



Universiteit
Leiden
The Netherlands

Numerieke bepaling van Gaussische kromming op een getrianguleerd oppervlak

Roobol, S.

Citation

Roobol, S. (2008). *Numerieke bepaling van Gaussische kromming op een getrianguleerd oppervlak*.

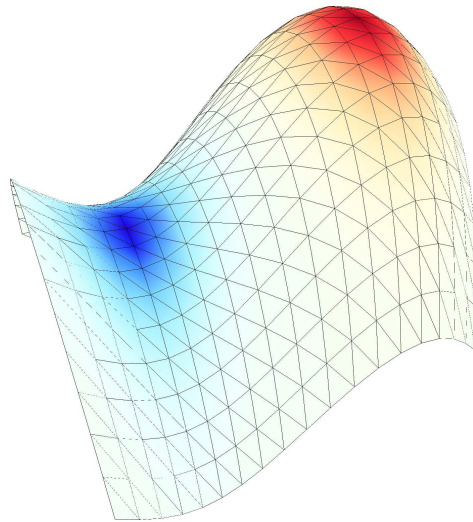
Version: Not Applicable (or Unknown)

License: [License to inclusion and publication of a Bachelor or Master thesis in the Leiden University Student Repository](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/3596866>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Numerieke bepaling van Gaussische kromming op een getrianguleerd oppervlak



Bachelor project
Universiteit Leiden

SANDER ROOBOL

januari 2007 – januari 2008

Abstract

Gaussische kromming is een eigenschap gedefinieerd op tweedimensionale differentieerbare variëteiten. Voor bepaalde numerieke berekeningen kan het nodig zijn om met triangulaties van zulke oppervlakken te werken in plaats van met een analytische beschrijving.

In dit verslag zal ik ingaan op het schatten van Gaussische kromming op punten van zo'n getrianguleerd oppervlak. Ik zal een methode beschrijven gebaseerd op de stelling van Gauss-Bonnet, en laten zien hoe deze zich in de praktijk gedraagt aan de hand van een aantal triangulaties.

Inhoudsopgave

Voorwoord	iii
1 Over kromming	1
1.1 Kromming van kromme	1
1.2 Kromming van oppervlakken	2
2 Numerieke methoden	4
2.1 Getrianguleerde oppervlakken	4
2.2 Kwadratische fit	5
2.3 Stelling van Gauss-Bonnet	6
3 Resultaten	10
3.1 Bol	11
3.2 Ellipsoïde	13
3.3 Omwentelingslichamen	14
3.4 Een echt Fermi-oppervlak	14
4 Conclusie	19

Voorwoord

Dit verslag vormt, samen met mijn verslag getiteld “Simulations on conductance fluctuations in STM experiments resulting from sub-surface defects in noble metals”, mijn eindproject voor mijn bachelors wiskunde en natuurkunde.

In mijn vorige verslag, waar de nadruk op de natuurkunde lag, ben ik ingegaan op het schrijven van een simulatie van een experiment met een zogenaamde Scanning Tunneling Microscope (STM). Zo’n STM tast met een minuscule naaldje een oppervlak van een *sample* af (bijvoorbeeld een stukje metaal) door een klein spanningsverschil aan te leggen tussen de naald en het oppervlak. Doordat de hoeveelheid stroom die dan gaat lopen afhankelijk is van de afstand tussen naald en oppervlak kun je op deze manier een soort hoogtkaartje construeren, waarop zelfs individuele atomen zichtbaar zijn.

Een nieuwe ontwikkeling is om te kijken naar atomen onder het oppervlak. Dit kan doordat de stroom door het hele sample loopt, en niet alleen over het oppervlak. Defecten onder het oppervlak, bijvoorbeeld een ander soort atoom in een verder zuiver metaal, hebben invloed op de elektronen die de STM-naald uitzendt, en dit resulteert in een interferentiepatroon dat is waar te nemen aan de oppervlakte.

Aan de hand van een reeds bestaand model[1] heb ik numerieke berekeningen uitgevoerd hoe dit interferentiepatroon er uit ziet voor een puntvormig defect in samples van de edelmetalen goud, zilver en koper. Dit model beschrijft de stroom die gaat lopen aan de hand van het zogenaamde “Fermi-oppervlak” van het sample. Het Fermi-oppervlak, een tweedimensionaal oppervlak in de \mathbb{R}^3 , is een abstract object waaruit diverse materiaaleigenschappen te halen zijn. Voor diverse materialen is het Fermi-oppervlak bepaald, en in het geval van de edelmetalen is er een relatief eenvoudige functie bekend die dit oppervlak vrij nauwkeurig beschrijft. Echter voor veel andere materialen is er alleen een triangulatie beschikbaar (bijvoorbeeld van [2]), in feite een discrete beschrijving van het oppervlak aan de hand van een eindige hoeveelheid driehoekjes.

Om dit model door te kunnen rekenen, is het nodig om op voldoende

veel punten op het Fermi-oppervlak de Gaussische kromming te bepalen, een bepaalde maat voor kromming van oppervlakken. Dit is vrij eenvoudig als het oppervlak beschreven wordt door een functie, omdat deze kromming uit te drukken is in de eerste en tweede partiële afgeleiden van die functie, maar voor een triangulatie ligt het een stuk lastiger: strikt genomen is de Gaussische kromming binnen ieder driehoekje nul, en op de randen van een driehoekje is deze niet gedefinieerd. In dit verslag, waar de nadruk ligt op de wiskunde, zal ik onderzoeken of er methodes zijn om de Gaussische kromming te schatten, en of deze voldoende nauwkeurig werken om bruikbaar te zijn om dit natuurkundige model door te rekenen.

Hoofdstuk 1

Over kromming

In dit hoofdstuk zal ik een aantal verschillende soorten maten van kromming bespreken, in het bijzonder de Gaussische kromming als maat voor kromming van een oppervlak.

In het algemeen is dit oppervlak een twee dimensionale Riemannse variëteit. De toevoeging *Riemanns* geeft aan dat het om een differentieerbare variëteit gaat die voorzien is van een bilineaire vorm vergelijkbaar met het inproduct in een vectorruimte, zodat er natuurlijke definities zijn voor afstanden en hoeken.

In dit verslag zal ik een minder algemene, maar meer inzichtelijke meetkundige definitie van de Gaussische kromming van een oppervlak ingebed in de \mathbb{R}^3 geven.

1.1 Kromming van kromme

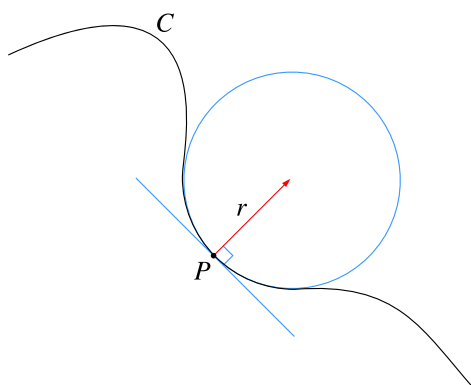
Het is echter noodzakelijk eerst de kromming van een lijn te definiëren. Voor een tweemaal differentieerbare kromme C in het platte vlak wordt de kromming κ gegeven door

$$\kappa = \left| \frac{d\mathbf{T}}{ds} \right|, \quad (1.1)$$

waar \mathbf{T} de eenheidsraakvector aan de kromme is, en s de booglengteparameter van de kromme. Hieraan gerelateerd is de kromtestraal ρ die wordt gegeven door

$$\rho = \frac{1}{\kappa}. \quad (1.2)$$

Dit is de straal van de cirkel die raakt aan de kromme C en die dezelfde kromming heeft als C in het raakpunt, een cirkel die in het Engels bekend staat als de *osculating circle* (figuur 1.1).



Figuur 1.1: Schematische weergave van een “osculating circle” die raakt in punt P van een kromme C .

1.2 Kromming van oppervlakken

Zij nu S een georiënteerd oppervlak in \mathbb{R}^3 , en zij P een punt op dat oppervlak. Voor ieder vlak V opgespannen door de normaalvector en een raakvector aan S in P levert de doorsnede van V met S een kromme in V op. Van deze kromme is de kromming in het punt P te bepalen. De kromming van zo’n kromme is volgens de definitie in paragraaf 1.1 altijd positief, maar in dit geval wordt de kromming alleen positief gekozen als de kromme in de richting van de normaal buigt, en anders negatief.

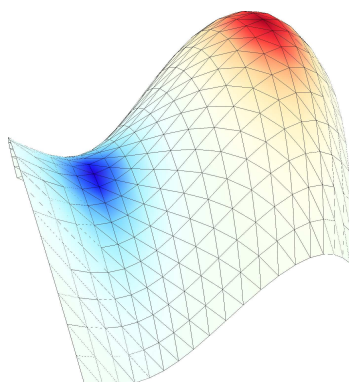
Voor elke richting langs S levert dit een kromming op, en de minimale en maximale krommingen die je op deze manier krijgt worden de *principiële krommingen* genoemd. De bijbehorende raakrichtingen heten *principiële richtingen*. Een eigenschap van deze richtingen is dat ze loodrecht op elkaar staan.

De *Gaussische kromming* K kan nu gedefinieerd worden als het product van deze principiële krommingen. Een belangrijke eigenschap van deze kromming, bewezen door Gauss, is dat ze intrinsiek is, te bepalen door alleen hoeken en afstanden te meten.

Uit deze constructie volgt direct dat de Gaussische kromming van een bol met straal r constant $1/r^2$ is. Een typisch oppervlak met een omgeving met negatieve en positieve kromming is weergegeven in figuur 1.2.

Een andere veel gebruikte maat voor kromming, de *gemiddelde kromming* is gedefinieerd als het gemiddelde van de twee principiële krommingen.

Behalve deze weinig directe meetkundige aanpak, zijn er nog diverse andere manieren om de Gaussische kromming te bepalen. Zo is deze ook te geven als limiet van het verschil tussen de oppervlakte van een cirkel in het



Figuur 1.2: Ter illustratie, de Gaussische kromming van een oppervlak. Blauw is negatieve kromming, rood is positief, de intensiteit van de kleur codeert de absolute waarde.

vlak en een cirkel op het oppervlak:

$$K = \lim_{r \rightarrow 0} (\pi r^2 - A(r)) \cdot \frac{12}{\pi r^4} \quad (1.3)$$

Een meer directe uitdrukking maakt gebruik van de eerste en tweede fundamentealvormen, begrippen uit de differentiaalmeetkunde. Voor een oppervlak ingebed in de \mathbb{R}^3 gegeven door $\mathbf{X}(u, v)$ met (u, v) in een open deelverzameling van \mathbb{R}^2 , \mathbf{X} tweemaal differentieerbaar, levert dit de volgende uitdrukking voor de Gaussische kromming op:

$$K = \frac{eg - f^2}{EG - F^2} \quad (1.4)$$

waarbij E , F en G de coëfficiënten van de eerste fundamentealvorm zijn, en e , f en g de coëfficiënten van de tweede fundamentealvorm. Deze worden in dit geval gegeven door

$$\begin{aligned} E &= \mathbf{X}_u \cdot \mathbf{X}_u & e &= \mathbf{X}_{uu} \cdot \mathbf{N} \\ F &= \mathbf{X}_u \cdot \mathbf{X}_v & f &= \mathbf{X}_{uv} \cdot \mathbf{N} \\ G &= \mathbf{X}_v \cdot \mathbf{X}_v & g &= \mathbf{X}_{vv} \cdot \mathbf{N} \end{aligned}$$

waarbij de subscripts differentiatie naar een coördinaat aangeven en

$$\mathbf{N} = \frac{\mathbf{X}_u \times \mathbf{X}_v}{|\mathbf{X}_u \times \mathbf{X}_v|}$$

de eenheidsnormaalvector op het oppervlak is.

Hoofdstuk 2

Numerieke methoden

In dit hoofdstuk zal ik twee algoritmen beschrijven die de Gaussische kromming op een getrianguleerd oppervlak kunnen schatten. Voor ik aan die twee methoden toekom is het nodig eerst een formele omschrijving van zo'n oppervlak te geven.

2.1 Getrianguleerde oppervlakken

In een aantal stappen zal ik toewerken naar een definitie van wat in de grafische computerwereld bekend staat als een *mesh*, een discrete benadering van een oppervlak. Dit is in feite stel driehoekjes die “netjes” aan elkaar geplakt zijn. Ik zal dit formaliseren en generaliseren naar willekeurig hoge dimensies.

Het eerste dat hiervoor nodig is, is het begrip *simplex*, de generalisatie van een driehoek. Een *simplex* van dimensie n , ook genoteerd als n -simplex, is de kleinste convexe deelverzameling van een reële vectorruimte van dimensie n of meer die een zekere verzameling van $n + 1$ punten bevat, waarbij deze $n + 1$ punten in *algemene positie* moeten liggen, met andere woorden er is geen deelruimte van dimensie $n - 1$ die al deze punten bevat.

Een $(n - 1)$ -simplex bestaande uit n hoekpunten van een n -simplex wordt een *zijde* van dat n -simplex genoemd. Een 0-simplex is simpelweg een (hoek)punt, een 1-simplex een lijnstuk en een 2-simplex een driehoek.

Een *simplicieel complex* of kortweg een *complex* K is een verzameling simplices met de twee eigenschappen dat elke zijde van een simplex in K ook in K zit, en dat de doorsnede van twee simplices $\sigma_1, \sigma_2 \in K$ (als deze niet leeg is) een zijde is van zowel σ_1 als σ_2 . De dimensie van een complex wordt gegeven door de hoogste dimensie van de simplices in het complex.

Omdat veel topologische ruimten homeomorf zijn met een zeker complex, worden complexen gebruikt om berekeningen te vereenvoudigen. Men noemt een complex K dat homeomorf is met een topologische ruimte T een *triangulatie* van T .

In dit geval ben ik eigenlijk geïnteresseerd in differentieerbare variëteiten, en ook die zijn te benaderen met een complex. Een complex K van dimensie n heet een *n -pseudovariëteit* als elke simplex van K bevat is in een n -simplex van K , iedere $(n - 1)$ -simplex een zijde is van ten hoogste twee n -simplices, en de graaf met als punten alle n -simplices van K , waarbij twee punten verbonden zijn als de simplices een $n - 1$ -simplex delen, samenhangend is.

In feite is een pseudovariëteit de generalisatie van een oppervlak naar willekeurig veel dimensies.

Voor computers is een eindige verzameling n -simplices (die op hun beurt weer vastgelegd worden door een verzameling van $n + 1$ punten) veel eenvoudiger te hanteren dan een willekeurige topologische ruimte of differentieerbare variëteit. Een mesh is dus gewoon een 2-pseudovariëteit in de \mathbb{R}^3 .

2.2 Kwadratische fit

Als $f : U \rightarrow \mathbb{R}^3$ twee keer differentieerbaar is, met U een open deelverzameling van \mathbb{R}^2 , dan wordt middels formule 1.4 de Gaussische kromming $K(x, y)$ van het oppervlak $z = f(x, y)$ gegeven door

$$K(x, y) = \frac{f_{xx}f_{yy} - f_{xy}^2}{(1 + f_x^2 + f_y^2)^2}. \quad (2.1)$$

Er is een voor de hand liggende manier om deze formule toe te passen op een triangulatie: fit een polynomiaal oppervlak aan de triangulatie, en pas 2.1 toe op dat polynoom. Deze methode wordt beschreven in o.a. [4], waar gewerkt wordt met een tweedegraads polynoom van de vorm

$$f(x, y) = ax^2 + bxy + cy^2. \quad (2.2)$$

Door minimaal 3 punten in een kleine omgeving te kiezen, meestal een aantal hoekpunten direct rondom het punt van interesse, en de coëfficiënten a, b en c te bepalen met behulp van de methode van kleinste kwadraten is er een schatting voor K te verkrijgen.

Een klein probleem van deze methode is dat er een keuze van de z -as gemaakt moet worden: zonder deze normaalvector aan het oppervlak is er geen beschrijving in de vorm $z = f(x, y)$. Het bepalen van een normaalvector aan een triangulatie zal ook aan de hand van een schatting moeten, maar de

nauwkeurigheid van deze schatting heeft grote invloed op de nauwkeurigheid waarmee K geschat wordt.

Een manier om dit aan te pakken is om eerst een “wilde” schatting van de normaal te gebruiken en een polynoom van de vorm

$$f(x, y) = ax^2 + bxy + cy^2 + dx + fy \quad (2.3)$$

te fitten. Een nieuwe schatting van de normaal is nu te bepalen aan de hand van de coëfficiënten d en e , en met deze nieuwe schatting kan het proces herhaald worden tot de geschatte normaal convergeert. De Gaussische kromming K wordt dan gegeven door

$$K = \frac{4ac - b^2}{(1 + d^2 + e^2)^2}. \quad (2.4)$$

Door het iteratieve karakter van deze methode is het relatief inefficiënt, er moet veel rekenwerk uitgevoerd worden om tot een antwoord te komen.

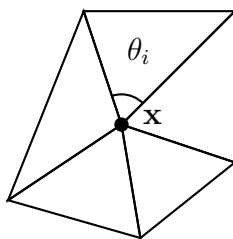
In [4] wordt beide varianten van deze kwadratisch-fit methode, met en zonder iteratie, vergeleken door numeriek te kijken naar convergentie van een steeds kleiner wordende zeshoekige triangulatie op een cilinder. In deze zeer beschaafde omgeving komt zeker de iteratieve methode aan de hand van vergelijking 2.3 zeer goed uit de bus. Dit is niet zo verwonderlijk: een oppervlak beschreven door $z = \sqrt{r^2 - x^2}$ is voor $x \ll r$ goed te benaderen door een kwadratisch polynoom. Deze functie heeft namelijk een taylorexpansie van de vorm $r - \frac{1}{2r}x^2 + O(x^4)$ waarbij de hogere orde coëfficiënten snel afnemen. De Gaussische kromming, die afhangt van eerste- en tweedeorde afgeleiden, zal in dit geval dus vrij nauwkeurig geschat worden aan de hand van een kwadratisch polynoom omdat hogere orde termen van de taylorreeks toch nauwelijks bijdragen.

In een meer algemene situatie zal dit echter wel een probleem zijn: een kwadratisch polynoom dat alleen gefit wordt aan functiewaarden en niet aan afgeleiden, zal bij lange na niet voldoende zijn om een differentiaal-eigenschap als kromming goed te representeren.

Een oplossing zou zijn om een hogere-orde polynoom te gebruiken en ook afgeleiden mee te nemen in de fit, maar dat is lastig omdat er van een triangulatie juist geen afgeleiden bekend zijn.

2.3 Stelling van Gauss-Bonnet

Een alternatieve methode, uitgebreid beschreven in [3], is gebaseerd op de stelling van Gauss-Bonnet, die de Gaussische kromming beschrijft aan de



Figuur 2.1: 1-ring omgeving rond punt van interesse \mathbf{x} .

hand van de kromming van de rand en de Euler-karakteristiek. Deze stelling luidt als volgt:

Stelling. Zij M een compacte tweedimensionale Riemannse differentieerbare variëteit met rand ∂M en Euler-karakteristiek χ . Dan

$$\int_M K \, dA + \int_{\partial M} k_g \, ds = 2\pi\chi. \quad (2.5)$$

k_g is hierbij de geodetische kromming, een maat voor kromming van een lijn op een differentieerbare variëteit. Voor een oppervlak met een stuksgewijs gladde rand moet behalve de integraal over die rand ook nog een sommatie over de eindpunten van de stukken van de rand meegenomen worden:

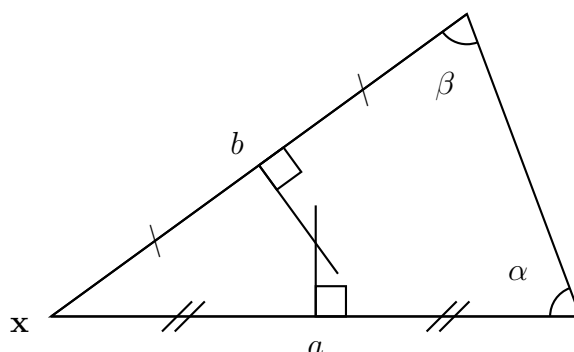
$$\int_M K \, dA + \int_{\partial M} k_g \, ds + \sum_i \phi_i = 2\pi\chi. \quad (2.6)$$

Om dit toe te passen op triangulaties kan je kijken naar een deelomgeving binnen een ring van driehoeken rond een hoekpunt \mathbf{x} , de zogenaamde 1-ring omgeving (figuur 2.1).

Bij een geschikte keus van zo'n omgeving, met een stuksgewijs rechte rand, is de Euler-karakteristiek 1, en de geodetische kromming op de rand steeds 0. Onder de aanname dat de Gaussische kromming constant is op een oppervlakte A rondom \mathbf{x} levert dit de volgende uitdrukking voor Gaussische kromming in een hoekpunt \mathbf{x} :

$$K(\mathbf{x}) = \frac{1}{A} \left(2\pi - \sum_i \theta_i \right) \quad (2.7)$$

waarbij de sommatie gaat over alle driehoeken rondom het hoekpunt \mathbf{x} (zie figuur 2.1), en θ_i de hoek is in die driehoek bij \mathbf{x} . A representeert de



Figuur 2.2: Voronoi oppervlakte van een driehoek bij een hoekpunt \mathbf{x}

oppervlakte waarover de oorspronkelijke integratie wordt uitgevoerd. De beste keus volgens [3] is

$$A = \sum_i A_i \quad (2.8)$$

waar de sommatie weer over dezelfde driehoeken gaat en A_i gegeven door

$$A_i = \begin{cases} 1/2 \text{ oppervlakte driehoek} & \text{als } i \text{ stomp is in de hoek bij } \mathbf{x} \\ 1/4 \text{ oppervlakte driehoek} & \text{als } i \text{ stomp is maar niet in de hoek bij } \mathbf{x} \\ \text{voronoi oppervlakte} & \text{als } i \text{ niet stomp is} \end{cases} \quad (2.9)$$

De voronoi oppervlakte van een driehoek bij een hoek \mathbf{x} is de oppervlakte van het gebied dat dichterbij hoekpunt \mathbf{x} ligt dan bij een ander hoekpunt. Deze oppervlakte wordt gegeven door

$$A = \frac{1}{8} (a^2 \cot \alpha + b^2 \cot \beta) \quad (2.10)$$

met a en b de lengte van de zijden bij \mathbf{x} , en α en β de andere aan die zijde liggende hoek (zie figuur 2.2).

Merk op dat de discrete beschrijving van formule 2.7 en de limietbeschrijving van formule 1.3 consistent zijn. Schrijf de oppervlakte $A(r)$ van de cirkel met straal r rond \mathbf{x} als

$$A(r) = \int_0^\alpha 1/2 r^2 d\theta = 1/2 \alpha r^2 \quad (2.11)$$

waarbij $\alpha = \sum_i \theta_i$, dan levert dit in 1.3, door tweemaal zonder verantwoor-

ding gebruik te maken van de regel van l'Hôpital

$$\begin{aligned} K &= \lim_{r \rightarrow 0} (\pi r^2 - 1/2\alpha r^2) \cdot \frac{12}{\pi r^4} \\ &= (2\pi - \alpha) \cdot \lim_{r \rightarrow 0} \frac{6r^2}{\pi r^4} \\ &= (2\pi - \alpha) \cdot \lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{\pi r^2}, \end{aligned} \tag{2.12}$$

waarbij $1/\pi r^2$ te herkennen is als de oppervlakte A rond \mathbf{x} , zodat inderdaad 2.7 verkregen wordt.

Hoofdstuk 3

Resultaten

De methode om de Gaussische kromming te schatten gebaseerd op de stelling van Gauss-Bonnet heb ik geïmplementeerd en in dit hoofdstuk zal ik de nauwkeurigheid van het algoritme onderzoeken aan de hand van diverse triangulaties van verschillende oppervlakken waarvan ook een analytische beschrijving bekend is.

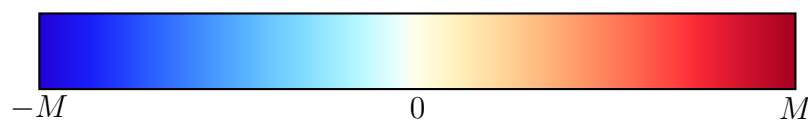
De andere methode, gebaseerd op het fitten van kwadratische oppervlakken, heb ik niet uitgeprobeerd. De implementatie daarvan zou veel tijd kosten, en ik verwacht er toch niet al te goede resultaten van.

Op ieder hoekpunt van de triangulaties is het mogelijk om de Gaussische kromming uit te rekenen, en deze te vergelijken met de exacte waarde, middels

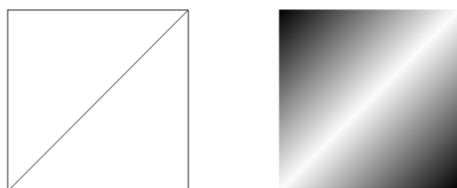
$$\varepsilon = \frac{x - x_0}{x_0}, \quad (3.1)$$

met x de numeriek benaderde waarde en x_0 de exacte waarde op grond van analytische argumenten. Deze relatieve fout zal weergegeven worden met de kleurenschaal van figuur 3.1, waarbij het bereik $[-M, M]$ voor ieder object apart bepaald wordt. Steeds als deze kleurenschaal gebruikt is, is M het maximum van de absolute waarden van de weer te geven data.

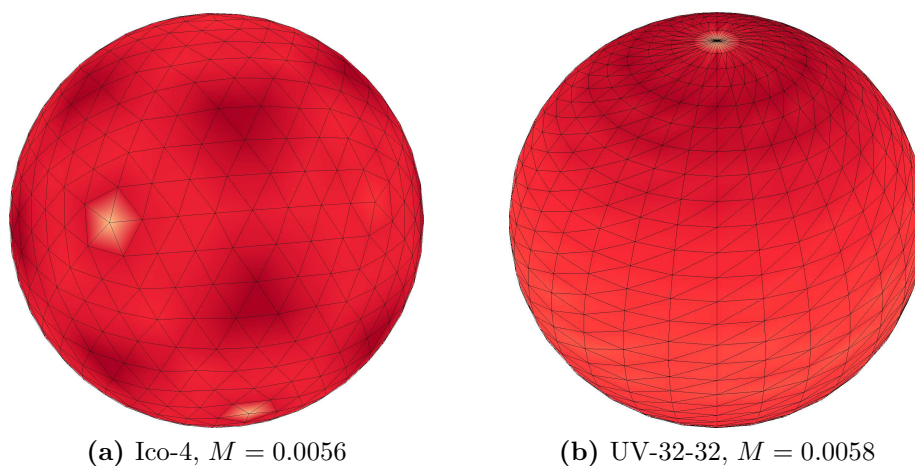
Merk op dat aan het teken van de relatieve fout 3.1 af te lezen is of de benadering de kromming overschat of onderschat, dit in tegenstelling tot sommige andere definities waarbij alleen absolute waarden worden meegenomen.



Figuur 3.1: De gebruikte kleurenschaal uit [5], met bereik $[-M, M]$.



Figuur 3.2: De lineaire interpolatie van de kleuren van de hoekpunten gaat per driehoek. Dit kan door een ongunstige triangulatie een vertekend beeld geven: een puntsymmetrische kleuring zoals hier (linksboven en rechtsonder zwart, andere twee hoeken wit; puntsymmetrisch rond het middelpunt) wordt niet puntsymmetrisch weergegeven.

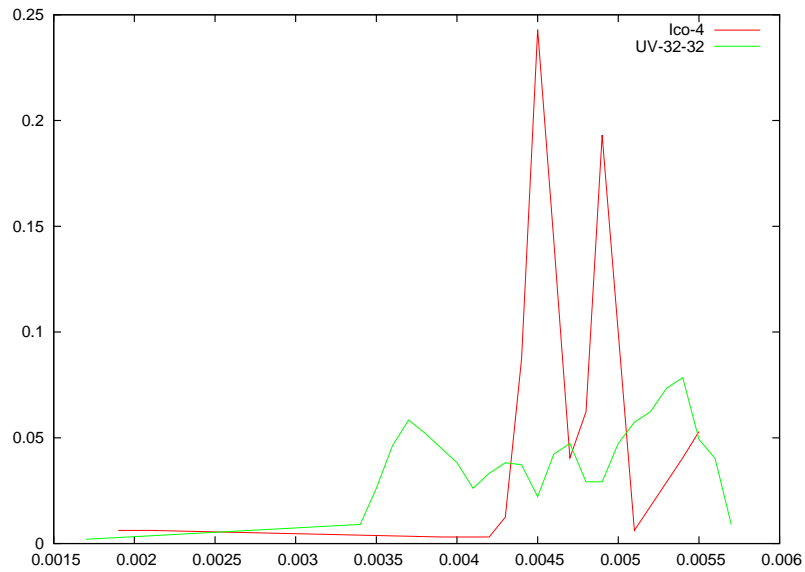


Figuur 3.3: Relatieve fout van de Gaussische kromming t.o.v. verwachte waarde. De bol (a) is verkregen door driemaal subdivisie toe te passen op regelmatig icosaeëder (20-vlak), de bol (b) is opgebouwd uit 32 ringen die verdeeld zijn 32 segmenten.

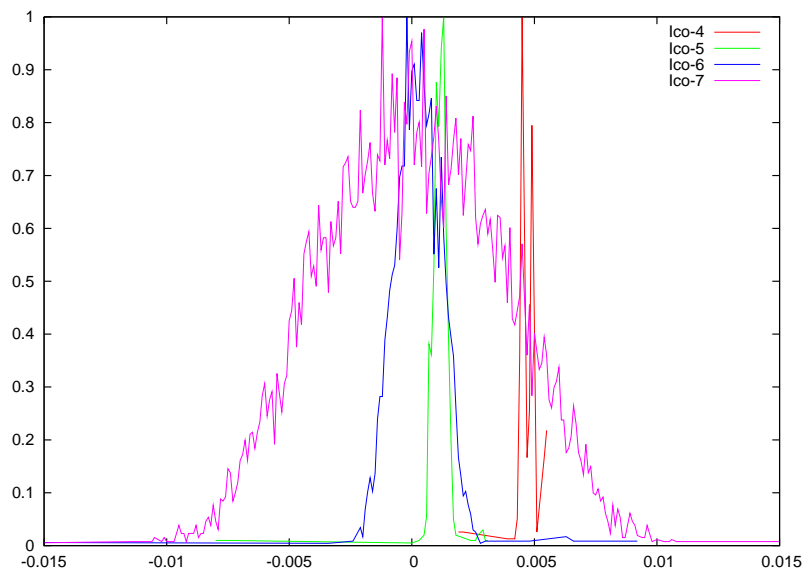
Ieder hoekpunt van de triangulatie krijgt zo een kleur, en deze wordt lineair geïnterpoleerd per driehoek, zoals gedemonstreerd in figuur 3.2. Het zo ontstane object wordt gerenderd door het 3D-tekenpakket Blender.

3.1 Bol

Als eerste zal ik naar een aantal triangulaties van een bol met straal 1 kijken. Deze triangulaties komen uit het 3D-tekenpakket Blender, en de twee basisvarianten zijn weergegeven in figuur 3.3. Een bol met straal r heeft een constante Gaussische kromming $K = 1/r^2$ en dit is dus een simpel object om mee te beginnen.



Figuur 3.4: Histogram van de relatieve fout voor de Ico-4 en UV-32-32 bollen. Bij de Ico-4 bol is relatieve fout gemiddeld $4.71e-03$ met standaardafwijking $5.00e-05$, bij de UV-32-32 bol is dit $4.62e-04 \pm 1.72e-05$. De aantallen in de grafiek zijn genormaliseerd naar het aantal hoekpunten.



Figuur 3.5: Vergelijking van relatieve fout van 4 verschillende bollen gebaseerd op icsaëders, verkregen door steeds een extra keer subdivisie toe te passen. De histogrammen zijn genormaliseerd op hun hoogste piek.

In figuur 3.4a zijn histogrammen geplot van de relatieve fout van de geschatte Gaussische kromming t.o.v. de exacte waarde, voor de zogenaamde Ico-4 en de UV-32-32 bol, in figuur 3.3 is te zien hoe de relatieve fout verdeeld is over beide triangulaties. Wat direct opvalt is dat bij beide bollen de kromming bijna overal overschat wordt, zij het met minder dan 1%. Dit effect is voor een belangrijk deel te wijten aan het feit dat triangulaties zó geconstrueerd zijn dat alleen de hoekpunten op precies de afstand 1 van het middelpunt zitten. Met andere woorden, de triangulatie ligt helemaal binnen een bol met straal 1, en dus is een consequente overschatting van de kromming te verwachten.

In dit geval is hier vrij eenvoudig voor te corrigeren. Door de straal te schatten aan de hand van het omsloten volume van de triangulaties kan de grootte van de gemiddelde relatieve fout met een factor 10 omlaag.

Figuur 3.3 bevat echter nog meer opmerkelijkheden. In de Ico-4 bol (a) is nog duidelijk de onderliggende structuur van de icosaeëder te zien. De gebieden waar de relatieve fout het kleinst is (geel) komen precies overeenkomen met de 12 hoekpunten van de oorspronkelijke icosaeëder. Als zo'n punt echter een van de coördinaten 0 heeft, zoals bovenaan en rechts waar resp. $x = y = 0$ en $y = 0$, dan is de fout weer wat groter, dit duidt op problemen met machineprecisie. Het algoritme presteert constanter op UV-32-32 bol, al vormen de beide polen daarop een uitzondering.

In figuur 3.5 worden 4 verschillende bollen gebaseerd op icosaeëders vergeleken. Elke bol is verkregen door een extra keer subdivisie toe te passen, waardoor de triangulatie steeds fijnmaziger wordt. Hoewel de gemiddelde relatieve fout omlaag gaat naar mate het de triangulatie fijner wordt, wordt de spreiding steeds groter.

3.2 Ellipsoïde

Voor een ellipsoïde van de vorm $(x/a)^2 + (y/b)^2 + (z/c)^2 = 1$ wordt de Gaussische kromming gegeven door

$$K(x, y, z) = \left(\frac{abc}{(bcx/a)^2 + (acy/b)^2 + (abz/c)^2} \right)^2. \quad (3.2)$$

Dit is af te leiden door formule 1.4 toe te passen op een geschikt gekozen parametrisatie.

Voor een aantal verschillende spheroides (een spheroïde is een ellipsoïde met twee gelijke assen), is de relatieve fout weergegeven in figuren 3.6 en 3.7.

De spheroides zijn gemaakt door de triangulaties van de bollen van de vorige paragraaf in verschillende richtingen met verschillende factoren op te schalen.

De relatieve fout is nu een stuk groter dan bij de bollen, in enkele gevallen zelfs groter dan 10%. Dit is vooral te wijten aan het feit dat de triangulaties minder mooi worden. Figuur 3.8 laat zien welke driehoeken in de triangulatie een stompe hoek hebben. Daaruit blijkt dat er een duidelijke correlatie is tussen de hoekpunten waar stompe driehoeken en scherpe driehoeken samenkomen en de hoekpunten met een slechtere benadering van de Gaussische kromming.

3.3 Omwentelingslichamen

Tot nu heb ik alleen maar naar oppervlakken met positieve kromming gekeken. Fermi-oppervlakken hebben over het algemeen niet overal positieve kromming, en het zijn juist de gebieden met kromming 0 die natuurkundig interessante effecten opleveren.

Een familie oppervlakken die daarom interessant zijn, zijn de omwentelingslichamen. Voor een oppervlak van de vorm

$$\mathbf{A}(x, \theta) = \begin{pmatrix} x \\ f(x) \cos \theta \\ f(x) \sin \theta \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

verkregen door een tweemaal differentieerbare functie $f : (a, b) \rightarrow \mathbf{R}_{>0}$ om de x -as te wentelen wordt de Gaussische kromming met behulp van 1.4 gegeven door

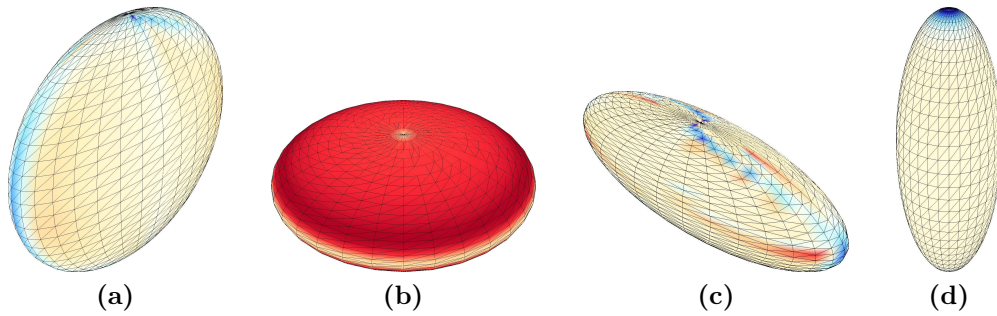
$$K(x, y, z) = \frac{-f''(x)}{f(x)(1 + f'(x))^2}. \quad (3.4)$$

Merk op dat de kromming niet afhangt van y en z .

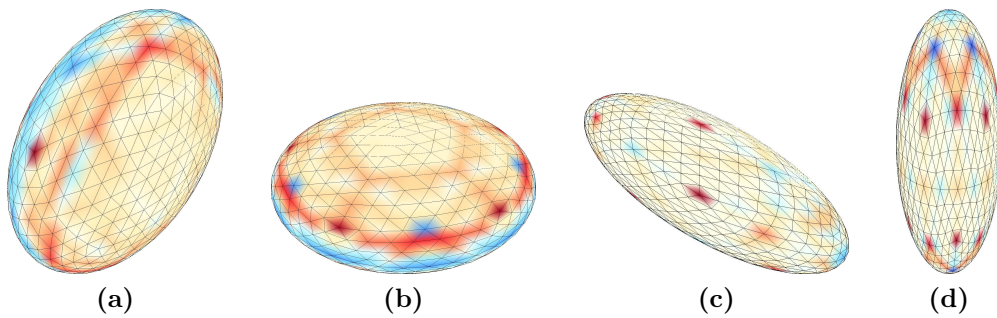
Voor de functie $f(x) = \exp(-x^2)$ zijn de resultaten weergegeven in figuur 3.9. In deelfiguur (b) zijn twee opvallende rode zones met een grote relatieve fout te zien. Echter, bij $x = \sqrt{2}$ is de Gaussische kromming 0, en daarom blaast de relatieve fout in die omgeving op. Elders blijft de relatieve fout wel klein, minder dan ± 0.02 . De benadering is ook rondom $x = \sqrt{2}$ goed, zoals te zien is in figuur (c).

3.4 Een echt Fermi-oppervlak

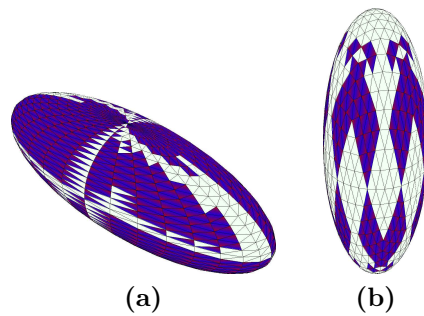
In figuur 3.10 is de Gaussische kromming van een echt Fermi-oppervlak weergegeven, namelijk van zilver. De triangulatie komt uit [2].



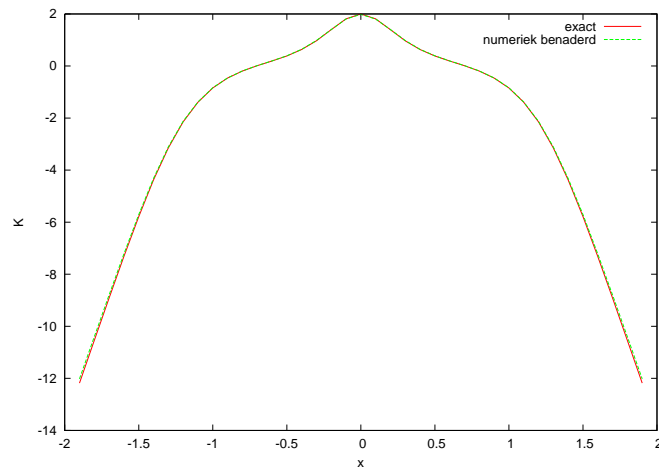
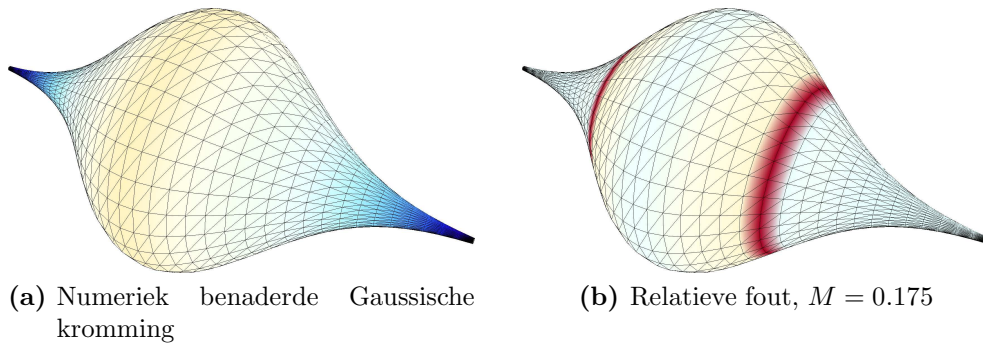
Figuur 3.6: Relatieve fout in Gaussische kromming voor spheroides gebaseerd op de UV-32-32 bol. Waarden van a , b , c van de lengte van de assen van de spheroides en M van het bereik van de kleurenschaal zijn: (a): $a = 1$, $b = c = 3$, $M = 0.125$, (b): $a = b = 3$, $c = 1$, $M = 0.017$, (c): $a = 3$, $b = c = 1$, $M = 0.094$, (d): $a = b = 1$, $c = 3$, $M = 0.035$



Figuur 3.7: Relatieve fout in Gaussische kromming voor spheroides gebaseerd op de Ico-4 bol. (a): $a = 1$, $b = c = 3$, $M = 0.086$, (b): $a = b = 3$, $c = 1$, $M = 0.073$, (c): $a = 3$, $b = c = 1$, $M = 0.096$, (d): $a = b = 1$, $c = 3$, $M = 0.083$



Figuur 3.8: Stompe driehoeken in deze triangulaties zijn gekleurd: de stompe hoek is rood, de andere hoeken van de driehoek zijn blauw. (a) is dezelfde triangulatie als 3.6(c), (b) komt overeen met 3.7(d).



Figuur 3.9: Oppervlak verkregen door Gauss-kromme $\exp(-x^2)$ om de x -as te wentelen. Het algoritme werkt niet op randpunten, daarom zijn de uiteinden bij (a) en (b) zwart gekleurd. In (b) is te zien dat de relatieve fout opblaast, maar de absolute fout (c) blijft binnen de perken.

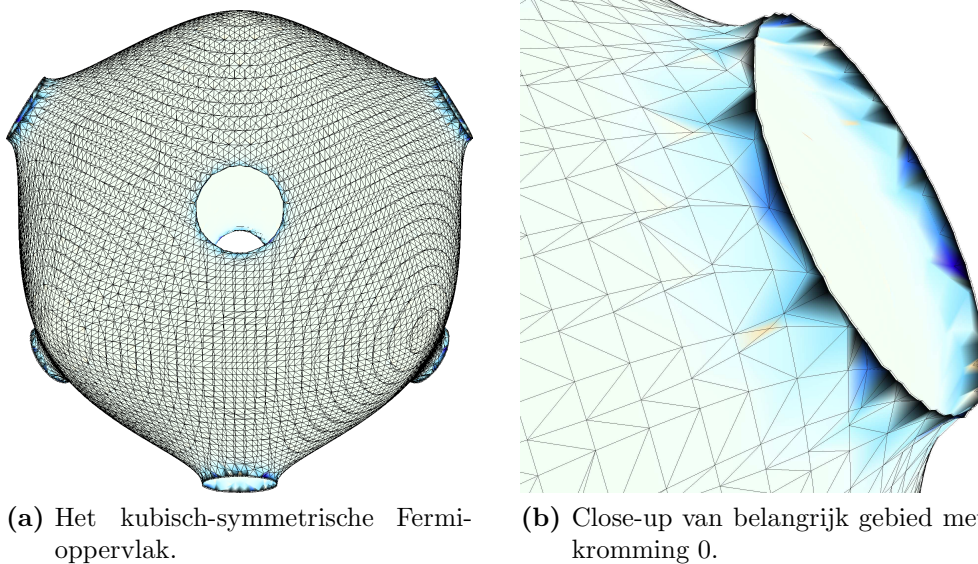
Dit Fermi-oppervlak is een soort kruising tussen een kubus en een bol, waarbij op de hoekpunten van de kubus een soort halzen te zien zijn.

Voor het natuurkundemodel dat de aanleiding was voor dit onderzoek, zijn juist de gebieden rond de halzen van groot belang. De kromming verandert daar van teken, en dat betekent dat er rondom elke hals een lijn is met kromming 0. Zo'n gebied zal van grote invloed zijn op de uitkomst van de berekeningen.

De hals is echter vrij kort, en de triangulatie is daar vrij onregelmatig. Op grond daarvan verwacht ik dat de Gaussische kromming daar relatief slecht geschat wordt, met een fout van rond de 10%. Op de rest van de bol zal de fout waarschijnlijk slechts een paar procent zijn.

Verder is er nog een ander probleem te zien, namelijk dat deze methode om de kromming te schatten niet op de randpunten van een triangulatie werkt. Gelukkig is dat in dit geval op te lossen, omdat een Fermi-oppervlak in feite periodiek herhaald moet worden, op een bepaalde manier die afhangt van het kristalrooster van het materiaal waar dit Fermi-oppervlak bij hoort. De randpunten zullen zo precies aansluiten op randpunten van een volgende oppervlak. Door dit mee te nemen kan ook op de randpunten een schatting verkregen worden.

De praktische uitvoering hiervan is nog lastig: de triangulaties van twee opeenvolgende oppervlakken zullen precies moeten aansluiten, of anders passend gemaakt moeten worden.



Figuur 3.10: Gaussische kromming van het Fermi-oppervlak van zilver, $M = 790.8$. De randpunten zijn zwart gekleurd omdat de kromming daar niet kan worden bepaald.

Hoofdstuk 4

Conclusie

De stelling van Gauss-Bonnet geeft aanleiding tot een zeer directe methode om de Gaussische kromming te schatten. Deze methode geeft voor diverse oppervlakken goede resultaten, met een relatieve fout die zelden boven de 10% uitkomt. Triangulaties zijn nou eenmaal eenvoudige lineaire benaderingen van gladde oppervlakken, en dat geeft al aan dat een eigenschap die afhangt van tweede orde afgeleiden niet altijd goed zal worden gerepresenteerd.

De kwaliteit van de triangulaties speelt dan ook een grote rol in de nauwkeurigheid. Stompe driehoeken kunnen problemen opleveren, en het is de moeite waard om te kijken of het mogelijk is de triangulaties zo aan te passen of te construeren dat stompe driehoeken niet of nauwelijks voorkomen.

Het maken van “mooie” triangulaties is een probleem waar veel over geschreven is, omdat het een belangrijk ingrediënt is voor de methode van eindige elementen, een numerieke methode om partiële differentiaalvergelijkingen op ingewikkelde domeinen op te lossen.

De triangulaties uit [2] zijn acceptabel, maar kunnen waarschijnlijk verbeterd worden door meer gespecialiseerde algoritmes toe te passen op de ruwe data.

Met deze methode is het mogelijk om het natuurkundige model door te rekenen voor andere materialen met ingewikkeldere Fermi-oppervlakken dan ik in mijn vorige verslag gedaan heb. Hoewel de Gaussische kromming niet perfect zal worden geschat, is de fout dermate beperkt dat deze methode in dit model goed toepasbaar is, omdat op diverse plaatsen toch al vrij benaderingen worden gebruikt.

Bibliografie

- [1] Ye. S. Avotina, Yu. A. Kolesnichenko, A. F. Otte, and J. M. van Ruitenbeek, *Phys. Rev. B* **74**, 085411 (2006).
- [2] 3D (VRML) Fermi Surface Database:
<http://www.phys.ufl.edu/fermisurface/>
- [3] M. Meyer, M. Desbrun, P. Schröder, and A. H. Barr, *Discrete Differential Geometry Operators for Triangulated 2-Manifolds*, 2002. VisMath.
- [4] Rao V. Garimella and Blair K. Swartz, *Curvature Estimation for Unstructured Triangulations of Surfaces*, 2003
- [5] A. Light, and P.J. Bartlein (2004), The end of the rainbow? Color schemes for improved data graphics, *Eos*, *85*(40), 385-391.
- [6] Wikipedia, the free encyclopedia: <http://www.wikipedia.org/>
- [7] Springer Online Encyclopedia of Mathematics: <http://eom.springer.de/>