentialgleichung vierter Ordnung. Die Gleichung $v_w = 0$ wurde bereits 1923 als Bedingung dafür, dass das Willmore-Funktional stationär ist, aufgestellt [34]. Die geometrischen Eigenschaften untersuchte dann Willmore 1993 [37]. Ein Beweis für die Existenz einer Lösung wurde 2004 gefunden [19]. Erste Versuche zur numerischen Lösung des Willmore-Fluss-Problems wurden 1997 mit der Software "surface evolver" von Brakke durchgeführt [14]. 2002 wurden mit Finiten Differenzen approximative axialsymmetrische Lösungen gefunden [21]. Einige Jahre später wurde in [4], [5] und [12] der mittlere Krümmungsvektor $\mathbf{Y} = H\boldsymbol{\nu}$ als zusätzliche Hilfsvariable zur Minimierung des Willmore-Funktional auf parametrisierten Oberflächen eingeführt. Man erhält ein Differentialgleichungssystem aus zwei Gleichungen zweiter Ordnung. In schwacher Formulierung enthält das System nur noch tangentielle Ableitungen erster Ordnung. Für eine semi-implizite Zeitdiskretisierung erhält man ein lineares Gleichungssystem. Eine andere Möglichkeit zur numerischen Berechnung des Willmore-Flusses als mit parametrisierten Oberflächen ist die Level-Set-Methode [10], bei der die Oberfläche als Nullstellenfunktion einer auf ganz \mathbb{R}^3 definierten Funktion beschrieben wird. In dieser Arbeit wird die Methode mit der zusätzlichen Hilfsvariablen für parametrisierte Oberflächen nach [12] angewendet.

Eine weitere Anwendung der Minimierung der Willmore-Evolution ist die Glättung von Oberflächen, denn sie hat die Eigenschaft, Ecken und Kanten abzurunden [36].

Um die Evolution einer gegebenen Oberfläche Γ_0 zu approximieren, werden diskrete Oberflächen Γ_h^m , $m \geq 0$, konstruiert. Die erste diskrete Oberfläche wird durch eine konforme Triangulierung von N_K Punkten $\{\mathbf{P}_i\}_{i=1}^{N_K} \subset \Gamma_0$ beschrieben,

$$\Gamma_h^0 = \bigcup_{j=1}^{N_D} \bar{T}_j,$$

wobei die T_j offene Dreiecke sind, die aus den Knoten \mathbf{P}_i gebildet werden. Die Triangulierung liefert eine stückweise lineare Parametrisierung der Oberfläche Γ_h^0 . Einsetzen dieses Ansatzes in das System führt zu einem linearen System, dessen Lösung die Änderung der Knotenpositionen bestimmt. Eine Folge von solchen Änderungen approximiert die Evolution, das heißt man erhält Parametrisierungen \mathbf{X}^m der triangulierten Oberflächen Γ_h^m .

Um das gesamte Helfrich-Funktional zu minimieren, benötigt man zusätzlich zur Willmore-Geschwindigkeit weitere Terme: In [5] wird ein Verfahren zur Berechnung der Evolution mit mittlerer Krümmung vorgestellt. Des Weiteren wird die Gauß-Krümmung benötigt. Eine Methode zu ihrer approximativen Berechnung findet man in [16]. Hier wird von der zweiten Fundamentalform ausgegangen. In [22] wird die Gauß-Krümmung in einem Punkt berechnet, indem man die Winkel der ihn umgebenden Dreiecke der Diskretisierung verwendet. Für den Kontaktterm wird der Abstand jedes Knotens der Oberflächendiskretisierung zum Kontaktobjekt berechnet.

1. Überblick

Eine sich von der vorher vorgestellten Methode stark unterscheidende Herangehensweise ist in der diskreten Differentialgeometrie angesiedelt [36]. Dabei wird nicht zunächst die Variation der Energie berechnet, um sie dann zu diskretisieren, sondern es wird direkt die Oberfläche trianguliert und danach die diskrete Energie definiert, die dann minimiert wird. Für die Näherung von geometrischen Größen werden sie vor der Diskretisierung in einer Form dargestellt, die auch für diskrete Oberflächen als Definition verwendet werden kann. So wird zum Beispiel die Gauß-Krümmung im Punkt \mathbf{P} über

$$K(\mathbf{P}) = \lim_{\text{diam}(A(\mathbf{P})) \rightarrow 0} \frac{A(\text{Bild}(\boldsymbol{\nu}_{A(\mathbf{P})}))}{A(\mathbf{P})}$$

definiert, wobei $A(\mathbf{P})$ eine infinitesimale Fläche um \mathbf{P} ist und $A(\text{Bild}(\boldsymbol{\nu}_{A(\mathbf{P})}))$ die Fläche des Bildes des Normalenvektors zur Fläche $A(\mathbf{P})$ ist. Die durchschnittliche Gauß-Krümmung

$$\frac{1}{A(\mathbf{P})} \int_{A(\mathbf{P})} K \, dS$$

konvergiert für Triangulierungen, die die ursprüngliche Oberfläche gut approximieren, gegen die exakte durchschnittliche Gauß-Krümmung. Im diskreten Fall kann mit Hilfe des Gauß-Bonnet-Theorems das Integral über die Gauß-Krümmung berechnet werden und man erhält für die Gauß-Krümmung im Knoten \mathbf{P}_j

$$K(\mathbf{P}_j) \approx \left(\sum_{i(\mathbf{P}_j)=1}^{N_D(\mathbf{P}_j)} A_{i(\mathbf{P}_j)} \right)^{-1} \left(2\pi - \sum_{i(\mathbf{P}_j)=1}^{N_D(\mathbf{P}_j)} \theta_{i(\mathbf{P}_j)} \right)$$

mit den Flächen $A_{i(\mathbf{P}_j)}$ der $N_D(\mathbf{P}_j)$ Dreiecke um \mathbf{P}_j und den Winkeln $\theta_{i(\mathbf{P}_j)}$ der Dreiecke in \mathbf{P}_j . Diese Approximation der Gauß-Krümmung wird auch in der vorliegenden Arbeit verwendet.

In dieser Arbeit werden numerische Methoden zur approximativen Bestimmung der stationären Punkte des Helfrich-Funktional mit Flächen- und Volumenerhaltung und Kontakt mit einem oder mehreren Objekten wie zum Beispiel einer Glasfläche oder Mikrofasern (siehe auch Abbildungen 2.2 und 2.3 aus dem folgenden Kapitel) entwickelt. In Kapitel 2 werden die den numerischen Simulationen zugrundeliegenden physikalischen Experimente vorgestellt und die Modelle beschrieben. Außerdem werden die benötigten mathematischen Grundlagen aus den Gebieten der Differentialgeometrie, der Variationsrechnung und der Numerik von Differentialgleichungen beschrieben. Zur Bestimmung der Minimierungsgeschwindigkeit wird die Variation in Kapitel 3 angewendet. In Kapitel 4 wird hergeleitet, wie die neuen Formen bestimmt werden, unter Verwendung der Techniken aus [5], [12] und [22] zur Minimierung des Willmore-Funktional, des Flächenfunktional und zur Berechnung der Gauß-Krümmung. Bei der Evolution können die Triangulierungen entarten, deshalb wird in Kapitel 5 eine Möglichkeit zur Verringerung dieser Entartung besprochen. Da keine analytische Überprüfung der numerischen Ergebnisse möglich ist, wird in Kapitel 6 zum Vergleich die axialsymmetrische Vorgehensweise nach [27] hergeleitet. Im darauffolgenden Kapitel 7 werden numerische Beispiele gezeigt. Im Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen kann man sehen, dass diskozyten- und stomatozytenförmige Oberflächen gefunden werden können. Außerdem kann die runde Form beim Kontakt mit einem Objektträger reproduziert werden. Als Beispiel eines nicht axialsymmetrischen Falles, welcher

nur in einer vollen dreidimensionalen Berechnung behandelt werden kann, wird der Kontakt mit Mikrofasern numerisch simuliert. Die anderen Beispiele liefern für dreidimensionale und axialsymmetrische Berechnungen übereinstimmende Ergebnisse. Schließlich wird in Kapitel 8 noch eine Zusammenfassung der Arbeit gegeben.

Ziel dieser Arbeit ist es, die dreidimensionalen Modellierungen der Form von roten Blutkörperchen ohne und mit Kontakt mit Objekten durchzuführen, die Resultate anhand der bekannten axialsymmetrischen Ergebnisse zu überprüfen und neue, nicht axialsymmetrische Formen zu erhalten.

2. Einleitung

In diesem Kapitel werden die Beobachtungen aus physikalischen Experimenten, die die Motivation dieser Arbeit darstellen, beschrieben und die Modelle für freie rote Blutkörperchen und für den Kontakt mit Hindernissen vorgestellt. Zudem werden die benötigten Begriffe aus der Differentialgeometrie definiert und erklärt, wie man mit Hilfe der Variation das Energiefunktional, das zur Modellierung verwendet wird, minimiert. Für die numerische Lösung wird die Methode der finiten Elemente vorgestellt sowie die Oberflächen- und Zeitdiskretisierung beschrieben.

2.1. Physikalische und biologische Experimente

Die verschiedenen Formen, die ein Erythrozyt annehmen kann, sind in Abbildung 2.1 gezeigt. Die natürliche Form ist eine bikonkave Scheibe (Diskozyt). Aber Erythrozyten sind sehr flexibel, sodass sie sich durch engste Kapillaren hindurchzwängen können, auch wenn deren Durchmesser kleiner ist als ihr eigener [13]. In diesem Fall nehmen sie eine Becherform an (Stomatozyt). Im Labor oder in Krankheitsfällen sind weitere Formen möglich, zum Beispiel bei Austrocknung oder Vergiftungen können sie stechapfelförmig werden (Echinozyt). Unter bestimmten Voraussetzungen, zum Beispiel durch Aufnahme von zu viel Wasser, können sie auch Kugelform annehmen (Sphärozyt).

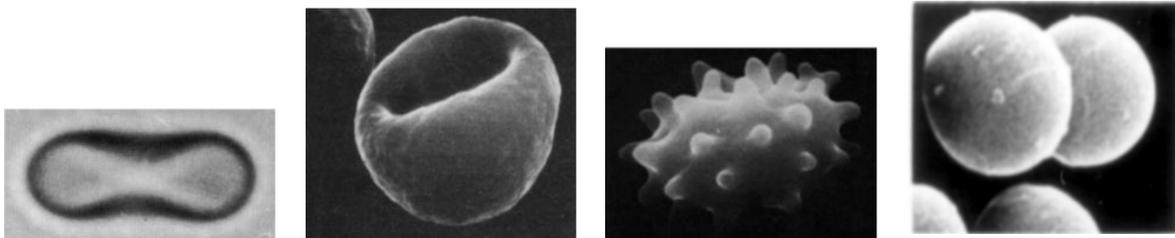


Abbildung 2.1.: Lichtmikroskop-Bilder der verschiedenen Formen eines Erythrozyten. Von links nach rechts: Diskozyt [20], Stomatozyt [20], Echinozyt [20], Sphärozyt [8].

Durch Interaktion mit einer speziellen Glasoberfläche wie zum Beispiel einem Objektträger in einem Mikroskop ändern Erythrozyten ihre Form und werden rund (siehe Abbildung 2.2). Die Änderung geschieht dabei sehr schnell beim Kontakt mit der Oberfläche.

2. Einleitung

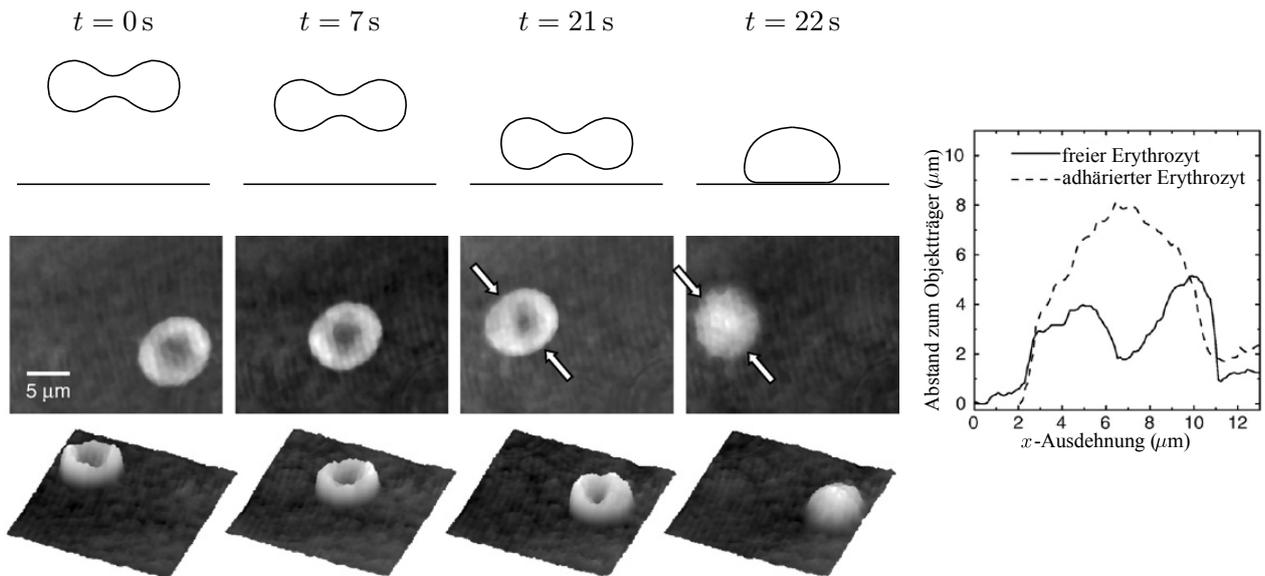


Abbildung 2.2.: Digital-holographische Mikroskopie-Bilder der Formänderung eines Erythrozyten bei Interaktion mit einer Glasoberfläche [1].

Ein Netz aus speziellen Mikrofasern bildet eine gute Grundlage zur Zellvermehrung. Dies wird zum Beispiel zur Wiederherstellung von verbrannter Haut genutzt. In Abbildung 2.3 wird die Interaktion eines Erythrozyten mit solchen Mikrofasern gezeigt.

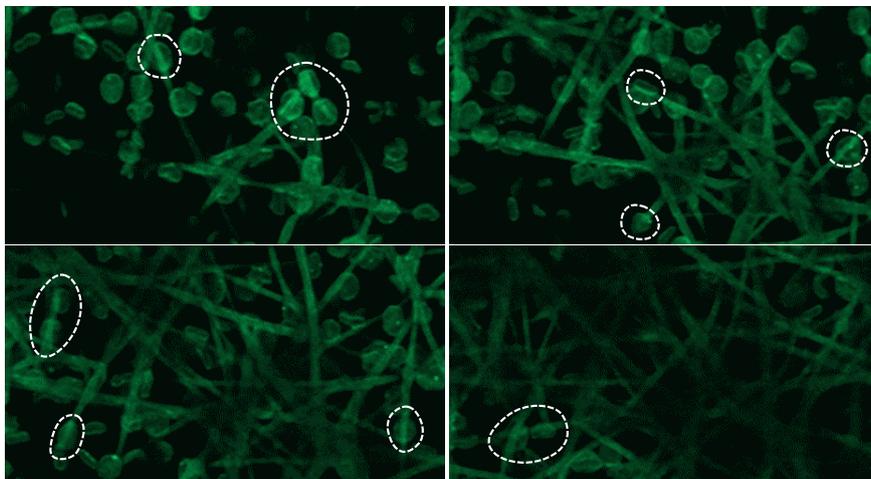


Abbildung 2.3.: Konfokal-Mikroskopie-Bilder von Erythrozyten in einem PU-Faser-Netzwerk [15].

Erythrozyten können bei geringer Fließgeschwindigkeit des Blutes Rouleaus bilden (siehe Abbildung 2.4). Im Blutkreislauf werden diese durch die Scherkräfte des fließenden Blutes schnell wieder aufgelöst, während sie im Labor häufiger zu beobachten sind.

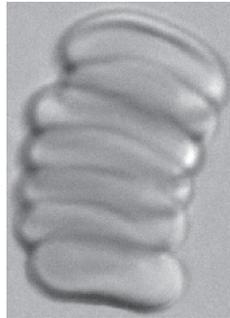


Abbildung 2.4.: Rouleau-Bildung [31].

Experimentell wird die Adhäsion zwischen den Erythrozyten wie folgt untersucht [31]: Ein Erythrozyt wird auf ein Substrat gegeben, woran er haftet, ein weiterer wird an einen Cantilever geklebt, welcher in einem Winkel von 11° (aus technischen Gründen) auf den ersten Erythrozyten abgesenkt wird bis zur Berührung. Beim anschließenden Auseinanderziehen wird die Kraft gemessen. Dabei stellt man fest, dass die Interaktionslängen bis zum Zehnfachen der Dicke eines Erythrozyten betragen. In Abbildung 2.5 sieht man den Aufbau und die Kraftmessung. Im Experiment kann die Form der Erythrozyten nicht beobachtet werden.

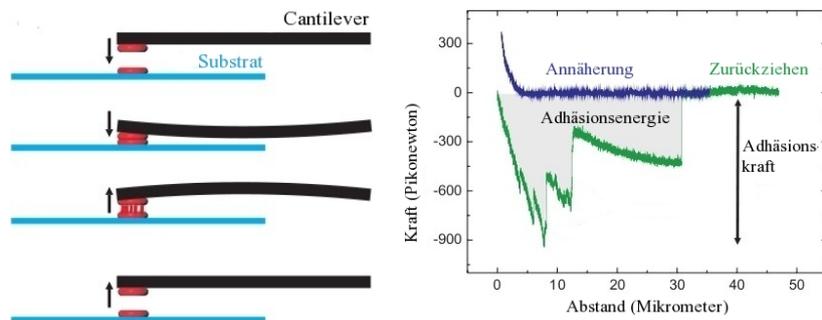


Abbildung 2.5.: Experiment zur Interaktion zweier Erythrozyten. Links: schematische Darstellung, rechts: gemessene Kraft in Abhängigkeit vom Abstand [31].

2. Einleitung

2.2. Das Modell

Die roten Blutkörperchen werden über ihre Membran modelliert. Da diese sehr dünn ist, wird sie als eine geschlossene zweidimensionale Oberfläche Γ dargestellt. Ihre Biegeenergie lautet

$$F_b = \frac{k_c}{2} F_h + \frac{k_g}{2} F_K$$

mit den Biegemodulen k_c und k_g [6]. Der erste Term,

$$F_h = \int_{\Gamma} (H - H_0)^2 dS,$$

ist das Helfrich-Funktional mit der doppelten mittleren Krümmung H und der spontanen Krümmung H_0 und der zweite Term ist das Integral

$$F_K = \int_{\Gamma} K dS.$$

Die Biegeenergie ist im Gleichgewichtszustand minimal.

Der Kontakt der Erythrozyten mit anderen Objekten wird durch das Energiefunktional

$$F_k = W_0 \int_{\Gamma} W(|\mathbf{r}|) dS \tag{2.1}$$

mit der Adhäsionsstärke W_0 und dem Wechselwirkungspotential W , das vom Betrag des Abstandsvektors \mathbf{r} jedes Punktes der Oberfläche Γ zum Hindernis abhängt, beschrieben. Es wird als zusätzlicher Term zum Helfrich-Funktional dazuaddiert [32].

In Abbildung 2.6 ist ein Beispiel für ein Wechselwirkungspotential in Form eines Mie-Potentials mit den Exponenten 4 und 2 aufgetragen. Wenn der Abstand des Erythrozyten größer als d_0 vom Kontaktobjekt ist, wird er angezogen, bis er den Minimalabstand d_0 erreicht. Ist der Abstand kleiner, so entsteht eine abstoßende Kraft.

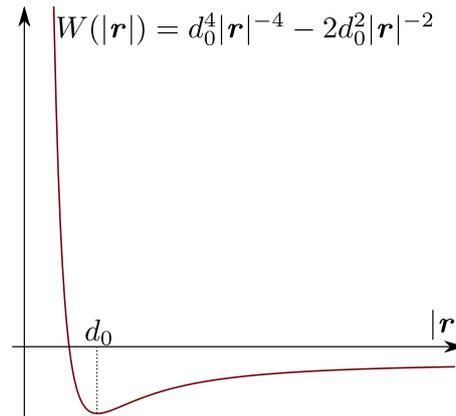


Abbildung 2.6.: Mie-Potential mit den Exponenten 4 und 2 als Beispiel eines Wechselwirkungspotentials für den Kontakt.

Ein Objektträger ist eine flache Glasscheibe, die wesentlich größer als der Erythrozyt ist. Deshalb kann man diesen als (unendlich große) Ebene ansehen. Dadurch lässt sich der Abstandsvektor eines Punktes auf der Oberfläche leicht durch Darstellung der Ebene in Parameterform berechnen.

Die Mikrofasern haben eine längliche Form mit näherungsweise kreisförmigem Querschnitt. Sie sind deutlich länger als der Durchmesser der Erythrozyten und werden deshalb als Zylinder angenommen. Die Achse eines Zylinders kann durch eine Geradengleichung parametrisiert werden, sodass man den Abstand zum Zylinder entsprechend des um den Radius skalierten Abstandsvektors zur Gerade bestimmen kann.

Im Experiment zur Untersuchung der Adhäsion zwischen zwei Erythrozyten wird für den Kontakt der Erythrozyten untereinander ebenfalls das Kontakt-Funktional (2.1) verwendet, hier beschreibt \mathbf{r} in jedem Punkt der Oberfläche des einen Erythrozyten den Abstandsvektor zum zweiten Erythrozyten. Das rote Blutkörperchen wird mit einem sehr starken Kleber am Cantilever fixiert, sodass es im Gegensatz zum Kontakt mit einem Objektträger nicht auf ihm rutschen kann. Deshalb wird der Cantilever als Kreisscheibe modelliert. Dann kann der Abstandsvektor ähnlich wie bei der Ebene beziehungsweise beim Zylinder berechnet werden.

Die Oberfläche und das Volumen des Erythrozyten hängen von der Oberflächentension und dem Druckunterschied zwischen Innerem und Äußerem ab. Sie gehen in Form von folgenden Zusatztermen zur freien Energie ein:

$$F_{A,V} = \lambda A + \mu V$$

mit der Oberflächentension λ , dem osmotischen Druck μ , der Fläche A und dem Volumen V [6]. Diese sind jedoch nicht bekannt, stattdessen werden eine Fläche und ein Volumen vorgegeben und während der Evolution erhalten. Dabei werden λ und μ als zeitabhängige Lagrange-Parameter verwendet. Man

2. Einleitung

erhält sie aus der Bedingung, dass ihre Zeitableitung verschwindet:

$$\frac{dV}{dt} = \int_{\Gamma} v_{\nu} dS = 0 \quad \text{und} \quad \frac{dA}{dt} = \int_{\Gamma} H v_{\nu} dS = 0,$$

wobei v_{ν} die Normalengeschwindigkeit ist.

Bei der üblichen Verwendung von Lagrange-Multiplikatoren würde man

$$F_{A,V} = \lambda(A - A_0) + \mu(V - V_0)$$

mit der Anfangsfläche A_0 und dem Anfangsvolumen V_0 schreiben. Doch bei der Variation ergibt sich kein Unterschied zu obiger Form, da die konstanten Terme wegfallen. Aufgrund der physikalischen Interpretation als Oberflächentension und osmotischer Druck hat sich die Darstellung ohne die Anfangswerte etabliert.

2.3. Differentialgeometrische Grundlagen

Alle Berechnungen werden auf einer Oberfläche Γ durchgeführt. Dabei spielt ihre Krümmung eine zentrale Rolle, deshalb müssen zunächst die differentialgeometrischen Grundlagen eingeführt werden. Dieser Abschnitt beruht auf [11], [12], [18] und [30].

Definition 2.1. *Eine Kurve ist eine stetig differenzierbare Immersion, die von einem Intervall in den Raum \mathbb{R}^3 abbildet. Die Differenzierbarkeit der Kurve ist durch die Differenzierbarkeit der Immersion gegeben.*

Definition 2.2. $\Gamma \subset \mathbb{R}^3$ heißt eine zweidimensionale C^p -Untermannigfaltigkeit von \mathbb{R}^3 , $p \geq 1$, wenn für jeden Punkt $\mathbf{P} \in \Gamma$ offene Mengen $U_1, U_2 \subset \mathbb{R}^3$ mit $\mathbf{P} \in U_1$, $\mathbf{0} \in U_2$ und ein C^p -Diffeomorphismus $\psi : U_1 \rightarrow U_2$ existieren, sodass $\psi(\mathbf{P}) = \mathbf{0}$ und $\psi(\Gamma \cap U_1) = U_2 \cap \mathbb{R}^2$ ist.

Dabei wird der Unterraum von \mathbb{R}^3 , der aus den Punkten $(x, y, 0)^{\top}$ besteht, mit \mathbb{R}^2 identifiziert.

Es existieren daher lokale Repräsentationen

$$\psi : U_2 \cap \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad \psi(U_2 \cap \mathbb{R}^2) = \Gamma \cap U_1, \quad \psi(\mathbf{0}) = \mathbf{P},$$

sodass die Vektoren

$$\frac{\partial \psi}{\partial x}(\mathbf{0}) \quad \text{und} \quad \frac{\partial \psi}{\partial y}(\mathbf{0})$$

linear unabhängig sind.

Im Folgenden sei Γ eine zweidimensionale C^p -Untermannigfaltigkeit mit $p \geq 2$.

Definition 2.3. *Der Tangentialraum $T_{\mathbf{P}}\Gamma$ von Γ in \mathbf{P} ist der aus den Vektoren $\boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^3$ bestehende Unterraum von \mathbb{R}^3 , sodass $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\gamma}'(0)$ für eine C^1 -Kurve $\boldsymbol{\gamma} : (-1, 1) \rightarrow \mathbb{R}^3$ gilt mit $\boldsymbol{\gamma}((-1, 1)) \subset \Gamma$ und $\boldsymbol{\gamma}(0) = \mathbf{P}$.*

$T_{\mathbf{P}}\Gamma$ hat eine Basis

$$\left\{ \frac{\partial \psi}{\partial x}(\mathbf{0}), \frac{\partial \psi}{\partial y}(\mathbf{0}) \right\}$$

für eine lokale Repräsentation ψ wie oben.

Definition 2.4. Sei $\mathbf{P} \in \Gamma$ und $f : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$. Für $\boldsymbol{\tau} \in T_{\mathbf{P}}\Gamma$ ist die Richtungsableitung $D_{\boldsymbol{\tau}}f \in \mathbb{R}$ definiert als

$$D_{\boldsymbol{\tau}}f = \frac{d}{ds}f(\boldsymbol{\gamma}(s))\Big|_{s=0}$$

für eine C^1 -Kurve $\boldsymbol{\gamma} : (-1, 1) \rightarrow \Gamma$ mit $\boldsymbol{\gamma}(0) = \mathbf{P}$, $\boldsymbol{\gamma}'(0) = \boldsymbol{\tau}$.

Diese Definition ist unabhängig von der Wahl der Kurve $\boldsymbol{\gamma}$.

Definition 2.5. Für eine reellwertige Funktion $f : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ ist der Oberflächengradient definiert als

$$\text{grad}_{\Gamma}(f) = \sum_{\alpha=1}^2 (D_{\boldsymbol{\tau}_{\alpha}}f)\boldsymbol{\tau}_{\alpha}$$

für jede Orthonormalbasis $\boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2$ von $T_{\mathbf{P}}\Gamma$.

Definition 2.6. Für ein Vektorfeld $\mathbf{f} = (\mathbf{f}^1, \mathbf{f}^2, \mathbf{f}^3)^{\top} : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^3$ ist die Divergenz definiert als

$$\text{div}_{\Gamma}(\mathbf{f}) = \sum_{l=1}^3 \mathbf{e}_l \cdot \text{grad}_{\Gamma}(\mathbf{f}^l),$$

wobei \mathbf{e}_l , $l = 1, 2, 3$, die Standardbasis-Vektoren in \mathbb{R}^3 sind.

„ \cdot “ bezeichnet dabei das Euklidische Skalarprodukt.

Es ergibt sich:

$$\text{div}_{\Gamma}(\mathbf{f}) = \sum_{l=1}^3 \mathbf{e}_l \cdot \text{grad}_{\Gamma}(\mathbf{f}^l) = \sum_{l=1}^3 \mathbf{e}_l \cdot \left(\sum_{\alpha=1}^2 (D_{\boldsymbol{\tau}_{\alpha}}\mathbf{f}^l)\boldsymbol{\tau}_{\alpha} \right) = \sum_{\alpha=1}^2 (D_{\boldsymbol{\tau}_{\alpha}}\mathbf{f}) \cdot \boldsymbol{\tau}_{\alpha}.$$

Definition 2.7. Der Laplace-Beltrami-Operator von $f : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ ist definiert als

$$\Delta_{\Gamma}f = \text{div}_{\Gamma}(\text{grad}_{\Gamma}(f)).$$

Setzt man die Definitionen von Divergenz und Gradient ein, ergibt sich:

$$\Delta_{\Gamma}f = \text{div}_{\Gamma}(\text{grad}_{\Gamma}(f)) = \sum_{\alpha=1}^2 \left(D_{\boldsymbol{\tau}_{\alpha}} \left(\sum_{\beta=1}^2 (D_{\boldsymbol{\tau}_{\beta}}f)\boldsymbol{\tau}_{\beta} \right) \right) \cdot \boldsymbol{\tau}_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^2 D_{\boldsymbol{\tau}_{\alpha}}^2 f.$$

Definition 2.8. Ein parametrisiertes Flächenstück ist eine Immersion $\mathbf{X} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ auf einem offenen Parametergebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. Man kann eine Untermannigfaltigkeit Γ von \mathbb{R}^3 lokal auch als Bild einer solchen Immersion, deren Jacobi-Matrix Rang 2 hat, beschreiben. \mathbf{X} heißt dann (reguläre) lokale Parametrisierung.

2. Einleitung

Im Folgenden werden, soweit nicht anders vermerkt, Ableitungen nach ξ_1, ξ_2 , wobei $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2)^\top \in \Omega$ ist, mit einem Index unten und Vektorkomponenten mit einem Index oben gekennzeichnet. Ableitungen im \mathbb{R}^3 werden wie gewohnt durch $\partial_l, l = 1, 2, 3$, dargestellt.

Die Ableitungen der Parametrisierung \mathbf{X}_1 und \mathbf{X}_2 im Punkt $\mathbf{P} \in \Gamma$ sind linear unabhängig und stellen eine Basis des Tangentialraumes $T_{\mathbf{P}}\Gamma$ dar.

Die wenigsten Oberflächen können global parametrisiert werden. Daher ist Γ zusammengesetzt aus Teiloberflächen,

$$\Gamma = \bigcup_j \bar{\Gamma}_j,$$

die lokal parametrisiert sind. So bezeichnet auch im Folgenden \mathbf{X} immer eine lokale Parametrisierung. Die lokalen Parametrisierungen seien dabei so, dass Γ unendlich glatt ist, auch an den Übergängen zwischen den Γ_j .

Definition 2.9. Eine zweidimensionale Untermannigfaltigkeit Γ heißt orientierbar, wenn es ein stetiges Einheitsnormalenfeld $\boldsymbol{\nu}$ auf Γ gibt, also eine global definierte stetige Zuordnung

$$\mathbf{P} \mapsto (\mathbf{P}, \boldsymbol{\nu}(\mathbf{P})) \in \perp_{\mathbf{P}}\Gamma, \quad \mathbf{P} \in \Gamma.$$

Die Gerade $\perp_{\mathbf{P}}\Gamma$ enthält dabei die Vektoren, die senkrecht auf Γ stehen. In lokalen Koordinaten ist der Normalenvektor

$$\boldsymbol{\nu} = \pm \frac{\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|}.$$

Hier wird das positive Vorzeichen gewählt, sodass bei einer geschlossenen Oberfläche $\boldsymbol{\nu}$ nach außen zeigt.

Definition 2.10. Die erste Fundamentalform $I : T_{\mathbf{P}}\Gamma \times T_{\mathbf{P}}\Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ ist die Einschränkung des Skalarprodukts auf alle Tangentialräume, also

$$I(\boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2) = \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2$$

für Tangentialvektoren $\boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2 \in T_{\mathbf{P}}\Gamma$. In lokalen Koordinaten wird die erste Fundamentalform durch die Matrix

$$g = (g_{\alpha\beta}) \in \mathbb{R}^{2 \times 2} \quad \text{mit} \quad g_{\alpha\beta} = \mathbf{X}_\alpha \cdot \mathbf{X}_\beta, \quad \alpha, \beta = 1, 2$$

beschrieben. g heißt metrischer Tensor.

Die obigen Definitionen der Differentialoperatoren sind unabhängig von der Parametrisierung der Oberfläche. Für praktische Zwecke jedoch, also um sie konkret berechnen zu können, ist es nützlicher, sie in lokalen Koordinaten auszudrücken:

$$\begin{aligned} \text{grad}_\Gamma(f) &= \sum_{\alpha, \beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{X}_\alpha f_\beta, \\ \text{div}_\Gamma(\mathbf{f}) &= \sum_{\alpha, \beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (\mathbf{X}_\alpha \cdot \mathbf{f}_\beta). \end{aligned}$$

Der Laplace-Beltrami-Operator als Hintereinanderausführung von Gradient und Divergenz ist damit

$$\begin{aligned}\Delta_{\Gamma} f &= \operatorname{div}_{\Gamma}(\operatorname{grad}_{\Gamma}(f)) = \sum_{\gamma, \delta=1}^2 (g^{-1})_{\gamma\delta} \mathbf{X}_{\gamma} \cdot \left(\sum_{\alpha, \beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} f_{\beta} \mathbf{X}_{\alpha} \right)_{\delta} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\det(g)}} \sum_{\alpha, \beta=1}^2 \left(\sqrt{\det(g)} (g^{-1})_{\alpha\beta} f_{\beta} \right)_{\alpha}.\end{aligned}$$

Definition 2.11. Die Günter-Ableitungen sind die Richtungsableitungen entlang der orthogonalen Projektionen der Standardbasis-Vektoren \mathbf{e}_l in den Tangentialraum von Γ , also

$$\mathcal{D}_l = \partial_l - \boldsymbol{\nu}^l \partial_{\boldsymbol{\nu}} = \partial_l - \boldsymbol{\nu}^l (\boldsymbol{\nu} \cdot \nabla), \quad l = 1, 2, 3.$$

Dabei ist $\partial_{\boldsymbol{\nu}} = \boldsymbol{\nu} \cdot \nabla$ die Normalenableitung und $\nabla = (\partial_1, \partial_2, \partial_3)^{\top}$ der übliche dreidimensionale Nabla-Operator.

Die Günter-Ableitungen sind Differentialoperatoren der Ordnung eins auf einer Umgebung $\tilde{\Gamma}$ von Γ in \mathbb{R}^3 . Sie sind linear abhängig, da die Tangentialoberfläche nur zweidimensional ist. Es gilt

$$\sum_{l=1}^3 \boldsymbol{\nu}^l \mathcal{D}_l = 0.$$

Die Ableitungen ∂_l sind für Funktionen auf Γ nicht definiert. Nimmt man eine Funktion \tilde{f} auf $\tilde{\Gamma}$, so kann man eine Funktion $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$f(\xi_1, \xi_2) = \tilde{f}(\mathbf{X}^1(\xi_1, \xi_2), \mathbf{X}^2(\xi_1, \xi_2), \mathbf{X}^3(\xi_1, \xi_2)), \quad \boldsymbol{\xi} \in \Omega,$$

definieren.

Der Gradient von f ist mit der Graßmann-Identität und der Cramerschen Regel für g^{-1}

$$\operatorname{grad}_{\Gamma}(f) = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} f_{\beta} \mathbf{X}_{\alpha} = \frac{\boldsymbol{\nu}}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|} \times (\mathbf{X}_1 f_2 - \mathbf{X}_2 f_1) = \frac{\boldsymbol{\nu}}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|} \times \begin{pmatrix} f_2 \mathbf{X}_1^1 - f_1 \mathbf{X}_2^1 \\ f_2 \mathbf{X}_1^2 - f_1 \mathbf{X}_2^2 \\ f_2 \mathbf{X}_1^3 - f_1 \mathbf{X}_2^3 \end{pmatrix}.$$

Es gilt

$$\begin{aligned}f_1 &= \mathbf{X}_1^1 \partial_1 \tilde{f} + \mathbf{X}_1^2 \partial_2 \tilde{f} + \mathbf{X}_1^3 \partial_3 \tilde{f}, \\ f_2 &= \mathbf{X}_2^1 \partial_1 \tilde{f} + \mathbf{X}_2^2 \partial_2 \tilde{f} + \mathbf{X}_2^3 \partial_3 \tilde{f}.\end{aligned}\tag{2.2}$$

2. Einleitung

Dies wird in den Gradienten eingesetzt:

$$\begin{aligned}
\text{grad}_\Gamma(\tilde{f}|_\Gamma) &= \frac{\boldsymbol{\nu}}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|} \times \begin{pmatrix} (\mathbf{X}_1^1 \mathbf{X}_2^2 - \mathbf{X}_2^1 \mathbf{X}_1^2) \partial_2 \tilde{f} + (\mathbf{X}_1^1 \mathbf{X}_2^3 - \mathbf{X}_2^1 \mathbf{X}_1^3) \partial_3 \tilde{f} \\ (\mathbf{X}_2^1 \mathbf{X}_1^2 - \mathbf{X}_1^1 \mathbf{X}_2^2) \partial_1 \tilde{f} + (\mathbf{X}_1^2 \mathbf{X}_2^3 - \mathbf{X}_2^2 \mathbf{X}_1^3) \partial_3 \tilde{f} \\ (\mathbf{X}_2^1 \mathbf{X}_1^3 - \mathbf{X}_1^1 \mathbf{X}_2^3) \partial_1 \tilde{f} + (\mathbf{X}_2^2 \mathbf{X}_1^3 - \mathbf{X}_1^2 \mathbf{X}_2^3) \partial_2 \tilde{f} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|^2} \begin{pmatrix} ((\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^2)^2 \partial_1 \tilde{f} - (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^1 (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^3 \partial_3 \tilde{f} \\ ((\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^3)^2 \partial_2 \tilde{f} - (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^1 (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^2 \partial_1 \tilde{f} \\ ((\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^1)^2 \partial_3 \tilde{f} - (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^2 (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^3 \partial_2 \tilde{f} \end{pmatrix} \\
&\quad - \frac{1}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|^2} \begin{pmatrix} (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^1 (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^2 \partial_2 \tilde{f} - ((\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^3)^2 \partial_1 \tilde{f} \\ (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^2 (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^3 \partial_3 \tilde{f} - ((\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^1)^2 \partial_2 \tilde{f} \\ (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^1 (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^3 \partial_1 \tilde{f} - ((\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^2)^2 \partial_3 \tilde{f} \end{pmatrix} \\
&= \nabla \tilde{f} - \boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{\nu} \cdot \nabla \tilde{f}) = (\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2, \mathcal{D}_3)^\top \tilde{f}.
\end{aligned}$$

Die Günter-Ableitungen lassen sich also als tangentielle Ableitungen ausdrücken,

$$\mathcal{D}_l f = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} f_\beta \mathbf{X}_\alpha^l, \quad l = 1, 2, 3.$$

Damit sind die Günter-Ableitungen auch für Funktionen auf Γ definiert.

Genauso kann man bei der Divergenz eines Vektorfeldes $\tilde{\mathbf{f}}$, das auf $\tilde{\Gamma}$ mit $\tilde{\mathbf{f}}|_\Gamma = \mathbf{f}$ definiert ist, vorgehen: Mit der Lagrange-Identität erhält man

$$\begin{aligned}
\text{div}_\Gamma(\mathbf{f}(\xi_1, \xi_2)) &= \sum_{\alpha, \beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (\mathbf{X}_\alpha \cdot \mathbf{f}_\beta) = \frac{\boldsymbol{\nu}}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|} \cdot (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{f}_2 - \mathbf{X}_2 \times \mathbf{f}_1) \quad (2.3) \\
&= \frac{\boldsymbol{\nu}}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|^2} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{f}_2^3 \mathbf{X}_1^2 - \mathbf{f}_1^3 \mathbf{X}_2^2 - \mathbf{f}_2^2 \mathbf{X}_1^3 + \mathbf{f}_1^2 \mathbf{X}_2^3 \\ \mathbf{f}_2^1 \mathbf{X}_1^3 - \mathbf{f}_1^1 \mathbf{X}_2^3 - \mathbf{f}_2^3 \mathbf{X}_1^1 + \mathbf{f}_1^3 \mathbf{X}_2^1 \\ \mathbf{f}_2^2 \mathbf{X}_1^1 - \mathbf{f}_1^2 \mathbf{X}_2^1 - \mathbf{f}_2^1 \mathbf{X}_1^2 + \mathbf{f}_1^1 \mathbf{X}_2^2 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Hier setzt man wieder die Ableitungen (2.2) ein:

$$\begin{aligned}
\text{div}_\Gamma(\tilde{\mathbf{f}}|_\Gamma) &= \frac{\boldsymbol{\nu}}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|} \cdot \begin{pmatrix} (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^1 \partial_2 \tilde{\mathbf{f}}^2 - (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^2 \partial_1 \tilde{\mathbf{f}}^2 \\ (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^2 \partial_1 \tilde{\mathbf{f}}^1 - (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^1 \partial_2 \tilde{\mathbf{f}}^1 \\ (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^3 \partial_1 \tilde{\mathbf{f}}^1 - (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^1 \partial_3 \tilde{\mathbf{f}}^1 \end{pmatrix} \\
&\quad + \frac{\boldsymbol{\nu}}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|} \cdot \begin{pmatrix} (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^1 \partial_3 \tilde{\mathbf{f}}^3 - (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^3 \partial_1 \tilde{\mathbf{f}}^3 \\ (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^2 \partial_3 \tilde{\mathbf{f}}^3 - (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^3 \partial_2 \tilde{\mathbf{f}}^3 \\ (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^3 \partial_2 \tilde{\mathbf{f}}^2 - (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^2 \partial_3 \tilde{\mathbf{f}}^2 \end{pmatrix} \\
&= \sum_{l=1}^3 \left(\partial_l \tilde{\mathbf{f}}^l - \boldsymbol{\nu}^l (\boldsymbol{\nu} \cdot \nabla \tilde{\mathbf{f}}^l) \right) = \sum_{l=1}^3 \mathcal{D}_l \tilde{\mathbf{f}}^l.
\end{aligned}$$

Der Laplace-Beltrami-Operator schließlich lässt sich ausdrücken als

$$\Delta_{\Gamma} \tilde{f}|_{\Gamma} = \sum_{l=1}^3 \mathcal{D}_l^2 \tilde{f}.$$

Die Differentialoperatoren haben also durch die Darstellung über die Günter-Ableitungen eine zum gewöhnlichen dreidimensionalen Fall analoge Form.

Definition 2.12. Für eine vektorwertige Funktion $\mathbf{f} : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^3$ ist die Matrix $\nabla_{\Gamma} \mathbf{f} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ definiert als

$$(\nabla_{\Gamma} \mathbf{f})_{kl} = \mathcal{D}_k \mathbf{f}^l, \quad k, l = 1, 2, 3.$$

Definition 2.13. Das Skalarprodukt zweier Matrizen F und G ist definiert als

$$F : G = \sum_{k,l=1}^3 F_{kl} G_{kl}.$$

Der Normalenvektor ist normiert, also gilt $|\boldsymbol{\nu}|^2 = 1$. Durch Ableiten dieser Gleichung erhält man $2\boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\nu}_{\alpha} = 0$, also sind seine Ableitungen parallel zur Tangentialebene an Γ . Deshalb ist folgende Abbildung wohldefiniert.

Definition 2.14. Die Jacobi-Matrizen $D\boldsymbol{\nu}$ und $D\mathbf{X}$ können in jedem Punkt aufgefasst werden als Abbildungen

$$D\boldsymbol{\nu}|_{\mathbf{P}} : \mathbb{R}^2 \rightarrow T_{\mathbf{P}}\Gamma \quad \text{und} \quad D\mathbf{X}|_{\mathbf{P}} : \mathbb{R}^2 \rightarrow T_{\mathbf{P}}\Gamma.$$

In diesem Sinne ist die inverse Abbildung $(D\mathbf{X}|_{\mathbf{P}})^{-1}$ auf $T_{\mathbf{P}}\Gamma$ erklärt. Die Abbildung \mathcal{W} , die punktweise durch

$$\mathcal{W} = -(D\boldsymbol{\nu}|_{\mathbf{P}}) \circ (D\mathbf{X}|_{\mathbf{P}})^{-1} : T_{\mathbf{P}}\Gamma \rightarrow T_{\mathbf{P}}\Gamma$$

definiert ist, heißt Weingarten-Abbildung.

Definition 2.15. Die Eigenwerte κ_1 und κ_2 der Matrix der Weingarten-Abbildung heißen Hauptkrümmungen.

Definition 2.16. Die zweite Fundamentalform ist definiert durch

$$\text{II}(\boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2) = \text{I}(\mathcal{W}\boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2)$$

für Tangentialvektoren $\boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2 \in T_{\mathbf{P}}\Gamma$. In lokalen Koordinaten wird die zweite Fundamentalform durch die Matrix

$$h = (h_{\alpha\beta}) \in \mathbb{R}^{2 \times 2} \quad \text{mit} \quad h_{\alpha\beta} = \boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{X}_{\alpha\beta} = -\mathbf{X}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nu}_{\beta} = -\mathbf{X}_{\beta} \cdot \boldsymbol{\nu}_{\alpha}, \quad \alpha, \beta = 1, 2,$$

beschrieben.

2. Einleitung

Definition 2.17. Die Summe der Hauptkrümmungen, also die Spur der Matrix der Weingarten-Abbildung,

$$H = \kappa_1 + \kappa_2,$$

heißt (doppelte) mittlere Krümmung H und $\mathbf{Y} = H\boldsymbol{\nu}$ mittlerer Krümmungsvektor. In lokalen Koordinaten lässt sich H ausdrücken als

$$H = \frac{g_{11}h_{22} + g_{22}h_{11} - 2g_{12}h_{12}}{\det(g)}.$$

Man beachte, dass hier im Gegensatz zur in der Differentialgeometrie üblichen Definition mit H die doppelte mittlere Krümmung bezeichnet wird.

Definition 2.18. Das Produkt der Hauptkrümmungen, also die Determinante der Matrix der Weingarten-Abbildung,

$$K = \kappa_1\kappa_2,$$

heißt Gauß-Krümmung. In lokalen Koordinaten lässt sie sich ausdrücken als

$$K = \frac{\det(h)}{\det(g)}.$$

Definition 2.19. Sei $\mathbf{X} : \Omega \rightarrow \Gamma$ ein Flächenstück und $f : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetige reellwertige Funktion. Dann ist für jede kompakte Teilmenge $\tilde{\Omega} \subset \Omega$ das Oberflächenintegral

$$\int_{\mathbf{X}(\tilde{\Omega})} f \, dS = \int_{\tilde{\Omega}} (f \circ \mathbf{X})(\xi_1, \xi_2) \sqrt{\det(g)} \, d\xi_1 \, d\xi_2$$

wohldefiniert.

Genau wie im \mathbb{R}^3 gilt für eine skalarwertige Funktion f und eine vektorwertige tangentielle Funktion $\underline{\mathbf{f}}$ die Produktregel

$$\operatorname{div}_{\Gamma}(f \underline{\mathbf{f}}) = \operatorname{grad}_{\Gamma}(f) \cdot \underline{\mathbf{f}} + f \operatorname{div}_{\Gamma}(\underline{\mathbf{f}}). \quad (2.4)$$

Analog gilt auch die Formel der partiellen Integration

$$\int_{\Gamma} \underline{\mathbf{f}} \Delta_{\Gamma} f \, dS = \int_{\partial\Gamma} \underline{\mathbf{f}} \partial_{\boldsymbol{\nu}} f \, dL - \int_{\Gamma} \operatorname{grad}_{\Gamma}(f) \cdot \operatorname{grad}_{\Gamma}(\underline{\mathbf{f}}) \, dS,$$

wobei $\boldsymbol{\nu}_{\partial\Gamma}$ der äußere Normalenvektor des Randes $\partial\Gamma$ tangential zu Γ ist. Das Integral über den Rand verschwindet bei den in der vorliegenden Arbeit betrachteten geschlossenen Oberflächen.

Für die Günter-Ableitungen ist die partielle Integration

$$\int_{\Gamma} \underline{\mathbf{f}} \mathcal{D}_k f \, dS = - \int_{\Gamma} \left(f \mathcal{D}^k \underline{\mathbf{f}} + \boldsymbol{\nu}_k H f \underline{\mathbf{f}} \right) \, dS, \quad k = 1, 2, 3.$$

Der Randterm wurde dabei schon vernachlässigt.

Lemma 2.1. *Der mittlere Krümmungsvektor ist der Laplace-Beltrami-Operator angewendet auf die Parametrisierung:*

$$\mathbf{Y} = \Delta_{\Gamma} \mathbf{X} .$$

Definition 2.20. *Das Geschlecht einer Fläche ist die maximale Anzahl möglicher Schnitte entlang disjunkter, einfach geschlossener Kurven, sodass die Fläche nach dem Schnittvorgang immer noch zusammenhängend ist.*

Anschaulich kann man sich das Geschlecht als die Anzahl "Löcher" der Oberfläche vorstellen. So hat zum Beispiel eine Sphäre das Geschlecht Null und ein Torus das Geschlecht Eins.

Satz 2.1 (Theorem von Gauß-Bonnet). *Für eine kompakte zweidimensionale orientierbare Untermannigfaltigkeit Γ von \mathbb{R}^3 mit Geschlecht \mathcal{G} gilt*

$$F_K = \int_{\Gamma} K \, dS = 4\pi(1 - \mathcal{G}) .$$

Das Integral F_K ist also konstant, weil sich die Topologie der Fläche nicht ändert. Für die Evolution spielt es daher keine Rolle und wird im Folgenden weggelassen.

2.4. Stationäre Formen und Variation

Die gesuchte Oberfläche minimiert das Energiefunktional. Ein Funktional bildet dabei eine Funktionenklasse stetig auf \mathbb{R} ab. In diesem Fall ist das Energiefunktional durch

$$\mathcal{F} = \frac{k_c}{2} F_h + F_k + F_{A,V} = \int_{\Gamma} \left(\frac{k_c}{2} (H - H_0)^2 + W_0 W(|\mathbf{r}|) + \lambda \right) dS + \mu V \quad (2.5)$$

gegeben. Es stellt also ein Integral der gesuchten Funktion, der Parametrisierung \mathbf{X} , und ihren Ableitungen, $H = \mathbf{Y} \cdot \boldsymbol{\nu} = \Delta_{\Gamma} \mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\nu}$, dar. Um ein Minimum zu finden, wird Variationsrechnung verwendet. Damit dies möglich ist, muss Γ orientierbar sein. Man betrachtet eine normale Variation von \mathbf{X} [37]:

$$\mathbf{X}(\xi_1, \xi_2) + t\phi(\xi_1, \xi_2)\boldsymbol{\nu}(\xi_1, \xi_2)$$

mit einer glatten reellwertigen Funktion ϕ und $-\frac{1}{2} < t < \frac{1}{2}$. Die Variation δ_{ϕ} mit einer Funktion in Normalenrichtung $\boldsymbol{\phi} = \phi\boldsymbol{\nu}$ ist dabei

$$\delta_{\phi\boldsymbol{\nu}} \mathcal{F} = \left. \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}(\mathbf{X} + t\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\nu}) \right|_{t=0} .$$

Es wird also nach t abgeleitet und t anschließend Null gesetzt. Minimiert eine Oberfläche das Funktional (2.5), so ist die Euler-Lagrange-Gleichung erfüllt:

$$\delta_{\phi\boldsymbol{\nu}} \mathcal{F} = 0 .$$

Im folgenden Kapitel wird die Variation zu

$$\delta_{\phi\boldsymbol{\nu}} \mathcal{F} = - \int_{\Gamma} v_{\boldsymbol{\nu}} \phi \, dS$$

2. Einleitung

bestimmt mit

$$v_{\nu} = -k_c \left(\Delta_{\Gamma} H + \frac{1}{2} H^3 - 2KH + 2H_0 K - \frac{1}{2} H_0^2 H \right) + \lambda H - \mu \\ + W_0 \left(W'(|\mathbf{r}|) \frac{\mathbf{r} \cdot \nu}{|\mathbf{r}|} - HW(|\mathbf{r}|) + (d_0^2 |\mathbf{r}|^{-2} - 2) H \right).$$

Damit die Variation für alle ϕ Null ist, muss die Bedingung

$$v_{\nu} = 0$$

erfüllt sein. Das sich daraus ergebende Gradientenflussproblem ist dann, lokal durch $\mathbf{X} : \Omega \rightarrow \Gamma(t)$ parametrisierte Oberflächen $\Gamma(t)$ mit $\Gamma(0) = \Gamma_0$ zu finden, sodass gilt [12]

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = v_{\nu} \nu.$$

Hier kann man t als Zeit interpretieren, das heißt jetzt ist $t \in [0, \infty)$. Dann ist die Variation immer kleiner gleich Null und Γ minimiert für $t \rightarrow \infty$ das Energiefunktional.

Dabei genügt es, die Oberfläche Γ nur in Normalenrichtung um $\phi \nu$ zu variieren, da tangentielle Bewegungen eine glatte Oberfläche nicht ändern und nur die Form von Interesse ist. Eine weitere Möglichkeit der Variation wäre ein Überhang (siehe Abbildung 2.7). Ein solcher Überhang könnte nicht durch eine Variation $\phi \nu$ beschrieben werden. Allerdings ist eine solche Form energetisch nachteilig [35], weshalb Variationen in Normalenrichtung ausreichend sind.

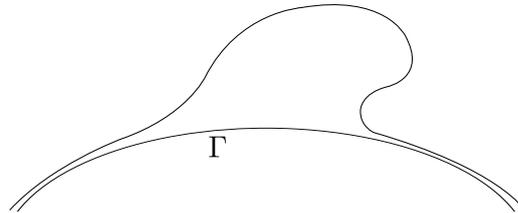


Abbildung 2.7.: Variation von Γ in Form eines Überhangs, die nicht durch eine Funktion in Normalenrichtung beschrieben werden kann.

2.5. Methode der finiten Elemente

In diesem Abschnitt wird die Methode der finiten Elemente, die zur numerischen Bestimmung des Gradientenflusses verwendet wird, vorgestellt. Dabei wird nach [17] vorgegangen. Die Methode soll am Beispiel des mittleren Krümmungsvektors erläutert werden. Die dazugehörige Gleichung für \mathbf{Y} lautet

$$\mathbf{Y} = \Delta_{\Gamma} \mathbf{X}.$$

Diese Gleichung wird numerisch gelöst, wobei die Oberfläche Γ diskret ist, also nur stückweise glatt. Der gesuchte Krümmungsvektor wird durch ein Polynom niedriger Ordnung approximiert, das heißt er kann

die Gleichung nicht punktweise erfüllen, sondern nur schwach, da die Glattheit der Ansatzfunktionen nicht ausreicht. Dazu multipliziert man beide Seiten der Gleichung mit einer auf Γ unendlich oft stetig differenzierbaren Testfunktion ϕ und integriert über Γ :

$$\int_{\Gamma} \mathbf{Y} \cdot \phi \, dS = \int_{\Gamma} \Delta_{\Gamma} \mathbf{X} \cdot \phi \, dS.$$

Durch partielle Integration lässt sich die Ordnung der Ableitung von \mathbf{X} reduzieren:

$$\int_{\Gamma} \mathbf{Y} \cdot \phi \, dS = - \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \mathbf{X} : \nabla_{\Gamma} \phi \, dS. \quad (2.6)$$

Hier werden nur noch die ersten Ableitungen von \mathbf{X} benötigt, sodass die Anforderungen an \mathbf{X} geringer werden.

Im folgenden Abschnitt werden die Räume, aus denen \mathbf{X} und \mathbf{Y} stammen, definiert. Dabei wird nach [23] vorgegangen.

Definition der Räume

Definition 2.21. Der Schwartz-Raum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$ ist der Raum der schnell fallenden glatten Funktionen und sein Dualraum $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$ der Raum der temperierten Distributionen.

Definition 2.22. Die Fourier-Transformierte von $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$ ist

$$\hat{\phi}(\underline{\xi}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^2} e^{-i\underline{\xi} \cdot \underline{\xi}} \phi(\underline{\xi}) \, d\underline{\xi}, \quad \underline{\xi}, \underline{\xi} \in \mathbb{R}^2.$$

Für eine Distribution $f \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$ ist die Fourier-Transformierte definiert als

$$\hat{f}(\phi) = f(\hat{\phi}) \quad \text{für alle } \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2).$$

Definition 2.23. Sei $p \in \mathbb{R}$ und $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$. Der Bessel-Potentialoperator $\mathcal{J}^p : \mathcal{S}(\mathbb{R}^2) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$ ist definiert als

$$(\mathcal{J}^p \phi)(\underline{\xi}) = \int_{\mathbb{R}^2} (1 + |\underline{\xi}|^2)^{\frac{p}{2}} \hat{\phi}(\underline{\xi}) e^{i\underline{\xi} \cdot \underline{\xi}} \, d\underline{\xi}, \quad \underline{\xi} \in \mathbb{R}^2.$$

Für eine Distribution $f \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$ ist der Bessel-Potentialoperator $\mathcal{J}^p f \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$ definiert als

$$(\mathcal{J}^p f)(\phi) = f(\mathcal{J}^p \phi) \quad \text{für alle } \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2).$$

Der Bessel-Potentialoperator verhält sich wie ein Differentialoperator der Ordnung p .

Definition 2.24. $L^p(\Omega)$, $1 \leq p < \infty$, ist für ein Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ der Raum aller messbaren Funktionen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, sodass $|f|^p$ auf Ω integrierbar ist, also

$$\|f\|_{L^p(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |f(\underline{\xi})|^p \, d\underline{\xi} \right)^{\frac{1}{p}} < \infty.$$

2. Einleitung

Definition 2.25. Der Sobolev-Raum $H^p(\mathbb{R}^2)$, $p \in \mathbb{R}$, ist der Raum der Distributionen $f, \underline{f} \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$ mit $\mathcal{J}^p f, \mathcal{J}^p \underline{f} \in L^2(\mathbb{R}^2)$ mit dem inneren Produkt

$$\langle f, \underline{f} \rangle_{H^p(\mathbb{R}^2)} = \langle \mathcal{J}^p f, \mathcal{J}^p \underline{f} \rangle_{L^2(\mathbb{R}^2)}$$

und der induzierten Norm

$$\|f\|_{H^p(\mathbb{R}^2)}^2 = \|\mathcal{J}^p f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 = \int_{\mathbb{R}^2} (1 + |\boldsymbol{\xi}|^2)^p |\hat{f}(\boldsymbol{\xi})|^2 d\boldsymbol{\xi}.$$

Für ein beschränktes Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ist der Sobolev-Raum definiert als die Einschränkung

$$H^p(\Omega) = \left\{ f = \tilde{f} \Big|_{\Omega} : \tilde{f} \in H^p(\mathbb{R}^2) \right\}$$

mit der Norm

$$\|f\|_{H^p(\Omega)} = \inf_{\tilde{f} \in H^p(\mathbb{R}^2): \tilde{f}|_{\Omega} = f} \left(\|\tilde{f}\|_{H^p(\mathbb{R}^2)} \right).$$

Definition 2.26. Sei $\mathbf{q} = (q_1, q_2) \in \mathbb{N}_0^2$ ein Multiindex mit $|\mathbf{q}| = q_1 + q_2$. Dann ist die Ableitung $D^{\mathbf{q}}$ definiert als

$$D^{\mathbf{q}} = (D_1^{q_1}, D_2^{q_2})^{\top}.$$

Definition 2.27. $L_{\text{loc}}^1(\Omega)$ ist der Raum der lokal integrierbaren Funktionen.

Definition 2.28. $f \in L_{\text{loc}}^1(\Omega)$ heißt schwach differenzierbar, falls es eine Funktion $D^{\mathbf{q}} f \in L_{\text{loc}}^1(\Omega)$ gibt mit

$$\int_{\Omega} f(\boldsymbol{\xi}) D^{\mathbf{q}} \phi(\boldsymbol{\xi}) d(\boldsymbol{\xi}) = (-1)^{|\mathbf{q}|} \int_{\Omega} D^{\mathbf{q}} f(\boldsymbol{\xi}) \phi(\boldsymbol{\xi}) d(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall \phi \in C^{\infty}(\Omega).$$

$D^{\mathbf{q}} f$ heißt dann die \mathbf{q} -te schwache Ableitung von f .

Man beachte, dass in der Definition sowohl die schwache als auch die klassische Ableitung mit $D^{\mathbf{q}}$ bezeichnet werden, da für klassisch differenzierbare Funktionen diese übereinstimmen.

Für den Spezialfall $p \in \mathbb{N}_0$ ist der Sobolev-Raum $H^p(\Omega)$ der Abschluss von $C^{\infty}(\Omega)$ bezüglich der Sobolev-Norm,

$$H^p(\Omega) = \overline{C^{\infty}(\Omega)}^{\|\cdot\|_{H^p(\Omega)}},$$

mit

$$\|f\|_{H^p(\Omega)} = \left(\sum_{|\mathbf{q}| \leq p} \|D^{\mathbf{q}} f\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Die Oberfläche Γ besteht aus einer beliebigen, aus endlich vielen Γ_j zusammengesetzten, überlappenden Parametrisierung

$$\Gamma = \bigcup_j \bar{\Gamma}_j \quad \text{mit} \quad \Gamma_j = \{ \mathbf{P} \in \mathbb{R}^3 : \mathbf{P} = \mathbf{X}_j(\boldsymbol{\xi}), \boldsymbol{\xi} \in \Omega_j \subset \mathbb{R}^2 \}$$

mit den offenen Parametergebieten Ω_j und en lokalen Parametrisierungen \mathbf{X}_j . Dieser Zerlegung untergeordnet betrachtet man die aus nicht negativen Funktionen $\phi_j \in C^\infty(\mathbb{R}^2)$ bestehende Partition der Eins

$$\sum_j \phi_j(\mathbf{P}) = 1, \quad \mathbf{P} \in \Gamma, \quad \phi_j(\mathbf{P}) = 0 \text{ für } \mathbf{P} \in \Gamma \setminus \Gamma_j.$$

Jede Funktion \tilde{f} auf Γ kann somit geschrieben werden als

$$\tilde{f}(\mathbf{P}) = \sum_j \phi_j(\mathbf{P}) \tilde{f}(\mathbf{P}) = \sum_j \tilde{f}_j(\mathbf{P}) \text{ für } \mathbf{P} \in \Gamma \quad \text{mit} \quad \tilde{f}_j(\mathbf{P}) = \phi_j(\mathbf{P}) \tilde{f}(\mathbf{P}) \text{ für } \mathbf{P} \in \Gamma_j.$$

Einsetzen der lokale Parametrisierung ergibt

$$\tilde{f}_j(\mathbf{P}) = \phi_j(\mathbf{P}) \tilde{f}(\mathbf{P}) = \phi_j(\mathbf{X}_j(\boldsymbol{\xi})) \tilde{f}(\mathbf{X}_j(\boldsymbol{\xi})) = f_j(\boldsymbol{\xi}), \quad \boldsymbol{\xi} \in \Omega_j.$$

Für die so definierten Funktionen $f_j(\boldsymbol{\xi})$ und $p \geq 0$ wird nun der Sobolev-Raum $H^p(\Omega_j)$ zusammen mit den Normen $\|f_j\|_{H^p(\Omega_j)}$ betrachtet. Damit kann nun der Sobolev-Raum $H^p(\Gamma)$ mit der Norm

$$\|\tilde{f}\|_{H^p_\mathbf{X}(\Gamma)} = \left(\sum_j \|f_j\|_{H^p(\Omega_j)}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

definiert werden. Diese Norm ist abhängig von der Parametrisierung \mathbf{X} , jedoch sind die Normen zu verschiedenen Parametrisierungen äquivalent.

Die Parametrisierung \mathbf{X} muss aus dem Sobolev-Raum $(H^1(\Gamma))^3$ und der mittlere Krümmungsvektor \mathbf{Y} aus $L^2(\Gamma)$ stammen. Bei der Willmore-Evolution erhält man im nächsten Kapitel die Aufgabenstellung, für eine Anfangsoberfläche Γ_0 \mathbf{X} und \mathbf{Y} zu finden mit $\mathbf{X}(\Omega, 0) = \Gamma_0$, sodass

$$\begin{aligned} 0 &= \int_\Gamma \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\phi} \, dS - \int_\Gamma \nabla_\Gamma \mathbf{Y} : \nabla_\Gamma \boldsymbol{\phi} \, dS + \int_\Gamma \nabla_\Gamma \mathbf{Y} : (D(\boldsymbol{\phi}) \nabla_\Gamma \mathbf{X}) \, dS - \int_\Gamma \operatorname{div}_\Gamma(\mathbf{Y}) \operatorname{div}_\Gamma(\boldsymbol{\phi}) \, dS \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_\Gamma |\mathbf{Y}|^2 \nabla_\Gamma \mathbf{X} : \nabla_\Gamma \boldsymbol{\phi} \, dS, \end{aligned} \tag{2.7}$$

$$0 = \int_\Gamma \mathbf{Y} \cdot \boldsymbol{\psi} \, dS + \int_\Gamma \nabla_\Gamma \mathbf{X} : \nabla_\Gamma \boldsymbol{\psi} \, dS$$

mit $D(\boldsymbol{\phi})_{ln} = \mathcal{D}_l \boldsymbol{\phi}^n + \mathcal{D}_n \boldsymbol{\phi}^l$ für alle Testfunktionen $\boldsymbol{\phi}$ und $\boldsymbol{\psi}$ erfüllt ist. Hier wird auch \mathbf{Y} abgeleitet, sodass $\mathbf{Y} \in L^2(\Gamma)$ nicht mehr ausreicht und ebenfalls $\mathbf{Y} \in (H^1(\Gamma))^3$ gelten muss.

Raumdiskretisierung

Das Problem

$$\text{Gesucht ist } \mathbf{Y} \in (H^1(\Gamma))^3 \quad \text{mit} \quad \int_\Gamma \mathbf{Y} \cdot \boldsymbol{\phi} \, dS = - \int_\Gamma \nabla_\Gamma \mathbf{X} : \nabla_\Gamma \boldsymbol{\phi} \, dS \quad \forall \boldsymbol{\phi} \in (H^1(\Gamma))^3.$$

2. Einleitung

wird beim Diskretisierungsansatz durch folgendes Problem ersetzt:

$$\text{Gesucht ist } \mathbf{Y}_h \in (H_h^1(\Gamma_h))^3 \text{ mit } \int_{\Gamma_h} \mathbf{Y}_h \cdot \boldsymbol{\phi} \, dS = - \int_{\Gamma_h} \nabla_{\Gamma_h} \mathbf{X}_h : \nabla_{\Gamma_h} \boldsymbol{\phi} \, dS \quad \forall \boldsymbol{\phi} \in (H_h^1(\Gamma_h))^3. \quad (2.8)$$

Der Lösungsraum $(H_1(\Gamma))^3$ wird durch einen endlich-dimensionalen Teilraum $(H_h^1(\Gamma_h))^3$, genannt Ansatzraum, ersetzt. Aus diesem stammen auch die Testfunktionen. Die geschlossene glatte zweidimensionale Oberfläche Γ in \mathbb{R}^3 wird durch eine Triangulierung Γ_h repräsentiert:

$$\Gamma_h = \bigcup_{j=1}^{N_D} \bar{T}_j \quad \text{und} \quad T_i \cap T_j = \emptyset \quad \text{für } i \neq j.$$

T_j , $j = 1, \dots, N_D$, sind dabei offene Dreiecke und N_D gibt die Anzahl der Dreiecke an. Für $i \neq j$ ist der Durchschnitt der Abschlüsse, $\bar{T}_i \cap \bar{T}_j$, leer, eine gemeinsame Seite oder eine gemeinsame Ecke. Dabei darf die Ecke eines Dreiecks nicht in der Seite eines anderen Dreiecks liegen, sondern muss dort ebenfalls eine Ecke bilden. In Abbildung 2.8 ist dargestellt, wie die Dreiecke angeordnet sein dürfen und welche Konfiguration verboten ist.

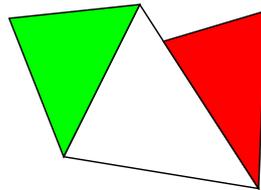


Abbildung 2.8.: Zulässige (grün) und nicht zulässige (rot) Anordnung von Dreiecken.

Die Dreiecke dürfen nicht entartet sein, das heißt alle Winkel müssen echt größer Null sein. Ein Beispiel für eine triangulierte Oberfläche ist in Abbildung 2.9 zu sehen.

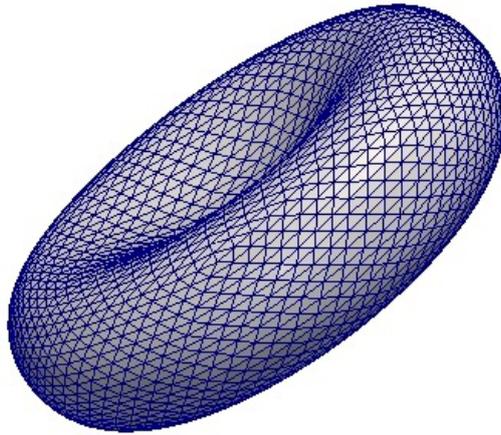


Abbildung 2.9.: Triangulierung einer erythrozytenähnlichen Oberfläche mit 5120 Dreiecken.

Eine triangulierte Oberfläche Γ wird durch eine Parametrisierung dargestellt, die lokal auf einem Dreieck T_j die Form

$$\mathbf{X}(\xi_1, \xi_2) = \sum_{l=1}^3 \mathbf{P}_{j_l} \phi_{j_l}(\xi_1, \xi_2)$$

hat. Dabei sind die \mathbf{P}_{j_l} , $l = 1, 2, 3$ die Dreiecksknoten und

$$\begin{aligned} \phi_{j_1}(\xi_1, \xi_2) &= 1 - \xi_1 - \xi_2, \\ \phi_{j_2}(\xi_1, \xi_2) &= \xi_1, \\ \phi_{j_3}(\xi_1, \xi_2) &= \xi_2, \end{aligned} \tag{2.9}$$

wobei die Knoten lokal von eins bis drei durchnummeriert werden (siehe Abbildung 2.10).

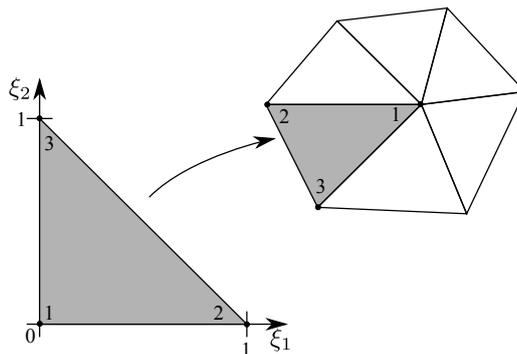


Abbildung 2.10.: Abbildung vom zweidimensionalen Referenzdreieck auf das Dreieck innerhalb der Triangulierung.

2. Einleitung

Der Ansatzraum für die Lösung besteht ebenfalls aus stückweise linearen, stetigen Funktionen:

$$H_h^1(\Gamma_h) = \left\{ \phi \in C^0(\Gamma_h) : \phi|_{T_j} \text{ Polynom erster Ordnung für alle } T_j \subset \Gamma_h \right\}.$$

Funktionen können somit durch

$$f_h(\xi_1, \xi_2) = \sum_{i=1}^{N_K} f_i \phi_i(\xi_1, \xi_2)$$

dargestellt werden, wobei N_K die Anzahl der Knoten, f_i die Werte von f in den Knoten und ϕ_i die Knotenbasisfunktionen sind. Diese haben den Wert 1 im i -ten Knoten, den Wert 0 in allen anderen Knoten und sind dazwischen linear. Auf einem Dreieck haben sie die Form (2.9).

Die glatten Problemstellungen (2.6) und (2.7) sind auch für polyhedrale Oberflächen wohldefiniert, da alle Ableitungen L^2 -integrierbar sind. Diese Formulierungen können also zur Approximation von Lösungen durch finite Elemente verwendet werden.

Zur Lösung des diskreten Problems (2.8) werden nun \mathbf{X}_h und \mathbf{Y}_h mit den Knotenbasisfunktionen dargestellt:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_h &= \sum_{i=1}^{N_K} \mathbf{X}_i \phi_i, \\ \mathbf{Y}_h &= \sum_{i=1}^{N_K} \mathbf{Y}_i \phi_i. \end{aligned}$$

Γ wird dabei durch die Triangulierung Γ_h repräsentiert und \mathbf{X}_i beziehungsweise \mathbf{Y}_i sind die Werte von \mathbf{X} beziehungsweise \mathbf{Y} im i -ten Knoten. Die Testfunktionen sind $\phi_j \mathbf{e}_l$ für $j = 1, \dots, N_K$ und $l = 1, 2, 3$. Damit erhält man

$$\int_{\Gamma_h} \left(\sum_{i=1}^{N_K} \mathbf{Y}_i \phi_i \right) \cdot (\phi_j \mathbf{e}_l) \, dS = - \int_{\Gamma_h} \nabla_{\Gamma_h} \left(\sum_{i=1}^{N_K} \mathbf{X}_i \phi_i \right) \cdot \nabla_{\Gamma_h} (\phi_j \mathbf{e}_l) \, dS, \quad j = 1, \dots, N_K, \quad l = 1, 2, 3.$$

Da die \mathbf{X}_i beziehungsweise \mathbf{Y}_i konstant sind, können sie aus dem Integral gezogen werden und es muss nur noch über die bekannten Knotenbasisfunktionen integriert werden:

$$\sum_{i=1}^{N_K} \left(\int_{\Gamma_h} \phi_i \phi_j \, dS \right) \mathbf{Y}_i^l = - \sum_{i=1}^{N_K} \left(\int_{\Gamma_h} \text{grad}_{\Gamma_h}(\phi_i) \cdot \text{grad}_{\Gamma_h}(\phi_j) \, dS \right) \mathbf{X}_i^l, \quad j = 1, \dots, N_K, \quad l = 1, 2, 3.$$

Fasst man die Integrale als Matrixeinträge

$$\begin{aligned} M_{ij} &= \int_{\Gamma_h} \phi_i \phi_j \, dS, \\ S_{ij} &= \int_{\Gamma_h} \text{grad}_{\Gamma_h} \phi_i \cdot \text{grad}_{\Gamma_h} \phi_j \, dS \end{aligned}$$

der sogenannten Massenmatrix M und Steifheitsmatrix S auf und fasst die Knotenwerte von \mathbf{X} und \mathbf{Y} in Vektoren zusammen

$$\begin{aligned}\mathbf{X}^l &= \left(\mathbf{X}_1^l, \dots, \mathbf{X}_{N_K}^l \right)^\top, \\ \mathbf{Y}^l &= \left(\mathbf{Y}_1^l, \dots, \mathbf{Y}_{N_K}^l \right)^\top,\end{aligned}$$

so kann man die Gleichungen als lineares Gleichungssystem schreiben:

$$M\mathbf{Y}^l = -S\mathbf{X}^l, \quad l = 1, 2, 3. \quad (2.10)$$

Um nun die Werte von \mathbf{Y} in den Knoten zu erhalten, muss man dieses Gleichungssystem lösen. M ist dabei als Matrix des L^2 -Skalarprodukts

$$\langle \phi_i, \phi_j \rangle = \int_{\Gamma_h} \phi_i \phi_j \, dS,$$

wobei die Knotenbasisfunktionen $\phi_i \geq 0$ und $\phi_i \neq 0$ sind, symmetrisch positiv definit.

Alternativ kann Γ auch durch eine Triangulierung aus gekrümmten Dreiecken dargestellt werden, deren Seiten quadratische Polynome sind [16] (siehe Abb. 2.11).

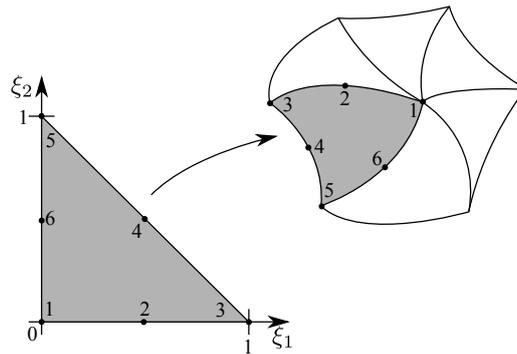


Abbildung 2.11.: Abbildung vom zweidimensionalen Referenzdreieck auf das Dreieck innerhalb der Triangulierung zweiter Ordnung.

Hier werden die Knoten auf jedem Dreieck von eins bis sechs durchnummeriert. Die Knotenbasisfunktionen sind in diesem Fall

$$\begin{aligned}\phi_{j_1}(\xi_1, \xi_2) &= 2\xi_1^2 + 2\xi_2^2 + 4\xi_1\xi_2 - 3\xi_1 - 3\xi_2 + 1, \\ \phi_{j_2}(\xi_1, \xi_2) &= -4\xi_1^2 - 4\xi_1\xi_2 + 4\xi_1, \\ \phi_{j_3}(\xi_1, \xi_2) &= 2\xi_1^2 - \xi_1, \\ \phi_{j_4}(\xi_1, \xi_2) &= 4\xi_1\xi_2, \\ \phi_{j_5}(\xi_1, \xi_2) &= 2\xi_2^2 - \xi_2, \\ \phi_{j_6}(\xi_1, \xi_2) &= -4\xi_2^2 - 4\xi_1\xi_2 + 4\xi_2.\end{aligned}$$

2. Einleitung

Die vorherige Berechnung kann für quadratische Knotenbasisfunktionen analog durchgeführt werden und es ergibt sich ebenso ein Gleichungssystem der Form (2.10).

Zeitdiskretisierung

Die zeitliche Ableitung der zeitabhängigen Parametrisierung $\mathbf{X}(\xi_1, \xi_2, t)$ mit $\mathbf{X} : \Omega \times \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}^3$ wird durch einen Differenzenquotienten angenähert [12]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{X}(\xi_1, \xi_2, mT) \approx \frac{\mathbf{X}^{m+1}(\xi_1, \xi_2) - \mathbf{X}^m(\xi_1, \xi_2)}{T}.$$

Dabei ist T die Schrittweite und \mathbf{X}^m beziehungsweise \mathbf{X}^{m+1} die Parametrisierung im m -ten beziehungsweise $(m+1)$ -ten Zeitschritt, also

$$\mathbf{X}^m(\xi_1, \xi_2) \approx \mathbf{X}(\xi_1, \xi_2, mT) \quad \text{beziehungsweise} \quad \mathbf{X}^{m+1}(\xi_1, \xi_2) \approx \mathbf{X}(\xi_1, \xi_2, (m+1)T).$$

In einer Differentialgleichung für \mathbf{X} werden dann die restlichen vorkommenden Größen möglichst im $(m+1)$ -ten Zeitschritt gewählt, um ein implizites Verfahren zu erhalten, damit größere Zeitschritte gewählt werden können. Im Beispiel des mittleren Krümmungsvektors ist es möglich, überall die Größe des nächsten Zeitschrittes zu nehmen, jedoch würden in späteren Kapiteln Nichtlinearitäten auftreten, dort wird dann die Größe im m -ten Zeitschritt eingesetzt.

3. Variation der freien Energie

In diesem Kapitel soll die Variation des Funktionals

$$\begin{aligned}\mathcal{F} &= \int_{\Gamma} \left(\frac{k_c}{2} (H - H_0)^2 + W_0 W(|\mathbf{r}|) + \lambda \right) dS + \mu V \\ &= k_c F_w + \frac{k_c}{2} \int_{\Gamma} (H_0^2 - 2H_0 H) dS + F_k + F_{A,V}\end{aligned}$$

hergeleitet werden, wobei die spontane Krümmung H_0 konstant ist. Dazu benötigt man zunächst die Variation des Willmore-Funktional

$$F_w = \frac{1}{2} \int_{\Gamma} H^2 dS.$$

Sie wurde in [12] berechnet und soll hier dargestellt werden. Die Variation der mittleren Krümmung H , des Flächenelements dS , des Kontakt-Funktional F_k und des Volumens V werden ebenfalls in diesem Kapitel bestimmt.

3.1. Variation des Willmore-Funktional

In diesem Abschnitt wird die Variation mit einer vektorwertigen Funktion ϕ (nicht notwendigerweise in Normalenrichtung) des Willmore-Funktional bestimmt.

Bei Anwendung der Kettenregel,

$$\delta_{\phi} F_w = \delta_{\phi} \int_{\Omega} H^2 \sqrt{\det(g)} d\xi_1 d\xi_2 = \int_{\Gamma} H \delta_{\phi} H dS + \frac{1}{2} \int_{\Omega} H^2 \delta_{\phi} \left(\sqrt{\det(g)} \right) d\xi_1 d\xi_2,$$

zeigt sich, dass unter anderem die Variation der Wurzel der Determinante des metrischen Tensors bestimmt werden muss.

Variation der Wurzel der Determinante des metrischen Tensors

Durch

$$\delta_{\phi} \sqrt{\det(g)} = \frac{1}{2\sqrt{\det(g)}} \delta_{\phi} \det(g) = \frac{1}{2\sqrt{\det(g)}} (\delta_{\phi} g_{11} g_{22} + g_{11} \delta_{\phi} g_{22} - 2g_{12} \delta_{\phi} g_{12}).$$

ist die Variation der Wurzel der Determinante des metrischen Tensors gegeben. Dafür wird die Variation des metrischen Tensors benötigt:

$$\delta_{\phi} g_{\alpha\beta} = (\delta_{\phi} \mathbf{X}_{\alpha}) \cdot \mathbf{X}_{\beta} + \mathbf{X}_{\alpha} \cdot (\delta_{\phi} \mathbf{X}_{\beta}).$$

3. Variation der freien Energie

Die Variation der Tangentialvektoren ist

$$\delta_\phi \mathbf{X}_\alpha = \left. \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{X}_\alpha + t\phi_\alpha) \right|_{t=0} = \phi_\alpha.$$

Es ergibt sich für die Variation des metrischen Tensors

$$\delta_\phi g_{\alpha\beta} = (\phi_\alpha \cdot \mathbf{X}_\beta) + (\mathbf{X}_\alpha \cdot \phi_\beta).$$

Man erhält für die Variation der Wurzel der Determinante des metrischen Tensors

$$\delta_\phi \sqrt{\det(g)} = \frac{1}{\sqrt{\det(g)}} ((\mathbf{X}_1 \cdot \phi_1)g_{22} + g_{11}(\mathbf{X}_2 \cdot \phi_2) - g_{12}(\mathbf{X}_1 \cdot \phi_2) - g_{12}(\mathbf{X}_2 \cdot \phi_1)).$$

Mit Hilfe des inversen metrischen Tensors ergibt sich

$$\delta_\phi \sqrt{\det(g)} = \sum_{\alpha,\beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (\mathbf{X}_\alpha \cdot \phi_\beta) \sqrt{\det(g)} = \operatorname{div}_\Gamma(\phi) \sqrt{\det(g)}. \quad (3.1)$$

Die Divergenz lässt sich durch Erweiterung mit dem Kronecker-Delta

$$\delta_{\alpha\delta} = \sum_{\gamma=1}^2 (g^{-1})_{\gamma\delta} g_{\alpha\gamma},$$

das dadurch zustande kommt, dass das Produkt von g mit seinem Inversen die Einheitsmatrix ist, auch als Matrix-Skalarprodukt ausdrücken:

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_\Gamma(\phi) &= \sum_{\alpha,\beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (\mathbf{X}_\alpha \cdot \phi_\beta) = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta=1}^2 \sum_{l=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\beta} (g^{-1})_{\gamma\delta} \phi_\beta^l \mathbf{X}_\delta^l g_{\alpha\gamma} \\ &= \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta=1}^2 \sum_{l,n=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\beta} (g^{-1})_{\gamma\delta} \phi_\beta^n \mathbf{X}_\gamma^l \mathbf{X}_\alpha^l \mathbf{X}_\delta^n = \sum_{l,n=1}^3 \mathcal{D}_l \phi^n \mathcal{D}_l \mathbf{X}^n = \nabla_\Gamma \mathbf{X} : \nabla_\Gamma \phi. \end{aligned}$$

Also erhält man für die Variation der Fläche:

$$\delta_\phi A = \int_\Omega \delta_\phi (\sqrt{\det(g)}) \, d\xi_1 \, d\xi_2 = \int_\Gamma \nabla_\Gamma \mathbf{X} : \nabla_\Omega \phi \sqrt{\det(g)} \, d\xi_1 \, d\xi_2 = \int_\Gamma \nabla_\Gamma \mathbf{X} : \nabla_\Gamma \phi \, dS. \quad (3.2)$$

Variation des quadrierten mittleren Krümmungsvektors

Der mittlere Krümmungsvektor ist $\mathbf{Y} = \Delta_\Gamma \mathbf{X}$. In schwacher Formulierung und mit partieller Integration ergibt sich

$$0 = \int_\Gamma \mathbf{Y} \cdot \psi \, dS + \int_\Gamma \nabla_\Gamma \mathbf{X} : \nabla_\Gamma \psi \, dS = \int_\Gamma \mathbf{Y} \cdot \psi \, dS + \delta_\psi A.$$

Die Variation des Willmore-Funktional ist

$$\delta_\phi F_w = \frac{1}{2} \delta_\phi \int_\Gamma |\mathbf{Y}|^2 dS = \int_\Gamma \mathbf{Y} \cdot (\delta_\phi \mathbf{Y}) dS + \frac{1}{2} \int_\Gamma |\mathbf{Y}|^2 \operatorname{div}_\Gamma(\phi) dS.$$

Der gestörte mittlere Krümmungsvektor $\underline{\mathbf{Y}}$, der sich aus der gestörten Parametrisierung $\mathbf{X} + t\phi$ durch $\Delta_\Gamma(\mathbf{X} + t\phi)$ ergibt, wird durch

$$\int_\Omega \underline{\mathbf{Y}} \cdot \psi \sqrt{\det(g)} d\xi_1 d\xi_2 + \int_\Omega \delta_\phi \left(\sqrt{\det(g)} \right) d\xi_1 d\xi_2 = 0$$

bestimmt. Die Gleichung wird nun nach t abgeleitet und anschließend wird $t = 0$ gesetzt:

$$\int_\Gamma (\delta_\phi \mathbf{Y}) \cdot \psi dS + \int_\Gamma (\mathbf{Y} \cdot \psi) \operatorname{div}_\Gamma(\phi) dS + \delta_\psi(\delta_\phi A) = 0. \quad (3.3)$$

Dafür wird die zweite Variation der Fläche $\delta_\psi(\delta_\phi A)$ benötigt.

Zweite Variation der Fläche

Es muss die Variation der bereits bekannten Variation der Wurzel des metrischen Tensors (3.1) berechnet werden:

$$\begin{aligned} \delta_\psi(\delta_\phi A) &= \int_\Gamma \delta_\psi \left(\sum_{\alpha, \beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (\mathbf{X}_\alpha \cdot \phi_\beta) \right) dS \\ &= \int_\Gamma \sum_{\alpha, \beta=1}^2 \delta_\psi (g^{-1})_{\alpha\beta} (\mathbf{X}_\alpha \cdot \phi_\beta) dS + \int_\Gamma \sum_{\alpha, \beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (\delta_\psi \mathbf{X}_\alpha \cdot \phi_\beta) dS \\ &\quad + \int_\Omega \sum_{\alpha, \beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (\mathbf{X}_\alpha \cdot \phi_\beta) \delta_\psi \left(\sqrt{\det(g)} \right) d\xi_1 d\xi_2. \end{aligned}$$

Die Variation des inversen metrischen Tensors kann man aus der Variation des metrischen Tensors bestimmen, indem man die Variation beider Seiten von

$$\sum_{\beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} g_{\beta\gamma} = \delta_{\alpha\gamma}$$

bestimmt:

$$\delta_\psi (g^{-1})_{\alpha\beta} = - \sum_{\gamma, \delta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\gamma} (g^{-1})_{\beta\delta} \delta_\psi g_{\gamma\delta} = - \sum_{\gamma, \delta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\gamma} (g^{-1})_{\beta\delta} ((\psi_\delta \cdot \mathbf{X}_\gamma) + (\mathbf{X}_\delta \cdot \psi_\gamma)).$$

3. Variation der freien Energie

Es folgt

$$\begin{aligned}
\delta_{\psi}(\delta_{\phi}A) &= - \int_{\Gamma} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\gamma} (g^{-1})_{\beta\delta} ((\mathbf{X}_{\gamma} \cdot \boldsymbol{\psi}_{\delta}) + (\mathbf{X}_{\delta} \cdot \boldsymbol{\psi}_{\gamma})) (\mathbf{X}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\phi}_{\beta}) dS \\
&+ \int_{\Gamma} \sum_{\alpha,\beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (\boldsymbol{\phi}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\psi}_{\beta}) dS \\
&+ \int_{\Gamma} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (\mathbf{X}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\phi}_{\beta}) (g^{-1})_{\gamma\delta} (\mathbf{X}_{\gamma} \cdot \boldsymbol{\psi}_{\delta}) dS.
\end{aligned}$$

Schreibt man die Skalarprodukte aus, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
\delta_{\psi}(\delta_{\phi}A) &= - \int_{\Gamma} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta=1}^2 \sum_{l,n=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\gamma} (g^{-1})_{\beta\delta} \phi_{\beta}^n \psi_{\delta}^l \mathbf{X}_{\gamma}^l \mathbf{X}_{\alpha}^n dS \\
&- \int_{\Gamma} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta=1}^2 \sum_{l,n=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\gamma} (g^{-1})_{\beta\delta} \mathbf{X}_{\delta}^l \psi_{\gamma}^l \mathbf{X}_{\alpha}^n \phi_{\beta}^n dS \\
&+ \int_{\Gamma} \sum_{\alpha,\beta=1}^2 \sum_{l=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\beta} \phi_{\beta}^l \psi_{\alpha}^l dS + \int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\phi}) \operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\psi}) dS.
\end{aligned}$$

Es gilt

$$\sum_{\alpha,\beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{X}_{\alpha}^l \mathbf{X}_{\beta}^n = \delta_{ln} - \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n \quad , l, n = 1, 2, 3 \quad (3.4)$$

(siehe Anhang). Damit folgt

$$\begin{aligned}
\delta_{\psi}(\delta_{\phi}A) &= - \int_{\Gamma} \sum_{l,n=1}^3 \mathcal{D}_l \phi^n \mathcal{D}_n \psi^l dS - \int_{\Gamma} \sum_{\alpha,\beta=1}^2 \sum_{l,n=1}^3 (\delta_{ln} - \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n) (g^{-1})_{\alpha\beta} \phi_{\alpha}^l \psi_{\beta}^n dS \\
&+ \int_{\Gamma} \sum_{\alpha,\beta=1}^2 \sum_{l=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\beta} \phi_{\beta}^l \psi_{\alpha}^l dS + \int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\phi}) \operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\psi}) dS \\
&= - \int_{\Gamma} \sum_{l,n=1}^3 \mathcal{D}_l \phi^n \mathcal{D}_n \psi^l dS + \int_{\Gamma} \sum_{\alpha,\beta=1}^2 \sum_{l,n=1}^3 \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n (g^{-1})_{\alpha\beta} \phi_{\alpha}^l \psi_{\beta}^n dS \\
&+ \int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\phi}) \operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\psi}) dS.
\end{aligned}$$

Variation des Willmore-Funktional

Einsetzen der zweiten Variation in die Bestimmungsgleichung für die Variation von \mathbf{Y} (3.3) ergibt

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Gamma} (\delta_{\phi} \mathbf{Y}) \cdot \boldsymbol{\psi} \, dS + \int_{\Gamma} (\mathbf{Y} \cdot \boldsymbol{\psi}) \operatorname{div}_{\Gamma}(\phi) \, dS - \int_{\Gamma} \sum_{l,n=1}^3 \mathcal{D}_l \phi^n \mathcal{D}_n \boldsymbol{\psi}^l \, dS \\ &\quad + \int_{\Gamma} \sum_{\alpha,\beta=1}^2 \sum_{l,n=1}^3 \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n (g^{-1})_{\alpha\beta} \phi_{\alpha}^l \boldsymbol{\psi}_{\beta}^n \, dS + \int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma}(\phi) \operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\psi}) \, dS. \end{aligned}$$

Es gilt

$$\sum_{\alpha,\beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} \phi_{\alpha}^l \boldsymbol{\psi}_{\beta}^n = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (g^{-1})_{\gamma\delta} g_{\alpha\gamma} \phi_{\beta}^l \boldsymbol{\psi}_{\delta}^n = \sum_{k=1}^3 \mathcal{D}_k \phi^l \mathcal{D}_k \boldsymbol{\psi}^n, \quad l, n = 1, 2, 3.$$

Der Normalenvektor steht senkrecht auf dem tangentialen Gradienten, sodass

$$\boldsymbol{\nu} \cdot \operatorname{grad}_{\Gamma}(\phi^n) = \sum_{l=1}^3 \boldsymbol{\nu}^l \mathcal{D}_l \phi^n = 0$$

gilt. Damit ergibt sich für den Term

$$\begin{aligned} &\sum_{\alpha,\beta=1}^2 \sum_{l,n=1}^3 \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n (g^{-1})_{\alpha\beta} \phi_{\alpha}^l \boldsymbol{\psi}_{\beta}^n - \sum_{l,n=1}^3 \mathcal{D}_l \phi^n \mathcal{D}_n \boldsymbol{\psi}^l \\ &= \sum_{k,l,n=1}^3 \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n \mathcal{D}_k \phi^l \mathcal{D}_k \boldsymbol{\psi}^n - \sum_{l,n=1}^3 \left(\mathcal{D}_l \phi^n + \mathcal{D}_n \phi^l \right) \mathcal{D}_n \boldsymbol{\psi}^l + \nabla_{\Gamma} \phi : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\psi}. \end{aligned}$$

Mit der Bezeichnung $D(\phi)_{ln} = \mathcal{D}_l \phi^n + \mathcal{D}_n \phi^l$ und wegen der Orthogonalität des Normalenvektors zum Gradienten erhält man

$$\begin{aligned} &\sum_{k,l,n=1}^3 \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n D(\phi)_{kn} \mathcal{D}_k \boldsymbol{\psi}^l - \sum_{k,n=1}^3 D(\phi)_{kn} \mathcal{D}_k \boldsymbol{\psi}^n + \nabla_{\Gamma} \phi : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\psi} \\ &= \sum_{k,l,n=1}^3 D(\phi)_{kn} \left(\boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n - \delta_{ln} \right) \mathcal{D}_k \boldsymbol{\psi}^l + \nabla_{\Gamma} \phi : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\psi}. \end{aligned}$$

Mit (3.4) und aus der Symmetrie von $\nabla_{\Gamma} \mathbf{X}$ ergibt sich

$$\begin{aligned} &- \sum_{k,l,n=1}^3 D(\phi)_{kn} (\nabla_{\Gamma} \mathbf{X})_{ln} (\nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\psi})_{kl} + \nabla_{\Gamma} \phi : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\psi} \\ &= - \sum_{l,n=1}^3 (D(\phi) \nabla_{\Gamma} \mathbf{X})_{ln} (\nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\psi})_{ln} + \nabla_{\Gamma} \phi : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\psi} \\ &= -(D(\phi) \nabla_{\Gamma} \mathbf{X}) : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\psi} + \nabla_{\Gamma} \phi : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\psi}. \end{aligned}$$

3. Variation der freien Energie

Daher gilt

$$0 = \int_{\Gamma} \delta_{\phi} \mathbf{Y} \cdot \boldsymbol{\psi} \, dS + \int_{\Gamma} (\mathbf{Y} \cdot \boldsymbol{\psi}) \operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\phi}) \, dS - \int_{\Gamma} (D(\boldsymbol{\phi}) \nabla_{\Gamma} \mathbf{X}) : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\psi} \, dS + \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\phi} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\psi} \, dS \\ + \int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\phi}) \operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\psi}) \, dS.$$

Einsetzen von $\boldsymbol{\psi} = \mathbf{Y}$ ergibt

$$\int_{\Gamma} (\delta_{\phi} \mathbf{Y}) \cdot \mathbf{Y} \, dS = - \int_{\Gamma} |\mathbf{Y}|^2 \operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\phi}) \, dS + \int_{\Gamma} (D(\boldsymbol{\phi}) \nabla_{\Gamma} \mathbf{X}) : \nabla_{\Gamma} \mathbf{Y} \, dS - \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\phi} : \nabla_{\Gamma} \mathbf{Y} \, dS \\ - \int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma}(\mathbf{Y}) \operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\phi}) \, dS.$$

Für $\operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\phi})$ erhält man, wobei wieder verwendet wird, dass das Matrixprodukt von g mit seiner Inversen die Einheitsmatrix ist,

$$\operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\phi}) = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 \sum_{n=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{X}_{\alpha}^n \phi_{\beta}^n = \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta=1}^2 \sum_{n=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{X}_{\alpha}^n (g^{-1})_{\gamma\delta} \phi_{\beta}^n g_{\alpha\gamma} \\ = \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta=1}^2 \sum_{l, n=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{X}_{\delta}^n \mathbf{X}_{\alpha}^l (g^{-1})_{\gamma\delta} \phi_{\beta}^n \mathbf{X}_{\gamma}^l = \sum_{l, n=1}^3 \mathcal{D}_l \mathbf{X}^n \mathcal{D}_l \phi^n = \nabla_{\Gamma} \mathbf{X} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\phi}.$$

Damit ergibt sich für die Variation des Willmore-Funktional

$$\delta_{\phi} F_w = \int_{\Gamma} (D(\boldsymbol{\phi}) \nabla_{\Gamma} \mathbf{X}) : \nabla_{\Gamma} \mathbf{Y} \, dS - \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\phi} : \nabla_{\Gamma} \mathbf{Y} \, dS - \int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma}(\mathbf{Y}) \operatorname{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\phi}) \, dS \\ - \frac{1}{2} \int_{\Gamma} |\mathbf{Y}|^2 \nabla_{\Gamma} \mathbf{X} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\phi} \, dS. \quad (3.5)$$

Variation in Normalenrichtung

Betrachtet man nun den Spezialfall der Variation in Normalenrichtung, so ist $\boldsymbol{\phi} = \phi \boldsymbol{\nu}$ und die Variation berechnet sich zu

$$\delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} F_w = \int_{\Gamma} \left(\left(\nabla_{\Gamma}(\phi \boldsymbol{\nu}) + (\nabla_{\Gamma}(\phi \boldsymbol{\nu}))^{\top} \right) \nabla_{\Gamma} \mathbf{X} \right) : \nabla_{\Gamma}(H \boldsymbol{\nu}) \, dS - \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma}(\phi \boldsymbol{\nu}) : \nabla_{\Gamma}(H \boldsymbol{\nu}) \, dS \\ - \int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma}(H \boldsymbol{\nu}) \operatorname{div}_{\Gamma}(\phi \boldsymbol{\nu}) \, dS - \frac{1}{2} \int_{\Gamma} H^2 \nabla_{\Gamma} \mathbf{X} : \nabla_{\Gamma}(\phi \boldsymbol{\nu}) \, dS.$$

Die einzelnen Terme können mit der Produktregel ausgerechnet werden. Der erste Term wird

$$\begin{aligned}
 (\nabla_\Gamma(\phi\nu)\nabla_\Gamma\mathbf{X}) : \nabla_\Gamma(H\nu) &= \sum_{k,l,n=1}^3 (\mathcal{D}_k\phi\nu^n\mathcal{D}_n\mathbf{X}^l\mathcal{D}_kH\nu^l + \mathcal{D}_k\phi\nu^n\mathcal{D}_n\mathbf{X}^l\mathcal{D}_k\nu^lH \\
 &\quad + \mathcal{D}_k\nu^n\phi\mathcal{D}_n\mathbf{X}^l\mathcal{D}_kH\nu^l + \mathcal{D}_k\nu^n\phi\mathcal{D}_n\mathbf{X}^l\mathcal{D}_k\nu^lH) \\
 &= \sum_{k,l=1}^3 \left(\mathcal{D}_k\phi(\nu \cdot \text{grad}_\Gamma(\mathbf{X}^l))\mathcal{D}_kH\nu^l + \mathcal{D}_k\phi(\nu \cdot \text{grad}_\Gamma(\mathbf{X}^l))\mathcal{D}_k\nu^lH \right) \\
 &\quad + \sum_{k,n=1}^3 \mathcal{D}_k\nu^n\phi(\mathcal{D}_n\mathbf{X} \cdot \nu)\mathcal{D}_kH + (\nabla_\Gamma\nu\nabla_\Gamma\mathbf{X}) : \nabla_\Gamma\nu H\phi.
 \end{aligned}$$

Die Günter-Ableitung \mathcal{D}_n angewendet auf \mathbf{X} ergibt

$$\mathcal{D}_n\mathbf{X} = \sum_{\alpha,\beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{X}_\beta \mathbf{X}_\alpha^n$$

und ist somit orthogonal zu ν . Damit verschwindet das Skalarprodukt mit ν , ebenso das Skalarprodukt von ν mit dem Gradienten:

$$(\nabla_\Gamma(\phi\nu)\nabla_\Gamma\mathbf{X}) : \nabla_\Gamma(H\nu) = (\nabla_\Gamma\nu\nabla_\Gamma\mathbf{X}) : \nabla_\Gamma\nu H\phi.$$

Für den zweiten Term wird ähnlich verfahren:

$$\begin{aligned}
 ((\nabla_\Gamma(\phi\nu))^\top \nabla_\Gamma\mathbf{X}) : \nabla_\Gamma(H\nu) &= \sum_{k,l,n=1}^3 (\mathcal{D}_n\phi\nu^k\mathcal{D}_n\mathbf{X}^l\mathcal{D}_kH\nu^l + \mathcal{D}_n\phi\nu^k\mathcal{D}_n\mathbf{X}^l\mathcal{D}_k\nu^lH \\
 &\quad + \mathcal{D}_n\nu^k\phi\mathcal{D}_n\mathbf{X}^l\mathcal{D}_kH\nu^l + \mathcal{D}_n\nu^k\phi\mathcal{D}_n\mathbf{X}^l\mathcal{D}_k\nu^lH) \\
 &= ((\nabla_\Gamma\nu)^\top \nabla_\Gamma\mathbf{X}) : \nabla_\Gamma\nu H\phi.
 \end{aligned}$$

Der dritte Term ist

$$\begin{aligned}
 -\nabla_\Gamma(\phi\nu) : \nabla_\Gamma(H\nu) &= -\sum_{k,l=1}^3 (\mathcal{D}_k\phi\nu^l\mathcal{D}_kH\nu^l + \mathcal{D}_k\phi\nu^l\mathcal{D}_k\nu^lH + \mathcal{D}_k\nu^l\phi\mathcal{D}_kH\nu^l + (\mathcal{D}_k\nu^l)^2\phi H) \\
 &= -(\text{grad}_\Gamma(\phi) \cdot \text{grad}_\Gamma(H))(\nu \cdot \nu) - \sum_{k,l=1}^3 (\mathcal{D}_k\phi\nu^l\mathcal{D}_k\nu^lH + \mathcal{D}_k\nu^l\phi\mathcal{D}_kH\nu^l) \\
 &\quad - (\nabla_\Gamma\nu : \nabla_\Gamma\nu)H\phi.
 \end{aligned}$$

3. Variation der freien Energie

Das Integral über diesen Term ergibt mit partieller Integration

$$\begin{aligned}
-\int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma}(\phi \boldsymbol{\nu}) : \nabla_{\Gamma}(H \boldsymbol{\nu}) \, dS &= -\int_{\Gamma} (\text{grad}_{\Gamma}(\phi) \cdot \text{grad}_{\Gamma}(H)) \, dS - \sum_{k,l=1}^3 \int_{\Gamma} \mathcal{D}_k \phi \boldsymbol{\nu}^l \mathcal{D}_k \boldsymbol{\nu}^l H \, dS \\
&\quad - \sum_{k,l=1}^3 \int_{\Gamma} \mathcal{D}_k \boldsymbol{\nu}^l \phi \mathcal{D}_k H \boldsymbol{\nu}^l \, dS - \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\nu} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\nu} H \phi \, dS \\
&= \int_{\Gamma} \Delta_{\Gamma} H \phi \, dS + \sum_{k,l=1}^3 \int_{\Gamma} \phi (\mathcal{D}_k \boldsymbol{\nu}^l)^2 H + \phi \boldsymbol{\nu}^l \mathcal{D}_k^2 \boldsymbol{\nu}^l H + \phi \boldsymbol{\nu}^l \mathcal{D}_k \boldsymbol{\nu}^l \mathcal{D}_k H \, dS \\
&\quad + \sum_{k,l=1}^3 \int_{\Gamma} \boldsymbol{\nu}_k H \phi \boldsymbol{\nu}^l \mathcal{D}_k \boldsymbol{\nu}^l H \, dS - \sum_{k,l=1}^3 \int_{\Gamma} \mathcal{D}_k \boldsymbol{\nu}^l \phi \mathcal{D}_k H \boldsymbol{\nu}^l \, dS \\
&\quad - \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\nu} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\nu} H \phi \, dS \\
&= \int_{\Gamma} \Delta_{\Gamma} H \phi \, dS + \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\nu} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\nu} H \phi \, dS + \int_{\Gamma} (\boldsymbol{\nu} \cdot \Delta_{\Gamma} \boldsymbol{\nu}) H \phi \, dS \\
&\quad - \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\nu} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\nu} H \phi \, dS.
\end{aligned}$$

Dabei wurde wieder verwendet, dass der Normalenvektor orthogonal zum Gradienten ist. Der vierte Term berechnet sich nach der Produktregel zu

$$-\text{div}_{\Gamma}(H \boldsymbol{\nu}) \text{div}_{\Gamma}(\phi \boldsymbol{\nu}) = -(\text{grad}_{\Gamma}(H) \cdot \boldsymbol{\nu} + H \text{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\nu})) (\text{grad}_{\Gamma}(\phi) \cdot \boldsymbol{\nu} + \phi \text{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\nu})).$$

Aus dem Verschwinden des Skalarprodukts des tangentialen Gradienten mit dem Normalenvektor folgt

$$-\text{div}_{\Gamma}(H \boldsymbol{\nu}) \text{div}_{\Gamma}(\phi \boldsymbol{\nu}) = -H (\text{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\nu}))^2 \phi.$$

Die Divergenz des Normalenvektors ist

$$\text{div}_{\Gamma}(\boldsymbol{\nu}) = \sum_{\alpha,\beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (\mathbf{X}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nu}_{\beta}) = - \sum_{\alpha,\beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} h_{\alpha\beta} = -H, \quad (3.6)$$

sodass

$$-\text{div}_{\Gamma}(H \boldsymbol{\nu}) \text{div}_{\Gamma}(\phi \boldsymbol{\nu}) = -H^3 \phi$$

gilt. Für den fünften Term gilt schließlich

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2} H^2 \nabla_{\Gamma} \mathbf{X} : \nabla_{\Gamma}(\phi \boldsymbol{\nu}) &= -\frac{1}{2} H^2 \sum_{k,l=1}^3 (\mathcal{D}_k \mathbf{X}^l \mathcal{D}_k \phi \boldsymbol{\nu}^l + \mathcal{D}_k \mathbf{X}^l \mathcal{D}_k \boldsymbol{\nu}^l \phi) \\
&= -\frac{1}{2} H^2 \left(\sum_{k=1}^3 (\mathcal{D}_k \mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\nu}) \mathcal{D}_k \phi + \nabla_{\Gamma} \mathbf{X} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\nu} \phi \right).
\end{aligned}$$

Aus der Orthogonalität der Günter-Ableitung \mathcal{D}_k angewendet auf \mathbf{X} zu $\boldsymbol{\nu}$ ergibt sich

$$-\frac{1}{2}H^2\nabla_\Gamma\mathbf{X} : \nabla_\Gamma(\phi\boldsymbol{\nu}) = -\frac{1}{2}H^2\nabla_\Gamma\mathbf{X} : \nabla_\Gamma\boldsymbol{\nu}\phi.$$

Das Integral über diesen Term berechnet sich mit partieller Integration zu

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}\int_\Gamma H^2\nabla_\Gamma\mathbf{X} : \nabla_\Gamma(\phi\boldsymbol{\nu}) \, dS &= -\frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^3\int_\Gamma H^2\mathcal{D}_k\mathbf{X}^l\mathcal{D}_k\boldsymbol{\nu}^l\phi \, dS \\ &= \frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^3\int_\Gamma 2H\mathcal{D}_kH\mathcal{D}_k\mathbf{X}^l\boldsymbol{\nu}^l\phi + H^2\mathcal{D}_k^2\mathbf{X}^l\boldsymbol{\nu}^l\phi + H^2\mathcal{D}_k\mathbf{X}^l\boldsymbol{\nu}^l\mathcal{D}_k\phi \, dS \\ &\quad + \frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^3\int_\Gamma \boldsymbol{\nu}_kH^2\mathcal{D}_k\mathbf{X}^l\boldsymbol{\nu}^l\phi \, dS \\ &= \frac{1}{2}\int_\Gamma \sum_{k=1}^3(2H\mathcal{D}_kH\phi + H^2\mathcal{D}_k\phi)(\mathcal{D}_k\mathbf{X}^l \cdot \boldsymbol{\nu}) + H^2(\Delta_\Gamma\mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\nu})\phi \, dS. \end{aligned}$$

Das Skalarprodukt der Günter-Ableitung der Parametrisierung mit dem Normalenvektor verschwindet wieder und mit $\Delta_\Gamma\mathbf{X} = \mathbf{Y} = H\boldsymbol{\nu}$ folgt

$$-\frac{1}{2}\int_\Gamma H^2\nabla_\Gamma\mathbf{X} : \nabla_\Gamma(\phi\boldsymbol{\nu}) \, dS = \frac{1}{2}\int_\Gamma H^3\phi \, dS.$$

Zusammengefasst ergibt sich für die Variation des Willmore-Funktional

$$\begin{aligned} \delta_{\phi\boldsymbol{\nu}}F_w &= \int_\Gamma \left((\nabla_\Gamma\boldsymbol{\nu}\nabla_\Gamma\mathbf{X}) : \nabla_\Gamma\boldsymbol{\nu} + ((\nabla_\Gamma\boldsymbol{\nu})^\top\nabla_\Gamma\mathbf{X}) : \nabla_\Gamma\boldsymbol{\nu} + (\boldsymbol{\nu} \cdot \Delta_\Gamma\boldsymbol{\nu}) - \frac{1}{2}H^2 \right) H\phi \, dS \\ &\quad + \int_\Gamma \Delta_\Gamma H\phi \, dS. \end{aligned}$$

Der erste Term lässt sich, wenn man die Summe über k als Skalarprodukt auffasst, formulieren als

$$(\nabla_\Gamma\boldsymbol{\nu}\nabla_\Gamma\mathbf{X}) : \nabla_\Gamma\boldsymbol{\nu} = \sum_{k,l,n=1}^3 \mathcal{D}_k\boldsymbol{\nu}^n\mathcal{D}_n\mathbf{X}^l\mathcal{D}_k\boldsymbol{\nu}^l = \sum_{l,n=1}^3 \text{grad}_\Gamma(\boldsymbol{\nu}^n) \cdot \text{grad}_\Gamma(\boldsymbol{\nu}^l)\mathcal{D}_n\mathbf{X}^l.$$

Mit der Formel für den Gradienten und mittels Umschreiben des Skalarprodukts als Summe über n folgt

$$\begin{aligned} (\nabla_\Gamma\boldsymbol{\nu}\nabla_\Gamma\mathbf{X}) : \nabla_\Gamma\boldsymbol{\nu} &= \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta=1}^2 \sum_{k,l,n=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\beta}\mathbf{X}_\alpha^k\boldsymbol{\nu}_\beta^n (g^{-1})_{\gamma\delta}\mathbf{X}_\gamma^k\boldsymbol{\nu}_\delta^l\mathcal{D}_n\mathbf{X}^l \\ &= \sum_{\alpha,\beta=1}^2 \sum_{l,n=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\beta}\boldsymbol{\nu}_\beta^n\boldsymbol{\nu}_\alpha^l\mathcal{D}_n\mathbf{X}^l = \sum_{\alpha,\beta=1}^2 \sum_{l=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\beta}\boldsymbol{\nu}_\beta \cdot \text{grad}_\Gamma(\mathbf{X}^l)\boldsymbol{\nu}_\alpha^l. \end{aligned}$$

3. Variation der freien Energie

Setzt man wieder die Formel für den Gradienten ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
(\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\nu}\nabla_{\Gamma}\mathbf{X}) : \nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\nu} &= \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (g^{-1})_{\gamma\delta} h_{\beta\gamma} h_{\alpha\delta} \\
&= \frac{1}{\det(g)^2} (g_{22}^2 h_{11}^2 - 4g_{12}g_{22}h_{11}h_{12} + 2g_{11}g_{22}h_{12}^2 + 2g_{12}^2 h_{12}^2 + 2g_{12}^2 h_{11}h_{22} \\
&\quad - 4g_{11}g_{12}h_{12}h_{22} + g_{11}^2 h_{22}^2) = H^2 - 2K.
\end{aligned}$$

Beim zweiten Term kann man die Summe über n ebenfalls als Skalarprodukt auffassen:

$$((\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\nu})^{\top}\nabla_{\Gamma}\mathbf{X}) : \nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\nu} = \sum_{k,l,n=1}^3 \mathcal{D}_n \boldsymbol{\nu}^k \mathcal{D}_n \mathbf{X}^l \mathcal{D}_k \boldsymbol{\nu}^l = \sum_{k,l=1}^3 \text{grad}_{\Gamma}(\boldsymbol{\nu}^k) \cdot \text{grad}_{\Gamma}(\mathbf{X}^l) \mathcal{D}_k \boldsymbol{\nu}^l.$$

Die Formel für den Gradienten und Formulieren der Summe über k als Skalarprodukt liefert

$$((\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\nu})^{\top}\nabla_{\Gamma}\mathbf{X}) : \nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\nu} = \sum_{\alpha,\beta=1}^2 \sum_{k,l=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\beta} \boldsymbol{\nu}_{\beta}^k \mathbf{X}_{\alpha}^l \mathcal{D}_k \boldsymbol{\nu}^l = \sum_{\alpha,\beta=1}^2 \sum_{l=1}^3 (g^{-1})_{\alpha\beta} \boldsymbol{\nu}_{\beta} \cdot \text{grad}_{\Gamma}(\boldsymbol{\nu}^l) \mathbf{X}_{\alpha}^l.$$

Durch Einsetzen des Gradienten erhält man das gleiche Ergebnis wie beim ersten Term:

$$((\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\nu})^{\top}\nabla_{\Gamma}\mathbf{X}) : \nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\nu} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (g^{-1})_{\gamma\delta} h_{\beta\gamma} h_{\alpha\delta} = (\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\nu}\nabla_{\Gamma}\mathbf{X}) : \nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\nu}.$$

Für den dritten Term ergibt sich

$$(\boldsymbol{\nu} \cdot \Delta_{\Gamma}\boldsymbol{\nu}) = \sum_{\alpha,\beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (\boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\nu}_{\alpha\beta}).$$

Dafür werden die Ableitungen des Normalenvektors benötigt:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\nu}_{\alpha} &= \frac{1}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|} \left((\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)_{\alpha} - (\boldsymbol{\nu} \cdot (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)_{\alpha}) \boldsymbol{\nu} \right), \\
\boldsymbol{\nu}_{\alpha\beta} &= \frac{1}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|} \left((\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)_{\alpha\beta} - (\boldsymbol{\nu} \cdot (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)_{\alpha})_{\beta} \boldsymbol{\nu} - (\boldsymbol{\nu} \cdot (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)_{\alpha}) \boldsymbol{\nu}_{\beta} \right. \\
&\quad \left. - (\boldsymbol{\nu} \cdot (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)_{\beta}) \boldsymbol{\nu}_{\alpha} \right).
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Das Produkt der zweiten Ableitung des Normalenvektors mit dem Normalenvektor ist damit

$$\boldsymbol{\nu}_{\alpha\beta} \cdot \boldsymbol{\nu} = -\frac{1}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|} (\boldsymbol{\nu}_{\beta} \cdot (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)_{\alpha}) \tag{3.8}$$

und das Produkt des abgeleiteten Normalenvektors mit der Ableitung des Kreuzprodukts

$$\boldsymbol{\nu}_{\beta} \cdot (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)_{\alpha} = -\frac{1}{\sqrt{\det(g)}} (g_{12}h_{1\alpha}h_{\beta 2} - g_{22}h_{1\alpha}h_{1\beta} - g_{11}h_{\alpha 2}h_{\beta 2} + g_{12}h_{1\beta}h_{\alpha 2}). \tag{3.9}$$

Damit ist schließlich der dritte Term das Negative des ersten:

$$(\boldsymbol{\nu} \cdot \Delta_{\Gamma} \boldsymbol{\nu}) = - \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} (g^{-1})_{\gamma\delta} h_{\alpha\gamma} h_{\beta\delta} = -(\nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\nu} \nabla_{\Gamma} \mathbf{X}) : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\nu}.$$

Also ist die normale Variation des Willmore-Funktional

$$\delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} F_w = \int_{\Gamma} \left(\Delta_{\Gamma} H + \frac{1}{2} H^3 - 2KH \right) \phi \, dS. \quad (3.10)$$

3.2. Normale Variation der mittleren Krümmung

Hier soll die normale Variation der mittleren Krümmung

$$H = \frac{g_{11}h_{22} - 2g_{12}h_{12} + g_{22}h_{11}}{g_{11}g_{22} - g_{12}^2}$$

berechnet werden. Mit Produkt- und Quotientenregel ergibt sich

$$\begin{aligned} \delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} H &= \frac{1}{\det^2(g)} \left((g_{11}g_{22} - g_{12}^2) (\delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} g_{11} h_{22} + g_{11} \delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} h_{22} - 2\delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} g_{12} h_{12} - 2g_{12} \delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} h_{12} + \delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} g_{22} h_{11} \right. \\ &\quad \left. + g_{22} \delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} h_{11}) \right. \\ &\quad \left. - (g_{11}h_{22} - 2g_{12}h_{12} + g_{22}h_{11}) (\delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} g_{11} g_{22} + g_{11} \delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} g_{22} - 2g_{12} \delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} g_{12}) \right). \end{aligned}$$

Dafür benötigt man die Variation des metrischen Tensors. Diese erhält man aus dem gestörten metrischen Tensor:

$$\delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} = \frac{\partial}{\partial t} \left((\mathbf{X} + t\phi \boldsymbol{\nu})_{\alpha} \cdot (\mathbf{X} + t\phi \boldsymbol{\nu})_{\beta} \right) \Big|_{t=0}.$$

Die Ableitung ist

$$(\mathbf{X} + t\phi \boldsymbol{\nu})_{\alpha} = \mathbf{X}_{\alpha} + t(\phi_{\alpha} \boldsymbol{\nu} + \phi \boldsymbol{\nu}_{\alpha}). \quad (3.11)$$

Also ergibt sich

$$\delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} g_{\alpha\beta} = \frac{\partial}{\partial t} (g_{\alpha\beta} - 2t\phi h_{\alpha\beta} + t^2(\phi_{\alpha} \phi_{\beta} + \phi^2 \boldsymbol{\nu}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nu}_{\beta})) \Big|_{t=0} = -2\phi h_{\alpha\beta}. \quad (3.12)$$

Dies wird in die Variation der mittleren Krümmung eingesetzt:

$$\delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} H = 2(H^2 - 2K)\phi + \frac{1}{\det(g)} (g_{11} \delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} h_{22} - 2g_{12} \delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} h_{12} + g_{22} \delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} h_{11}).$$

Die Variation der zweiten Fundamentalform ist:

$$\delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} h_{\alpha\beta} = \delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} \mathbf{X}_{\alpha\beta} \cdot \boldsymbol{\nu} + \mathbf{X}_{\alpha\beta} \cdot \delta_{\phi \boldsymbol{\nu}} \boldsymbol{\nu}.$$

3. Variation der freien Energie

Dazu wird die Variation der zweiten Ableitung der Parametrisierung bestimmt. Die zweite Ableitung der gestörten Oberfläche ist

$$\mathbf{X}_{\alpha\beta} + t(\phi_{\alpha\beta}\boldsymbol{\nu} + \phi_{\alpha}\boldsymbol{\nu}_{\beta} + \phi_{\beta}\boldsymbol{\nu}_{\alpha} + \phi\boldsymbol{\nu}_{\alpha\beta}).$$

Durch Ableiten nach t und Nullsetzen von t erhält man die Variation:

$$\delta_{\phi\boldsymbol{\nu}}\mathbf{X}_{\alpha\beta} = \phi_{\alpha\beta}\boldsymbol{\nu} + \phi_{\alpha}\boldsymbol{\nu}_{\beta} + \phi_{\beta}\boldsymbol{\nu}_{\alpha} + \phi\boldsymbol{\nu}_{\alpha\beta}.$$

Demnach ist die Variation der zweiten Fundamentalform

$$\delta_{\phi\boldsymbol{\nu}}h_{\alpha\beta} = \phi_{\alpha\beta} + \phi\boldsymbol{\nu}_{\alpha\beta} \cdot \boldsymbol{\nu} + \mathbf{X}_{\alpha\beta} \cdot \delta_{\phi\boldsymbol{\nu}}\boldsymbol{\nu}.$$

Die Ableitungen des Normalenvektors (Gleichungen (3.7)) und auch das Skalarprodukt des Normalenvektors mit seiner zweiten Ableitung (Gleichungen (3.8) und (3.9)) sind aus dem vorherigen Kapitel bekannt:

$$\boldsymbol{\nu}_{\alpha\beta} \cdot \boldsymbol{\nu} = \frac{1}{\det(g)}(g_{12}h_{1\alpha}h_{\beta 2} - g_{22}h_{1\alpha}h_{1\beta} - g_{11}h_{\alpha 2}h_{\beta 2} + g_{12}h_{1\beta}h_{\alpha 2}).$$

Jetzt wird die Variation des Normalenvektors bestimmt. Dafür wird die Variation der ersten Ableitung von \mathbf{X} benötigt (aus Gleichung (3.11)):

$$\delta_{\phi\boldsymbol{\nu}}\mathbf{X}_{\alpha} = \phi_{\alpha}\boldsymbol{\nu} + \phi\boldsymbol{\nu}_{\alpha}.$$

Es ergibt sich

$$\delta_{\phi\boldsymbol{\nu}}\boldsymbol{\nu} = \frac{1}{|\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2|} \left((\phi_1\boldsymbol{\nu} + \phi\boldsymbol{\nu}_1) \times \mathbf{X}_2 + \mathbf{X}_1 \times (\phi_2\boldsymbol{\nu} + \phi\boldsymbol{\nu}_2) - \phi(\boldsymbol{\nu} \cdot (\boldsymbol{\nu}_1 \times \mathbf{X}_2 + \mathbf{X}_1 \times \boldsymbol{\nu}_2))\boldsymbol{\nu} \right).$$

Damit berechnet sich die Variation der zweiten Fundamentalform zu

$$\begin{aligned} & \frac{\phi}{\sqrt{\det(g)}} \left(\mathbf{X}_{\alpha\beta} \cdot \left(\boldsymbol{\nu}_1 \times \mathbf{X}_2 + \mathbf{X}_1 \times \boldsymbol{\nu}_2 - (\boldsymbol{\nu} \cdot (\boldsymbol{\nu}_1 \times \mathbf{X}_2 + \mathbf{X}_1 \times \boldsymbol{\nu}_2))\boldsymbol{\nu} \right) - (\boldsymbol{\nu}_{\beta} \cdot (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)_{\alpha}) \right) \\ & + \frac{\phi_1}{\sqrt{\det(g)}} \mathbf{X}_{\alpha\beta} \cdot (\boldsymbol{\nu} \times \mathbf{X}_2) + \frac{\phi_2}{\sqrt{\det(g)}} \mathbf{X}_{\alpha\beta} \cdot (\mathbf{X}_1 \times \boldsymbol{\nu}) + \phi_{\alpha\beta}. \end{aligned}$$

Die einzelnen Terme sind

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nu}_{\alpha} \times \mathbf{X}_{\beta} &= \frac{1}{\sqrt{\det(g)}}(g_{1\beta}h_{\alpha 2} - g_{\beta 2}h_{1\alpha})\boldsymbol{\nu}, \\ \boldsymbol{\nu} \times \mathbf{X}_{\alpha} &= \frac{1}{\sqrt{\det(g)}}(g_{1\alpha}\mathbf{X}_2 - g_{\alpha 2}\mathbf{X}_1). \end{aligned}$$

Es ergibt sich für die Variation der zweiten Fundamentalform

$$\begin{aligned} \delta_{\phi\boldsymbol{\nu}}h_{\alpha\beta} &= \frac{\phi}{\det(g)}(g_{12}h_{1\alpha}h_{\beta 2} - g_{22}h_{1\alpha}h_{1\beta} - g_{11}h_{\alpha 2}h_{\beta 2} + g_{12}h_{1\beta}h_{\alpha 2}) \\ & + \frac{\phi_1}{\det(g)}\mathbf{X}_{\alpha\beta} \cdot (g_{12}\mathbf{X}_2 - g_{22}\mathbf{X}_1) + \frac{\phi_2}{\det(g)}\mathbf{X}_{\alpha\beta} \cdot (g_{12}\mathbf{X}_1 - g_{11}\mathbf{X}_2) + \phi_{\alpha\beta}. \end{aligned}$$

Der Term $\nu_\beta \cdot (\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)_\alpha$ wurde bereits im vorherigen Kapitel bestimmt (Gleichung (3.9)). Dies kann nun in die Variation der mittleren Krümmung eingesetzt werden:

$$\begin{aligned} \delta_{\phi\nu} H &= \frac{\phi_1}{\det(g)^2} (g_{11}g_{12}(\mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_{22}) - g_{11}g_{22}(\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{X}_{22}) - 2g_{12}^2(\mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_{12}) + 2g_{12}g_{22}(\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{X}_{12}) \\ &\quad + g_{12}g_{22}(\mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_{11}) - g_{22}^2(\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{X}_{11})) \\ &\quad + \frac{\phi_2}{\det(g)^2} (g_{11}g_{12}(\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{X}_{22}) - g_{11}^2(\mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_{22}) - 2g_{12}^2(\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{X}_{12}) + 2g_{11}g_{12}(\mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_{12}) \\ &\quad + g_{12}g_{22}(\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{X}_{11}) - g_{11}g_{22}(\mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_{11})) \\ &\quad + \frac{1}{\det(g)} (g_{11}\phi_{22} - 2g_{12}\phi_{12} + g_{22}\phi_{11}) + (H^2 - 2K)\phi. \end{aligned}$$

Zusammengefasst ergeben die Terme vor den ersten Ableitungen von ϕ :

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\det(g)^2} (g_{11}g_{12}(\mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_{22}) - g_{11}g_{22}(\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{X}_{22}) - 2g_{12}^2(\mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_{12}) + 2g_{12}g_{22}(\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{X}_{12}) \\ &\quad + g_{12}g_{22}(\mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_{11})) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\det(g)}} \left(\left(\frac{g_{22}}{\sqrt{\det(g)}} \right)_1 - \left(\frac{g_{12}}{\sqrt{\det(g)}} \right)_2 \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\det(g)}} \left(\left(\sqrt{\det(g)} (g^{-1})_{11} \right)_1 + \left(\sqrt{\det(g)} (g^{-1})_{12} \right)_2 \right). \end{aligned}$$

Genauso wird mit dem Vorfaktor der zweiten Ableitung verfahren:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\det(g)^2} (g_{11}g_{12}(\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{X}_{22}) - g_{11}^2(\mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_{22}) - 2g_{12}^2(\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{X}_{12}) + 2g_{11}g_{12}(\mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_{12}) \\ &\quad + g_{12}g_{22}(\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{X}_{11}) - g_{11}g_{22}(\mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_{11})) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\det(g)}} \left(\left(\sqrt{\det(g)} (g^{-1})_{12} \right)_1 + \left(\sqrt{\det(g)} (g^{-1})_{22} \right)_2 \right). \end{aligned}$$

Damit ergibt sich für die Variation

$$\delta_{\phi\nu} H = \frac{1}{\sqrt{\det(g)}} \sum_{\alpha,\beta=1}^2 \left(\sqrt{\det(g)} (g^{-1})_{\alpha\beta} \phi_\beta \right)_\alpha + (H^2 - 2K)\phi = \Delta_\Gamma \phi + (H^2 - 2K)\phi. \quad (3.13)$$

3.3. Normale Variation der Fläche

Für die Variation der Wurzel der Determinante des metrischen Tensors kann auf die bereits bekannte Variation des metrischen Tensors (3.12) zurückgegriffen werden:

$$\delta_{\phi\nu} \left(\sqrt{\det(g)} \right) = -\frac{1}{\sqrt{\det(g)}} (h_{11}g_{22} + g_{11}h_{22} - 2g_{12}h_{12})\phi = -H\phi\sqrt{\det(g)}.$$

3. Variation der freien Energie

Also ist die Variation der Fläche

$$\delta_{\phi\nu} A = \int_{\Gamma} -H\phi \, dS. \quad (3.14)$$

Mit partieller Integration erkennt man, dass die Variation mit allgemeinem ϕ (3.2) für $\phi = \phi\nu$ das gleiche Ergebnis liefert:

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} \sum_{l,n=1}^3 \mathcal{D}_l \mathbf{X}^n \mathcal{D}_l \phi^n \, dS &= \int_{\Gamma} \sum_{n=1}^3 \text{grad}_{\Gamma}(\mathbf{X}^n) \cdot \text{grad}_{\Gamma}(\phi^n) \, dS = - \int_{\Gamma} \sum_{n=1}^3 \Delta_{\Gamma} \mathbf{X}^n \phi^n \, dS \\ &= - \int_{\Gamma} \Delta_{\Gamma} \mathbf{X} \cdot \phi \, dS = - \int_{\Gamma} \mathbf{Y} \cdot \phi \, dS = - \int_{\Gamma} H\phi \, dS. \end{aligned}$$

3.4. Normale Variation des Kontakt-Funktional

Die Variation des Kontakt-Funktional

$$F_k = W_0 \int_{\Gamma} W(|\mathbf{r}|) \, dS$$

ist nach Produkt- und Kettenregel:

$$\delta_{\phi\nu} F_k = W_0 \left(\int_{\Gamma} W'(|\mathbf{r}|) \delta_{\phi\nu} |\mathbf{r}| \, dS + \int_{\Omega} W(|\mathbf{r}|) \delta_{\phi\nu} (\sqrt{\det(g)}) \, d\xi_1 \, d\xi_2 \right).$$

Die Variation des Abstandes ist

$$\delta_{\phi\nu} |\mathbf{r}| = \frac{\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\nu}}{|\mathbf{r}|} \phi$$

und die der Wurzel der Determinante des metrischen Tensors bekanntermaßen

$$\delta_{\phi\nu} (\sqrt{\det(g)}) = -H\phi \sqrt{\det(g)}.$$

Also ergibt sich

$$\delta_{\phi\nu} F_k = W_0 \int_{\Gamma} \left(W'(|\mathbf{r}|) \frac{\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\nu}}{|\mathbf{r}|} - HW(|\mathbf{r}|) \right) \phi \, dS.$$

Für ein Kontakt-Potential der Form

$$W(|\mathbf{r}|) = d_0^4 |\mathbf{r}|^{-4} - 2d_0^2 |\mathbf{r}|^{-2}$$

ist die Variation

$$\delta_{\phi\nu} F_k = W_0 d_0^2 \int_{\Gamma} |\mathbf{r}|^{-2} \left(4|\mathbf{r}|^{-2} (-d_0^2 |\mathbf{r}|^{-2} + 1) (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\nu}) - (d_0^2 |\mathbf{r}|^{-2} - 2) H \right) \phi \, dS.$$

3.5. Normale Variation des Flächen- und Volumenerhaltungsterms

Durch Variation des Funktionals

$$F_{A,V} = \lambda A + \mu V$$

erhält man

$$\delta_{\phi\nu} F_{A,V} = \lambda \delta_{\phi\nu} A + \mu \delta_{\phi\nu} V.$$

Die Variation der Fläche wurde bereits im vorherigen Abschnitt berechnet und die Variation des Volumens ergibt sich daraus, dass ein Volumenelement aus der Basis dS und der Höhe $t\phi$ in Normalenrichtung besteht [35]:

$$\delta_{\phi\nu} F_{A,V} = \int_{\Gamma} (-\lambda H + \mu) \phi \, dS.$$

3.6. Zusammenfassung der Variation des gesamten Funktionals

Mit den in den vorherigen Kapiteln berechneten Ergebnissen erhält man für die Variation des gesamten Funktionals

$$\begin{aligned} \delta_{\phi\nu} \mathcal{F} &= k_c \delta_{\phi\nu} F_w - k_c \int_{\Gamma} H_0 \delta_{\phi\nu} H \, dS + \frac{k_c}{2} \int_{\Gamma} H_0^2 \, dS - 2H_0 \int_{\Omega} H \delta_{\phi\nu} \left(\sqrt{\det(g)} \right) \, d\xi_1 \, d\xi_2 + \delta_{\phi\nu} F_k \\ &\quad + \delta_{\phi\nu} F_{A,V} \\ &= k_c \int_{\Gamma} \left(\Delta_{\Gamma} H + \frac{1}{2} H^3 - 2KH - \frac{1}{2} (H_0^2 - 2H_0 H) H \right) \phi \, dS - k_c H_0 \int_{\Gamma} \Delta_{\Gamma} \phi + (H^2 - 2K) \phi \, dS \\ &\quad + \int_{\Gamma} \left(W_0 \left(W'(|\mathbf{r}|) \frac{\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\nu}}{|\mathbf{r}|} - HW(|\mathbf{r}|) \right) - \lambda H + \mu \right) \phi \, dS. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Wegen der Formel für die partielle Integration gilt

$$\int_{\Gamma} \Delta_{\Gamma} \phi \, dS = 0$$

und man erhält für die Variation des Helfrich-Funktional

$$\frac{1}{2} \delta_{\phi\nu} F_h = \int_{\Gamma} \left(\Delta_{\Gamma} H + \frac{1}{2} H^3 - 2KH + 2H_0 K - \frac{1}{2} H_0^2 H \right) \phi \, dS.$$

Dasselbe Ergebnis erhält man auch durch Variation des Willmore-Funktional direkt in Normalenrichtung. In

$$\delta_{\phi\nu} F_w = \int_{\Gamma} \delta_{\phi\nu} H H \, dS + \frac{1}{2} \int_{\Omega} H^2 \delta_{\phi\nu} \left(\sqrt{\det(g)} \right) \, d\xi_1 \, d\xi_2$$

setzt man die Variation der mittleren Krümmung ein:

$$\delta_{\phi\nu} F_w = \int_{\Gamma} H (\Delta_{\Gamma} \phi + (H^2 - 2K) \phi) \, dS - \frac{1}{2} \int_{\Gamma} H^3 \phi \, dS$$

3. Variation der freien Energie

und mit

$$\int_{\Gamma} \Delta_{\Gamma} \phi H \, dS = - \int_{\Gamma} \text{grad}_{\Gamma}(\phi) \cdot \text{grad}_{\Gamma}(H) \, dS = \int_{\Gamma} \Delta_{\Gamma} H \phi \, dS$$

folgt das gleiche Ergebnis wie bei der Variation in allgemeine Richtung.

4. Evolution

In diesem Kapitel wird die Durchführung der Willmore-Evolution beschrieben. Außerdem werden zur Minimierung des vollständigen Helfrich-Funktional noch zusätzlich zur Willmore-Geschwindigkeit der mittlere Krümmungsvektor, die Gauß-Krümmung, der Flächen- und Volumenerhaltungsterm sowie der Kontaktterm benötigt.

4.1. Willmore-Evolution

Das Willmore-Energiefunktional

$$F_w = \frac{1}{2} \int_{\Gamma} H^2 dS$$

ist der mathematisch anspruchsvollste Teil des Helfrich-Funktional, weshalb es gesondert betrachtet wird.

Die Geschwindigkeit beträgt nach (3.10)

$$v_w = - \left(\Delta_{\Gamma} H + \frac{1}{2} H^3 - 2KH \right).$$

Die Oberfläche Γ muss also gemäß

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = v_w \boldsymbol{\nu} = - \left(\Delta_{\Gamma} H + \frac{1}{2} H^3 - 2KH \right) \boldsymbol{\nu}$$

bewegt werden. Wegen $H = \Delta_{\Gamma} \mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\nu}$ wird \mathbf{X} viermal abgeleitet. Im Fall einer stückweise linear diskretisierten Oberfläche verschwinden jedoch höhere Ableitungen als Ableitungen der Ordnung eins von Funktionen auf der Oberfläche und daher auch alle Terme auf der rechten Seite.

Die Grundidee ist, eine zusätzliche unbekannt Funktion einzuführen, um die Differentialgleichung vierter Ordnung auf ein System von Differentialgleichungen zweiter Ordnung in gemischter Formulierung zu reduzieren. Die beiden zu bestimmenden Funktionen sind dann die Parametrisierung der Oberfläche \mathbf{X} und der mittlere Krümmungsvektor $\mathbf{Y} = \Delta_{\Gamma} \mathbf{X} = H\boldsymbol{\nu}$. Dieser Ansatz liefert zusammen mit einer schwachen Formulierung und einer Linearisierung in jedem Zeitschritt ein System von linearen Gleichungen.

Das Anfangswertproblem lautet

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = v_w \boldsymbol{\nu} = - \left(\Delta_{\Gamma} H + \frac{1}{2} H^3 - 2KH \right) \boldsymbol{\nu} \quad \text{mit} \quad \mathbf{X}(\Omega, 0) = \Gamma_0$$

4. Evolution

für eine Anfangsoberfläche Γ_0 . Obwohl die Differentialgleichung nicht linear, vierter Ordnung und partiell ist, ist es möglich, eine Existenzaussage über die Evolution mit Willmore-Geschwindigkeit v_w zu machen [19]:

Satz 4.1. *Sei $\Gamma_0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ eine glatte Immersion einer Sphäre Ω mit Willmore-Energie $F_w \leq 16\pi$. Dann existiert die Willmore-Evolution mit Anfangsoberfläche Γ_0 für alle Zeiten und konvergiert zu einer Sphäre.*

Ist die Anfangsoberfläche also hinreichend nahe an einer Sphäre mit Willmore-Energie 16π , so evolviert sie zu einer Sphäre.

Die Differentialgleichung

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = v_w \nu$$

lautet in schwacher Formulierung

$$\int_{\Gamma} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \cdot \phi \, dS = -\delta_{\phi} F_w.$$

Die Variation ist gemäß (3.5)

$$\begin{aligned} \delta_{\phi} F_w &= \int_{\Gamma} (D(\phi) \nabla_{\Gamma} \mathbf{X}) : \nabla_{\Gamma} \mathbf{Y} \, dS - \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \phi : \nabla_{\Gamma} \mathbf{Y} \, dS - \int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma}(\mathbf{Y}) \operatorname{div}_{\Gamma}(\phi) \, dS \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_{\Gamma} |\mathbf{Y}|^2 \nabla_{\Gamma} \mathbf{X} : \nabla_{\Gamma} \phi \, dS. \end{aligned}$$

Folglich ergibt sich die Aufgabenstellung, für eine gegebene Anfangsoberfläche Γ_0 eine Parametrisierung $\mathbf{X} \in (H^1(\Gamma))^3$ und einen mittleren Krümmungsvektor $\mathbf{Y} \in (H^1(\Gamma))^3$ zu finden mit $\mathbf{X}(t=0) = \Gamma_0$, sodass

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Gamma} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \cdot \phi \, dS - \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \mathbf{Y} : \nabla_{\Gamma} \phi \, dS + \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \mathbf{Y} : (D(\phi) \nabla_{\Gamma} \mathbf{X}) \, dS - \int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma}(\mathbf{Y}) \operatorname{div}_{\Gamma}(\phi) \, dS \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_{\Gamma} |\mathbf{Y}|^2 \nabla_{\Gamma} \mathbf{X} : \nabla_{\Gamma} \phi \, dS, \\ 0 &= \int_{\Gamma} \mathbf{Y} \cdot \psi \, dS + \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \mathbf{X} : \nabla_{\Gamma} \psi \, dS \end{aligned}$$

für alle Testfunktionen $\phi \in (H^1(\Gamma))^3$ und $\psi \in (H^1(\Gamma))^3$ erfüllt ist. Die zeitliche Ableitung wird durch den Differenzenquotienten

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \approx \frac{\mathbf{X}^{m+1} - \mathbf{X}^m}{T} \tag{4.1}$$

mit $\mathbf{X}^m(\xi) \approx \mathbf{X}(\xi, mT)$ und der Schrittweite T approximiert. Um größere Zeitschritte wählen zu können, soll die diskrete Gleichung möglichst implizit werden. Daher wird, wenn möglich, für \mathbf{X}

beziehungsweise \mathbf{Y} \mathbf{X}^{m+1} beziehungsweise \mathbf{Y}^{m+1} gewählt. An nichtlinearen Stellen wird \mathbf{X}^m beziehungsweise \mathbf{Y}^m genommen. Damit erhält man das diskrete System

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \int_{\Gamma_h^m} \mathbf{X}^m \cdot \phi \, dS &= \frac{1}{T} \int_{\Gamma_h^m} \mathbf{X}^{m+1} \cdot \phi \, dS - \int_{\Gamma_h^m} \nabla_{\Gamma_h^m} \mathbf{Y}^{m+1} : \nabla_{\Gamma_h^m} \phi \, dS \\ &+ \int_{\Gamma_h^m} \nabla_{\Gamma_h^m} \mathbf{Y}^{m+1} : (D(\phi) \nabla_{\Gamma_h^m} \mathbf{X}^m) \, dS - \int_{\Gamma_h^m} \operatorname{div}_{\Gamma_h^m} (\mathbf{Y}^{m+1}) \operatorname{div}_{\Gamma_h^m} (\phi) \, dS \\ &- \frac{1}{2} \int_{\Gamma_h^m} |\mathbf{Y}^m|^2 \nabla_{\Gamma_h^m} \mathbf{X}^{m+1} : \nabla_{\Gamma_h^m} \phi \, dS, \\ 0 &= \int_{\Gamma_h^m} \mathbf{Y}^{m+1} \cdot \psi \, dS + \int_{\Gamma_h^m} \nabla_{\Gamma_h^m} \mathbf{X}^{m+1} : \nabla_{\Gamma_h^m} \psi \, dS. \end{aligned}$$

In der zweiten Zeile im ersten Term wäre natürlich auch die Wahl \mathbf{X}^{m+1} und \mathbf{Y}^m möglich gewesen. Die diskreten Vektoren werden mit Hilfe der linearen Knotenbasisfunktionen ϕ_i und der Werte \mathbf{X}_i beziehungsweise \mathbf{Y}_i in den Knoten dargestellt:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^{m+1} &= \sum_{i=1}^{N_K} \mathbf{X}_i \phi_i, \\ \mathbf{Y}^{m+1} &= \sum_{i=1}^{N_K} \mathbf{Y}_i \phi_i. \end{aligned}$$

Als Testfunktionen für ϕ und ψ werden $\phi_i \mathbf{e}_l$ für $i = 1, \dots, N_K$ und $l = 1, 2, 3$ gewählt. Damit ergibt sich folgendes Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^l &= \frac{1}{T} M \mathbf{X}^l - S \mathbf{Y}^l + \sum_{n=1}^3 R^{ln} \mathbf{Y}^n + \sum_{n=1}^3 (S^{ml} - S^{ln}) \mathbf{Y}^n - \frac{1}{2} Q \mathbf{X}^l, \\ 0 &= M \mathbf{Y}^l + S \mathbf{X}^l, \quad l = 1, 2, 3 \end{aligned}$$

mit der Massenmatrix M und der Steifheitsmatrix S ,

$$M_{ij} = \int_{\Gamma_h^m} \phi_i \phi_j \, dS, \quad S_{ij} = \int_{\Gamma_h^m} \left(\operatorname{grad}_{\Gamma_h^m}(\phi_i) \cdot \operatorname{grad}_{\Gamma_h^m}(\phi_j) \right) \, dS, \quad (4.2)$$

den Matrizen

$$\begin{aligned} R_{ij}^{ln} &= \int_{\Gamma_h^m} (\delta_{ln} - \nu_l \nu_n) \left(\operatorname{grad}_{\Gamma_h^m}(\phi_i) \cdot \operatorname{grad}_{\Gamma_h^m}(\phi_j) \right) \, dS, \\ S_{ij}^{ln} &= \int_{\Gamma_h^m} \mathcal{D}_l \phi_i \mathcal{D}_n \phi_j \, dS, \\ Q_{ij} &= \int_{\Gamma_h^m} |\mathbf{Y}^m|^2 \left(\operatorname{grad}_{\Gamma_h^m}(\phi_i) \cdot \operatorname{grad}_{\Gamma_h^m}(\phi_j) \right) \, dS, \end{aligned}$$

4. Evolution

den Vektoren der Knotenwerte

$$\mathbf{X}^l = \left(\mathbf{X}_1^l, \dots, \mathbf{X}_{N_K}^l \right)^\top, \quad \mathbf{Y}^l = \left(\mathbf{Y}_1^l, \dots, \mathbf{Y}_{N_K}^l \right)^\top \quad (4.3)$$

und der rechten Seite

$$\mathbf{x}_i^l = \frac{1}{T} \int_{\Gamma_h^m} (\mathbf{X}^m)^l \phi_i \, dS. \quad (4.4)$$

Das nicht symmetrische Gleichungssystem wird mit dem GMRES-Verfahren [24] gelöst.

4.2. Evolution mit mittlerer Krümmung

Da der mittlere Krümmungsvektor eine der Unbekannten des Gleichungssystems der Willmore-Evolution ist, erhält man diesen bei der Lösung mit und kann ihn im darauffolgenden Schritt direkt verwenden. Nur im ersten Schritt muss die Evolution mit Geschwindigkeit \mathbf{Y} getrennt berechnet werden.

Die Gleichung für den Krümmungsvektor lautet

$$\mathbf{Y} = \Delta_\Gamma \mathbf{X}.$$

In schwacher Formulierung erhält man nach partieller Integration

$$\int_\Gamma \mathbf{Y} \cdot \phi \, dS = - \int_\Gamma \nabla_\Gamma \mathbf{X} \cdot \nabla_\Gamma \phi \, dS.$$

\mathbf{X} und \mathbf{Y} werden wieder mit den Knotenbasisfunktionen approximiert, Γ mit der Triangulierung Γ_h und als Testfunktionen werden $\phi_j \mathbf{e}_l$ mit $j = 1, \dots, N_K$ und $l = 1, 2, 3$ gewählt. Es folgt das diskrete System

$$M \mathbf{Y}^l = -S \mathbf{X}^l, \quad l = 1, 2, 3, \quad (4.5)$$

mit den bereits aus (4.2) bekannten Matrizen M und S und Vektoren \mathbf{X}^l und \mathbf{Y}^l aus (4.3). Um nun die Evolution mit Geschwindigkeit \mathbf{Y} zu bekommen, wird

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = -\mathbf{Y} = -\Delta_\Gamma \mathbf{X}$$

mit einer gegebenen Anfangsoberfläche gelöst.

Mit der Approximation der zeitlichen Ableitung (4.1) und dem mittleren Krümmungsvektor

$$\mathbf{Y}^{m+1} = \Delta_\Gamma \mathbf{X}^{m+1}$$

im schwachen Sinn, also

$$\mathbf{Y}^l = -M^{-1} S \mathbf{X}^l \quad \text{für } l = 1, 2, 3$$

aus Gleichung (4.5) und der Wahl $\phi_j \mathbf{e}_l$ als Testfunktionen für $j = 1, \dots, N_K$ und $l = 1, 2, 3$ folgen die diskreten Gleichungssysteme

$$(M - TM^{-1}S)\mathbf{X}^l = \mathbf{x}^l, \quad l = 1, 2, 3,$$

mit der rechten Seite (4.1) wie bei der Willmore-Evolution.

Die Massenmatrix M und auch die Matrix $M - TM^{-1}S$ der zu lösenden Gleichungssysteme sind symmetrisch positiv definit, das heißt es kann das Verfahren der konjugierten Gradienten verwendet werden.

4.3. Gauß-Krümmung

Für die Approximation der Gauß-Krümmung gibt es verschiedene Ansätze. Sie kann als Determinante der zweiten Fundamentalform aus der Näherung derselben bestimmt werden oder es können die Winkel der Dreiecke der Diskretisierung verwendet werden.

Schwache Formulierung

Die Gauß-Krümmung ist das Produkt der Hauptkrümmungen, welche die Eigenwerte der zweiten Fundamentalform darstellen. Diese kann in schwacher Formulierung aus

$$\int_{\Gamma} (\mathbb{I}_k \cdot \phi) \, dS = - \int_{\Gamma} \boldsymbol{\nu}^k \operatorname{div}_{\Gamma}(\phi) \, dS - \int_{\Gamma} \boldsymbol{\nu}^k (\mathbf{Y} \cdot \phi) \, dS, \quad k = 1, 2, 3$$

bestimmt werden [16]. \mathbb{I}_k ist dabei die k -te Spalte der zweiten Fundamentalform. Die zweite Fundamentalform wird als (3×3) -Matrix dargestellt, sie kann jedoch höchstens zwei Eigenwerte haben, die nicht Null sind, da sie auf dem zweidimensionalen Tangentialraum definiert ist. Das diskrete Gleichungssystem lautet

$$M\mathbf{Z}^{kl} = -\mathbf{A}^{kl} - B^l \mathbf{Y}^k, \quad k, l = 1, 2, 3$$

mit der Massenmatrix M , der Matrix

$$B_{ij}^l = \int_{\Gamma_h} \boldsymbol{\nu}_h^l \phi_i \phi_j \, dS,$$

dem diskreten Normalenvektor $\boldsymbol{\nu}_h$, den Vektoren \mathbf{Y}^k der Knotenwerte von \mathbf{Y} in den Knoten der Triangulierung Γ_h und den Vektoren

$$\mathbf{Z}_j^{kl} = (\mathbb{I}_{kl}^h)_j, \quad \mathbf{A}_j^{kl} = - \int_{\Gamma_h} \boldsymbol{\nu}_h^l \mathcal{D}_k \phi_j \, dS.$$

Hat man die zweite Fundamentalform in jedem Knoten berechnet, kann man ihre Eigenwerte bestimmen, wobei einer Null ist, da die Oberfläche zweidimensional ist, und die anderen beiden die Hauptkrümmungen darstellen.

4. Evolution

Winkelformel

Um eine Näherung der Gauß-Krümmung für diskrete Oberflächen zu erhalten, wird sie im glatten Fall in einer Form dargestellt, die auch im diskreten Fall verwendet werden kann [22]. Sie wird im Punkt \mathbf{P} über

$$K(\mathbf{P}) = \lim_{\text{diam}(A(\mathbf{P})) \rightarrow 0} \frac{A(\text{Bild}(\nu_{A(\mathbf{P})}))}{A(\mathbf{P})}$$

definiert, wobei $A(\mathbf{P})$ eine infinitesimale Fläche um \mathbf{P} ist und $A(\text{Bild}(\nu_{A(\mathbf{P})}))$ die Fläche des Bildes des Normalenvektors zur Fläche $A(\mathbf{P})$ ist. Zur Gauß-Krümmung zugehörig ist die durchschnittliche Gauß-Krümmung

$$\frac{1}{A(\mathbf{P})} \int_{A(\mathbf{P})} K \, dS.$$

Diese konvergiert für Triangulierungen, die die ursprüngliche Oberfläche gut approximieren, gegen die exakte durchschnittliche Gauß-Krümmung. Im diskreten Fall kann mit Hilfe des Gauß-Bonnet-Theorems das Integral über die Gauß-Krümmung berechnet werden zu

$$\int_{A(\mathbf{P}_j)} K \, dS = 2\pi - \sum_{i(\mathbf{P}_j)=1}^{N_D(\mathbf{P}_j)} \theta_{i(\mathbf{P}_j)},$$

wobei die $\theta_{i(\mathbf{P}_j)}$ die Winkel der $N_D(\mathbf{P}_j)$ Dreiecke um \mathbf{P}_j sind, siehe auch Abbildung 4.1.

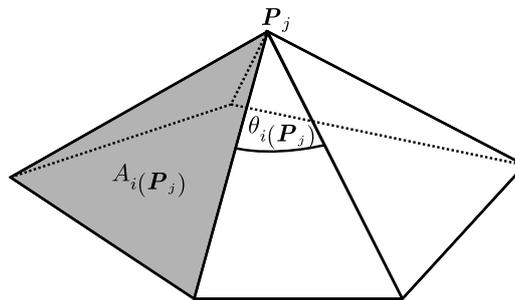


Abbildung 4.1.: Benötigte Größen zur Berechnung der Gauß-Krümmung. Hier ist $N_D(\mathbf{P}_j) = 5$.

\mathbf{P}_j ist ein Knoten der Triangulierung und $A(\mathbf{P}_j)$ die Fläche der Dreiecke um \mathbf{P}_j . Damit erhält man für die Gauß-Krümmung

$$K(\mathbf{P}_j) \approx \left(\sum_{i(\mathbf{P}_j)=1}^{N_D(\mathbf{P}_j)} A_{i(\mathbf{P}_j)} \right)^{-1} \left(2\pi - \sum_{i(\mathbf{P}_j)=1}^{N_D(\mathbf{P}_j)} \theta_{i(\mathbf{P}_j)} \right)$$

mit den Flächen $A_{i(\mathbf{P}_j)}$ der Dreiecke um \mathbf{P}_j .

4.4. Flächen- und Volumenerhaltung

Die Geschwindigkeit v wird um die Terme für Flächen- und Volumenerhaltung ergänzt [6]:

$$v_{A,V} = \lambda H - \mu.$$

Das Volumen und die Fläche ändern sich nicht über die Zeit. Mit der ersten Variationsformel [30] erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dt} &= \int_{\Gamma} (v + \lambda H - \mu) dS = 0, \\ \frac{dA}{dt} &= \int_{\Gamma} (Hv + \lambda H^2 - \mu H) dS = 0. \end{aligned}$$

Mit dem L^2 -Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ ausgedrückt sind die Lagrange-Multiplikatoren

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{\langle 1, v \rangle \langle 1, H \rangle - \langle 1, 1 \rangle \langle H, v \rangle}{\langle 1, 1 \rangle \langle H, H \rangle - \langle 1, H \rangle^2}, \\ \mu &= \frac{\langle 1, v \rangle \langle H, H \rangle - \langle 1, H \rangle \langle H, v \rangle}{\langle 1, 1 \rangle \langle H, H \rangle - \langle 1, H \rangle^2}. \end{aligned}$$

Der Nenner wird Null, wenn die mittlere Krümmung konstant ist. Die einzige geschlossene Oberfläche mit konstanter Krümmung ist die Kugel. Da es keine andere Oberfläche mit gleichem Volumen und gleicher Oberfläche wie eine Kugel gibt, ist sie eine ungeeignete Startoberfläche für die Evolution.

5. Verringerung von Approximationsfehlern

Während der Evolution der diskreten Oberfläche können verschiedene Probleme auftreten. Eine Möglichkeit ist, dass die Dreiecke der triangulierten Oberfläche entarten, das heißt, ein Winkel wird unendlich klein. Um dem entgegenzuwirken, wird eine Korrektur durchgeführt, die dafür sorgt, dass die Fläche der Dreiecke nahezu konstant bleibt.

Ein weiteres Problem ist, da die Lagrange-Multiplikatoren zur Flächen- und Volumenerhaltung nicht exakt berechnet werden können, ändern sich Fläche und Volumen während der Evolution dennoch. Ist das Minimum des Energiefunktional schon fast erreicht, so ändert es sich nur sehr wenig. Dann kann es passieren, dass diese unerwünschte Flächen- und Volumenänderung das Energiefunktional stärker verkleinert als die Evolution selbst. Dadurch läuft die Evolution sehr lange weiter, ohne dass ein Minimum erreicht wird.

5.1. Lokale Flächenerhaltung

Ein mögliches Problem, das zur Entartung der Dreiecke führt, ist, dass während der Evolution die Flächen der Dreiecke der Triangulierung stark unterschiedlich groß werden. In diesem Fall verliert man an Stellen, an denen die Dreiecke sehr groß sind, an Genauigkeit. Außerdem können die Matrizen der zu lösenden Gleichungssysteme durch die ungleiche Verteilung schlecht konditioniert sein.

Die Normalengeschwindigkeit ist durch die Lösung der Gleichungen, die die Evolution beschreiben, vorgegeben. Die tangentielle Geschwindigkeit ist jedoch frei wählbar, da sie die Form einer glatten Oberfläche nicht ändert. Sie soll nun so gewählt werden, dass sich die Flächen der Dreiecke möglichst wenig während der Evolution ändern.

Man fordert eine gleichförmige Oberflächenänderung in jedem Flächenstück, das heißt

$$\frac{\partial}{\partial t} A(\mathbf{X}(B(\zeta, \rho), t)) = \text{konstant}$$

für jede Kugel

$$B(\zeta, \rho) = \{ \underline{\zeta} \in \Omega : |\underline{\zeta} - \zeta| < \rho \}, \quad \zeta \in \Omega, \rho > 0.$$

$A(\cdot)$ bezeichnet hierbei die Fläche. Die Parametrisierung \mathbf{X} bildet dabei von $\Omega \times [0, 1]$ nach \mathbb{R}^3 ab. Sie stellt die Evolution im Zeitintervall $[0, 1]$ dar. Nach der ersten Variationsformel [30] gilt für die Flächenänderung

$$\frac{\partial}{\partial t} A(\mathbf{X}(B(\zeta, \rho), t)) = \int_{\mathbf{X}(B(\zeta, \rho), t)} \operatorname{div}_{\Gamma} \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t}(\xi, t) \right) d\xi_1 d\xi_2 = \text{konstant}.$$

5. Verringerung von Approximationsfehlern

Dies gilt für alle Kugeln, das heißt der Integrand muss konstant sein:

$$\operatorname{div}_\Gamma \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \right) = -C.$$

Daraus erhält man folgende Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} A(\mathbf{X}(\Omega, t)) = \int_\Gamma \operatorname{div}_\Gamma \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \right) dS = - \int_\Gamma C dS = -CA(\mathbf{X}(\Omega, t)).$$

Als Lösung ergibt sich

$$A(\mathbf{X}(\Omega, t)) = A(\mathbf{X}(\Omega, 0))e^{-Ct} = A_0 e^{-Ct}.$$

Die Endfläche ist

$$A(\mathbf{X}(\cdot, 1)) = A_E,$$

sodass die Konstante durch

$$C = \ln \left(\frac{A_0}{A_E} \right)$$

gegeben ist. Die Geschwindigkeit wird in einen Normal- und einen Tangentialanteil zerlegt:

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = v_\nu \boldsymbol{\nu} + \mathbf{v}_T.$$

Die Normalengeschwindigkeit v_ν ist dabei als vorher berechnete Evolutionsgeschwindigkeit bekannt. Die Divergenz dieser Gleichung ist

$$\operatorname{div}_\Gamma \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \right) = \operatorname{grad}_\Gamma(v_\nu) \cdot \boldsymbol{\nu} + v_\nu \operatorname{div}_\Gamma(\boldsymbol{\nu}) + \operatorname{div}_\Gamma(\mathbf{v}_T).$$

Der erste Term verschwindet, da der Gradient als tangentialer Differentialoperator senkrecht auf dem Normalenvektor steht. Die Divergenz des Normalenvektors wurde in (3.6) bestimmt: $\operatorname{div}_\Gamma(\boldsymbol{\nu}) = -H$. Also ist die Divergenz der Geschwindigkeit

$$\operatorname{div}_\Gamma \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \right) = -C = -\ln \left(\frac{A_0}{A_E} \right) = -Hv_\nu + \operatorname{div}_\Gamma(\mathbf{v}_T).$$

Um nun die tangentielle Geschwindigkeit \mathbf{v}_T zu erhalten, muss man eine Lösung der folgenden Gleichung finden:

$$\operatorname{div}_\Gamma(\mathbf{v}_T) = Hv_\nu - \ln \left(\frac{A_0}{A_E} \right).$$

Die Lösung ist nicht eindeutig, da nach Addition eines konstanten Vektors zu einer Lösung die Differentialgleichung weiterhin erfüllt ist.

Die Gleichung ist genau dann lösbar, wenn die rechte Seite die Bedingung

$$\int_\Gamma \left(v_\nu H - \ln \left(\frac{A_0}{A_E} \right) \right) dS = 0$$

erfüllt [25]. Integration der Gleichung ergibt

$$\int_{\Gamma} \operatorname{div}_{\Gamma}(\mathbf{v}_T) \, dS = \int_{\Gamma} H v_{\nu} \, dS - \ln\left(\frac{A_0}{A_E}\right) A(\mathbf{X}(\Omega, t)).$$

Die linke Seite kann mit dem Gaußschen Integralsatz als Randintegral ausgedrückt werden. Aufgrund des Fehlens eines Randes verschwindet der Term jedoch. Damit ist die geforderte Bedingung erfüllt.

Die Tangentialgeschwindigkeit \mathbf{v}_T wird nun in der Form

$$\mathbf{v}_T = \operatorname{grad}_{\Gamma}(\Phi)$$

dargestellt. Damit muss folgendes Problem auf Γ gelöst werden

$$\Delta_{\Gamma}\Phi = v_{\nu}H - \ln\left(\frac{A_0}{A_E}\right).$$

Wird die Fläche auch global erhalten, das heißt $A_0 = A_E$, so lautet die Gleichung

$$\Delta_{\Gamma}\Phi = v_{\nu}H.$$

5.2. Verringerung der Flächen- und Volumenerhaltungsfehler

Da die Bedingungen

$$\frac{dA}{dt} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{dV}{dt} = 0,$$

aus denen die Lagrange-Multiplikatoren λ und μ berechnet werden, durch Approximationsfehler nicht exakt erfüllt werden können, entsteht ein Fehler für die Flächen- und Volumenerhaltung im Verlauf der Evolution. Deshalb werden Bedingungen aufgestellt, die die Anfangsfläche A_0 und das Anfangsvolumen V_0 berücksichtigen:

$$\frac{dA}{dt} = a(A_0 - A) \quad , \quad \frac{dV}{dt} = b(V_0 - V).$$

a und b sind dabei positive Vorfaktoren. Wenn die Fläche kleiner ist als die Anfangsfläche, so ist die Differenz $A_0 - A$ positiv, also ist die zeitliche Ableitung positiv, sodass die Fläche wächst. Umgekehrt, wenn die Fläche größer ist, wird sie verkleinert. Analog gilt dies für das Volumen. Dadurch erhält man die modifizierten Lagrange-Parameter

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{\langle 1, v \rangle \langle 1, H \rangle - \langle 1, 1 \rangle \langle H, v \rangle + a(A_0 - A) \langle 1, 1 \rangle - b(V_0 - V) \langle 1, H \rangle}{\langle 1, 1 \rangle \langle H, H \rangle - \langle 1, H \rangle^2}, \\ \mu &= \frac{\langle 1, v \rangle \langle H, H \rangle - \langle 1, H \rangle \langle H, v \rangle + a(A_0 - A) \langle 1, H \rangle - b(V_0 - V) \langle H, H \rangle}{\langle 1, 1 \rangle \langle H, H \rangle - \langle 1, H \rangle^2}. \end{aligned}$$

6. Axialsymmetrische Formen

Da viele der möglichen Formen der Erythrozyten axialsymmetrisch sind, wird das Minimierungsproblem häufig auf das Finden einer Kurve in der x - z -Ebene reduziert. Die gewünschte Form ergibt sich dann durch Rotation der Kurve um die z -Achse. Zum Vergleich mit den dreidimensional erhaltenen Formen wird dies auch hier durchgeführt. Als Koordinaten werden die Bogenlänge s entlang der Kontur und der Azimutwinkel ϑ gewählt [27]. Die Form wird dann durch den Neigungswinkel θ bestimmt (siehe Abbildung 6.1).

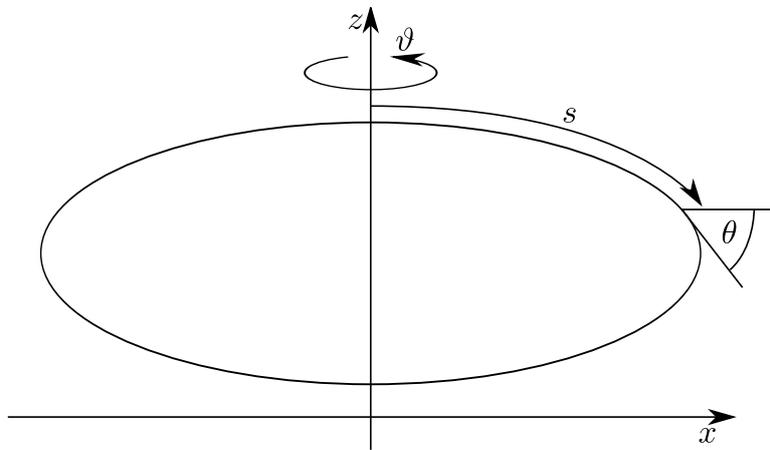


Abbildung 6.1.: Parametrisierung bei Axialsymmetrie.

Dann gilt

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \cos(\theta), \\ \dot{z} &= \sin(\theta). \end{aligned} \tag{6.1}$$

Der Punkt bedeutet dabei die Ableitung nach s . Die Parametrisierung ist

$$\mathbf{X}(\vartheta, s) = (x(s) \cos(\vartheta), x(s) \sin(\vartheta), z(s)).$$

Die Normalengeschwindigkeit ergibt sich aus der Variation (3.15) zu

$$\begin{aligned} v_{\nu} &= -k_c \left(\Delta_{\Gamma} H + \frac{1}{2} H^3 - 2KH + 2H_0 K - \frac{1}{2} H_0^2 H \right) + \lambda H - \mu \\ &\quad + W_0 d_0^2 |\mathbf{r}|^{-2} \left(4|\mathbf{r}|^{-2} (d_0^2 |\mathbf{r}|^{-2} - 1) (\mathbf{r} \cdot \nu) + (d_0^2 |\mathbf{r}|^{-2} - 2) H \right). \end{aligned}$$

6. Axialsymmetrische Formen

Diese wird jetzt in die axialsymmetrischen Koordinaten umgerechnet. Die Ableitungen der Parametrisierung sind

$$\begin{aligned}\mathbf{X}_\vartheta &= x(-\sin(\vartheta), \cos(\vartheta), 0), \\ \mathbf{X}_s &= (\cos(\theta)\cos(\vartheta), \cos(\theta)\sin(\vartheta), \sin(\theta))\end{aligned}$$

und der Normalenvektor ist

$$\boldsymbol{\nu} = (\sin(\theta)\cos(\vartheta), \sin(\theta)\sin(\vartheta), -\cos(\theta)).$$

Die erste Fundamentalform ergibt sich zu

$$g_{\vartheta\vartheta} = x^2, \quad g_{s\vartheta} = 0, \quad g_{ss} = 1$$

sodass ihre Determinante $\det(g) = x^2$ ist. Die zweiten Ableitungen der Parametrisierung sind

$$\begin{aligned}\mathbf{X}_{\vartheta\vartheta} &= -x(\cos(\vartheta), \sin(\vartheta), 0), \\ \mathbf{X}_{\vartheta s} &= \cos(\theta)(-\sin(\vartheta), \cos(\vartheta), 0), \\ \mathbf{X}_{ss} &= \dot{\theta}(-\sin(\theta)\cos(\vartheta), -\sin(\theta)\sin(\vartheta), \cos(\theta)).\end{aligned}$$

Damit ist die zweite Fundamentalform

$$h_{\vartheta\vartheta} = -x\sin(\theta), \quad h_{\vartheta s} = 0, \quad h_{ss} = -\dot{\theta}.$$

Es ergeben sich die mittlere Krümmung und die Gauß-Krümmung:

$$H = -\dot{\theta} - \frac{\sin(\theta)}{x}, \quad K = \frac{\dot{\theta}\sin(\theta)}{x}.$$

Der Laplace-Beltrami-Operator von H ist folglich

$$\Delta_\Gamma H = -\frac{1}{2x^3} \left(2\ddot{\theta}x^3 + 4\dot{\theta}\cos(\theta)x^2 - 2\sin(\theta)\dot{\theta}^2x^2 - 2\cos^2(\theta)\dot{\theta}x + 2\sin^2(\theta)\dot{\theta}x + 2\sin(\theta)\cos^2(\theta) \right).$$

Des Weiteren gilt

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}H^3 &= -\frac{1}{2x^3} \left(\dot{\theta}^3x^3 + \sin^2(\theta)\dot{\theta}x + \dot{\theta}^2\sin(\theta)x^2 + \sin^3(\theta) \right) + KH, \\ KH &= -\frac{1}{2x^3} \left(2\dot{\theta}^2\sin(\theta)x^2 + 2\dot{\theta}\sin^2(\theta)x \right).\end{aligned}$$

Für den Kontakt mit einer Ebene parallel zur x - y -Ebene ist der Abstandsvektor $\mathbf{r} = (0, 0, z - z_0)$, wobei z_0 die z -Position der Ebene ist. Also ist die Normalengeschwindigkeit

$$\begin{aligned}v_\nu &= \frac{k_c}{2x^3} (4\dot{\theta}\cos(\theta)x^2 - 3\sin(\theta)\dot{\theta}^2x^2 + \sin^2(\theta)\dot{\theta}x - 2\cos^2(\theta)\dot{\theta}x + 2\sin(\theta)\cos^2(\theta) + \dot{\theta}^3x^3 + \sin^3(\theta)) \\ &+ k_c\ddot{\theta} - \frac{k_c}{x} \left(2H_0\dot{\theta}\sin(\theta) + \frac{H_0^2}{2}(\dot{\theta}x + \sin(\theta)) \right) - \lambda \frac{\dot{\theta}x + \sin(\theta)}{x} - \mu \\ &- W_0d_0^2(z - z_0)^{-2} \left(4(z - z_0)^{-1} (d_0^2(z - z_0)^{-2} - 1) \cos(\theta) + (d_0^2(z - z_0)^{-2} - 2) \frac{\dot{\theta}x + \sin(\theta)}{x} \right).\end{aligned}$$

Diese verschwindet im Gleichgewicht. Es ergibt sich die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \ddot{\theta} &= \frac{1}{2x^3} (3 \sin(\theta) \dot{\theta}^2 x^2 - 4 \ddot{\theta} \cos(\theta) x^2 - \sin^2(\theta) \dot{\theta} x + 2 \cos^2(\theta) \dot{\theta} x - 2 \sin(\theta) \cos^2(\theta) - \dot{\theta}^3 x^3 - \sin^3(\theta)) \\ &+ \frac{1}{x} \left(2H_0 \dot{\theta} \sin(\theta) + \frac{H_0^2}{2} (\dot{\theta} x + \sin(\theta)) \right) + \frac{\lambda}{k_c} \frac{\dot{\theta} x + \sin(\theta)}{x} + \frac{\mu}{k_c} \\ &+ \frac{W_0}{k_c} \frac{d_0^2}{(z - z_0)^2} \left(\frac{4}{z - z_0} \left(\frac{d_0^2}{(z - z_0)^2} - 1 \right) \cos(\theta) + \left(\frac{d_0^2}{(z - z_0)^2} - 2 \right) \frac{\dot{\theta} x + \sin(\theta)}{x} \right) \end{aligned} \quad (6.2)$$

mit $\theta(0) = 0$.

Da durch Potenzen von x geteilt wird, muss der Grenzwert $x \rightarrow 0$ bestimmt werden. $x = 0$ gilt am Anfang ($s = 0$) und an dem Punkt, an dem wieder die z -Achse geschnitten wird. Aus Stetigkeitsgründen ist am Ende $\theta = \pi$, also ist

$$\sin(\theta)|_{x=0} = \tan(\theta)|_{x=0} = 0.$$

Zuerst wird der Grenzwert für den Willmore-Teil bestimmt:

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} v_w &= \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{2x^3} (3 \sin(\theta) \dot{\theta}^2 x^2 - 4 \ddot{\theta} \cos(\theta) x^2 - \sin^2(\theta) \dot{\theta} x + 2 \cos^2(\theta) \dot{\theta} x - 2 \sin(\theta) \cos^2(\theta) \dot{\theta}^3 x^3 \\ &- \sin^3(\theta)). \end{aligned}$$

Zähler und Nenner verschwinden für $x = 0$. Mit Hilfe der Regel von l'Hospital ergibt sich

$$\lim_{x \rightarrow 0} v_w = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{6x^2} \left(10 \tan(\theta) \dot{\theta} \ddot{\theta} x^2 - 4 \ddot{\theta} x^2 - 6 \ddot{\theta} \cos(\theta) x - \sin(\theta) \tan(\theta) \ddot{\theta} x - \frac{3}{\cos(\theta)} \dot{\theta}^2 \ddot{\theta} x^3 \right).$$

Dabei wurde verwendet, dass wegen Gleichung (6.1)

$$\frac{d\theta}{dx} = \frac{\dot{\theta}}{\cos(\theta)}, \quad \frac{d\dot{\theta}}{dx} = \frac{\ddot{\theta}}{\cos(\theta)}, \quad \frac{d\ddot{\theta}}{dx} = \frac{\ddot{\theta}}{\cos(\theta)}$$

gilt. Der Grenzwert der Terme mit quadratischen und höheren Potenzen von x kann direkt bestimmt werden. Damit vereinfacht sich der Grenzwert zu

$$\lim_{x \rightarrow 0} v_w = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{6x^2} (-6 \ddot{\theta} \cos(\theta) x - \sin(\theta) \tan(\theta) \ddot{\theta} x) - \frac{2}{3} \lim_{x \rightarrow 0} \ddot{\theta}.$$

Hier kann mit x gekürzt werden. Wenn man außerdem annimmt, dass $\ddot{\theta}$ für $x = 0$ ebenfalls verschwindet, kann wieder die Regel von l'Hospital angewendet werden:

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} v_w &= \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{6} \left(-6 \ddot{\theta} + 6 \ddot{\theta} \tan(\theta) \dot{\theta} - \dot{\theta} \tan(\theta) \ddot{\theta} - \tan(\theta) (1 + \tan^2(\theta)) \dot{\theta} \ddot{\theta} - \tan^2(\theta) \ddot{\theta} \right) - \frac{2}{3} \lim_{x \rightarrow 0} \ddot{\theta} \\ &= -\frac{5}{3} \lim_{x \rightarrow 0} \ddot{\theta}. \end{aligned}$$

6. Axialsymmetrische Formen

Als nächstes wird der Grenzwert des Terms, der bei der Helfrich-Evolution ergänzt wird, bestimmt:

$$\begin{aligned} & \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{x} \left(2H_0 \dot{\theta} \sin(\theta) + \frac{H_0^2}{2} \dot{\theta} x + \frac{H_0^2}{2} \sin(\theta) \right) \\ &= \lim_{x \rightarrow 0} \left(2H_0 \ddot{\theta} \tan(\theta) - 2H_0 \dot{\theta}^2 + \frac{H_0^2}{2 \cos(\theta)} \ddot{\theta} x + \frac{H_0^2}{2} \dot{\theta} + \frac{H_0^2}{2} \dot{\theta} \right) = 2H_0 \dot{\theta}^2 + H_0^2 \dot{\theta}. \end{aligned}$$

Die Erhaltungsterme ergeben

$$\lim_{x \rightarrow 0} \left(\frac{\lambda}{k_x} \frac{\dot{\theta} x + \sin(\theta)}{x} + \frac{\mu}{k_c} \right) = 2 \frac{\lambda}{k_x} \dot{\theta} + \frac{\mu}{k_c}$$

und der Kontakt-Teil

$$\begin{aligned} & \lim_{x \rightarrow 0} \frac{W_0}{k_c} d_0^2 (z - z_0)^{-2} \left(4(z - z_0)^{-1} (d_0^2 (z - z_0)^{-2} - 1) \cos(\theta) + (d_0^2 (z - z_0)^{-2} - 2) \frac{\dot{\theta} x + \sin(\theta)}{x} \right) \\ &= \frac{W_0}{k_c} d_0^2 (z - z_0)^{-2} \left(4(z - z_0)^{-1} (d_0^2 (z - z_0)^{-2} - 1) \cos(\theta) + (d_0^2 (z - z_0)^{-2} - 2) 2\dot{\theta} \right). \end{aligned}$$

Es folgt der Grenzwert

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} \ddot{\theta} &= \frac{3}{4} H_0 \dot{\theta}^2 + \frac{3}{8} H_0^2 \dot{\theta} + \frac{3}{4} \frac{\lambda}{k_x} \dot{\theta} + \frac{3}{8} \frac{\mu}{k_c} \\ &+ \frac{3}{4} \frac{W_0}{k_c} d_0^2 (z - z_0)^{-2} \left(2(z - z_0)^{-1} (d_0^2 (z - z_0)^{-2} - 1) \cos(\theta) + (d_0^2 (z - z_0)^{-2} - 2) \dot{\theta} \right). \end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich also folgendes Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} \ddot{\theta} &= \frac{3}{4} H_0 \dot{\theta}^2 + \frac{3}{8} H_0^2 \dot{\theta} + \frac{3}{4} \frac{\lambda}{k_x} \dot{\theta} + \frac{3}{8} \frac{\mu}{k_c} \\ &+ \frac{3}{4} \frac{W_0}{k_c} \frac{d_0^2}{(z - z_0)^2} \left(\frac{2}{z - z_0} \left(\frac{d_0^2}{(z - z_0)^2} - 1 \right) \cos(\theta) + \left(\frac{d_0^2}{(z - z_0)^2} - 2 \right) \dot{\theta} \right) \quad (x = 0), \\ \ddot{\theta} &= \frac{1}{2x^3} (3 \sin(\theta) \dot{\theta}^2 x^2 - 4 \ddot{\theta} \cos(\theta) x^2 - \sin^2(\theta) \dot{\theta} x + 2 \cos^2(\theta) \dot{\theta} x - 2 \sin(\theta) \cos^2(\theta) - \dot{\theta}^3 x^3 - \sin^3(\theta)) \\ &+ \frac{1}{x} \left(2H_0 \dot{\theta} \sin(\theta) + \frac{H_0^2}{2} (\dot{\theta} x + \sin(\theta)) \right) + \frac{\lambda}{k_x} \frac{\dot{\theta} x + \sin(\theta)}{x} + \frac{\mu}{k_c} \\ &+ \frac{W_0}{k_c} \frac{d_0^2}{(z - z_0)^2} \left(\frac{4}{z - z_0} \left(\frac{d_0^2}{(z - z_0)^2} - 1 \right) \cos(\theta) + \left(\frac{d_0^2}{(z - z_0)^2} - 2 \right) \frac{\dot{\theta} x + \sin(\theta)}{x} \right) \quad (x \neq 0), \\ \dot{x} &= \cos(\theta), \\ \dot{z} &= \sin(\theta), \\ \theta(0) &= 0, \\ \dot{\theta}(0) &= 0, \\ x(0) &= 0. \end{aligned} \tag{6.3}$$

Die Anfangswerte $\dot{\theta}(0)$ und $z(0)$ sind dabei unbekannt. Sie müssen genau wie λ und H_0 variiert werden. Der Lagrange-Parameter μ kann als konstant angenommen werden, da seine Änderung nur eine Skalierung der Form bedeutet [27]. So erhält man viele verschiedene Lösungskurven, die dann darauf untersucht werden müssen, ob die Kurve die z -Achse am Ende senkrecht schneidet, um die Glattheit zu gewährleisten.

7. Numerische Ergebnisse

In diesem Kapitel werden numerische Beispiele gezeigt. Zunächst werden Konvergenzuntersuchungen für den mittleren Krümmungsvektor, die Gauß-Krümmung und die Evolution mit mittlerer Krümmung durchgeführt. Dann werden die Evolutionen mit und ohne Verbesserungen, also mit und ohne lokale Flächenerhaltung sowie Verringerung der Flächen- und Volumenerhaltungsfehler für verschiedene Vorfaktoren, verglichen. Es werden Beispiele für die Helfrich-Evolution mit verschiedenen Parametern gezeigt und mit den axialsymmetrischen Ergebnissen verglichen. Außerdem werden Berechnungen für verschiedene Kontaktobjekte wie Ebenen und Zylinder durchgeführt und die Adhäsion zwischen zwei Erythrozyten untersucht.

Die dreidimensionalen Evolutionen wurden in der Programmiersprache C programmiert. Zur Lösung des Differentialgleichungssystems im axialsymmetrischen Fall wurde das Programmpaket "Mathematica" verwendet, in dem ein Runge-Kutta-Verfahren implementiert ist.

Für eine explizite Zeitdiskretisierung ist für numerische Stabilität eine Schrittweite in vierter Potenz der Maschenweite nötig [4]. Bei den Evolutionen hat sich eine Schrittweite von $T = 10^{-5}$ als praktikabel erwiesen und wurde meist verwendet. Die Anzahl Schritte, die bis zum Minimum benötigt wird, wird jeweils mit N bezeichnet. Der Minimalabstand bei den Kontaktberechnungen ist hier für gewöhnlich $d_0 = 0.1$.

7.1. Konvergenzuntersuchungen

In diesem Abschnitt wird die Konvergenzordnung der verschiedenen Größen, die bei der Berechnung der Evolutionsgeschwindigkeit auftreten, untersucht. Dabei werden als Testoberflächen eine Kugel und ein Torus verwendet.

Mittlerer Krümmungsvektor

Für eine Einheitssphäre

$$\mathbf{X}(\xi_1, \xi_2) = \begin{pmatrix} \sin(\xi_1) \cos(\xi_2) \\ \sin(\xi_1) \sin(\xi_2) \\ \cos(\xi_1) \end{pmatrix}$$

hat die doppelte mittlere Krümmung überall den Wert 2. Der mittlere Krümmungsvektor ist also

$$\mathbf{Y} = H\nu = 2 \begin{pmatrix} \sin(\xi_1) \cos(\xi_2) \\ \sin(\xi_1) \sin(\xi_2) \\ \cos(\xi_1) \end{pmatrix}.$$

7. Numerische Ergebnisse

Ein Torus mit kleinem Radius 1 und großem Radius 2,

$$\mathbf{X}(\xi_1, \xi_2) = \begin{pmatrix} (2 + \cos(\xi_1)) \cos(\xi_2) \\ (2 + \cos(\xi_1)) \sin(\xi_2) \\ \sin(\xi_1) \end{pmatrix},$$

hat die Ableitungen

$$\mathbf{X}_1 = \begin{pmatrix} -\sin(\xi_1) \cos(\xi_2) \\ -\sin(\xi_1) \sin(\xi_2) \\ \cos(\xi_1) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X}_2 = (2 + \cos(\xi_1)) \begin{pmatrix} -\sin(\xi_2) \\ \cos(\xi_2) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Der Normalenvektor und seine Ableitungen sind

$$\boldsymbol{\nu} = - \begin{pmatrix} \cos(\xi_1) \cos(\xi_2) \\ \cos(\xi_1) \sin(\xi_2) \\ \sin(\xi_1) \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\nu}_1 = \begin{pmatrix} \sin(\xi_1) \cos(\xi_2) \\ \sin(\xi_1) \sin(\xi_2) \\ -\cos(\xi_1) \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\nu}_2 = \begin{pmatrix} \cos(\xi_1) \sin(\xi_2) \\ -\cos(\xi_1) \cos(\xi_2) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Also sind die Koeffizienten der ersten und der zweiten Fundamentalform

$$g_{11} = h_{11} = 1, \quad g_{12} = h_{12} = 0, \quad g_{22} = (2 + \cos(\xi_1))^2, \quad h_{22} = (2 + \cos(\xi_1)) \cos(\xi_1).$$

Damit ist die doppelte mittlere Krümmung

$$H = \frac{2 + 2 \cos(\xi_1)}{2 + \cos(\xi_1)}$$

und der mittlere Krümmungsvektor

$$\mathbf{Y} = - \frac{2 + 2 \cos(\xi_1)}{2 + \cos(\xi_1)} \begin{pmatrix} \cos(\xi_1) \cos(\xi_2) \\ \cos(\xi_1) \sin(\xi_2) \\ \sin(\xi_1) \end{pmatrix}.$$

In Abbildung 7.1 ist die L^2 -Norm des Fehlers des mittleren Krümmungsvektors,

$$\left(\int_{\Gamma_h} |\mathbf{Y}_h - \mathbf{Y}_{\text{exakt}}|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

für flache Dreiecke und für Dreiecke zweiter Ordnung bei verschiedenen feinen Diskretisierungen aufgetragen. Dabei ist \mathbf{Y}_h der mit Hilfe des Programmes berechnete mittlere Krümmungsvektor und $\mathbf{Y}_{\text{exakt}}$ der exakte. Das Integral wird berechnet, indem die Werte in den Knoten mit Hilfe der Knotenbasisfunktionen auf den Dreiecken interpoliert werden. Die Maschenweite berechnet sich über

$$\sqrt{\max_{j=1, \dots, N_D} (A(T_j))}.$$

Man sieht, dass er für beide Oberflächen bei flachen Dreiecken in erster Ordnung und bei gekrümmten Dreiecken in zweiter Ordnung konvergiert.

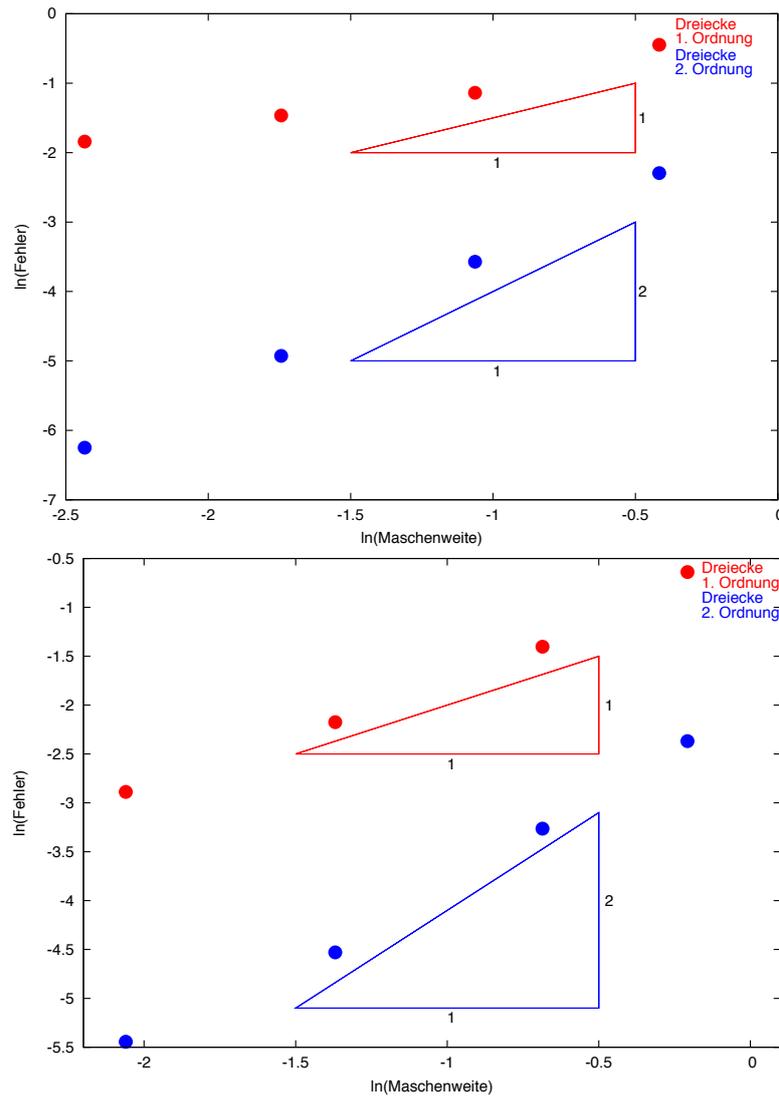


Abbildung 7.1.: L^2 -Norm des Fehlers des mittleren Krümmungsvektors für eine Kugel (oben) und einen Torus (unten).

Gauß-Krümmung

Für eine Einheitskugel ist die Gauß-Krümmung überall 1 und für obigen Torus von vorn gilt

$$K = \frac{\cos(\xi_1)}{2 + \cos(\xi_1)}.$$

In Abbildung 7.2 ist die L^2 -Norm des Fehlers der Gauß-Krümmung für flache Dreiecke mit der Winkelformel und für Dreiecke zweiter Ordnung in der schwachen Formulierung bei verschiedenen feinen

7. Numerische Ergebnisse

Diskretisierungen aufgetragen. Auch sie konvergiert für beide Oberflächen bei flachen Dreiecken in erster Ordnung und bei gekrümmten Dreiecken in zweiter Ordnung.

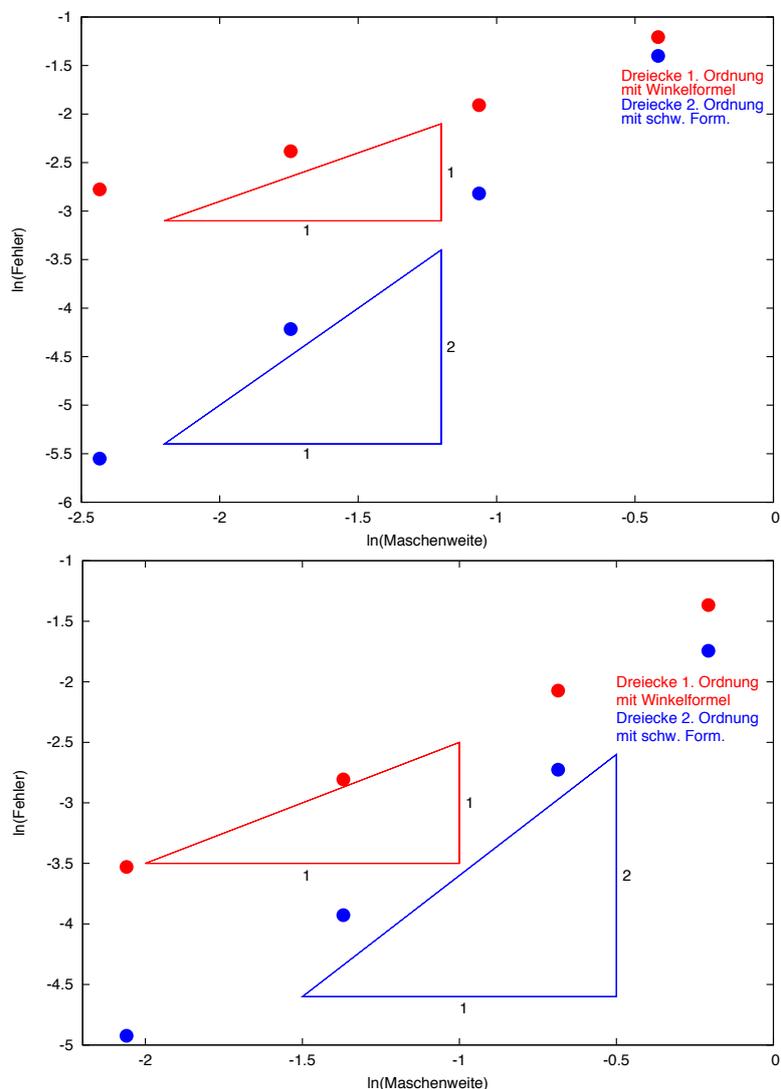


Abbildung 7.2.: L^2 -Norm des Fehlers der Gauß-Krümmung für eine Sphäre (oben) und einen Torus (unten).

Evolution mit mittlerer Krümmung

In diesem Abschnitt wird die Evolution mit Geschwindigkeit \mathbf{Y} für eine Einheitssphäre untersucht. Die mittlere Krümmung ist konstant und entspricht gerade dem Kehrwert des Radius ρ . Der Normalen-

vektor ist der radiale Einheitsvektor. Somit erhält man für den Radius folgende Differentialgleichung:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{2}{\rho}.$$

Diese ist trennbar:

$$\int_{\rho(0)}^{\rho} \rho \, d\rho = \int_0^t -2 \, dt.$$

Die Integrale ergeben

$$\frac{1}{2}\rho^2 - \frac{1}{2}\rho^2(0) = -2t.$$

Der Anfangsradius ist 1 und der Radius ist immer größer gleich 0. Damit ergibt sich für ρ

$$\rho(t) = \sqrt{1 - 4t}.$$

Der Radius verschwindet für $t = 0.25$, also wird die Evolution bis zu diesem Zeitpunkt durchgeführt. Abbildung 7.3 zeigt den Verlauf der impliziten Evolution für verschiedene Diskretisierungen und zum Vergleich die exakte Lösung. Man erkennt, dass der Verlauf der Kurve sich mit feinerer Diskretisierung immer mehr an den Verlauf der exakten annähert.

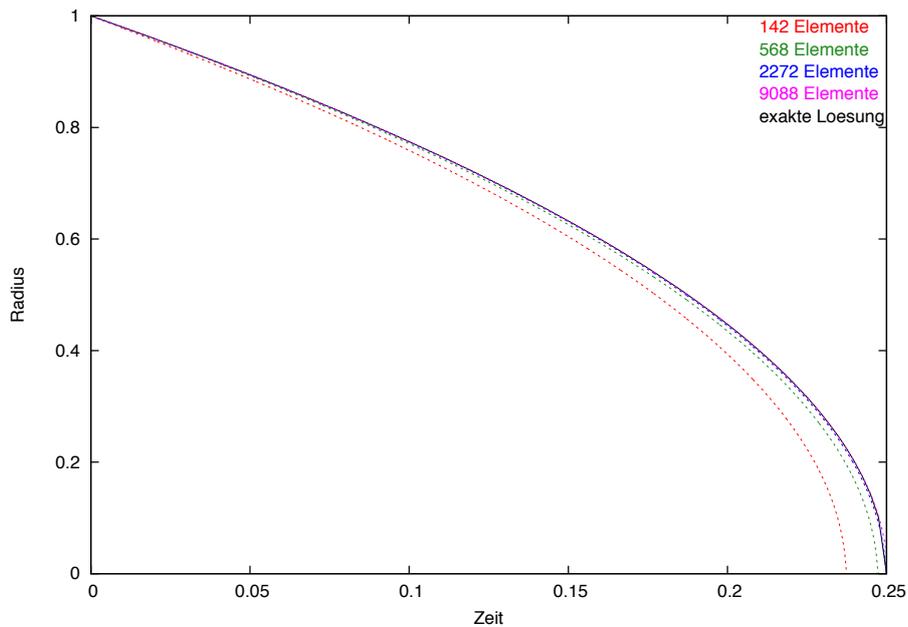


Abbildung 7.3.: Evolution mit Geschwindigkeit \mathbf{Y} für verschieden feine Diskretisierungen im Vergleich zur exakten Lösung.

In Abbildung 7.4 ist der Fehler des Radius zu einem festen Zeitpunkt aufgetragen. Dabei wurden für eine bestimmte Schrittweite verschieden feine Diskretisierungen und für eine feste Diskretisierung verschiedene Schrittweiten untersucht. Der Fehler konvergiert in beiden Fällen in erster Ordnung.

7. Numerische Ergebnisse

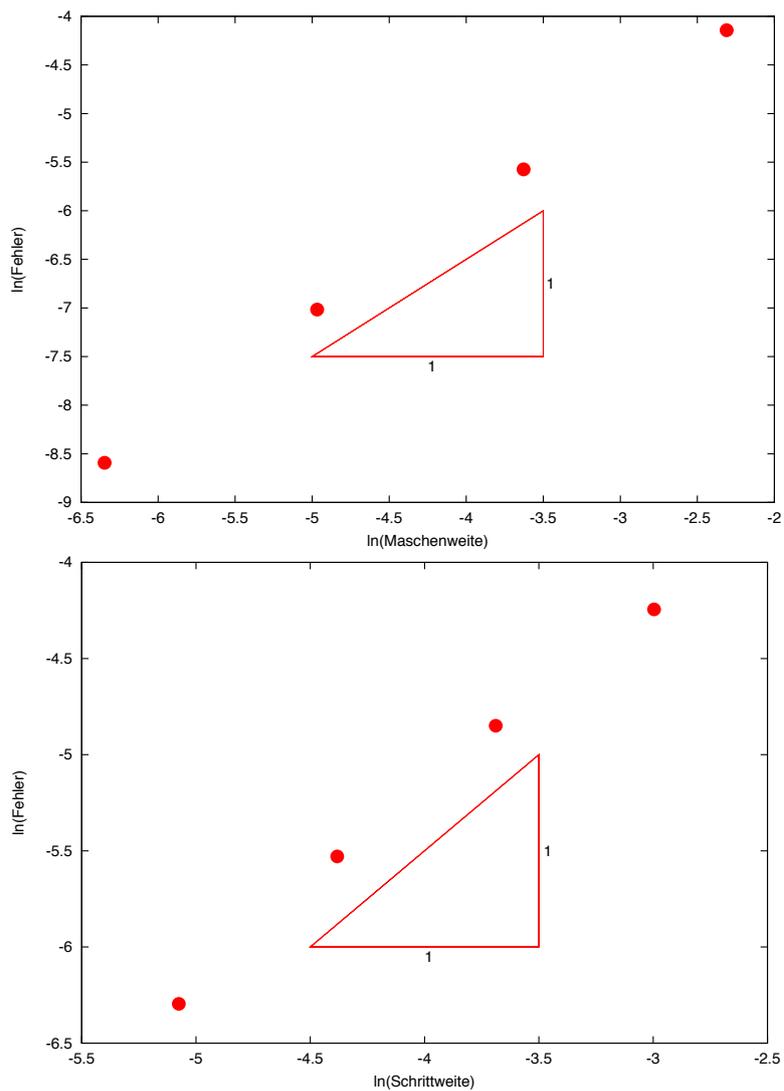


Abbildung 7.4.: Fehler der Evolution mit Geschwindigkeit \mathbf{Y} für verschiedene feine Diskretisierungen (oben) und verschiedene Schrittweiten (unten).

Willmore-Evolution

Gemäß Satz 4.1 konvergiert die Willmore-Evolution gegen eine Kugel. In Abbildung 7.5 sieht man die Anwendung der Willmore-Evolution (ohne Flächen- und Volumenerhaltung) auf einen Erythrozyten. Wie erwartet ist die Gleichgewichtsform eine Kugel.

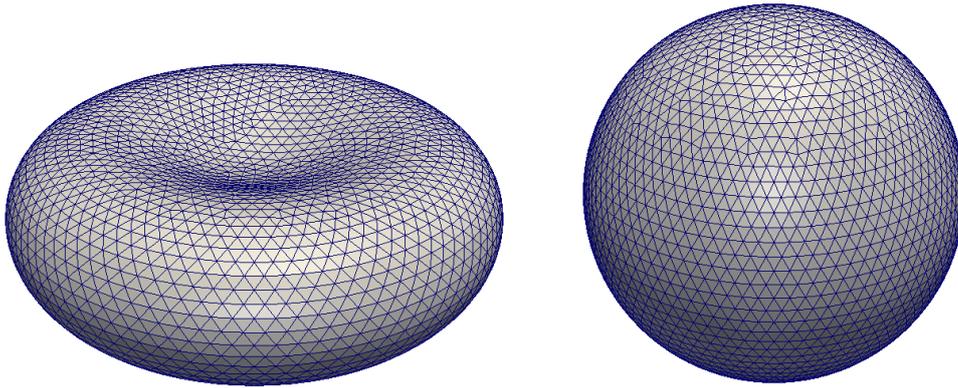


Abbildung 7.5.: Willmore-Evolution eines Erythrozyten mit $N = 4295000$.

Für einen Torus, der das Willmore-Funktional minimiert, ist das Verhältnis der beiden Radien $\sqrt{2}$ [37]. Abbildung 7.6 zeigt einen Torus vor und nach der Willmore-Evolution. Sein Radien-Verhältnis ist 1.4199, was einem Fehler von 0.4% entspricht.

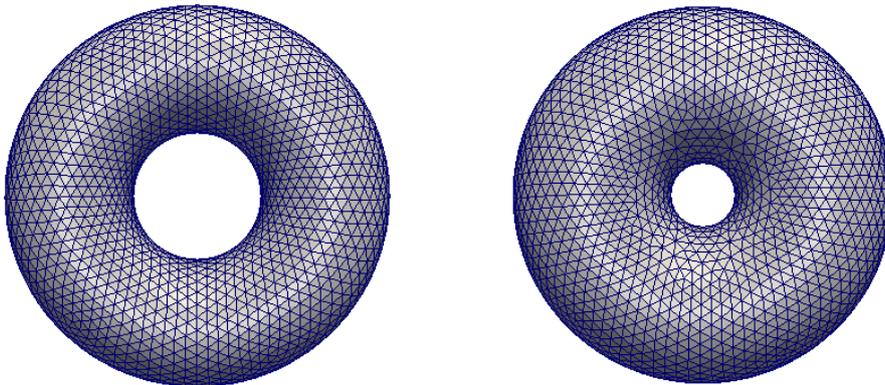


Abbildung 7.6.: Willmore-Evolution eines Torus mit $N_D = 5056$ und $N = 3195000$. Links: Startoberfläche, rechts: Gleichgewichtsoberfläche.

In Abbildung 7.7 ist der Fehler des Radien-Verhältnisses nach der Willmore-Evolution für verschieden fein diskretisierte Tori aufgetragen. Er konvergiert in dritter Ordnung.

7. Numerische Ergebnisse

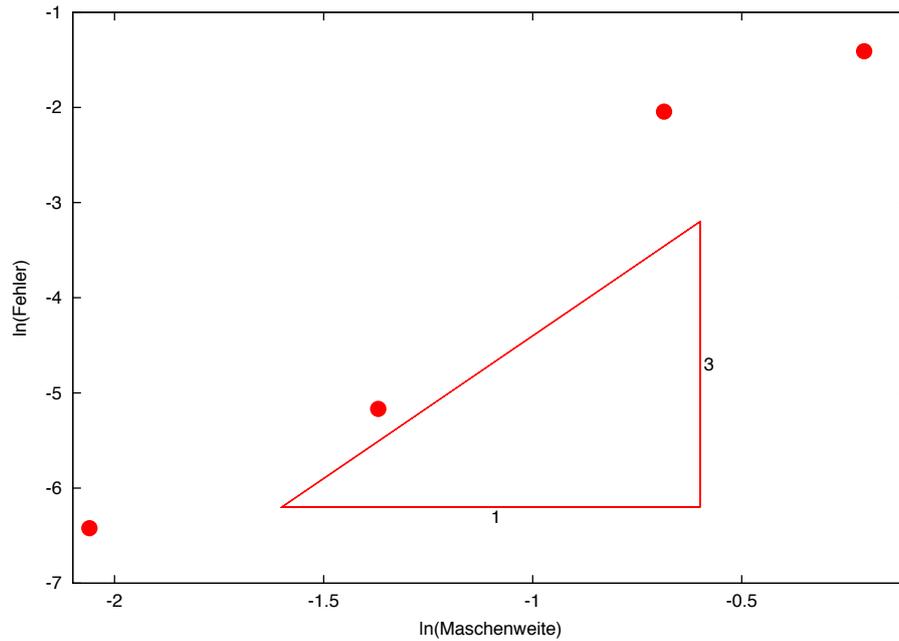


Abbildung 7.7.: Fehler des Radien-Verhältnisses für verschiedene Diskretisierungen.

Helfrich-Funktional

In diesem Abschnitt wird die Konvergenzordnung der Berechnung des Helfrich-Funktional untersucht.

Für eine Einheitssphäre mit $H = 2$ ist das Helfrich-Funktional

$$F_h = \int_{\Gamma} (H - H_0)^2 dS = (2 - H_0)^2 A = 4\pi(2 - H_0)^2.$$

Bei obigem Torus ergibt sich

$$\begin{aligned} F_h &= \int_{\Gamma} (H - H_0)^2 dS = \int_{\xi_2=0}^{2\pi} \int_{\xi_1=0}^{2\pi} \left(\frac{2 + 2 \cos(\xi_1)}{2 + \cos(\xi_1)} - H_0 \right)^2 (2 + \cos(\xi_1)) d\xi_1 d\xi_2 \\ &= 2\pi \left(\int_0^{2\pi} \frac{(2 + 2 \cos(\xi_1))^2}{2 + \cos(\xi_1)} d\xi_1 - 2H_0 \int_0^{2\pi} (2 + 2 \cos(\xi_1)) d\xi_1 + H_0^2 \int_0^{2\pi} (2 + \cos(\xi_1)) d\xi_1 \right) \\ &= 8\pi^2 \left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 2H_0 + H_0^2 \right). \end{aligned}$$

Bei der Helfrich-Evolution wird später eine aus einem Zylinder mit Höhe 2 und Radius 4 sowie einem Torus mit Radien 1 und 3 zusammengesetzte Fläche verwendet (siehe Abbildung 7.8).

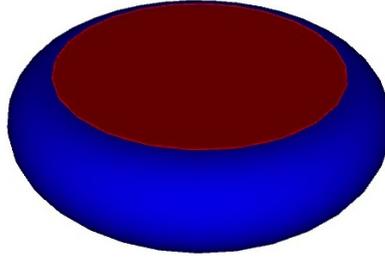
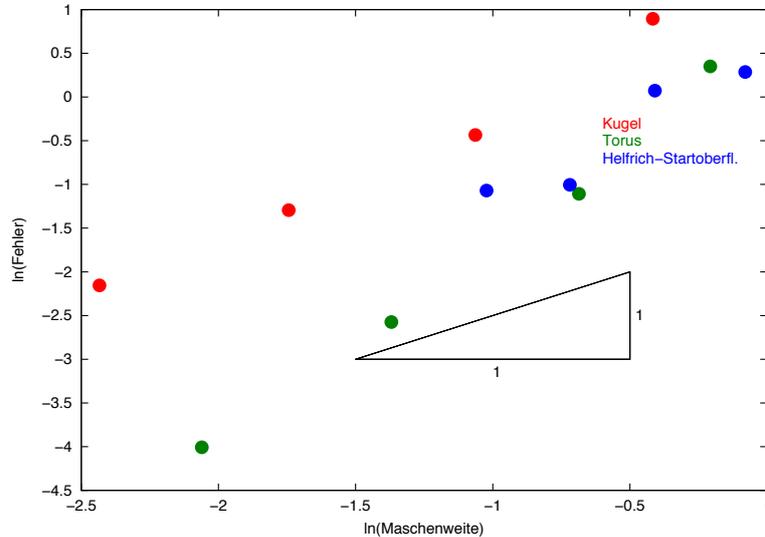


Abbildung 7.8.: Für Helfrich-Evolutionen verwendete Startoberfläche.

Die mittlere Krümmung verschwindet für den ebenen Teil und für den gekrümmten Teil entspricht sie der Toruskrümmung, wobei der Winkel ξ_1 nur von $-\frac{\pi}{2}$ bis $\frac{\pi}{2}$ läuft. Also erhält man für das Helfrich-Funktional

$$\begin{aligned}
 F_h &= \int_{\Gamma} (H - H_0)^2 dS = \int_{\xi_2=0}^{2\pi} \int_{\xi_1=-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{3 + 2 \cos(\xi_1)}{3 + \cos(\xi_1)} - H_0 \right)^2 (3 + \cos(\xi_1)) d\xi_1 d\xi_2 \\
 &= 2\pi \left(8 + 9\sqrt{2} \arctan\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) - 2H_0(3\pi + 4) + H_0^2(3\pi + 2) \right).
 \end{aligned}$$

In Abbildung 7.9 ist für Sphäre, den Torus und die Helfrich-Startoberfläche der Fehler des Helfrich-Funktional für verschieden feine Diskretisierungen aufgetragen. Es konvergiert in erster Ordnung.

Abbildung 7.9.: Fehler des Helfrich-Funktional der Einheitssphäre, eines Torus und einer aus Zylinder und Torus zusammengesetzten Oberfläche mit $H_0 = 1$.

7.2. Verringerung von Approximationsfehlern

Lokale Flächenerhaltung

In Abbildung 7.10 sieht man das Ergebnis einer Helfrich-Evolution ohne tangentielle Korrektur und einer mit lokaler Flächenerhaltung. Im ersten Fall haben die Dreiecke unterschiedlich große Flächen, im zweiten Fall sind sie fast gleich groß.

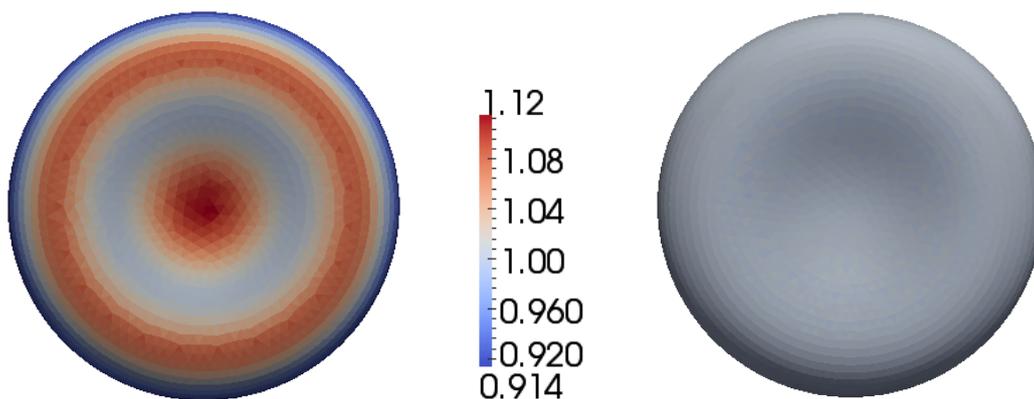


Abbildung 7.10.: Unterschied beim Flächenverhältnis der Dreiecke nach einer Helfrich-Evolution ohne tangentielle Korrektur (links) und mit lokaler Flächenerhaltung (rechts). Dabei ist $N = 177000$.

Bei der Simulation des Kontaktes ist diese Korrektur nötig, um die Evolution überhaupt durchführen zu können, da in manchen Bereichen die Dreiecke so groß werden, dass die Form der Oberfläche dort nicht mehr genau genug aufgelöst wird.

Verringerung der Flächen- und Volumenerhaltungsfehler

Für eine Helfrich-Evolution ohne und mit Verringerung der Flächen- und Volumenerhaltungsfehler mit verschiedenen Vorfaktoren, wie in Kapitel 5.2 beschrieben, werden in Abbildung 7.2 die Verläufe der Fläche und des Volumens gezeigt.

7.2. Verringerung von Approximationsfehlern

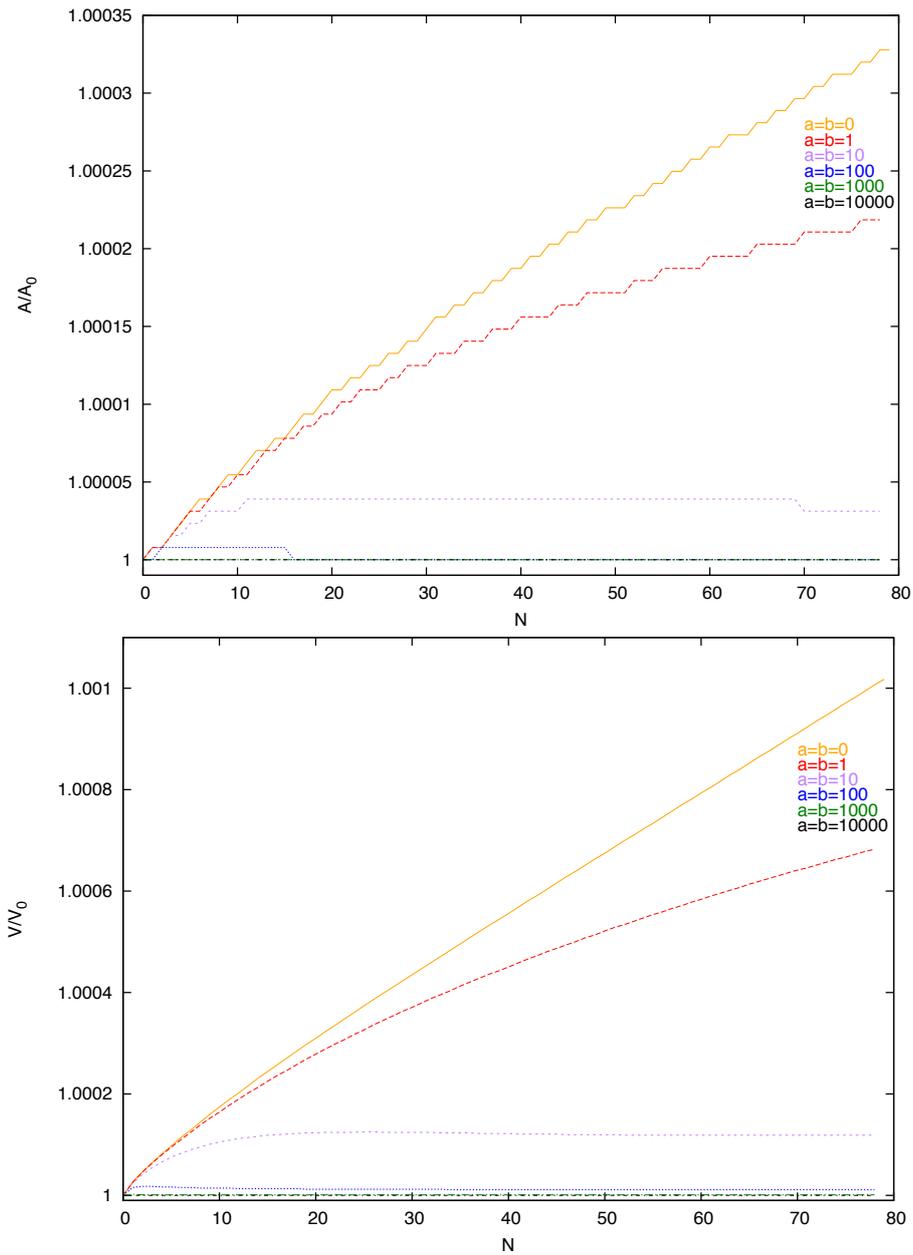


Abbildung 7.11.: Verlauf der Fläche (oben) und des Volumens (unten) bei der Verringerung der Flächen- und Volumenerhaltungsfehler.

Man kann erkennen, dass sich mit steigendem Vorfaktor sowohl die Fläche als auch das Volumen weniger ändern.

7.3. Helfrich-Evolution

Die Evolution, die aus dem Helfrich-Funktional folgt, ergibt sich dadurch, dass Willmore-Evolution, mittlere Krümmungs-Evolution, Evolution mit Geschwindigkeit mittlerer Krümmung und eine Korrektur für Flächen- und Volumenerhaltung in einem Zeitschritt durchgeführt werden. In Abbildung 7.12 ist ein Beispiel für die Entstehung einer erythrozytenähnlichen Form gezeigt.

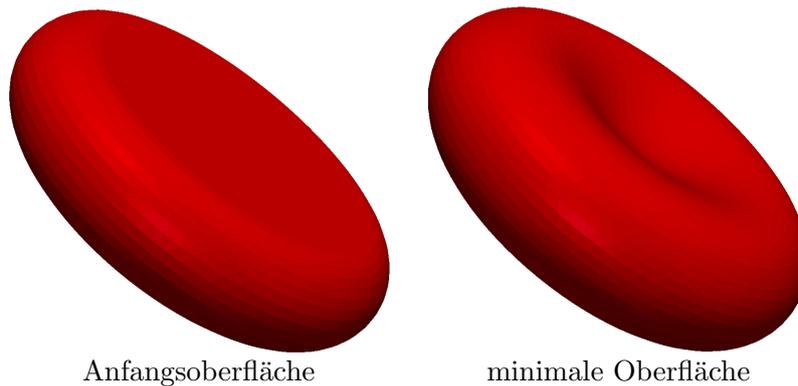


Abbildung 7.12.: Entwicklung einer Oberfläche unter Helfrich-Evolution zu einer Minimaloberfläche, die einem Erythrozyten ähnelt.

Den späteren Kontaktberechnungen liegt immer die minimale Oberfläche aus Abbildung 7.12 zugrunde. Sie hat $N_D = 6536$ Dreiecke und ihre relative maximale Maschenweite ist

$$\sqrt{\frac{\max_{j=1,\dots,N_D} (A(T_j))}{A}} = 0.0146.$$

In Abbildung 7.13 sieht man, wie das Helfrich-Funktional minimiert wird. Dabei wurde die Evolution für verschiedene Diskretisierungen durchgeführt und jeweils der Energieverlauf verglichen. Der Verlauf ist ähnlich, nur die Werte unterscheiden sich etwas. In Bezug auf die Konvergenz des Helfrich-Funktional, Abbildung 7.9, ist dies durchaus angemessen.

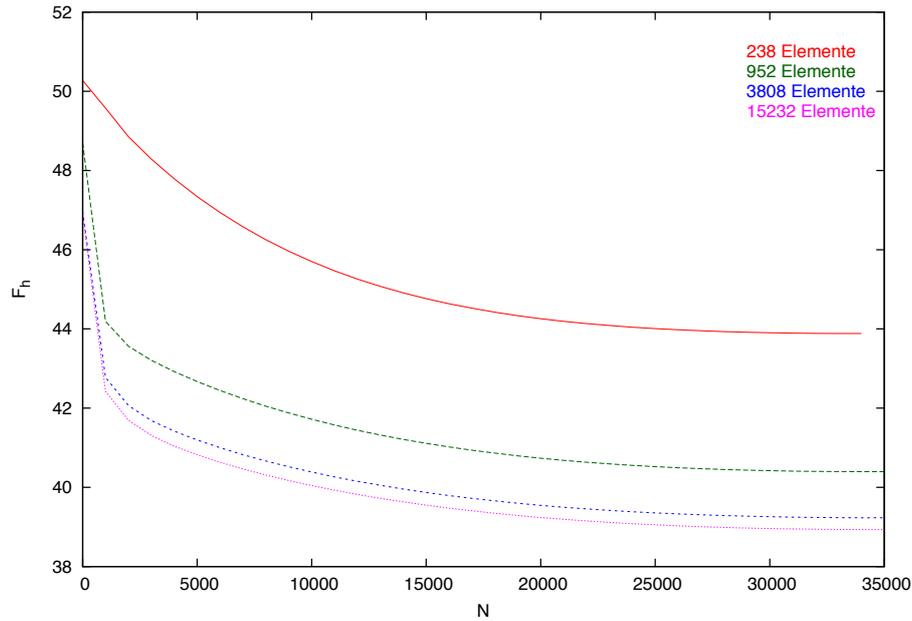


Abbildung 7.13.: Verlauf des Helfrich-Funktional bei der Entwicklung einer Oberfläche unter Helfrich-Evolution.

Für eine bessere Vergleichbarkeit verschiedener Oberflächen verwendet man das reduzierte Volumen $\frac{V}{c_0}$ und das Produkt $H_0 R_0$ mit

$$A = 4\pi R_0^2 \quad \text{und} \quad c_0 = \frac{4}{3}\pi R_0^3.$$

Für axialsymmetrische Oberflächen wurden bereits Parameterstudien in [27] durchgeführt (siehe Abbildung 7.14).

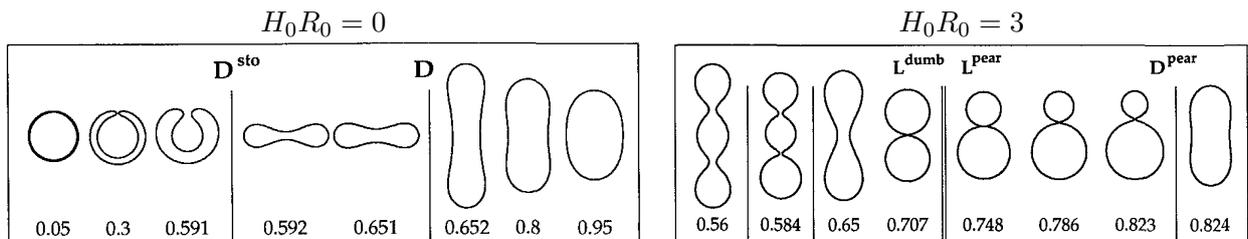
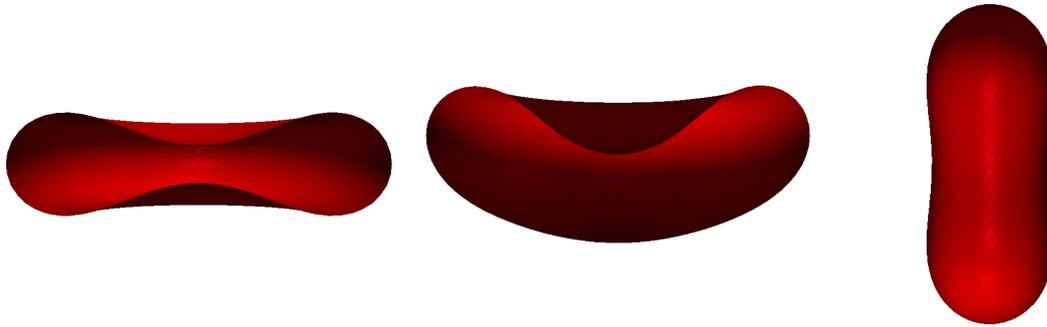


Abbildung 7.14.: Formen bei Minimierung des Helfrich-Funktional für verschiedene Werte des reduzierten Volumens.

In Abbildung 7.15 sieht man drei Formen, die sich aus verschiedenen Werten für $\frac{V}{v_0}$ und $H_0 R_0$ ergeben. Eine ähnelt einem Diskozyten, eine zweite einem Stomatozyten und die dritte entspricht der prolaten

7. Numerische Ergebnisse

Form aus [27].



$$H_0 R_0 = 0, \frac{V}{v_0} = 0.6 \quad (1)$$

$$H_0 R_0 = -1, \frac{V}{v_0} = 0.7 \quad (2)$$

$$H_0 R_0 = 0, \frac{V}{v_0} = 0.8 \quad (3)$$

Abbildung 7.15.: Verschiedene Formen für verschiedene Werte von $\frac{V}{v_0}$ und $H_0 R_0$. Dabei sind die Anzahlen der Dreiecke (1) 4672, (2) 4672, (3) 3552.

In Abbildung 7.16 sind die entsprechenden Stellen in das axialsymmetrische Phasendiagramm aus [27] eingetragen. Diese stimmen mit den Formen, die hier berechnet wurden, überein.

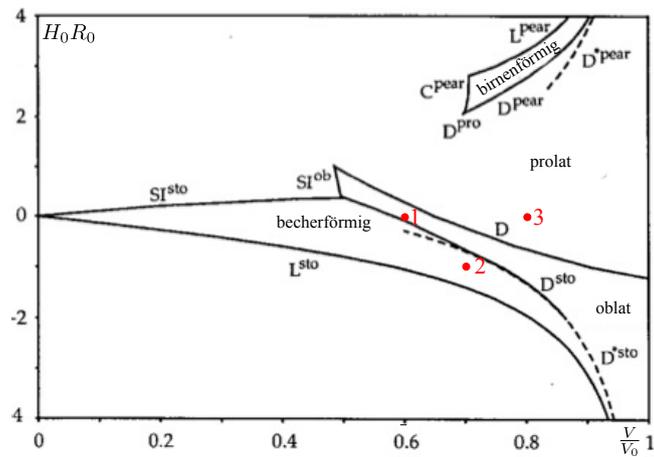


Abbildung 7.16.: Vergleich der durch die dreidimensionale Evolution erhaltenen Formen mit dem axialsymmetrischen Phasendiagramm.

Um die axialsymmetrische Berechnung direkt mit der dreidimensionalen vergleichen zu können, wird die Differentialgleichung (6.2) aus der Axialsymmetrie numerisch gelöst, die Lösungskurve um die z -Achse rotiert, die entstehende Oberfläche trianguliert und die 3D-Berechnung auf sie angewendet. In Abbildung 7.17 sieht man eine solche Kurve. Nach der dreidimensionalen Evolution gibt es praktisch

keinen Unterschied zur Anfangsoberfläche.

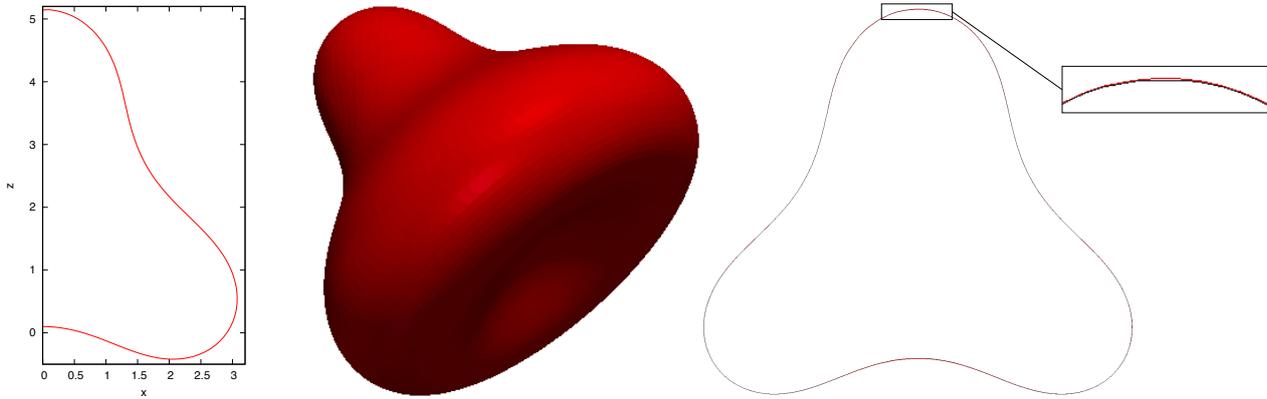


Abbildung 7.17.: Kurve in der x - z -Ebene (links), durch Rotation dieser um die z -Achse entstandene Oberfläche (Mitte) und Schnitt der Oberfläche vor (schwarz) und nach (rot) der Evolution (rechts). In der Vergrößerung ist der größte Unterschied zwischen den beiden Schnitten gezeigt. Dabei ist $N_D = 2372$, $H_0 R_0 = 0$, $\frac{V}{v_0} = 0.80$ und $N = 88000$.

7.4. Kontakt mit einer Ebene

Für den Geschwindigkeitsbeitrag des Kontakts benötigt man den Abstandsvektor \mathbf{r} : Eine Ebene mit Aufpunkt \mathbf{a} und Richtungsvektoren \mathbf{b} und \mathbf{c} lässt sich darstellen als

$$\{\mathbf{a} + \sigma_1 \mathbf{b} + \sigma_2 \mathbf{c} : \sigma_1, \sigma_2 \in \mathbb{R}\}.$$

Der Abstandsvektor zu einem Punkt \mathbf{P} ist dann

$$\mathbf{r} = \mathbf{P} - \mathbf{a} - \sigma_1 \mathbf{b} - \sigma_2 \mathbf{c}$$

mit noch zu bestimmenden σ_1, σ_2 . Der Abstandsvektor steht senkrecht auf den Richtungsvektoren, also gilt

$$\begin{aligned} (\mathbf{P} - \mathbf{a} - \sigma_1 \mathbf{b} - \sigma_2 \mathbf{c}) \cdot \mathbf{b} &= 0, \\ (\mathbf{P} - \mathbf{a} - \sigma_1 \mathbf{b} - \sigma_2 \mathbf{c}) \cdot \mathbf{c} &= 0. \end{aligned}$$

Daraus lassen sich σ_1 und σ_2 berechnen:

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \frac{(\mathbf{P} - \mathbf{a}) \cdot \mathbf{b} |\mathbf{c}|^2 - (\mathbf{P} - \mathbf{a}) \cdot \mathbf{c} (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})}{|\mathbf{b}|^2 |\mathbf{c}|^2 - (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})^2}, \\ \sigma_2 &= \frac{(\mathbf{P} - \mathbf{a}) \cdot \mathbf{c} |\mathbf{b}|^2 - (\mathbf{P} - \mathbf{a}) \cdot \mathbf{b} (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})}{|\mathbf{b}|^2 |\mathbf{c}|^2 - (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})^2}. \end{aligned}$$

7. Numerische Ergebnisse

Insgesamt ergibt sich als Abstandsvektor

$$\mathbf{r} = \mathbf{P} - \mathbf{a} - |\mathbf{b} \times \mathbf{c}|^{-2} ((\mathbf{P} - \mathbf{a}) \times (\mathbf{c} \times \mathbf{b})) \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}).$$

In Abbildung 7.18 ist der Kontakt eines Erythrozyten mit einer Ebene gezeigt. Man erkennt, wie der Erythrozyt bei höheren Adhäsionsstärken seine bikonkave Form verliert und eine runde Form annimmt, wie es auch in der Realität beim Kontakt mit einem Objektträger (Abbildung 2.2) passiert. Bei schwächeren Adhäsionsstärken ist die Kugelform weniger ausgeprägt und verliert sich vollends bei $W_0 = \frac{k_c}{2}$.

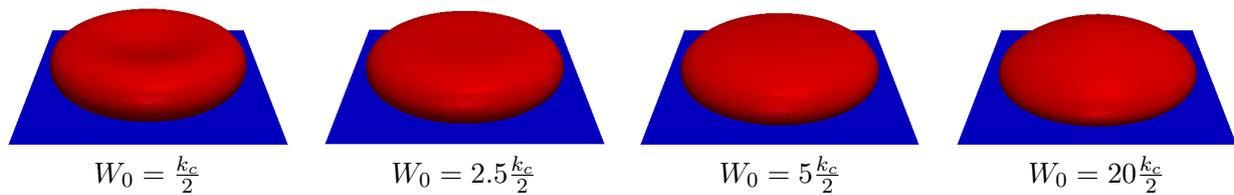


Abbildung 7.18.: Kontakt eines Erythrozyten mit einer Ebene für verschiedene Adhäsionsstärken.

In Abbildung 7.19 werden die Querschnitte von verschiedenen Stadien der Evolution am Beispiel $W_0 = \frac{k_c}{2}$ gezeigt. Es ist zu erkennen, dass sich bereits sehr früh eine glatte Kontaktfläche ausbildet.

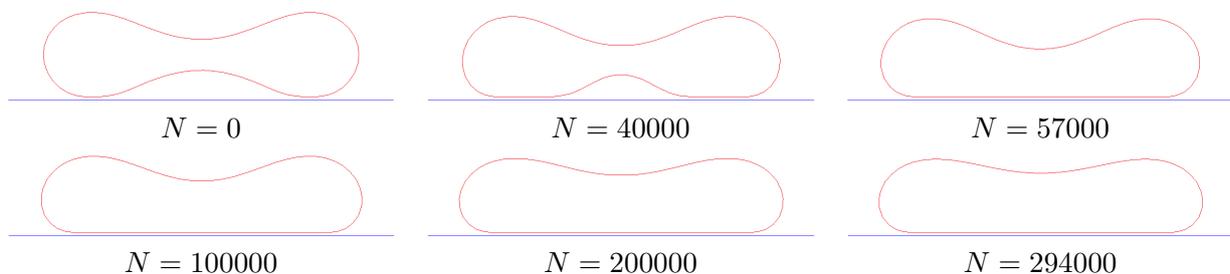


Abbildung 7.19.: Querschnitte eines Erythrozyten im Kontakt mit einer Ebene zu verschiedenen Zeitpunkten der Evolution.

Nun soll der Zusammenhang zwischen der Adhäsionsstärke und der Kontaktfläche untersucht werden. Das Verhältnis der Kontaktfläche A_k zur Gesamtfläche A steigt an bis zu einer Sättigung, da sonst die Krümmung der Oberfläche zu stark ist. In Abbildung 7.20 ist diese Kurve aufgetragen.

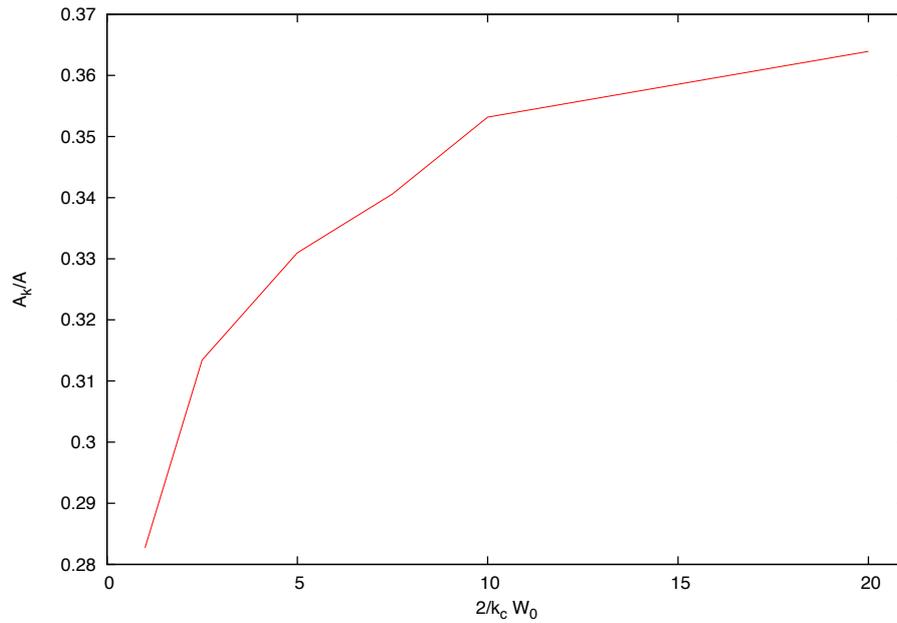


Abbildung 7.20.: Kontaktfläche beim Kontakt eines Erythrozyten mit einer Ebene in Abhängigkeit von der Adhäsionsstärke.

Als ein Beispiel für nicht axialsymmetrischen Kontakt ist in Abbildung 7.21 der Kontakt mit zwei senkrecht aufeinanderstehenden Ebenen dargestellt. Der Erythrozyt bildet dabei eine möglichst große Kontaktfläche, indem er eine längliche Form annimmt.

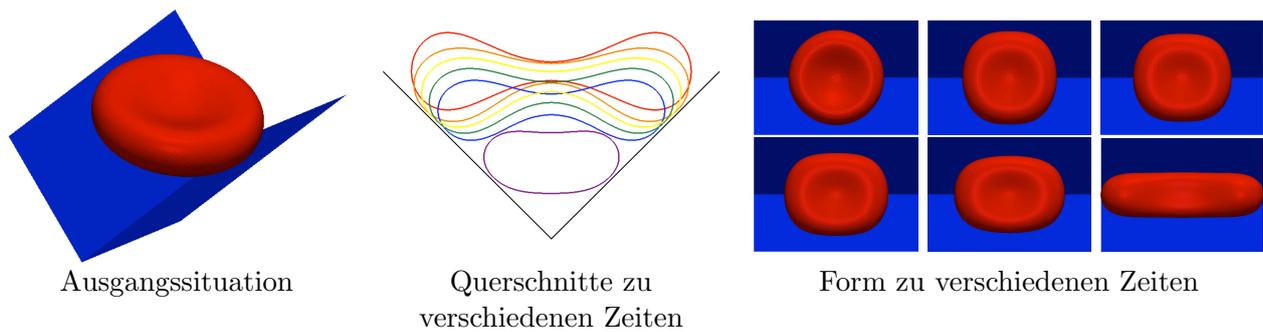


Abbildung 7.21.: Kontakt eines Erythrozyten mit zwei Ebenen.

7.5. Kontakt mit einem Zylinder

Die Achse eines Zylinders mit Aufpunkt \mathbf{a} und Richtungsvektor \mathbf{b} lässt sich darstellen als

$$\{\mathbf{a} + \sigma\mathbf{b} : \sigma \in \mathbb{R}\}.$$

Der Abstandsvektor zu einem Punkt \mathbf{P} ist dann

$$\mathbf{P} - \mathbf{a} - \sigma\mathbf{b}$$

mit noch zu bestimmendem σ . Der Abstandsvektor steht senkrecht auf dem Richtungsvektor, also

$$(\mathbf{P} - \mathbf{a} - \sigma\mathbf{b}) \cdot \mathbf{b} = 0.$$

Daraus lässt sich σ berechnen:

$$\sigma = \frac{1}{|\mathbf{b}|^2} (\mathbf{P} - \mathbf{a}) \cdot \mathbf{b}.$$

Damit ist der Abstandsvektor zur Zylinderachse

$$|\mathbf{b}|^{-2} \mathbf{b} \times ((\mathbf{P} - \mathbf{a}) \times \mathbf{b}).$$

Der Zylinder hat einen Radius r_0 . Es wird also der Abstandsvektor zum Rand des Zylinders, der r_0 von seiner Achse entfernt ist, benötigt. Deshalb muss man den Abstandsvektor zur Achse noch entsprechend skalieren:

$$\mathbf{r} = \left(1 - \frac{r_0 |\mathbf{b}|^2}{|\mathbf{b} \times ((\mathbf{P} - \mathbf{a}) \times \mathbf{b})|} \right) |\mathbf{b}|^{-2} \mathbf{b} \times ((\mathbf{P} - \mathbf{a}) \times \mathbf{b}).$$

Die Mikrofasern aus Abbildung 2.3 kann man sich idealisiert als Zylinder vorstellen. In Abbildung 7.5 ist der Kontakt mit einem Zylinder für verschiedene Adhäsionsstärken dargestellt. Je höher die Adhäsionsstärke ist, desto stärker wickelt sich der Erythrozyt um den Zylinder, um die Kontaktfläche zu erhöhen.

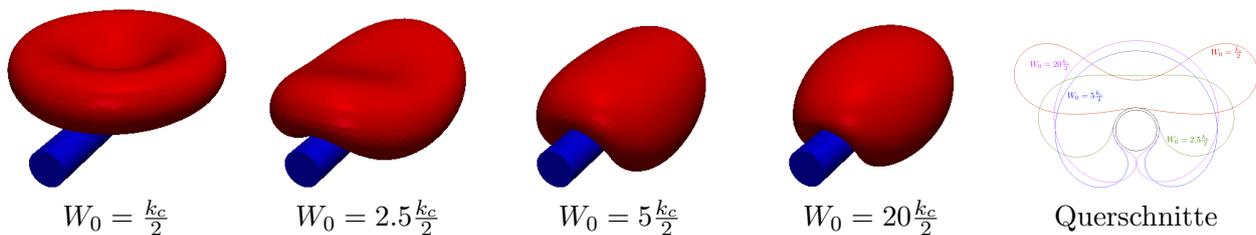


Abbildung 7.22.: Kontakt mit einem Zylinder für verschiedene Adhäsionsstärken.

Auch hier wird der Zusammenhang zwischen der Adhäsionsstärke und der Kontaktfläche untersucht. Dieser ist in Abbildung 7.23 aufgetragen.

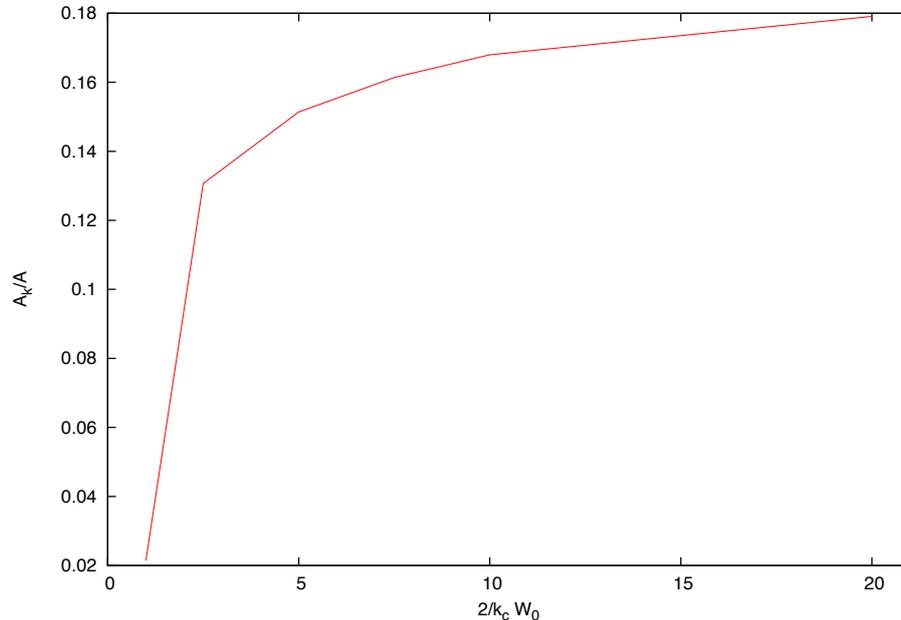


Abbildung 7.23.: Kontaktfläche beim Kontakt eines Erythrozyten mit einem Zylinder in Abhängigkeit von der Adhäsionsstärke.

7.6. Auseinanderziehen eines Erythrozyten

Ein Erythrozyt auf einer Ebene wird mit Hilfe einer der Ebene gegenüber liegenden kleinen Kugel, an der er adhärirt, auseinandergezogen (siehe Abbildung 7.24). Dazu wird die Kugel etwas nach oben bewegt und das Minimum des Energiefunktional berechnet. Dieser Vorgang wird wiederholt, bis der Kontakt abreißt.

Es wird der Abstandsvektor eines Punktes \mathbf{P} zu einer Kugel mit Mittelpunkt \mathbf{a} und Radius r_0 benötigt. Der Abstandsvektor zum Mittelpunkt ist $\mathbf{P} - \mathbf{a}$. Da die Kugel einen Radius r_0 hat, muss man diesen entsprechend skalieren:

$$\mathbf{r} = \left(1 - \frac{r_0}{|\mathbf{P} - \mathbf{a}|}\right) (\mathbf{P} - \mathbf{a}).$$

In Abbildung 7.24 ist dargestellt, wie ein Erythrozyt auseinandergezogen wird. Trägt man die Energie in Abhängigkeit vom Abstand auf, so kann man durch Ableiten nach dem Abstand die Kraft, mit der an dem Erythrozyten gezogen wird, bestimmen. Diese wird auch in den entsprechenden physikalischen Experimenten bestimmt.

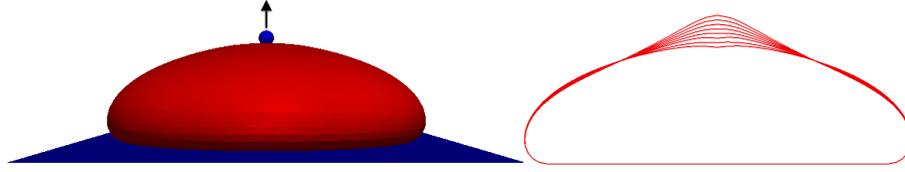


Abbildung 7.24.: An einem Erythrozyten wird mit Hilfe einer kleinen Kugel gezogen. Links: Ausgangssituation, rechts: Querschnitte zu den verschiedenen Stadien. Die Adhäsionsstärken sind dabei $10\frac{k_c}{2}$ für die Ebene und $1000\frac{k_c}{2}$ für die Kugel.

7.7. Kontakt zweier Erythrozyten

Hier wird das Experiment aus Abbildung 2.5 simuliert. Der Kontakt des unteren Erythrozyten mit der Glasfläche wird durch eine Ebene modelliert, der des oberen mit dem Cantilever durch eine Kreisscheibe. Es wird zunächst die Gleichgewichtsform beim Kontakt der beiden jeweils einzeln mit der Ebene beziehungsweise Kreisscheibe berechnet, dann werden sie in Kontakt gebracht und die dabei entstehende Gleichgewichtsform wird bestimmt. Danach werden sie immer weiter auseinandergezogen und in jedem Schritt wird das Energieminimum berechnet, bis der Kontakt abreißt. Der Abstand eines Punktes auf der Oberfläche des einen Erythrozyten zum anderen wird dabei berechnet, indem der Abstand jedes Knotens der Triangulierung des einen zum anderen Erythrozyten berechnet wird und der herausgesucht wird, der den geringsten Abstand hat. Diese Methode hat quadratischen Aufwand, doch für die hier verwendete Anzahl an Dreiecken ist sie schnell genug.

Für den Kontakt mit der Kreisscheibe wird der Abstand eines Punktes \mathbf{P} von einer Kreisscheibe mit Mittelpunkt \mathbf{a} , Richtungsvektoren \mathbf{b} , \mathbf{c} und Radius r_0 benötigt. Es wird dazu zunächst der Schnittpunkt des Normalenvektors zur Ebene, in der die Kreisscheibe liegt, durch \mathbf{P} mit der Ebene berechnet:

$$\mathbf{a} + |\mathbf{b} \times \mathbf{c}|^{-2} ((\mathbf{P} - \mathbf{a}) \times (\mathbf{c} \times \mathbf{b})) \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}).$$

Liegt dieser innerhalb der Kreisscheibe, das heißt sein Abstand zum Mittelpunkt \mathbf{a} ist kleiner gleich dem Radius r_0 , so ergibt sich der Abstandsvektor als seine Differenz von \mathbf{P} wie bei einer Ebene. Ist dies nicht der Fall, so wird der Abstandsvektor vom Mittelpunkt zum Schnittpunkt

$$|\mathbf{b} \times \mathbf{c}|^{-2} ((\mathbf{P} - \mathbf{a}) \times (\mathbf{c} \times \mathbf{b})) \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c})$$

wie beim Zylinder skaliert:

$$\left(1 - \frac{r_0 |\mathbf{b} \times \mathbf{c}|^2}{|((\mathbf{P} - \mathbf{a}) \times (\mathbf{c} \times \mathbf{b})) \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c})|} \right) |\mathbf{b} \times \mathbf{c}|^{-2} ((\mathbf{P} - \mathbf{a}) \times (\mathbf{c} \times \mathbf{b})) \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c})$$

und der Abstandsvektor ergibt sich dann als Summe des Abstandvektors vom Mittelpunkt zum Schnittpunkt und des Abstandvektors vom Schnittpunkt zu \mathbf{P} :

$$\mathbf{P} - \mathbf{a} - r_0 \frac{((\mathbf{P} - \mathbf{a}) \times (\mathbf{c} \times \mathbf{b})) \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}{|((\mathbf{P} - \mathbf{a}) \times (\mathbf{c} \times \mathbf{b})) \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c})|}.$$

Zusammengefasst ist der Abstandsvektor

$$r = P - a - ((P - a) \times (c \times b)) \times (b \times c) \begin{cases} \frac{1}{|b \times c|^2} & \text{für } \frac{|((P - a) \times (c \times b)) \times (b \times c)|}{|b \times c|^2} \leq r_0 \\ \frac{r_0}{|((P - a) \times (c \times b)) \times (b \times c)|} & \text{für } \frac{|((P - a) \times (c \times b)) \times (b \times c)|}{|b \times c|^2} > r_0 \end{cases} .$$

In Abbildung 7.25 ist die Ausgangssituation dargestellt: Ein Erythrozyt ist in Kontakt mit einer Ebene und einer mit einer Kreisscheibe. Man sieht, dass die Form beim Kontakt mit der Kreisscheibe keinen Unterschied zur Form beim Kontakt mit der Ebene zeigt.



Abbildung 7.25.: Ausgangssituation des Experimentes: Kontakt eines Erythrozyten mit einer Ebene und eines zweiten mit einer Kreisscheibe für $W_0 = 10 \frac{k_e}{2}$.

In Abbildung 7.26 werden verschiedene Stadien des Auseinanderziehens gezeigt, wobei die Adhäsionsstärke für den Kontakt der beiden Erythrozyten ebenfalls $W_0 = 10 \frac{k_e}{2}$ beträgt.

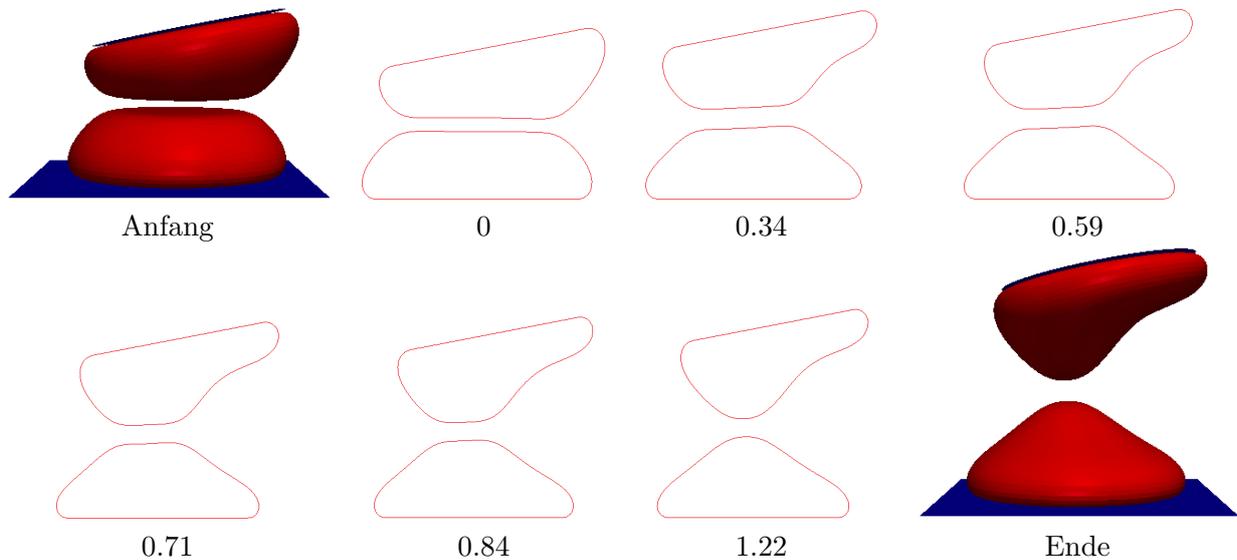


Abbildung 7.26.: Auseinanderziehen zweier adhärierter Erythrozyten. Bei den Querschnitten ist dabei angegeben, um wieviel die Kreisscheibe im Verhältnis zur Dicke der ursprünglichen Erythrozytenform jeweils nach oben verschoben wurde.

7. Numerische Ergebnisse

Für diese (verhältnismäßig schwache) Adhäsionsstärke kann also um das 1.22-fache der Dicke eines Erythrozyten auseinandergezogen werden, bevor der Kontakt abbricht. Dabei ist der Minimalabstand beim Kontakt zwischen den beiden Erythrozyten $d_0 = 0.5$, da sonst feiner diskretisiert werden müsste. Durch den Winkel, in dem der obere Erythrozyt zum unteren steht, ist keine axialsymmetrische Berechnung möglich, es wird also die dreidimensionale Evolution benötigt. In Abbildung 7.27 ist die Energie in Abhängigkeit vom Abstand aufgetragen. Diese kann mit experimentellen Ergebnissen verglichen werden.

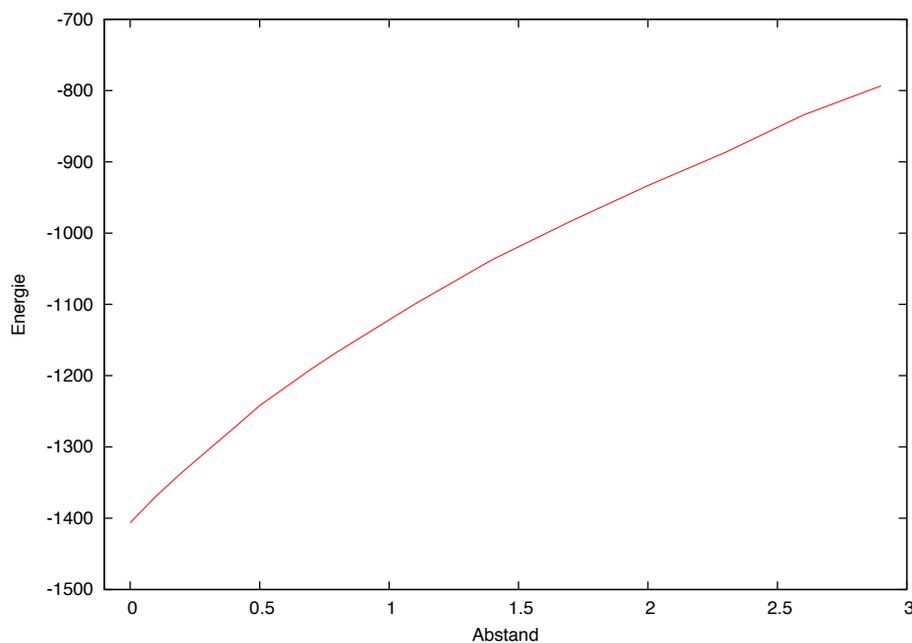


Abbildung 7.27.: Energie beim Auseinanderziehen zweier adhärirter Erythrozyten in Abhängigkeit vom Abstand.

8. Fazit

Die Form von Erythrozyten lässt sich in weiten Teilen über das Helfrich-Funktional, welches der Hauptteil der Biegeenergie ihrer Membran darstellt, beschreiben. Mit Hilfe von zusätzlichen Termen kann man Fläche und Volumen erhalten und den Kontakt mit Objekten modellieren.

Um das Energiefunktional zu minimieren, muss die Variation bestimmt werden. Die Euler-Lagrange-Gleichung beschreibt die Bedingung, dass die Variation verschwindet. Für axialsymmetrische Formen kann die Symmetrie ausgenutzt und die Euler-Lagrange-Gleichung für die Kurve in der x - z -Ebene, die um die y -Achse rotiert wird, gelöst werden. Im allgemeinen dreidimensionalen Fall nimmt man eine Anfangsoberfläche, die mit dem Gradientenfluss bewegt wird, bis eine Oberfläche entsteht, welche die Energie minimiert. Es ergibt sich dabei ein Anfangswertproblem für die Parametrisierung der Oberfläche, welches Ableitungen vierter Ordnung enthält. Um diese zu reduzieren, wird der mittlere Krümmungvektor, der der Laplace-Beltrami-Operator der Parametrisierung ist, als zusätzliche Unbekannte eingeführt und man erhält schließlich in schwacher Formulierung ein Differentialgleichungssystem erster Ordnung.

Zur Lösung des Anfangswertproblems wird die Methode der Finiten Elemente verwendet, wobei die Oberfläche meist linear trianguliert ist. Die gesuchten Funktionen werden mit Hilfe der Knotenbasisfunktionen dargestellt, die den Wert eins im ihnen zugeordneten Knoten haben und in allen anderen Knoten verschwinden. Auf diese Art lässt sich das Anfangswertproblem durch ein lineares Gleichungssystem ausdrücken, dessen Matrizen dünn besetzt sind, da die Integrale über die Knotenbasisfunktionen nur auf benachbarten Dreiecken nicht verschwinden.

Um eine Entartung der Dreiecke während der Evolution zu reduzieren, kann im dreidimensionalen Fall zusätzlich eine tangentielle Korrektur durchgeführt werden, die lokal die Fläche erhält. Um Approximationsfehler bei der Flächen- und Volumenerhaltung zu verringern, fordert man nicht, dass ihre zeitliche Änderung verschwindet, sondern der mit einem positiven Vorfaktor multiplizierten Differenz zwischen dem aktuellen Wert und dem Anfangswert entspricht.

Die axialsymmetrische Methode hat den Vorteil, dass sie wesentlich schneller minimierende Formen liefert, da die Euler-Lagrange-Gleichung gelöst wird und keine zeitintensive Evolution durchgeführt werden muss. Jedoch können nicht axialsymmetrische Formen natürlich nicht bestimmt werden. Hierfür muss die rechenintensivere Evolution angewendet werden. Hierbei darf die Anfangsoberfläche nicht zu weit vom Minimum entfernt sein, da sonst zu viele Schritte durchgeführt werden, sodass trotz der tangentialen Korrektur die Dreiecke entarten. Wird die Triangulierung verfeinert, muss auch die Schrittweite verkleinert werden, sodass nicht nur die Komplexität, also die Anzahl Unbekannter im zu lösenden Gleichungssystem, steigt, sondern auch mehr Schritte bis zum Erreichen des Minimums nötig sind.

8. Fazit

Ableitungen zweiter Ordnung wie die mittlere und die Gauß-Krümmung können auf Konvergenz untersucht werden. Man stellt fest, dass sich für eine Sphäre und einen Torus eine Konvergenzordnung von eins für flache Dreiecke und eine Konvergenzordnung von zwei für Dreiecke, deren Kanten quadratische Polynome sind, ergibt. Für eine Sphäre, die mit dem mittleren Krümmungsvektor evolviert, kann man die exakte Lösung bestimmen und für verschiedene Diskretisierungen und Schrittweiten untersuchen. Dabei stellt man fest, dass die Evolution sowohl in der Raum- als auch in der Zeitdiskretisierung in erster Ordnung konvergiert. Wendet man die Willmore-Evolution auf ein Objekt mit Geschlecht Null an, so evolviert es wie in der Theorie vorhergesagt zu einer Kugel. Bei einem Torus ergibt sich ein bestimmtes Radienverhältnis, das in dritter Ordnung konvergiert. Das Helfrich-Funktional konvergiert für verschieden Objekte in erster Ordnung.

Die Flächen der Dreiecke der Diskretisierung ändern sich ohne Korrektur im Laufe der Evolution. Im Vergleich dazu gibt es bei Berechnungen mit einer tangentialen Korrektur zur lokalen Flächenerhaltung jedoch kaum Änderungen. Diese Korrektur ermöglicht auch manche Berechnungen, die ohne sie nicht durchführbar sind, da an manchen Stellen durch die wachsende Größe der Dreiecke zu viel Genauigkeit verloren geht. Durch die Abwandlung der Bedingung für die Flächen- und Volumenerhaltung ist die Erhaltung während der Evolution durch Verringerung von Approximationsfehlern besser erfüllt, als wenn man nur die zeitliche Änderung gleich Null setzt. Dabei wird die Erhaltung mit wachsendem Vorfaktor besser.

Es ist möglich, in der Natur vorkommende Formen wie Diskozyten und Stomatozyten durch Minimierung des Helfrich-Funktional zu erhalten. Eine Einordnung einiger Formen für verschiedene Werte der spontanen Krümmung und des reduzierten Volumens in ein Phasendiagramm, das aus axialsymmetrischen Berechnungen erhalten wurde, zeigt, dass die dreidimensionalen Berechnungen mit den axialsymmetrischen übereinstimmen. Des Weiteren konnte festgestellt werden, dass eine axialsymmetrische Form, die durch Lösung der Euler-Lagrange-Gleichung berechnet wurde, ebenfalls minimal unter der dreidimensionalen Evolution ist.

Durch den Kontakt mit einer Ebene erhält man eine sphärozytische Form, welche in Experimenten mit Glasoberflächen beobachtet werden kann. In anderen Experimenten werden Erythrozyten in ein Netz aus Mikrofasern gegeben, deren Formen sich beim Kontakt mit einem Zylinder wiederfinden. Diese sind nicht axialsymmetrisch und können nur mit der dreidimensionalen Evolution gefunden werden. Es ist nicht nur möglich, den Kontakt eines Erythrozyten mit einer künstlichen Oberfläche zu simulieren, sondern auch den Kontakt zweier Erythrozyten untereinander.

In Zukunft könnte in Analogie zur Willmore-Evolution die komplette Evolution in einem solchen semi-impliziten Schema durchgeführt werden. Außerdem sollte nach weiteren Möglichkeiten zur Verbesserung der Triangulierung während der Evolution gesucht werden. Zum Beispiel ist zwar die Fläche der Dreiecke annähernd erhalten, aber die Winkel nicht, sie können also dennoch sehr schmal werden, was die Evolution instabil macht. Weitere Parameterstudien bei der Helfrich-Evolution für verschiedene Formen wären interessant, insbesondere in Hinblick auf nicht axialsymmetrische Formen. Bei den Zieh-Experimenten sollten noch die Parameter dahingegen untersucht werden, dass ein Vergleich mit den Ergebnissen physikalischer Experimente möglich ist.

A. Anhang

Hier soll

$$\sum_{\alpha,\beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{X}_\alpha^l \mathbf{X}_\beta^n = \delta_{ln} - \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n$$

bewiesen werden. Es gibt drei Möglichkeiten: $n = l, n = l + 1, n = l + 2$, wobei dies, wie auch im Folgenden, modulo 3 zu verstehen ist.

Erster Fall: $n = l$

Für $n = l$ erhält man:

$$\delta_{ln} - \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n = 1 - (\boldsymbol{\nu}^l)^2 = \frac{1}{\det(g)} \left(g_{11}g_{22} - g_{12}^2 - ((\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)^l)^2 \right).$$

Ausgeschrieben ergibt sich

$$\begin{aligned} \delta_{ln} - \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n &= \frac{1}{\det(g)} \left(g_{11} \left((\mathbf{X}_2^l)^2 + (\mathbf{X}_2^{l+1})^2 + (\mathbf{X}_2^{l+2})^2 \right) - g_{12} (\mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_2^l + \mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+1} + \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^{l+2}) \right. \\ &\quad \left. - (\mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+2} - \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^{l+1})^2 \right). \end{aligned}$$

Zwei der gewünschten Summanden erhält man direkt:

$$\begin{aligned} \delta_{ln} - \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n &= \frac{1}{\det(g)} \left(g_{11} \left((\mathbf{X}_2^{l+1})^2 + (\mathbf{X}_2^{l+2})^2 \right) - g_{12} (\mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+1} + \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^{l+2}) \right. \\ &\quad \left. - (\mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+2} - \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^{l+1})^2 \right) + (g^{-1})_{12} \mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_2^l + (g^{-1})_{22} (\mathbf{X}_2^l)^2. \end{aligned}$$

Durch Erweiterung bekommt man die restlichen Summanden:

$$\begin{aligned} \delta_{ln} - \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n &= \frac{1}{\det(g)} \left(- (\mathbf{X}_1^l)^2 (\mathbf{X}_2^l)^2 + \left((\mathbf{X}_1^{l+1})^2 + (\mathbf{X}_1^{l+2})^2 \right) \left((\mathbf{X}_2^{l+1})^2 + (\mathbf{X}_2^{l+2})^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + (\mathbf{X}_1^l)^2 (\mathbf{X}_2^l)^2 - (\mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+1} + \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^{l+2}) (\mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+1} + \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^{l+2}) \right. \\ &\quad \left. - (\mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+2} - \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^{l+1})^2 \right) + (g^{-1})_{11} (\mathbf{X}_1^l)^2 + 2 (g^{-1})_{12} \mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_2^l \\ &\quad + (g^{-1})_{22} (\mathbf{X}_2^l)^2 \\ &= \sum_{\alpha,\beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{X}_\alpha^l \mathbf{X}_\beta^n. \end{aligned}$$

A. Anhang

Zweiter Fall: $n = l + 1$

Für $n = l + 1$ ergibt sich

$$\begin{aligned}\delta_{ln} - \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n &= -\boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^{l+1} \\ &= \frac{1}{\det(g)} \left(\mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_1^{l+1} (\mathbf{X}_2^{l+2})^2 - \mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^l \mathbf{X}_2^{l+2} + (\mathbf{X}_1^{l+2})^2 \mathbf{X}_2^l \mathbf{X}_2^{l+1} \right. \\ &\quad \left. - \mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+2} \right).\end{aligned}$$

Auch hier erhält man die ersten beiden Summanden direkt:

$$\begin{aligned}\delta_{ln} - \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n &= \frac{1}{\det(g)} \left(-\mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_2^{l+1} (\mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_2^l + \mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+1} + \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^{l+2}) \right. \\ &\quad \left. - \mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^l (\mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_2^l + \mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+1} + \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^{l+2}) \right) \\ &\quad + (g^{-1})_{11} \mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_1^{l+1} + (g^{-1})_{22} \mathbf{X}_2^l \mathbf{X}_2^{l+1}\end{aligned}$$

und durch Erweiterung die restlichen:

$$\begin{aligned}\delta_{ln} - \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n &= (g^{-1})_{11} \mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_2^{l+1} + (g^{-1})_{12} \mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_2^{l+1} + (g^{-1})_{12} \mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^l + (g^{-1})_{22} \mathbf{X}_2^l \mathbf{X}_2^{l+1} \\ &= \sum_{\alpha, \beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{X}_\alpha^l \mathbf{X}_\beta^{l+1} = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{X}_\alpha^l \mathbf{X}_\beta^n.\end{aligned}$$

Dritter Fall: $n = l + 2$

Analog zum zweiten Fall verfährt man für $n = l + 2$:

$$\begin{aligned}\delta_{ln} - \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n &= -\boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^{l+2} \\ &= \frac{1}{\det(g)} \left(-\mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+2} + (\mathbf{X}_1^{l+1})^2 \mathbf{X}_2^l \mathbf{X}_2^{l+2} + \mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_1^{l+2} (\mathbf{X}_2^{l+1})^2 \right. \\ &\quad \left. - \mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^l \mathbf{X}_2^{l+1} \right).\end{aligned}$$

Wieder spaltet man die ersten beiden Summanden ab:

$$\begin{aligned}\delta_{ln} - \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n &= \frac{1}{\det(g)} \left(-\mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_2^{l+2} (\mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_2^l + \mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+1} + \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^{l+2}) \right. \\ &\quad \left. - \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^l (\mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_2^l + \mathbf{X}_1^{l+1} \mathbf{X}_2^{l+1} + \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^{l+2}) \right) \\ &\quad + (g^{-1})_{11} \mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_1^{l+2} + (g^{-1})_{22} \mathbf{X}_2^l \mathbf{X}_2^{l+2}\end{aligned}$$

und erweitert für die restlichen

$$\begin{aligned}\delta_{ln} - \boldsymbol{\nu}^l \boldsymbol{\nu}^n &= (g^{-1})_{11} \mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_2^{l+2} + (g^{-1})_{12} \mathbf{X}_1^l \mathbf{X}_2^{l+2} + (g^{-1})_{12} \mathbf{X}_1^{l+2} \mathbf{X}_2^l + (g^{-1})_{22} \mathbf{X}_2^l \mathbf{X}_2^{l+2} \\ &= \sum_{\alpha, \beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{X}_\alpha^l \mathbf{X}_\beta^{l+2} = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 (g^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{X}_\alpha^l \mathbf{X}_\beta^n.\end{aligned}$$

B. Bezeichnungen

a	Vorfaktor für Verbesserung der Flächenerhaltung
\mathbf{a}	Aufpunkt Zylinder/Ebene, Mittelpunkt Kreisscheibe/Kugel beim Kontakt
A	Fläche
$A(\cdot)$	Fläche von \cdot
$A(\mathbf{P})$	infinitesimale Fläche um \mathbf{P}
A_0	Fläche zu Beginn der Evolution
A_E	Fläche am Ende der Evolution
$A_i(\mathbf{P}_j)$	Fläche des $i(\mathbf{P}_j)$ -ten Dreiecks um \mathbf{P}_j
A_k	Kontaktfläche
\mathbf{A}^{kl}	Vektor für die Berechnung der diskreten zweiten Fundamentalform
α	Index mit Werten 1 oder 2
b	Vorfaktor für Verbesserung der Volumenerhaltung
\mathbf{b}	Richtungsvektor Zylinder/Ebene beim Kontakt
$B(\rho, \zeta)$	Kugel
B^l	Matrix für die Berechnung der zweiten Fundamentalform
β	Index mit Werten 1 oder 2
\mathbf{c}	Richtungsvektor Ebene beim Kontakt
C	Konstante
C^p	Raum der p -mal differenzierbaren Funktionen
D	Jacobi-Matrix
d_0	minimaler Abstand bei Kontakt
D_τ	Richtungsableitung in Richtung τ , Seite 23
D^q	q -te schwache Ableitung, Seite 32
\mathcal{D}_l	Günter-Ableitungen, Seite 25
$D(\phi)$	Matrix mit Günter-Ableitungen von ϕ
δ	Index mit Werten 1 oder 2
δ_ϕ	Variation mit ϕ
$\delta_{\alpha\beta}$	Kronecker-Delta
Δ_Γ	Laplace-Beltrami-Operator, Seite 23
div_Γ	Oberflächendivergenz, Seite 23
dL	Linielement
dS	Oberflächenelement
$\partial\Gamma$	Rand von Γ
∂_l	Ableitungen im \mathbb{R}^3
∂_ν	Normalenableitung
\mathbf{e}_l	Standardbasisvektoren

B. Bezeichnungen

f	skalarwertige Funktion auf Γ
\underline{f}	skalarwertige Funktion auf Γ
\widetilde{f}	skalarwertige Funktion auf Umgebung von Γ
\mathbf{f}	vektorwertige Funktion auf Γ
f_i	Knotenwerte von f
F	matrixwertige Funktion auf Γ
$\widetilde{\mathbf{f}}$	vektorwertige Funktion auf Umgebung von Γ
\mathcal{F}	Energiefunktional
$F_{A,V}$	Flächen- und Volumenerhaltungsterm des Energiefunktionals
F_b	Biegeenergie der Membran
f_h	diskrete Version von f
F_h	Helfrich-Funktional
F_k	Kontakt-Funktional
F_K	Integral über die Gauß-Krümmung
F_w	Willmore-Funktional
g	metrischer Tensor, $g = (g_{\alpha\beta})$, Seite 24
G	matrixwertige Funktion
\mathcal{G}	Geschlecht
γ	Index mit Werten 1 oder 2
γ	Kurve
Γ	Oberfläche
$\underline{\Gamma}$	gestörte Oberfläche
$\widetilde{\Gamma}$	Umgebung von Γ
Γ_0	Anfangsoberfläche
Γ_h	diskrete Oberfläche
Γ_j	Teiloberfläche
Γ_h^m	diskrete Oberfläche im m -ten Zeitschritt
grad_Γ	Oberflächengradient, Seite 23
h	zweite Fundamentalform, $h = (h_{\alpha\beta})$, Seite 27
H	doppelte mittlere Krümmung, Seite 28
H_0	spontane Krümmung, Seite 10
H^p	Sobolev-Raum, Seite 32
H_h^1	Ansatzraum, Seite 36
i	Index mit Werten $1, \dots, N_K/N_D$
I	erste Fundamentalform, Seite 24
II	zweite Fundamentalform, $II = (II)_{kl}$, Seite 27
$i(\mathbf{P}_j)$	Index mit Werten $1, \dots, N_D(\mathbf{P}_j)$
j	Index mit Werten $1, \dots, N_K/N_D$
\mathcal{J}^p	Bessel-Potentialoperator, Seite 31
k	Index mit Werten 1,2,3
K	Gauß-Krümmung, Seite 28
k_c	Biegemodul
k_g	Biegemodul

κ_α	Hauptkrümmung, Seite 27
l	Index mit Werten 1,2,3
L^p	Raum der messbaren Funktionen, sodass die p -te Potenz integrierbar ist, Seite 31
L^1_{loc}	Raum der auf jeder kompakten Teilmenge von Γ integrierbaren Funktionen, Seite 32
λ	Lagrange-Multiplikator für Flächenerhaltung
m	Zeitschritt
M	Massenmatrix
μ	Lagrange-Multiplikator für Volumenerhaltung
N	Anzahl Evolutionsschritte
n	Index mit Werten 1,2,3
N_D	Anzahl Dreiecke
$N_D(\mathbf{P}_j)$	Anzahl Dreiecke um \mathbf{P}_j
N_K	Anzahl Knoten
ν	äußerer Normalenvektor, Seite 24
$\nu_{A(\mathbf{P})}$	äußerer Normalenvektor an $A(\mathbf{P})$
$\nu_{\partial\Gamma}$	zu Γ tangentialer äußerer Normalenvektor auf $\partial\Gamma$
∇	Nabla-Operator
∇_Γ	matrixwertige Ableitung, Seite 27
Ω	$\subset \mathbb{R}^2$ offen
$\tilde{\Omega}$	kompakte Teilmenge von Ω
Ω_i	$\subset \mathbb{R}^2$ offen
p	$1 \leq p \leq \infty$
p_α	$\in \mathbb{N}_0$
\mathbf{P}	Punkt aus Γ
\mathbf{P}_i	Knoten aus Γ_h
ϕ	1D-Testfunktion
ϕ	3D-Testfunktion
Φ	Hilfsfunktion für die Berechnung der tangentialen Geschwindigkeit
ϕ_i	Knotenbasisfunktionen, Seite 35
ψ	Diffeomorphismus
ψ	3D-Testfunktion
\mathbf{q}	$\in \mathbb{N}_0^3$, $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$
Q	Willmore-Matrix
\mathbf{r}	Abstandsvektor bei Kontakt
R^{ln}	Willmore-Matrix
r_0	Radius Zylinder/Kugel/Kreisscheibe beim Kontakt
R_0	Radius einer Kugel mit gleicher Oberfläche wie die betrachtete Form
ρ	Radius Kugel
s	Bogenlänge
S	Stiftheitsmatrix
$\mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$	Schwartz-Raum, Seite 31
$\mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$	Raum der temperierten Distributionen, Seite 31
S^{ln}	Willmore-Matrix

B. Bezeichnungen

σ	Parameter bei Zylinder
σ_α	Parameter bei Ebene
t	Zeit
t^*	Endzeitpunkt der Evolution
T	Schrittweite
T_i	Dreieck
$T_{\mathbf{P}\Gamma}$	Tangentialraum
$\perp_{\mathbf{P}\Gamma}$	Menge der Vektoren senkrecht zu Γ
$\boldsymbol{\tau}$	Tangentialvektor
$\boldsymbol{\tau}_\alpha$	Tangentialvektor
θ	Neigungswinkel bei axialsymmetrischen Formen
$\theta_{i(\mathbf{P}_j)}$	Winkel um \mathbf{P}_j
ϑ	Azimutwinkel bei axialsymmetrischen Formen
v	skalare Geschwindigkeit
V	Volumen
v_0	Volumen einer Kugel mit gleicher Oberfläche wie die betrachtete Form
V_0	Anfangsvolumen
$v_{A,V}$	Geschwindigkeitszusatz für Volumen- und Flächenerhaltung
v_ν	Normalengeschwindigkeit
\mathbf{v}_T	tangentiale Geschwindigkeit
v_w	Willmore-Geschwindigkeit
W	Wechselwirkungspotential
\mathcal{W}	Weingarten-Abbildung, Seite 27
W_0	Adhäsionsstärke
x	Koordinate
\mathbf{x}^l	rechte Seite bei der Berechnung der Willmore-Evolution
\mathbf{X}	Parametrisierung, Seite 23
\mathbf{X}_h	diskrete Parametrisierung
\mathbf{X}_j	lokale Parametrisierung
\mathbf{X}^m	Parametrisierung im m -ten Zeitschritt
\mathbf{X}^l	Vektor der Knotenwerte von \mathbf{X}^{m+1} oder \mathbf{X}
\mathbf{X}_{T_j}	Parametrisierung von T_j
$\boldsymbol{\xi}$	$= (\xi_1, \xi_2) \in \Omega$
y	Koordinate
\mathbf{Y}	mittlerer Krümmungsvektor, Seite 28
$\underline{\mathbf{Y}}$	gestörter mittlerer Krümmungsvektor
$\mathbf{Y}_{\text{exakt}}$	exakter Wert für \mathbf{Y}
\mathbf{Y}_h	diskreter mittlerer Krümmungsvektor
\mathbf{Y}^l	Vektor der Knotenwerte von \mathbf{Y}^{m+1} oder \mathbf{Y}
\mathbf{Y}^m	mittlerer Krümmungsvektor im m -ten Zeitschritt
z	Koordinate
z_0	Position der Ebene bei Axialsymmetrie
\mathbf{Z}^{kl}	Vektor der zweiten Fundamentalform

$\zeta \in \Omega$
 ζ $\in \Omega$

Literaturverzeichnis

- [1] I. Bernhardt, L. Ivanova, P. Langehanenberg, B. Kemper, G. von Bally. Application of digital holographic microscopy to investigate the sedimentation of intact red blood cells and their interaction with artificial surfaces. *Bioelectrochemistry (Amsterdam, Netherlands)*, 73(2):92-6, 2008.
- [2] David H. Boal. Computer Simulation of a Model Network for the Erythrocyte Cytoskeleton. *Biophysical Journal*, Volume 67, 1994.
- [3] P. B. Canham. The minimum energy of bending as a possible explanation of biconcave shape of the human red blood cell. *Journal of Theoretical Biology*, 26, 61-81, 1970.
- [4] U. Clarenz, U. Diewald, G. Dziuk, M. Rumpf, R. Rusu. A finite element method for surface restoration with smooth boundary conditions. *Elsevier*, 2004.
- [5] Klaus Deckelnick, Gerhard Dziuk, Charles M. Elliott. Computation of geometric partial differential equations and mean curvature flow. *Acta Numerica*, 2005.
- [6] H. J. Deuling, W. Helfrich. Red blood cell shapes as explained on the basis of curvature elasticity. *Biophysical Journal*, Volume 16, 1976.
- [7] H. J. Deuling, W. Helfrich. The curvature elasticity of fluid membranes: a catalogue of vesicle shapes. *Le journal de physique*, Tome 37, 1976.
- [8] B. Deuticke. Membrane Lipids and Proteins as a Basis of Red Cell Shape and its Alterations. Aus: I. Bernhardt, J. Ellory: Red cell membrane transport in health and disease. *Springer-Verlag*, 2003.
- [9] Günay Doğan, Ricardo H. Nochetto. First variation of the general curvature-dependent surface energy. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 2012.
- [10] M. Droske, M. Rumpf. A level set formulation for Willmore flow. *Interfaces Free Boundaries* 8, 21-46, 2006.
- [11] Roland Duduchava, Dorina Mitrea, Marius Mitrea: Differential operators and boundary value problems on hypersurfaces. *Mathematische Nachrichten*, Volume 279, Issue 9-10, pages 996–1023, 2006.
- [12] Gerhard Dziuk. Computational parametric Willmore flow. *Numerische Mathematik*, Springer-Verlag, 2008.
- [13] T. Fischer: Human Red Cell Shape and the Mechanical Characteristics of the Membrane. Aus: I. Bernhardt, J. Ellory: Red cell membrane transport in health and disease. *Springer-Verlag*, 2003.

- [14] G. Francis, J. M. Sullivan, R. B. Kusner, K. A. Brakke, C. Hartman, G. Chappell. The minimax sphere eversion. Aus: H.-C. Hege, K. Polthier: Visualization and Mathematics, pp. 3-20. *Springer*, 1997.
- [15] Richards Grzhibovskis, Elisabeth Krämer, Ingolf Bernhardt, Carl Zanden, Nikolay V. Repin, Bogdan V. Tkachuk, Marina V. Voinova. Shape of red blood cells in contact with artificial surfaces. *European Biophysics Journal*, eingereicht.
- [16] C.-J-Heine: Isoparametric finite element approximation of curvature on hypersurfaces. *Preprint, Fak. f. Math. Phys., Univ. Freiburg*, 2004.
- [17] P. Knabner, L. Angermann. Numerik partieller Differentialgleichungen. *Springer*, 2000.
- [18] Wolfgang Kühnel. Differentialgeometrie. *Vieweg*, 2008.
- [19] Ernst Kuwert, Reiner Schätzle. Removability of point singularities of Willmore surfaces. *Annals of Mathematics*, 160, 2004.
- [20] G. Lim, M. Wortis, R. Mukhopadhyay. Stomatocyte-discocyte-echinocyte sequence of the human red blood cell: Evidence for the bilayer-couple hypothesis from membrane mechanics. *PNAS*, 16766-16769, vol. 99, no. 26, December 24, 2002.
- [21] U. F. Mayer, G. Simonett. A numerical scheme for axisymmetric solutions of curvature-driven free boundary problems, with applications to the Willmore flow. *Interfaces Free Boundaries* 4, 89-109, 2002.
- [22] Mark Meyer, Mathieu Desbrun, Peter Schröder, Alan H. Barr: Discrete Differential-Geometry Operators in n D. *Springer-Verlag*, 2000.
- [23] Sergej Rjasanow, Olaf Steinbach. The Fast Solution of Boundary Integral Equations.
- [24] Youcef Saad, Martin H. Schultz. GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, November 1983
- [25] Günter Schwarz. Hodge decomposition - a method for solving boundary value problems. *Band 1607 von Lecture Notes in Mathematics, Springer*, 1995.
- [26] Udo Seifert. Configurations of fluid membranes and vesicles. *Advances in Physics*, 46: 1, 13-137, 1997.
- [27] Udo Seifert, Karin Berndl, and Reinhard Lipowsky: Shape transformations of vesicles: Phase diagram for spontaneous-curvature and bilayer-coupling models. *Physical Review A*, Volume 44, Number 2, 1991.
- [28] Udo Seifert, Reinhard Lipowsky. Adhesion of vesicles. *Physical Review A*, Volume 42, Number 8, 1990.
- [29] U. Seifert, L. Miao, H. G. Döbereiner, M. Wortis. The Structure and Conformation of Ampiphilic Membranes. *Springer Proceedings in Physics*, Vol. 66, pp. 93-96, 1992.

- [30] Leon Simon: Lectures on Geometric Measure Theory. *Proceedings of the Centre for Mathematical Analysis, Volume 3, Australian National University*, 1983.
- [31] P. Steffen, C. Verdier, and C. Wagner: Quantification of Depletion-Induced Adhesion of Red Blood Cells. *Phys. Rev. Lett.* 110, 018102 (2013).
- [32] Sreejitz Sukumaran, Udo Seifert. Influence of shear flow on vesicles near a wall: A numerical study. *Physical Review*, Volume 64, 2001.
- [33] S. Svetina, B. Zeks. Bilayer couple hypothesis of red cell shape transformations and osmotic hemolysis. *Biochimica et Biophysica Acta*, 42, 1989.
- [34] G. Thomsen. Über Konforme Geometrie, I: Grundlagen der Konformen Flächentheorie. *Abh. Math. Sem. Hamburg* 3, pp. 31-56, 1923.
- [35] J. van Hemmen, C. Leibold: Elementary excitations of biomembranes: Differential geometry of undulations in elastic surfaces. *Physics Report*, 444 (2007) 51-00, 2007.
- [36] Max Wardetzky, Miklós Bergou, David Harmon, Denis Zorin, Eitan Grinspun. Discrete Quadratic Curvature Energies. *ACM*, 2006.
- [37] T. J. Willmore. Riemannian Geometry. *Oxford University Press*, 2002.

Anmerkung

Die aus der Literatur verwendeten Bilder wurden zum Teil verändert. Englische Texte wurden ins Deutsche übersetzt und einmal ein Vergleich mit eigenen Simulationen eingetragen.

Danksagung

Ich danke meinem Professor Sergej Rjasanow für die Bereitstellung dieses äußerst interessanten Themas, der Möglichkeit, bei ihm zu promovieren, und für die angenehme Arbeitsatmosphäre. Auch möchte ich mich bei ihm dafür bedanken, dass ich, wenn nötig, meine Kinder mit in mein Büro nehmen konnte.

Ich danke meinem Zweitgutachter Prof. Duduchava für die Begutachtung meiner Arbeit.

Besonderer Dank gilt meinem Betreuer Dr. Richards Grzhibovskis, der immer bereit war, mir bei jedem Problem zu helfen.

Ich danke meinen aktuellen und ehemaligen Kollegen Andreas Buchheit, Dr. Marvin Fleck, Christian Michel, Dr. Lucy Weggler und Dr. Steffen Weißer, die immer ein offenes Ohr für Probleme hatten und auch immer wieder mit Ideen oder Hinweisen weiterhelfen konnten.

Bedanken möchte ich mich auch bei meinem Mann Florian Krämer, meinen Eltern Dr. Gabriele und Dr. Franz Josef Eckle, meinen Geschwistern Katharina und Konstantin Eckle, meiner Schwiegermutter Bärbel Krämer und meiner Schwägerin Katja Krämer für das Zuhören bei Problemen und die Unterstützung bei der Kinderbetreuung und noch einmal speziell bei meinem Mann, meiner Mutter und meinen Geschwistern für das Korrekturlesen.