

Technische Universität München
Lehrstuhl für Computation in Engineering

Die Mortar Methode für Finite Elemente hoher Ordnung

Dipl.-Ing. Ziad Wassouf, M.Sc.

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktor-Ingenieurs

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr.-Ing., Dr.-Ing. habil. G. H. Müller

Prüfer der Dissertation:

1. Univ.-Prof. Dr.rer.nat. E. Rank
2. Univ.-Prof. Dr.-Ing. M. Schanz

Technische Universität Graz, Österreich

Die Dissertation wurde am 10.11.2009 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen am 22.2.2010 angenommen.

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit untersucht für strukturmechanische Probleme eine nicht C_0 -stetige Diskretisierungsstrategie mit Finiten Elementen hoher Ordnung, die mit Hilfe der so genannten Mortar Element Methode umgesetzt wird. Angewandt wird die Methode zur Kopplung von Hexaeder- und Tetraederelementen. Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Tetraederformulierung basiert auf der Idee einer entarteten Hexaeder-Tetraeder Abbildung (Duffy Transformation) und verwendet eine Tensorproduktstruktur integrierter Legendrepolynome auf dem Hexaeder als Basisfunktionen. Die Implementierung der Mortar Element Methode bestätigt theoretische Vorhersagen bezüglich exponentieller Konvergenz in der Energienorm für Verschiebungsfelder ohne Singularitäten. Für allgemeine Verschiebungslösungen wird mindestens algebraische Konvergenz erreicht. Untersucht werden des Weiteren verschiedene Ansätze für den Lagrangen Multiplikatorraum auf dem Kopplungsinterface, wobei sich ein diskontinuierlicher Ansatz als günstig erweist. Diese Aussage gilt für materiell lineares Verhalten. Eine numerische Untersuchung mit nichtlinearem Materialverhalten deutet auch für diese Problemklasse auf ein robustes Verhalten der Methode hin.

Abstract

This thesis investigates a non-continuous discretization strategy in the context of the high order Finite Element Method (p -FEM) for 3D elastostatic analyses. The approach is known as a Mortar Element Method, which we use to couple hexahedral and tetrahedral elements. The tetrahedron's shape functions developed in this work are based on a degenerated hexahedral to tetrahedral mapping called Duffy transformation. They consist of integrated Legendre polynomials exhibiting a tensor product structure on the hexahedron which allows for fast integration algorithms. Numerical experiments confirm theoretical predictions stating that for smooth problems an exponential convergence rate is obtained under pure p -refinement. For other types of problems at least algebraic rates of convergence are achieved. Furthermore, different discretizations of the shape functions used for the Lagrangian multipliers on the interface of the two structures are investigated. Here, non-continuous ansatz spaces produce the best results for the examples under investigation. Even for nonlinear material behaviour a numerical experiment provides a sound indication of the robust properties of the proposed method.

Vorwort

Diese Arbeit entstand von September 2006 bis November 2009, unterbrochen durch eine einjährige Elternpause, im Rahmen meiner Forschungstätigkeit am Lehrstuhl für Computation in Engineering an der Technischen Universität München.

Besonderen Dank schulde ich Herrn Prof.Dr.rer.nat. Ernst Rank, der mir die Möglichkeit gegeben hat in einem derart interessanten Forschungsgebiet zu arbeiten und letztendlich darin zu promovieren. Sein mir entgegengebrachtes Vertrauen, die vorliegenden Fragestellungen in der gegebenen doch recht kurzen Zeitspanne erfolgreich zu beantworten kann ich nicht hoch genug einschätzen.

Herrn Prof.Dr.Ing. Martin Schanz möchte ich für die Übernahme des Koreferates danken.

Ein weiterer Dank geht an die Deutsche Forschungsgemeinschaft, deren finanzielle Unterstützung diese Arbeit erst ermöglichte.

Insbesondere danke ich bei Herrn Prof.Dr.Ing.habil. Alexander Düster, der durch seine fachlichen Anregungen und seine Hilfe hinsichtlich der programmtechnischen Umsetzung einen sehr großen Anteil zu dieser Arbeit beigetragen hat.

Für die freundschaftliche und hilfsbereite Atmosphäre am Lehrstuhl bedanke ich mich bei all meinen Kollegen.

Ganz besonderer Dank gilt meiner Lebensgefährtin Carmen, durch deren Unterstützung ich erst die notwendige Energie aufbringen konnte, diese Arbeit erfolgreich zu vollenden.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	PLANUNG IM BAUWESEN	1
1.1.1	PLANUNGSCHARAKTERISTIKA	1
1.1.2	PRODUKTMODELLE IM BAUWESEN	2
1.1.3	DER PRODUKTMODELL STANDARD IFC	3
1.2	TRAGWERKSPLANUNG IM KONSTRUKTIVEN INGENIEURBAU	3
1.3	BERECHNUNG AM GESAMTMODELL	5
1.4	ZIELSETZUNG UND GLIEDERUNG DER ARBEIT	6
2	Finite Elemente Methode	9
2.1	DIE SCHWACHE FORM DER LINEAREN ELASTOSTATIK	10
2.1.1	GLEICHGEWICHT	10
2.1.2	KINEMATIK	11
2.1.3	STOFFGESETZ	12
2.1.4	STARKE FORM DER LINEAREN ELASTOSTATIK	13
2.1.5	HERLEITUNG DER SCHWACHEN FORM	13
2.2	DISKRETISIERUNG	15
2.2.1	RÄUMLICHE DISKRETISIERUNG	15
2.2.2	DISKRETISIERUNG DES ELEMENT-FUNKTIONENRAUMES	15
2.2.3	MASTERELEMENT	16
2.2.4	GLEICHUNGSSYSTEM	18
2.3	KONVERGENZRATEN	19
2.3.1	EIGENSCHAFTEN DER EXAKTEN LÖSUNG	19
2.3.2	A PRIORI FEHLERSCHÄTZUNG	20
2.3.3	A POSTERIORI FEHLERSCHÄTZUNG - EXTRAPOLATION	22
2.3.4	VERFEINERUNGSSTRATEGIEN	23
3	Ansatzfunktionen für Tetraederelemente hoher Ordnung	25
3.1	ANFORDERUNGEN	25
3.1.1	ORTHOGONALITÄT	26
3.1.2	HIERARCHIE	28
3.1.3	SYMMETRIE	29
3.1.4	TOPOLOGISCHE STRUKTUR	30
3.2	KONSTRUKTION	31
3.2.1	LAGRANGE BASIS	31
3.2.2	ANSÄTZE IN BARYZENTRISCHEN KOORDINATEN	32

3.2.3	ANSÄTZE NACH SCHÖBERL	34
3.2.4	ABGEBILDETE BASIS	37
3.3	ELEMENTANSÄTZE AUF BASIS INTEGRIERTER LEGENDREPOLYNOME	38
3.3.1	KNOTENMODEN	38
3.3.2	KANTENMODEN	39
3.3.3	FLÄCHENMODEN	40
3.3.4	INNERE MODEN	42
3.3.5	KONTINUITÄT	43
3.4	INTEGRATION AUF DEM TETRAEDER	44
3.4.1	EIGENSCHAFTEN VON INTEGRATIONSFORMELN	44
3.4.2	PRODUKTINTEGRATION ÜBER DAS GLOBALE ELEMENT	46
3.5	NUMERISCHE BEISPIELE	50
3.5.1	MANUFACTURED SOLUTION	50
3.5.2	PATCH TEST	51
3.5.3	MIKROSKOPISCHE KNOCHENSTRUKTUR	52
4	Geometrische Aspekte bei der p-Version	55
4.1	NETZE MIT GEKRÜMMTEN OBERFLÄCHEN	55
4.2	POLYNOMIELLE INTERPOLATION	57
4.2.1	1D-INTERPOLATION	58
4.2.2	LEBESQUE KONSTANTE UND FEHLERSCHÄTZUNG	59
4.2.3	STÜTZSTELLENMENGEN	61
4.2.4	INTERPOLATION AUF DREIECKEN UND TETRAEDERN	63
4.3	BLENDING FUNKTIONEN METHODE FÜR TETRAEDER	67
4.4	BEISPIELE	71
4.4.1	PATCH TEST MIT GEKRÜMMTEN ELEMENTEN	71
4.4.2	ACHTELKUGEL UNTER HYDROSTATISCHEM DRUCK	72
4.4.3	LOCHSCHEIBE	73
4.4.4	SCORDELIS-LO SCHALE	75
4.4.5	HALBKUGELFÖRMIGE SCHALE MIT VERSTEIFUNGSRING	76
4.4.6	TURBINE	78
5	Die Mortar Element Methode	81
5.1	APPROXIMATIONSMETHODEN	83
5.1.1	L_2 -PROJEKTION	84
5.1.2	LEAST SQUARES FIT	85
5.1.3	BEISPIELE	87
5.2	HERLEITUNG DER MORTAR ELEMENT METHODE	92
5.2.1	MORTAR MIT LAGRANGEN MULTIPLIKATOREN	92
5.2.2	PHYSIKALISCHE HERLEITUNG	93
5.2.3	FE-DISKRETISIERUNG	96
5.3	ZUSAMMENFASSUNG DES VERFAHRENS UND ALGORITHMISCHE UMSETZUNG	100
5.3.1	BERECHNUNG DES INTERFACE	100
5.3.2	VERSCHNEIDUNG DER ELEMENTE	101
5.4	RECHENBEISPIEL	103

6	Numerische Beispiele	107
6.1	STARRKÖRPERVERSCHIEBUNGEN	108
6.2	PATCH TEST	108
6.3	ACHTELKUGEL UNTER HYDROSTATISCHEM DRUCK	111
6.4	MANUFACTURED SOLUTION	113
6.5	LOCHSCHEIBE - LINEARES MATERIALGESETZ	114
6.6	LOCHSCHEIBE - NICHTLINEARES MATERIALGESETZ	118
6.7	TUNNEL	122
7	Zusammenfassung und Ausblick	127
	Anhang	129
A	Tetraeder Ansätze nach dem Prinzip von Schöberl	129
A.1	KNOTENMODEN	130
A.2	KANTENMODEN	130
A.3	FLÄCHENMODEN	130
A.4	BUBBLE MODEN	131
B	Abgebildete Basis	132
C	Blending Terme für Kanten und Flächen	133
	Literaturverzeichnis	135

Kapitel 1

Einleitung

In dieser Einleitung wird die vorliegende Arbeit in den Gesamtzusammenhang der Planungsaufgaben im Bauwesen gestellt. Nach einer kurzen Skizze über bauspezifische Planungscharakteristika werden heute übliche Methoden der dimensionsreduzierten Tragwerksmodellierung angesprochen. Aus einer ersten Analyse der damit verbundenen Probleme wird eine alternative, rein volumenorientierte Tragwerksplanung motiviert. Diese wurde bereits in mehreren vorangegangenen Doktorarbeiten am Lehrstuhl für Computation in Engineering untersucht. Aus der damit verbundenen Schwierigkeit der Vernetzung komplexer dreidimensionaler Strukturen ergibt sich die eigentliche Aufgabenstellung dieser Arbeit, die Umsetzung der Mortar Methode für dreidimensionale Finite Elemente hoher Ordnung.

1.1 Planung im Bauwesen

Die Planung im Bauwesen zeichnet sich i.A. durch den Unikatcharakter eines Bauwerks, die damit verbundenen Risiken und Kosten sowie aufgrund des Zwangs fachübergreifender Zusammenarbeit durch eine hohe Komplexität und einen hohen Kommunikationsbedarf aus. Während der unterschiedlichen Planungs- und Bauphasen finden Arbeitsschritte statt, die sequentiell oder zyklisch von einer heterogenen Gruppe verschiedener Fachplaner bearbeitet werden müssen.

1.1.1 Planungscharakteristika

Um unterstützende Methoden für die Planung und Ausführung im Bauwesen zu entwickeln, ist zunächst eine Analyse der Planungs- und Ausführungsprozesse durchzuführen. Es lassen sich dabei nach EASTMAN [40] die folgenden typischen Planungscharakteristika identifizieren:

- Unikatcharakter:
Der Unikatcharakter hat einen deutlichen Einfluss auf das Verhältnis zwischen Planungskosten und Endpreis des Produktes. Im Bauwesen liegen die Planungskosten oft bei 10 % des Endpreises, während der Preis industriell am Fließband gefertigter Produkte meist um Größenordnungen über den Planungs- bzw. Entwicklungskosten liegt. Damit 'lohnt' sich bei industrieller Fertigung ein erhöhter Planungsaufwand mehr als bei Unikatfertigung.

- **Iterative Arbeitsweise:**
Eine iterative Arbeitsweise findet in zweierlei Hinsicht während des Planungs- und Ausführungsprozesses statt: Erstens in einem einzelnen Planungsabschnitt, also in einem dafür vorhergesehenem zeitlichen Rahmen. Und zweitens über verschiedene Abschnitte hinweg, falls Modifikationen des Bauwerks durch äußere Umstände notwendig werden.
- **Zunehmender Detaillierungsgrad:**
Der Detaillierungsgrad eines Bauprojekts nimmt von der Machbarkeitsstudie über die Planung und Ausführungsplanung permanent zu.
- **Vielzahl an Fachdisziplinen:**
Bei einem Bauprojekt ist eine Vielzahl unterschiedlicher Spezialisten beteiligt. Dies sind z.B. Architekten, Tragwerksplaner, Bauphysiker, Geologen, um nur einige zu nennen. Dabei ist i.d.R. davon auszugehen, dass mit der Größe und steigendem Unikatcharakter des Bauwerks die Anzahl der Beteiligten und deren Vernetzung anwächst.
- **Wechselnde Arbeitsgruppen:**
Die Zusammensetzung und Größe der Arbeitsgruppen ändert sich während des fortschreitenden Bauablaufs.
- **Geringe Strukturierung:**
Durch den Unikatcharakter eines Bauwerks und das Auftreten unvorhersehbarer Ereignisse ist die Entwicklung einer formalen Steuerung für den Bauprozess deutlich schwieriger als im Fall standardisierter Industrieprodukte.

Die aufgeführten Punkte machen deutlich, dass eine effiziente Computerunterstützung von Planungsprozessen im Bauwesen schwieriger zu realisieren ist als z.B. im Maschinenbau. Sie sind auch ein wesentlicher Grund dafür, dass Software im Bauwesen heute nachwievor in Form von Insellösungen für die verschiedenen Planungsphasen existiert. Für einen Fortschritt bei der Entwicklung computerunterstützender Verfahren im Bauwesen ist es deshalb zunächst nötig, alle Objekte und Zustände eines Bauwerks eindeutig zu beschreiben, um sie dann übergreifend in verschiedenen Planungsphasen nutzen zu können.

1.1.2 Produktmodelle im Bauwesen

Ein Produkt wird in der ISO 9002 lediglich als ein Ergebnis von Tätigkeiten und Prozessen definiert. Im Bauwesen ist ebenfalls der Begriff Bauwerksmodell üblich. Ein Bauwerksmodell dient der Beschreibung eines Bauwerks über alle Phasen der Planung, Ausführung, Nutzung, bis hin zum Rückbau. Dabei wird in der Regel ein objektorientierter Ansatz gewählt, d.h. die relevanten Daten werden entsprechend diverser Klassifizierungseigenschaften, z.B. Geometrie, Kosten, Instandhaltung, etc. gliedert[57].

Im vorhergehenden Abschnitt wurde erwähnt, dass es über den gesamten Lebenszyklus hinweg verschiedene Sichtweisen auf ein Bauwerk gibt. Man spricht von domänenspezifischen Sichtweisen, da jede Domäne (Architekt, Tragwerksplaner, Kleinunternehmer, . . .) sich vornehmlich für einen Teil, bzw. Teilaspekt des Bauwerks interessiert. Ein Bauwerksmodell soll dabei die von jeder Domäne verlangten Daten beinhalten. Ebenfalls soll entsprechende Software diese in

effizienter Weise weiterverarbeiten und dem Nutzer bereitstellen können. Die Anforderung der Effizienz und die programmiertechnische Umsetzung verlangt ebenfalls nach einer geeigneten Strukturierung der Daten. Von besonderer Bedeutung für die Modellierung im Bauwesen ist der Aspekt der Geometrie. Algorithmen, die auf einem Gebäudemodell basieren, müssen die Geometrie von Objekten und geometrische Beziehungen zwischen Objekten erkennen können. Ein weiterer Aspekt ist die Erhaltung der Konsistenz des Modells, das für die verschiedenen an der Planung beteiligten Personen modifizier- und erweiterbar sein muss.

1.1.3 Der Produktmodell Standard IFC

Dem Wunsch der Standardisierung von Produktmodellen im Bauwesen folgend gründete sich 1995 die International Alliance for Interoperability IAI, ein internationaler Zusammenschluss von Firmen und Organisationen im Umfeld des Bauwesens. Die Entwicklung eines gemeinsamen Datenmodells, der Industry Foundation Classes IFC [79] (ISO Standard: ISO PAS16578), dauert seither an und ist derzeit noch nicht abgeschlossen. Die IFC soll ein semantisches Objektmodell zur Verfügung stellen, das eine hierarchische Gliederung des Bauvorhabens in Projekt, Gelände, Raum, Element beinhaltet. Zum Zweck einer verbesserten Anbindung an die Tragwerksplanung entstand die IFC-Erweiterung ST-4, die dimensionsreduzierte Modelle (Mittelflächen von Decken, etc.) bereitstellt. Für technische Details der IFC sei an dieser Stelle auf LIEBICH [78] verwiesen.

1.2 Tragwerksplanung im konstruktiven Ingenieurbau

Die Tragwerksplanung nimmt aufgrund ihrer existenziellen Bedeutung für das Bauwerk eine Sonderstellung im Laufe des gesamten Bauvorhabens ein. Nach der Entscheidung für eine bestimmte Tragstruktur erfolgt deren Bemessung sowie deren statischer Nachweis. Dabei wird üblicherweise aufgrund der unbedingt notwendigen Interpretier- und Nachrechenbarkeit der Ergebnisse für den Ingenieur die gesamte Tragstruktur in dimensionsreduzierte statische Teilmodelle (z.B. Balken, Decken, Wände, ...) zerlegt. Das statische Gesamtmodell bestimmt sich dadurch als Menge miteinander in Wechselwirkung tretender Einzelbauteile. Neuere Ansätze vernachlässigen jedoch die bisher übliche Vorgehensweise und nutzen die im Produktmodell vorliegenden Daten, um ein Gesamt-Volumenmodell des Bauwerks zu extrahieren (s.u.). In beiden Fällen, der klassischen Vorgehensweise sowie der strukturmechanischen Berechnung am Gesamtmodell, kommen computergestützte numerische Verfahren - hier ist in erster Linie die Finite Elemente Methode (FEM) zu nennen - zum Einsatz. Letztere unterscheidet sich wiederum in Varianten, so z.B. in h -, oder p -FEM (s.u.), die an die Voraussetzungen der Berechnungsverfahren, d.h. auf Dimensionsreduktion oder Gesamtmodell, angepasst werden müssen. Die Berechnung mit dimensionsreduzierten Teilmodellen zeigt vor allem dann Schwächen, wenn nachträgliche Veränderungen des Tragwerks potentiell den gesamten Lastabtrag beeinflussen und deshalb alle Bauteile erneut untersucht werden müssen. Bei der Berechnung am Gesamt-Volumenmodell ist algorithmisch gesehen die automatisierte Generierung eines geeigneten FE-Netzes (s.u.) problematisch.

Die Tragwerksplanung im konstruktiven Ingenieurbau beruht allgemein auf verschiedenen Modellen mit unterschiedlichen Schwerpunkten. So sind nach RUEPPEL [106] und MEISSNER [89]

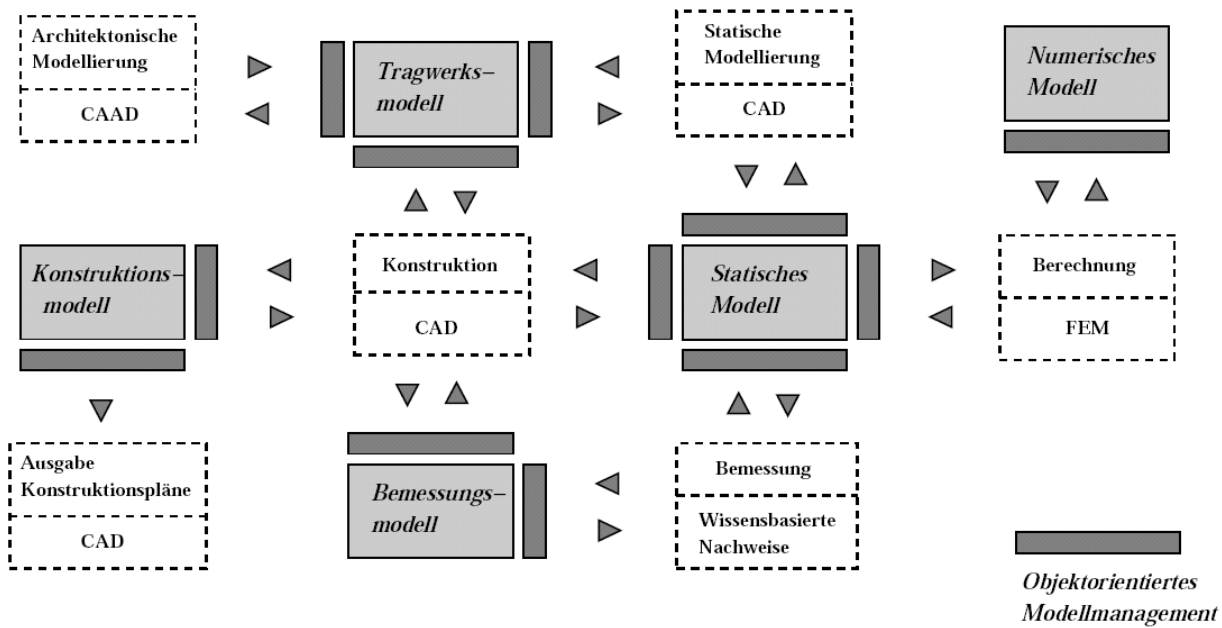


Abbildung 1.1: Tragwerksmodelle nach [106],[89]

fünf verschiedene Teilmodelle im Bereich der Tragwerksplanung zu identifizieren, s. Abb. 1.1. Diese sind:

- **Architekturmodell:**
Das Architekturmodell bildet die Grundlage für alle im weiteren Planungsverlauf erstellten Teilmodelle. Es ist das Resultat der ersten wesentlichen Planungsphasen. Falls im Sinne einer Produktmodell-orientierten Handlungsweise vorgegangen wird, so liegt das Architekturmodell als dreidimensionaler Körper vor, der im einzelnen aus attribuierten Objekten besteht. Bei Einsatz geeigneter Software kann das Architekturmodell über den IFC-Standard an den Tragwerksplaner übergeben werden.
- **Tragwerksmodell:**
Das Tragwerksmodell besteht aus den tragenden Bauteilen und stellt somit eine Untermenge des Architekturmodells dar. Im Idealfall wird es vom Tragwerksplaner direkt aus diesem generiert. Derzeit üblich ist aber noch die Neuerstellung mit eigens dafür konzipierten CAD Programmen.
- **Statisches Modell:**
Das statische Modell identifiziert die Bauteile entsprechend ihrer Tragwirkung, d.h. Balken, Platten, Stützen, etc. Dies führt zu einer Dimensionsreduktion des Modells und dient oft auch der separierten Berechnung einzelner Tragwerksteile. Diese Teilberechnungen werden dem Lastabtrag folgend 'von oben nach unten' vorgenommen.
- **Numerisches Modell:**
Das Numerische Modell ist i.d.R. ein Finite Elemente Modell. Es entsteht aus der Wahl der Diskretisierung und der im statischen Modell gemachten mechanischen Annahmen.

Erwartet der Ingenieur z.B. plastisches Materialverhalten wird sich das numerische Modell von einem linear elastischen unterscheiden. Nach Durchführung der Berechnung sind alle maßgeblichen Schnittgrößen bekannt.

- **Bemessungsmodell:**
Das Bemessungsmodell dient dem normativen Nachweis der jeweiligen Bauteile. Je nach angenommenem Tragverhalten (ein-, zweidimensional) werden hiermit die Trag- und Gebrauchsfähigkeit von Querschnitten, bzw. Bewehrungsführungen nachgewiesen.
- **Konstruktionsmodell:**
Im Konstruktionsmodell sind alle für den Bau relevanten Daten abgelegt. Es enthält bspw. Bewehrungspläne, Informationen zur Betondeckung, etc. Meist liegen die Daten auf der Baustelle in Papierform vor.

Die Vielfalt der Modelle lässt erkennen, dass eine computergestützte Effizienzsteigerung der einzelnen Teilprozesse und deren Zusammenfügen zu einem Gesamtprozess sich schwierig gestaltet. Die Probleme liegen dabei in der Automatisierung sowie in der Konsistenzsicherung bzw. Widerspruchsfreiheit des Bauwerksmodells. Hinsichtlich Konsistenzsicherung ist nach MEISSNER [89] und WÖRNER [131] unter dem Aspekt, dass mehrere Planer gleichzeitig Veränderungen am Modell vornehmen, eine Verwaltung durch ein zentrales Datenbankmanagementsystem einem Dateiaustausch vorzuziehen (siehe auch RANK [99]). Hinsichtlich der automatischen Konvertierung, bzw. Extrahierung, ist vor allem der Schritt vom Architektur- zum statischen Modell problematisch, da hier ingenieurmäßige Annahmen getroffen werden, die mit Hilfe des Computers schwer nachgebildet werden können. Die Problematik liegt vor allem in der Dimensionsreduktion und der Beurteilung des Tragverhaltens der einzelnen Bauteile, so dass hier als Lösungsansatz im Weiteren die statische Berechnung am Gesamtmodell und nicht am dimensionsreduzierten Modell untersucht wird.

1.3 Berechnung am Gesamtmodell

Wie bereits erläutert steht die Idee, die Tragstruktur als Ganzes an einem nicht dimensionsreduzierten Modell, und auch nicht in Teilschritten, zu berechnen im Gegensatz zur der derzeit üblichen Praxis. Dies liegt sicherlich einerseits an den bisher nicht ausreichenden Rechnerkapazitäten, vor allem aber an der historischen Entwicklung aus der Handkalkulation mittels Rechenschieber heraus. Aufgrund der Geschwindigkeit mit der sich die Halbleitertechnologie weiterentwickelt und dem Wunsch durch optimale Vernetzung mit Hilfe eines Produktmodells weitere Effizienzgewinne in der Bauwirtschaft zu erlangen, kann jedoch davon ausgegangen werden, dass die Berechnung an einem Volumenmodell in Zukunft an Bedeutung gewinnen wird (ROMBERG [104], RANK [100]). Die Frage, welche Schritte vom Architekturmodell zum dreidimensionalen Berechnungsmodell notwendig sind und inwiefern dies mit den bereits in der Praxis verfügbaren Standards möglich ist, war Gegenstand der Untersuchungen von ROMBERG [103] und NIGGL [90] im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms 'Vernetzt-kooperative Planungsprozesse im Konstruktiven Ingenieurbau'. Die wesentlichen Ergebnisse hierzu werden nachfolgend kurz zusammengefasst:

- ROMBERG stellt in [103] ein Verfahren vor, mit dessen Hilfe es möglich ist, eine dreidimensionale Strukturanalyse auf Basis eines Gebäudemodells durchzuführen (s. Abb.

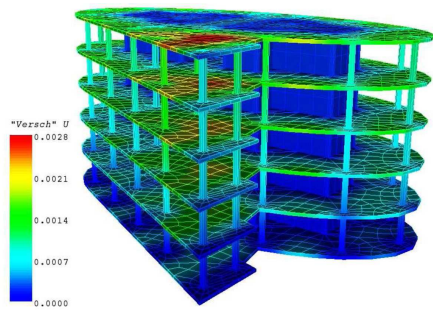


Abbildung 1.2: Berechnung am Gesamtmodell [103]

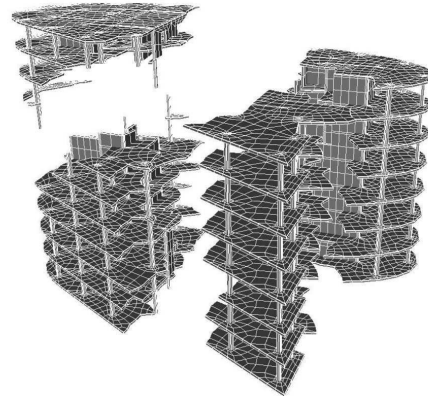


Abbildung 1.3: Hierarchische Bisektion [90]

1.2). Verwendet wird hierbei die so genannte FEM hoher Ordnung (p -Version), die hierbei den typischen dünnwandigen Tragstrukturen angepasst wird. Vom Autor wird festgehalten, dass die semantischen und topologischen Informationen innerhalb des Bauwerksmodells ausreichend sind, um Nachbarschaftsrelationen zwischen separat modellierten Volumina zu identifizieren. Mit Hilfe dieser Nachbarschaften kann eine geeignete geometrische Zerlegung des Modells durchgeführt werden, die den im Bauwesen typischen dünnwandigen Strukturen gerecht wird. Auf Grundlage dieser Zerlegung entwickelt der Autor einen Vernetzungsalgorithmus, der die Berechnung des dreidimensionalen Gesamtmodells mit Hilfe der Finite Elemente Methode ermöglicht.

- NIGGL untersucht in [90] darauf aufbauend weitere Fragestellungen, so z.B. hinsichtlich der Eignung eines Volumenmodells zur vernetzt-kooperativen Zusammenarbeit, wobei er zu dem Schluss kommt, dass durch den Einsatz eines Volumenmodells die Schnittstellenproblematik, wie sie in Abb. 1.1 dargestellt ist, deutlich reduziert wird. Des Weiteren entwickelt er eine hierarchische Strukturierung des Gebäudemodells (s. Abb. 1.2), die bei den im Planungsverlauf zu erwartenden Modifikationen eine schnelle Neuberechnung an Gesamtmodell erlaubt [93; 91; 92].

1.4 Zielsetzung und Gliederung der Arbeit

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass durch die beiden Arbeiten von ROMBERG und NIGGL der Weg vom digitalen Gebäudemodell im IFC-Standard hin zum dreidimensionalen Volumenmodell und dessen strukturmechanische Berechnung mit Hilfe der Finite Elemente Methode grundsätzlich aufgezeigt wurde. Einige Probleme, die in diesem Zusammenhang bezüglich der praxisnahen Umsetzung stehen, sind gelöst, so z.B. die Frage nach der zeitintensiven Berechnung am Gesamtmodell vor dem Hintergrund eines sich ständig ändernden Modells. Die entwickelten Methoden entbehren jedoch noch der Allgemeingültigkeit, da sie sich auf die typischerweise im Bauwesen anzutreffenden Strukturen, nämlich dünnwandige Strukturen, beschränken. Es fehlt ihnen die Möglichkeit beliebig geformte, massive Körper, zu integrieren. Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, diese Lücke durch die Anbindung eines Freiformvernetzers an die bestehende Software zu schließen.

Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass der Leser eine prinzipielle Idee von strukturmechanischen, computergestützten Berechnungsmethoden besitzt, obwohl im Rahmen dieser Arbeit auf diese noch detailliert eingegangen wird.

Da der in den genannten Vorarbeiten des Lehrstuhls entwickelte Vernetzer für dünnwandige Strukturen reine Hexaedernetze erzeugt, wäre es naheliegend, für die massiven Strukturen einen Hexaedervernetzer zu verwenden. Wenn man allerdings die derzeit verfügbaren kommerziellen bzw. akademischen Hexaedervernetzer untersucht, so stellt man fest, dass diese außer in Sonderfällen nicht in der Lage sind, die für die p -Version geeigneten großelementigen Netze zu generieren. Diese Fähigkeit besitzen derzeit nur Netzgeneratoren auf Basis von Tetraedern.

Allerdings möchte man nicht auf die Vorteile der p -Version bei der Berechnung dünnwandiger Strukturen mit Hexaederelementen verzichten [34]. Die Frage, die sich stellt, ist deshalb: Welche Möglichkeiten gibt es beide Elementtypen miteinander zu kombinieren? Das Problem, das dabei auftaucht liegt auf der Hand. Hexaeder- und Tetraedernetze sind zwangsläufig nicht konform, d.h. (im Ergebnis), dass sich unter Verwendung dieser nicht konformen Netze, sich Bauteile fiktiv durchdringen können, wodurch strukturmechanische Berechnungen an Sinn verlieren. Es gibt die Möglichkeit, Konformität der Ansätze zu erzwingen, indem jeweils zwei Dreiecksflächen passend auf eine Vierecksfläche gelegt werden. Dies ist jedoch eine nichttriviale Aufgabe, da die Anzahl der Dreiecke auf der Kontaktfläche immer gerade sein muss. Diese Bedingung würde die Algorithmen, die bei der Hexaeder- und Tetraedervernetzung ablaufen, stark beeinträchtigen. Über die Qualität solcher Netze und der damit erzielten Ergebnisse sind dem Autor keine Untersuchungen bekannt. Hier soll mit einer nicht konformen Kopplung beider Elementtypen ein alternativer, allgemeingültiger Weg beschritten werden. Eine Methode, die dies ermöglicht, ist die so genannte Mortar Element Methode.

Gliederung der Arbeit:

- **Kapitel 2** stellt die Grundprinzipien der Finiten Elemente Methode im Bereich der Strukturmechanik vor. Nach der Herleitung werden Konvergenzeigenschaften sowie Strategien zur Verbesserung der Ergebnisse vorgestellt.
- **Kapitel 3** analysiert die Eigenschaften bestehender Ansatzbasen für Tetraeder und stellt die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Polynombasis vor, mit deren Hilfe allgemeine Strukturen in das bestehende Softwareframework eingebaut werden können.
- **Kapitel 4** behandelt geometrische Aspekte der zugrunde liegenden Netze, die bei der p -FEM von besonderer Bedeutung sind.
- **Kapitel 5** leitet die eigentliche Mortar Element Methode in einem ingenieurgemäßen Kontext her. Mit Hilfe dieser Methode wird die Nutzung der vorher entwickelten Tetraederelemente mit gekrümmten Oberflächen im Rahmen gemischter Hexaeder/Tetraedernetze möglich.
- **Kapitel 6** stellt numerische Beispiele zur Verifikation der entwickelten Verfahren vor. Des Weiteren werden die damit erzielten Ergebnisse hinsichtlich Tauglichkeit für praxisrelevante Anwendungen im Bauwesen untersucht.

Kapitel 2

Finite Elemente Methode

Die Finite Elemente Methode (FEM) stellt das Standardverfahren dar, mit dem im Ingenieurwesen komplexe Strukturen mit Hilfe von Computern berechnet und analysiert werden. Mathematisch betrachtet sucht sie die Lösung einer Differentialgleichung (DGL) auf einem Gebiet Ω unter gegebenen Randbedingungen. Es gibt mehrere Möglichkeiten der Herleitung der FEM. Eine verallgemeinernde Sichtweise ist die Formulierung eines gewichteten Residuums, durch das man die zur Differentialgleichung gehörende schwache Form erhält. Durch Multiplikation der DGL mit einer so genannten Test- oder Wichtungsfunktion und anschließender partieller Integration über das Gebiet Ω ergibt sich in Folge die Grundgleichung der FEM. Ein weniger abstrakter Ansatz ist die Herleitung über Energieprinzipien, falls diese existieren, bzw. bekannt sind. Dazu wird gefordert, dass ein gegebenes Potential $\Pi(\mathbf{u})$, i.d.R. ein Maß für die vom System geleistete Arbeit, minimal wird. Das heißt, ein physikalisches System entgegnet den gegebenen Belastungen und aufgeprägten Verschiebungen mit minimalem und endlichem Energieaufwand.

Für eine Einführung in die Finite Elemente Methode für kontinuumsmechanische Probleme sei auf STRANG [119], HUGHES [64] und SZABÓ [120] verwiesen. Eine kurze und prägnante Einführung in die p -Version der FEM, auf die später eingegangen wird, wird von SZABÓ, DÜSTER und RANK in [121] gegeben.

Mit Hilfe der FEM erreicht man im allgemeinen Fall eine Näherungslösung \mathbf{u}_{Fe} , deren Qualität maßgeblich von der gewählten Diskretisierung abhängt. Unter Diskretisierung versteht man dabei die Wahl oder Definition des endlich dimensionalen Funktionenraums, in dem die Näherungslösung gesucht wird. Er besteht bei der FEM üblicherweise aus Polynomen mit örtlicher Begrenztheit (kompaktem Träger), d.h. Polynomen, die nur in einem Teil des Gebietes, den so genannten Elementen definiert sind und nach außen hin stetig zu null fortgesetzt werden. Ausgehend von der schwachen Form spricht man von einem Bubnov-Galerkin Verfahren, wenn Wichtungs- und Diskretisierungsraum identisch sind. Weichen sie voneinander ab, so ergibt sich ein Petrov-Galerkin Verfahren, das die Grundlage für andere numerische Methoden bildet, wie z.B. die Finite Volumen Methode (siehe z. B. LEVEQUE [76]), die Randelementemethode (siehe z.B. SCHANZ [107], BREBBIA [16]) oder auch FEM-Derivate. Die folgenden Kapitel sollen zur Begriffsbestimmung und zur Absteckung der im Rahmen dieser Arbeit gestellten Problemstellungen dienen. Sie sind in keinerlei Hinsicht als eine strenge mathematische Formulierung mit funktionalanalytischem Hintergrund gedacht. Dabei werden

zur kürzeren Darstellung kontinuumsmechanische Sachverhalte und das allgemeine numerische Approximationsverfahren, das für beliebige dafür geeignete Problemstellungen (z. B. Finanzmathematik, Medizin) verwendet werden kann, gekoppelt in einem Kapitel erörtert.

2.1 Die schwache Form der linearen Elastostatik

Im Rahmen dieser Arbeit wird die reine Verschiebungsformulierung der linearen Elastostatik behandelt. Gemischte Variationsprinzipien bspw. nach HU-WASHIZU [115] oder HELLINGER-REISSNER [126], zählen zu den Mehrfeldfunktionalen und beinhalten neben den Verschiebungen \mathbf{u} auch Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ und Verzerrungen $\boldsymbol{\varepsilon}$. Sie basieren auf denselben physikalischen Grundgleichungen wie die Verschiebungsformulierung, fordern allerdings nur deren schwache Erfüllung.

Zur Herleitung der Grundgleichungen ist zunächst von drei Grundprinzipien der Elastostatik auszugehen. Diese sind:

- Gleichgewicht
- Kinematik
- Stoffgesetz

Alle im weiteren Verlauf durchgeführten Betrachtungen erfolgen an einem infinitesimalen Volumen für das kleine Verschiebungsgradienten und konstante Materialeigenschaften angenommen werden.

2.1.1 Gleichgewicht

Nach dem dritten Newton'schen Axiom *actio=reactio* müssen die Kräfte innerhalb eines Körpers mit den auf ihn einwirkenden Kräften im Gleichgewicht sein. Zur Beschreibung dieses Gleichgewichts innerhalb des Körpers wird für die vom/im Körper herrschenden Kräfte der Spannungstensor σ_{ij} (s. Abb. 2.1) eingeführt. Es gilt:

$$\sigma_{ij,j} + f_i = 0, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2.1)$$

wobei durch die Indizes i, j die Koordinatenachsen x, y, z beschrieben werden. Dabei werden die Volumenkräfte durch den Vektor $\mathbf{f} = (f_x, f_y, f_z)^T$ gekennzeichnet. Bei $\boldsymbol{\sigma}$ handelt es sich um einen Tensor 2. Stufe mit neun Einträgen, der sich in Matrixschreibweise darstellt als:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

Durch Betrachtung des Momentengleichgewichts ergibt sich dessen Symmetrie, wodurch nur noch sechs unabhängige Spannungsgrößen verbleiben, so dass sich $\boldsymbol{\sigma}$ in der Voigt-Notation als sechs-zeiliger Vektor $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ schreiben lässt.

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = [\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{yz}, \sigma_{xz}]^T \quad (2.3)$$

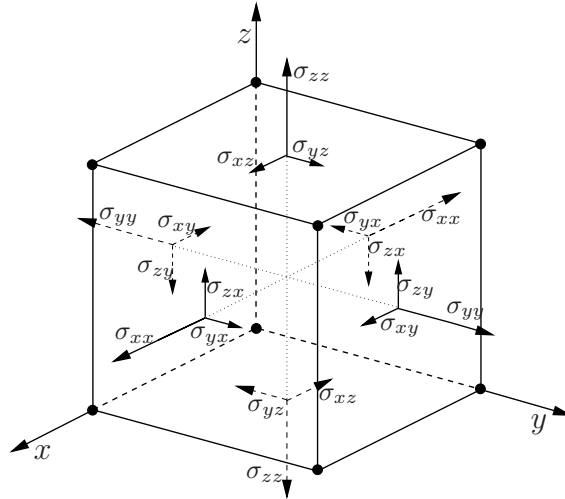


Abbildung 2.1: Definition der Spannungen

Mit der Differentialoperatormatrix \mathbf{L}

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix}, \quad (2.4)$$

lässt sich Glg. 2.1 darstellen als

$$\mathbf{L}^T \tilde{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad (2.5)$$

Die Kräfte- und Randbedingungen \mathbf{t} stehen dabei mit dem Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ in folgender Beziehung:

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}. \quad (2.6)$$

Dabei stellt \mathbf{n} den nach außen gerichteten Normaleneinheitsvektor dar.

2.1.2 Kinematik

Wird ein Körper belastet, so verformt er sich. Diese Deformation führt innerhalb des Körpers zu lokalen Dehnungen, Volumenänderungen und Scherverformungen, die sich aus den partiellen Ableitungen des Verschiebungsfeldes ergeben. Die Kinematik beschreibt dabei mathematisch die Beziehungen zwischen Verschiebungen und Verzerrungen. Sie wird durch die Betrachtung eines Punktes vor (Ausgangskonfiguration) und nach der Belastung (Momentankonfiguration) beschrieben (s. Abb. 2.2). Zwischen dem Verzerrungstensor $\boldsymbol{\varepsilon}$ und den Verschiebungen \mathbf{u} gilt im linearen Fall, d.h. unter Vernachlässigung quadratischer Terme¹ der folgende Zusammenhang:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}), \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2.7)$$

¹Im Rahmen dieser Arbeit werden nur geometrisch lineare Verschiebungen angenommen.

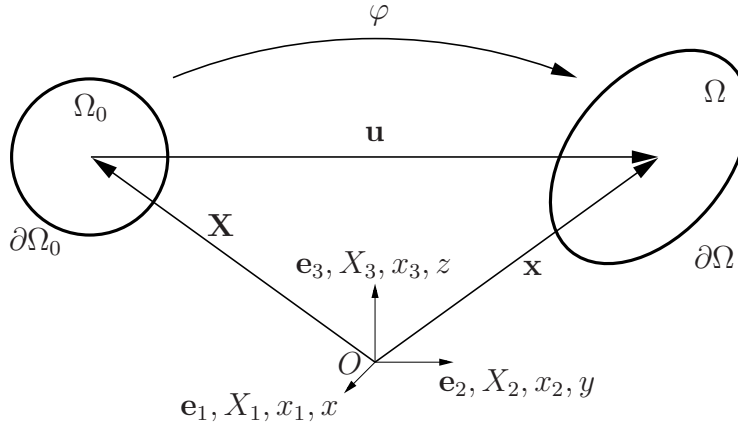


Abbildung 2.2: Ausgangs- und Momentankonfiguration eines Punktes

Auch beim Tensor ε_{ij} führen Symmetrieüberlegungen am infinitesimalen Element zu nur sechs unabhängigen Verzerrungsgrößen. Mit dem Verschiebungsvektor $\mathbf{u} = [u_x, u_y, u_z]^T$ und dem Verzerrungsvektor

$\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}, \gamma_{xy}, \gamma_{yz}, \gamma_{xz}]^T$ lässt sich Glg. 2.7 darstellen als

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{L}\mathbf{u}, \quad (2.8)$$

wobei die um den Faktor 2 größeren Ingenieurverzerrungen $\gamma_{xy} = 2\varepsilon_{xy}$, $\gamma_{yz} = 2\varepsilon_{yz}$, $\gamma_{xz} = 2\varepsilon_{xz}$ eingeführt werden.

2.1.3 Stoffgesetz

Das Stoffgesetz beschreibt den Widerstand eines Materials gegenüber einer aufgetragenen Belastung und formuliert somit den Zusammenhang zwischen Spannungen und Verzerrungen. Im hier betrachteten linear elastischen Fall und isotropen Materialeigenschaften wird dieses Materialverhalten durch zwei konstante Kenngrößen, λ und μ , den so genannten Lamé Konstanten beschrieben. Um physikalisch interpretierbare Kenngrößen, die aus Versuchen bestimmt werden können, zu erhalten, werden der Elastizitätsmodul E und die Querkontraktionszahl ν eingeführt. Der Elastizitätsmodul lässt sich als Steifigkeit einer eindimensionalen Feder interpretieren. Die Querkontraktionszahl beschreibt die Dickenänderung des Materials unter Axialbelastung. Ein negatives ν würde bspw. einen Stab unter Zugbelastung dicker werden lassen. Der Zusammenhang zwischen Spannungen und Verzerrungen ist folgender:

$$\sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij} \quad (2.9)$$

Die Lamé Konstanten stehen mit den ingenieurtechnischen Größen in folgender Beziehung:

$$\mu = \frac{E}{2(1+2\nu)}, \quad \lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}. \quad (2.10)$$

Des Weiteren gilt $0 < \lambda < \infty$, und somit $-1 < \nu < 0.5$.

Auch hier stellt sich die Darstellung der Glg. 2.9 für nachfolgende Überlegungen in Matrixschreibweise als vorteilhaft dar. Mit der Elastizitätsmatrix \mathbf{C}

$$\mathbf{C} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} (1-\nu) & \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & (1-\nu) & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & \nu & (1-\nu) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

gilt

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}\boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.12)$$

Die spezifische Formänderungsenergie Π_ρ eines Verschiebungsfeldes lässt sich mit Hilfe der eingeführten Ingenieurverzerrungen nun als Skalarprodukt der Vektoren $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \boldsymbol{\varepsilon}$ schreiben als:

$$\Pi_\rho = \tilde{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.13)$$

2.1.4 Starke Form der linearen Elastostatik

Nach Einführung von drei Verschiebungs-, sechs Verzerrungs- und sechs Spannungsgrößen, also insgesamt 15 Unbekannten, lassen sich die 15 Gleichungen 2.1 - 2.9 so umformulieren, dass entweder nur Spannungen, nur Verschiebungen oder beides in einem gesuchten Differentialgleichungssystem auftreten. Dabei treten je nach Vorgehensweise Differentialgleichungssysteme verschiedener Anzahl und Ordnung auf. Je nach Formulierung sind ebenso verschiedene Randbedingungen (Spannungs- oder Verschiebungsfelder) als bekannt vorauszusetzen. Die übliche Herangehensweise, die auch hier angewandt wird, führt auf eine reine Verschiebungsformulierung, die sich in Indexschreibweise wie folgt darstellt:

$$\mu u_{i,jj} + (\lambda + \mu)u_{j,ij} + f_i = 0 \quad , \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2.14)$$

Dies sind drei Differentialgleichungen 2. Ordnung. Zu einer eindeutigen Problemstellung gehören noch Randbedingungen, d.h. Verschiebungen $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$ auf einem Teil des Randes Γ_u sowie Spannungen $\mathbf{t} = \bar{\mathbf{t}}$ auf Γ_t .

2.1.5 Herleitung der schwachen Form

Das gewichtete Residuum der Glg. 2.14 wird durch Multiplikation mit einer Wichtungsfunktion (oder Testfunktion) v_i und anschließender Integration über das Gesamtgebiet gebildet.

$$\int_{\Omega} [\mu u_{i,jj} + (\lambda + \mu)u_{j,ij} + f_i] v_i = 0 \quad (2.15)$$

Eine nachfolgende partielle Integration verschiebt die Ableitungen der gesuchten Funktion u auf die Wichtungsfunktion v .

$$\int_{\Omega} 2\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \lambda (u_{i,i} v_{j,j}) d\Omega = \int_{\Omega} f_i v_i d\Omega + \int_{\Gamma_t} t_i v_i d\Gamma_t \quad (2.16)$$

Mit Hilfe der Funktionalanalysis kann gezeigt werden, dass die Formulierungen 2.14 und 2.16 zusammen mit den vorgegebenen Randbedingungen unter entsprechenden Annahmen bezüglich Differenzierbarkeit gleiche Lösungen besitzt, d.h. jede Funktion \tilde{u} , die Glg. 2.16 erfüllt, erfüllt ebenfalls 2.14 und umgekehrt. Dabei wird vorausgesetzt, dass die exakte Lösung \mathbf{u}_{Ex} und deren Ableitungen auf dem Gebiet Ω quadratintegrierbar sind, d.h.

$$\int_{\Omega} [\mathbf{u}^2 + (\nabla \mathbf{u})^2] d\Omega < \infty \quad (2.17)$$

Alle Funktionen \mathbf{u} , die Glg. 2.17 erfüllen, werden in Kombination mit einer entsprechenden Norm im so genannten Sobolev Raum H^1 zusammengefasst. In diesem Raum ist durch

$$\|\mathbf{u}\| = \sqrt{\int_{\Omega} \mathbf{u}^2 + (\nabla \mathbf{u})^2} \quad (2.18)$$

eine Norm definiert. Mit Hilfe der Norm lassen sich gewisse Eigenschaften der durch 2.18 definierten Menge definieren, so z.B. Abgeschlossenheit und Stetigkeit. Erfüllen Funktionen aus H^1 des Weiteren noch die homogenen Null-Randbedingungen auf dem gesamten Rand Γ , so spricht man von H_0^1 .

Bemerkung:

Das maßgebliche Theorem, das beim Nachweis der Gleichheit von 2.14 und 2.16 eingesetzt wird, ist das *Fundamental theorem of variational calculus* (oder auch *Fouriers Lemma*). Mit Hilfe des Lax-Milgram Theorems kann zusammen mit der V-Elliptizität des Integrals die Eindeutigkeit der Lösung von 2.16 bewiesen werden, s. z.B. REDDY [101]. Eine eindeutige Lösung existiert für elastostatische Probleme, wenn reine Starrkörperverschiebungen und -rotationen durch gegebene Randbedingungen ausgeschlossen sind.

In Matrixschreibweise wird Glg. 2.16 üblicherweise folgendermaßen dargestellt

$$\int_{\Omega} (\mathbf{L}\mathbf{v})^T \mathbf{C} (\mathbf{L}\mathbf{u}) d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{f}\mathbf{v}d\Omega + \int_{\Gamma_t} \mathbf{t}\mathbf{v}d\Gamma_t \quad (2.19)$$

Hierbei erkennt man durch die auftretenden Skalarprodukte etwas deutlicher den Schritt von einem DGL-System zu einem vektoriiellen Skalarprodukt, also einer Summe über die Anzahl der Gleichungen in 2.14. Statt der drei gekoppelten Differentialgleichungen 2.14 der starken Form, wird bei der schwachen Form mit dem Funktional 2.19 gearbeitet.

Die Glg. 2.19 lässt sich in einer etwas abstrakteren Form schreiben:

$$\mathcal{B}(u, v) = \mathcal{F}(v), \quad v \in H_0^1, \quad u \in H_{\tilde{u}}^1, \quad (2.20)$$

mit der Gleichbedeutung der linken und rechten Seiten von Glg. 2.19, 2.20.

2.2 Diskretisierung

Nach Herleitung der schwachen Form beginnt im nächsten Schritt die Diskretisierung des Problems. Anstatt zu fordern, dass die gesuchte Näherungsfunktion \mathbf{u}_{Fe} mit jeder beliebigen Wichtungsfunktion \mathbf{v} die gewichtete Form erfüllt, wird dies nur für eine endliche Anzahl von Funktionen $v^h \in S^{hv} \subset H_0^1$ gefordert. Ebenfalls wird der Raum der gesuchten Funktionen H_0^1 angenähert durch einen Teilraum S^{hu} dessen. Im Falle eines Bubnov-Galerkin Verfahrens sind beide wie bereits erwähnt identisch. Konvergenzbeweise zeigen, dass für $S^{hv}, S^{hu} \rightarrow H_0^1$ ^[2] die exakte Lösung der starken Form beliebig genau angenähert werden kann, wenn man den Unterschied, bzw. die Differenz beider in einer bestimmten Norm, der so genannten Energienorm misst. Punktweise Konvergenz, also Konvergenz in der Maximumsnorm $\|\bullet\|_\infty$, kann für analytische Funktionen erreicht werden (Typ A/B in Abschnitt 2.3.2). Kritische Größen hinsichtlich Konvergenz und Konvergenzverhalten sind bspw. singuläre Spannungen in einspringenden Ecken.

2.2.1 Räumliche Diskretisierung

Zur Konstruktion eines endlichen Subraums S^{hv}, S^{hu} aus H_0^1 wird das Gebiet Ω in eine Menge sich nicht überlappender Teilgebiete Ω_E , den (Finiten) Elementen, unterteilt.

$$\Omega = \bigcup \Omega_E \quad (2.21)$$

Dieser Prozess wird Netzgenerierung genannt, siehe z.B. Abb. 2.3. Bei dreidimensionalen Problemen gibt es hierbei verschiedene Typen: Tetraedernetze, Hexaedernetze, hybride (gemischte) Netze, etc. Eine automatische und fehlerfreie Generierung eines solchen Netzes, das die Güte der Approximation maßgeblich beeinflusst, ist nicht für alle Problemstellungen in der Praxis befriedigend durchzuführen. In einem solchen Fall sind manuell durchzuführende Korrekturen vorzunehmen. Die Netzgenerierung stellt daher ein eigenständiges Forschungsgebiet dar, dessen Abhandlung sich in dieser Arbeit auf dieses Kapitel beschränken muss.

Jedes Element dient im Folgenden als Träger von Funktionen, die auf diesem Element und evtl. auf Nachbarelementen leben. Diese Funktionen bilden eine Basis des diskreten endlich-dimensionalen Teilraums S^{hv}, S^{hu} , in dem die Lösung gesucht wird.

2.2.2 Diskretisierung des Element-Funktionenraumes

Die gesuchte Näherungslösung \mathbf{u}_{Fe} stellt sich als Linearkombination so genannter Ansatzfunktionen dar

$$\mathbf{u}_{Fe} = \sum_{i=1}^n \mathbf{N}_i u_i = \sum_{i=1}^n \begin{bmatrix} N_{x,i} \\ N_{y,i} \\ N_{z,i} \end{bmatrix} u_i \quad (2.22)$$

Bei gegebenen \mathbf{N}_i stellen die Freiheitsgrade u_i die gesuchten Unbekannten dar. In der Regel werden Ansätze gewählt, bei denen nur eine Komponente (N_x, N_y, N_z) ungleich null ist, wodurch sich das Skalarprodukt in Glg. 2.19 auf eine Koordinatenrichtung reduziert und die

²Hiermit ist gemeint, dass die Approximationsräume S^{hv}, S^{hu} bei Verfeinerungen den Raum H_0^1 beliebig genau approximieren.

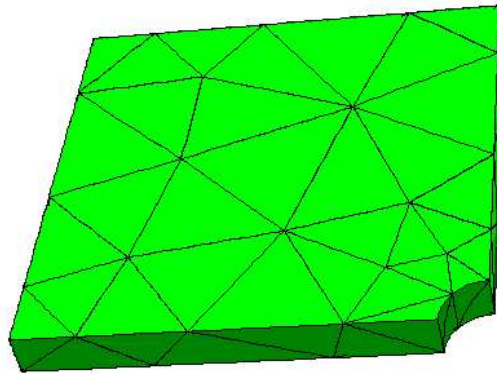


Abbildung 2.3: Tetraedernetz eines Viertels einer Lochscheibe

Glg. 2.19 deutlich vereinfacht wird.

Die klassische Vorgehensweise bei der Approximation des Raumes S durch Ansatzfunktionen ist die Annäherung durch Polynome. In letzter Zeit finden aber auch *NURBS*, s. z.B. HUGHES [65], d.h. gebrochen rationale Polynome mit Erfolg Anwendung. Eine Konvergenzbedingung an die Ansatzfunktionen, bzw. den Ansatzraum ist, dass die auftretenden ersten Ableitungen nicht zu null werden, da sonst das Integral in Glg. 2.19 zwangsläufig verschwindet. Des Weiteren müssen die essentiellen Randbedingungen - in diesem Fall die Verschiebungen - durch den Ansatz erfüllt werden. Es sei an dieser Stelle bereits angemerkt, dass die in vielen Lehrbüchern geforderte Bedingung der C_0 -Stetigkeit der Lösung \mathbf{u}_{Fe} im Rahmen der Strukturmechanik 'lediglich' im Grenzfall $S^{hu}, S^{hv} \rightarrow S$ erfüllt sein muss. An dieser Stelle muss auf die Mortar Element Methode (Kap. 5) verwiesen werden, bei der der Ansatzraum i.d.R. nicht stetig ist.

Bei der FEM gibt es zwei klassische Varianten, die h -Version und die p -Version. Bei der h -Version beschränkt man sich auf lineare, bzw. quadratische Funktionen, d.h. auf den Polynomgrad eins oder zwei. Das maßgebliche Charakteristikum der h -Version ist, dass Konvergenz hierbei durch ein immer feiner werdendes Netz erzielt wird. Man modifiziert somit die räumliche Diskretisierung. Bei der p -Version wird der Polynomgrad erhöht und das Netz konstant gehalten, d.h. der Ansatzfunktionenraum der einzelnen Elemente wird verändert. Es gibt ebenfalls die Kombination von beiden Varianten - die hp -Version (s. z.B. DEMKOWICZ [28]), sowie verschiedene Derivate, die die p -Version mit Netzverfeinerungs-, bzw. Modifikationstechniken verknüpft - je nach Problemstellung. Alle Varianten besitzen unterschiedliche Konvergenzordnungen, abhängig davon wie die exakte Lösung \mathbf{u}_{Ex} beschaffen ist, d.h. ob und welche Art von Singularitäten sie besitzt. Sie werden im Kapitel 2.3 beschrieben.

2.2.3 Masterelement

Die Konstruktion der Funktionen *direkt* auf einem globalen Element stellt sich unter den gegebenen Bedingungen als schwierig dar. Grund hierfür sind der bereits angesprochene kompakte Träger und die Null-Fortsetzbarkeit der Funktionen an Elementrändern, wie sie in Kap. 3.2

für Tetraeder diskutiert werden. Um eine einfache und klare programmiertechnische Umsetzung der Konstruktion globaler Ansatzfunktionen zu ermöglichen werden alle Elemente auf ein so genanntes Masterelement abgebildet, dessen lokales Koordinatensystem im Folgenden mit ξ, η, ζ bezeichnet wird.

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x(\xi, \eta, \zeta) \\ y(\xi, \eta, \zeta) \\ z(\xi, \eta, \zeta) \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

Auf dem Masterelement sind die Formfunktionen definiert. Dort wird integriert und wieder zurück abgebildet, d.h. es findet eine doppelte Koordinatentransformation mit zugehörigen Ableitungstransformationen in Form der Jacobimatrix \mathbf{J} und Volumentransformation in Form der Jacobideterminante $|\mathbf{J}|$ statt. Auf dem Masterelement sind Standardfunktionen definiert, die hier als *Formfunktionen* bezeichnet werden sollen. Durch Transformation auf das globale Finite Element entstehen die *Ansatzfunktionen*. Die Transformation auf das Masterelement beinhaltet gewisse Einschränkungen an die Geometrie der globalen Elemente. Die Jacobideterminante darf im gesamten Element das Vorzeichen nicht wechseln, da sonst keine injektive (eins zu eins) Abbildung vorliegt. Diese Bedingung hat bei Hexaedern Auswirkung auf die Nummerierung der globalen Knoten, sowie auf die Innenwinkel der Elemente, die größer als 0° und kleiner als 180° sein müssen. Die Jacobideterminante \mathbf{J} der Abbildung ist definiert als:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

Die Umrechnungsvorschriften für die Ableitungen sowie die Integrationsgrenzen zwischen lokalem und globalem Koordinatensystem lauten folgendermaßen

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} (\bullet) = \mathbf{J}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta} \end{bmatrix} (\bullet) \quad (2.25)$$

und

$$dx dy dz = |\mathbf{J}| d\xi d\eta d\zeta \quad (2.26)$$

Die Umrechnung von Oberflächenlasten erfolgt über den Betrag des (nicht normierten) Normalenvektors der Abbildungsvorschrift 2.23, wobei auf der lokalen Oberfläche eine Koordinate konstant oder für lokal schräg liegende Flächen als Funktion der anderen beiden geschrieben werden kann. Mit

$$dn = \left\| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial v} \right\| \quad (2.27)$$

gilt somit

$$\int_A (\bullet) dA = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (\bullet) dn \quad (2.28)$$

Die beiden Variablen (u, v) stellen dabei abhängig von der Abbildungsvorschrift vom Master- auf das globale Element die Koordinaten ξ, η, ζ dar, d.h. $(u, v) \in [(\xi, \eta); (\xi, \zeta); (\eta, \zeta)]$

2.2.4 Gleichungssystem

Nach Einsetzen der diskreten Ansatz- und Wichtungs- bzw. Testfunktionen in die schwache Form erhält man diskret auswertbare Integrale, die elementweise mit Hilfe numerischer Quadraturverfahren berechnet werden können. Man spricht im Bereich der Strukturmechanik von Elementsteifigkeitsmatrizen \mathbf{k} , die für das Gesamtsystem zur Gesamtsteifigkeitsmatrix \mathbf{K} zusammengebaut werden. Nach Einsetzen der Ansätze für \mathbf{u}_{Fe} 2.22 in Glg. 2.19 und Wichtung mit einer Funktion $v_i = \mathbf{N}_i$ erhält man:

$$\int_{\Omega} (\mathbf{L}\mathbf{N}_i)^T \mathbf{C} \left(\mathbf{L} \sum_{j=1}^n \mathbf{N}_j u_j \right) d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{N}_i^T \mathbf{f} d\Omega + \int_{\Gamma_t} \mathbf{N}_i^T \mathbf{t} d\Gamma_t \quad (2.29)$$

Hierbei sind bis auf die Unbekannten u_j , die sich aus dem Integral ziehen lassen, alle auftretenden Größen bekannt.

$$\sum_{j=1}^n \left[\int_{\Omega} (\mathbf{L}\mathbf{N}_i)^T \mathbf{C} (\mathbf{L}\mathbf{N}_j) d\Omega \right] u_j = \int_{\Omega} \mathbf{N}_i^T \mathbf{f} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{N}_i^T \mathbf{t} d\Gamma \quad (2.30)$$

Die Auswertung des Integrals für ein Element ergibt eine Gleichung mit n Unbekannten. Nach Wichtung mit allen n Ansatzfunktionen ergibt sich die evtl. noch singuläre Elementsteifigkeitsmatrix \mathbf{k} sowie die rechte Seite \mathbf{f} .

$$\mathbf{k}\mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (2.31)$$

Ein Eintrag in der Matrix an der Stelle (i, j) ergibt sich dabei durch

$$k_{ij} = \int_{\Omega} (\mathbf{L}\mathbf{N}_i)^T \mathbf{C} (\mathbf{L}\mathbf{N}_j) d\Omega \quad (2.32)$$

Nach Berechnung der einzelnen Elementsteifigkeitsmatrizen müssen diese noch zu der Gesamtsteifigkeitsmatrix zusammengefügt werden - ebenso wie der Lastvektor. Dieser Schritt erfolgt über die Nummerierung der einzelnen Funktionen und bedarf je nach Version (h - oder p -Version) der Verwaltung der Ansatzfunktionen durch Zuweisung zu geometrischen Elementen, d.h. zu Knoten (h - p -Version), Kanten, Flächen und Volumina (p -Version).

Das Gesamtgleichungssystem liest sich analog zu Glg. 2.31:

$$\mathbf{K}\mathbf{U} = \mathbf{F} \quad (2.33)$$

Die Gesamtsteifigkeitsmatrix \mathbf{K} ist im Fall linearer Elastostatik und isotropem Materialverhalten symmetrisch und positiv semidefinit, d.h. sie besitzt nur nicht negative Eigenwerte. Zwei Eigenschaften, die hinsichtlich Speicherbedarf und Gleichungslösung von großer Bedeutung sind.

Randbedingungen werden im FE-Code i.d.R. einfach über ein Penaltyverfahren implementiert, um somit algorithmisch gesehen erst relativ spät den geforderten homogenen Ansatzraum H_0^1 und die Erfüllung der Verschiebungsrandbedingungen zu garantieren. Nach dem Einbau der Randbedingungen ist die Gesamtsteifigkeitsmatrix \mathbf{K} positiv definit.³

³Dies gilt für den Fall, dass Starrkörperverschiebungen ausgeschlossen werden.

2.3 Konvergenzraten

Bei der Analyse eines Problems mit Hilfe eines computergestützten Verfahrens stellt sich nach Erhalt des Ergebnisses dem Ingenieur zwangsläufig die Frage nach der Güte der Approximation. Die kritischen Größen, z.B. Verschiebungen, Dehnungen, Spannungen, etc. variieren dabei entsprechend den spezifischen Anforderungen der Aufgabenstellung. Um den Diskretisierungsfehler zu verringern, können dabei Konvergenzuntersuchungen als unterstützendes Hilfsmittel dienen, um vertrauenswürdige Ergebnisse zu erhalten. Sie unterteilen sich in *a priori* Schätzungen, die ohne Kenntnis der Näherungslösung \mathbf{u}_{Fe} untersuchen, wie sich die Ergebnisse, bzw. deren Fehler bestmöglich verbessern, bzw. verringern lassen, und *a posteriori* Untersuchungen, die die erhaltene Näherungslösung verwenden, um verbesserte Ergebnisse zu erhalten, indem man die nachläufige Fehlerschätzung mit adaptiven Verfahren koppelt.

Bei der Modifikation der Berechnung lassen sich entsprechend dem Diskretisierungsprinzip zwei Parameter verändern:

- Die räumliche Diskretisierung - also das Netz
- Die Diskretisierung des Element-Funktionenraumes - hier also einer Veränderung des polynomiellen Ansatzgrades

Des Weiteren stellt sich die Frage nach dem Maß, das den Fehler beschreiben soll. Problem-spezifische Beschränkungen, bspw. die Spannung in einem bestimmten Punkt, wie zu Beginn angesprochen, sind für theoretische Untersuchungen hierzu nicht geeignet. Um allgemeingültige Aussagen treffen zu können, verwendet man bei methodischen Untersuchungen i.A. die Energienorm $\|\bullet\|_{E(\Omega)}$ des Fehlers $\mathbf{e} = \mathbf{u}_{Ex} - \mathbf{u}_{Fe}$.

$$\|\mathbf{e}\|_{E(\Omega)} = \sqrt{\frac{1}{2}\mathcal{B}(\mathbf{e}, \mathbf{e})} \quad (2.34)$$

Daneben bedarf es noch einer Größe, die die Diskretisierungsparameter gleichermaßen beschreiben kann. Dies ist z.B. die Anzahl der Unbekannten N . Von eigentlichem Interesse ist jedoch der Zeitaufwand, d.h. die Dauer der Berechnung, im Verhältnis zur interessierenden (kritischen) Größe. Diese ist jedoch schwierig abstrakten und allgemeingültigen Überlegungen zugänglich, da sie von vielen verschiedenen Faktoren abhängt. Zu nennen sind hier geometrische Algorithmen, numerische Integration, Gleichungslösung, Speicherverwaltung, Prozessor, Computersprache, Compiler, etc. Es wird gemeinhin jedoch davon ausgegangen, dass Verfahren, die in der Relation Fehler zu Freiheitsgraden gut abschneiden, ebenfalls gute Aussichten auf eine schnell ablaufende Implementierung besitzen.

2.3.1 Eigenschaften der exakten Lösung

Es ist zunächst sinnvoll die Eigenschaften der exakten Lösung \mathbf{u}_{Ex} zu charakterisieren, da das Konvergenzverhalten in der Energienorm bzw. die Verbesserung dessen maßgeblich davon abhängt. Entscheidendes Merkmal hierbei sind auftretende Singularitäten der gesuchten Funktion, da sich an diesen Stellen die Approximation durch Polynome am schwierigsten gestaltet. Im Bereich der Strukturmechanik unterscheidet man daher nach SZABÓ [120] drei Funktionstypen:

- Typ A - Analytische Funktionen:
Diese besitzen keine Singularitäten. Per Definition lassen sich analytische Funktionen in jedem Punkt durch eine Taylorreihenentwicklung beliebig genau darstellen. Sie werden im Folgenden als glatt bezeichnet.
- Typ B - Teilweise analytische Funktionen:
Diese sind analytisch auf dem gesamten Gebiet Ω bis auf eine endliche Anzahl Punkte und Kanten. An diesen Stellen treten bspw. durch wechselnde Randbedingungen oder einspringende Ecken Singularitäten auf.
- Typ C - Funktionen, die weder in Kategorie A noch B gehören.

Die analytische Lösung in der Umgebung von singulären Punkten lässt sich oft als unendliche Reihe schreiben. Für zweidimensionale Probleme gilt dort:

$$\mathbf{u}_{Ex} = \sum_{i=1}^{\infty} A_i r^{\lambda_i} F_i(\theta), \quad r < \rho, \quad \lambda_{min} > 0 \quad (2.35)$$

Hierin sind r, θ Polarkoordinaten mit dem Ursprung im singulären Punkt, ρ der Konvergenzradius, A_i Konstanten, F_i analytische Funktionen in Abhängigkeit vom Polarwinkel θ , und λ_i Exponenten, wobei der kleinste Wert λ_{min} die Glattheit des Problems charakterisiert. Je nach Problemstellung (Strukturmechanik 2D/3D, Wärmeleitungsgleichung, etc.) sind die Exponenten λ_i generell durch die Forderung der endlichen Energie des Systems nach unten beschränkt, d.h. zu kleine Exponenten würden Lösungen mit unendlich viel Energie generieren, eine nichtphysikalische Eigenschaft. Anzumerken ist an dieser Stelle, dass für die betrachteten Problemstellungen durch den Energieterm $\tilde{\sigma} \epsilon$ (Glg. 2.13), die *Ableitungen* der Verschiebungsapproximation \mathbf{u}_{Fe} im Quadrat eingehen. Man erkennt an dieser Stelle, warum die exakte Lösung im H^1 liegen muss, denn dieser ist durch die Endlichkeit des Integrals des 'Ableitungsquadrats' der Verschiebungen definiert.

2.3.2 A priori Fehlerschätzung

Im Folgenden sind verschiedene Konvergenzeigenschaften über den funktionalen Zusammenhang zwischen der Energienorm des Fehlers $|\bullet|_{E(\Omega)}$ und den Freiheitsgraden N zu charakterisieren. Es gibt nach SZABÓ [120] zwei Typen:

- Algebraische Konvergenz
- Exponentielle Konvergenz

Algebraische Konvergenz zeichnet sich durch die folgende Fehlerabschätzung aus:

$$\|\mathbf{e}\|_E \leq \frac{k}{N^\beta}, \quad \text{bzw.} \quad \log \|\mathbf{e}\|_E \leq k^* - \beta \log N \quad (2.36)$$

Und für exponentielle Konvergenz gilt:

$$\|\mathbf{e}\|_E \leq \frac{k}{\exp(\gamma N^\theta)}, \quad \text{bzw.} \quad \log \|\mathbf{e}\|_E \leq k^* - \gamma N^\theta \quad (2.37)$$

Zur besseren grafischen Unterscheidung der beiden Typen nimmt man i.d.R. statt der direkten Beziehung den Logarithmus davon, da sich in einer log-log Darstellung algebraische Konvergenz darin als Gerade mit der Steigung $-\beta$ identifizieren lässt und exponentielle Konvergenz durch eine nach unten abfallende Kurve gekennzeichnet ist. Neben reiner algebraischer und reiner exponentieller Konvergenz gibt es noch eine Zwischenform, die so genannte präasymptotisch exponentielle asymptotisch algebraische Konvergenz. Sie zeichnet sich dadurch aus, dass die Berechnung zunächst exponentiell konvergiert, um anschließend in eine Gerade abzufachen, s. Abb. 2.4. In den Tabellen 2.1,2.2 sind die Konvergenzeigenschaften für die h -, p -

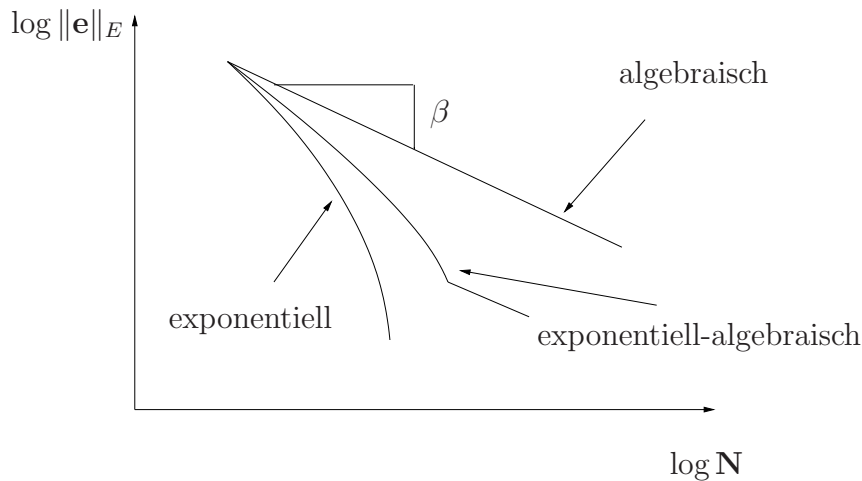


Abbildung 2.4: Konvergenzeigenschaften. Relativer Fehler über Anzahl der Freiheitsgrade

und hp -Version angegeben. In den Tabellen ist $\lambda = \lambda_{min}$ aus Glg. 2.35.

Tabelle 2.1: Asymptotische Konvergenzraten in 2D nach [120]

Kategorie	Version		
	h	p	hp
A	algebraisch $\beta = p/2$	exponentiell $\theta \geq 1/2$	exponentiell $\theta \geq 1/2$
B	algebraisch, Bem. 1 $\beta = \frac{1}{2} \min(p, \lambda)$	algebraisch $\beta = \lambda$	exponentiell $\theta \geq 1/3$
C	algebraisch $\beta > 0$	algebraisch $\beta > 0$	Bem. 2

Tabelle 2.2: Asymptotische Konvergenzraten in 3D nach [120]

Kategorie	Version		
	h	p	hp
A	algebraisch $\beta = p/3$	exponentiell $\theta \geq 1/3$	exponentiell $\theta \geq 1/3$
B	Bem. 3		exponentiell $\theta \geq 1/5$
C	algebraisch $\beta > 0$	algebraisch $\beta > 0$	Bem. 2

Bemerkungen zu den Tabellen 2.1,2.2:

- 1. Es wird uniforme oder quasiuniforme Netzverfeinerung angenommen. Im Fall einer optimalen nicht uniformen Netzverfeinerung gilt $\beta = \frac{1}{2}p$
- 2. In manchen Fällen besteht die Möglichkeit durch eine hp -Verfeinerung eine stärkere Konvergenz als algebraisch zu erhalten.
- 3. In 3D kann die exakte Lösung nicht durch einen einzigen Parameter charakterisiert werden. Es gilt jedoch, dass die Konvergenzrate der p -Version mindestens doppelt so hoch ist wie die der h -Version.
- 4. Diese Konvergenzraten können erreicht werden, wenn alle Singularitäten auf Elementpunkten oder -Kanten liegen.

2.3.3 A posteriori Fehlerschätzung - Extrapolation

Im Gegensatz zu den bisher ausgeführten Überlegungen lassen sich mit a posteriori Fehlerschätzungen Aussagen über die Qualität der Ergebnisse nach einer durchgeführten Finite Elemente Berechnung treffen. Eine Möglichkeit die Energienorm der exakten Lösung besser anzunähern, besteht in der Extrapolation erhaltener FE-Ergebnisse. Unter Annahme algebraischer Konvergenz gilt

$$\|\mathbf{e}\|_E^2 = \|\mathbf{u}_{Ex}\|_E^2 - \|\mathbf{u}_{Fe}\|_E^2 = \frac{k^2}{N^{2\beta}} \quad (2.38)$$

Um die Unbekannten $\|\mathbf{u}_{Ex}\|_E^2$, β und k zu bestimmen wird der Quotient der Energiefehler dreier aufeinanderfolgender Berechnungen in Beziehung gesetzt. Es ergibt sich somit

$$\frac{\|\mathbf{u}_{Ex}\|_E^2 - \|\mathbf{u}_{Fe,p}\|_E^2}{\|\mathbf{u}_{Ex}\|_E^2 - \|\mathbf{u}_{Fe,p-1}\|_E^2} \approx \left(\frac{\|\mathbf{u}_{Ex}\|_E^2 - \|\mathbf{u}_{Fe,p-1}\|_E^2}{\|\mathbf{u}_{Ex}\|_E^2 - \|\mathbf{u}_{Fe,p-2}\|_E^2} \right)^{\left(\frac{\log \frac{N_{p-1}}{N_p}}{\log \frac{N_{p-2}}{N_{p-1}}} \right)} \quad (2.39)$$

Diese Gleichung kann bspw. mit Hilfe eines Newton-Raphson Verfahrens gelöst werden. Nach Erhalt der verbesserten Energienorm lässt sich der Fehler der durchgeführten Berechnung abschätzen.

2.3.4 Verfeinerungsstrategien

Die Tabellen 2.1, 2.2 deuten bereits an, dass eine hp -Verfeinerung die beste Methode ist, da mit ihr in fast allen Fällen exponentielle Konvergenz erreicht wird. Die Implementierung eines hp -Codes ist jedoch sehr komplex, so dass man in der Regel auf die beiden anderen Verfeinerungsstrategien zurückgreifen muss. Im Vorfeld müssen jedoch noch die Begriffe uniforme, quasiuniforme und geometrische Netzverfeinerung definiert werden (s. z.B. SZABÓ [120]). Die Variablen h_{min} und h_{max} kennzeichnen dabei den kleinsten bzw. größten Elementdurchmesser.

- **uniforme Netzverfeinerung:**
In diesem Fall werden alle Elemente gleichermaßen verfeinert (z.B. halbiert).
- **quasiuniforme Netzverfeinerung:**
Hier wird gebietsweise eine größere Verfeinerung durchgeführt. Der Quotient h_{max}/h_{min} bleibt für die Folge von Netzen jedoch endlich. Man verfeinert sozusagen überall, jedoch in einigen Teilbereich stärker.
- **geometrische Netzverfeinerung:**
Hier bleibt das Verhältnis von kleinsten zu größtem Elementdurchmesser für die Folge von Netzen nicht mehr endlich. Das Netz wird z.B. in Richtung einer Singularität um einen konstanten Faktor, i.d.R. 0.15 verfeinert.

Damit können im Folgenden die einzelnen Verfeinerungsstrategien diskutiert werden.

Verfeinerungsstrategien:

- **h -Verfeinerung:**
Bei einer glatten Lösung, d.h. λ ist groß, wird der Fehler vom Polynomgrad bestimmt, $\beta = p/2$ (für den 2D Fall). Für nichtglatte Lösungen, d.h. $\lambda < p$ (im 2D-Fall), bestimmt die Glattheit die Konvergenzrate. Es lassen sich jedoch durch Anwendung adaptiver Strategien optimale Netzfolgen generieren. In diesem Fall kann β unabhängig von der Glattheit der Lösung gemacht werden, ist jedoch immer noch durch den Ansatzgrad durch $p/2$ beschränkt. Im Falle glatter Lösungen werden durch Adaptivität quasiuniforme Netze generiert. Ist die exakte Lösung nicht glatt, geht der Quotient der Durchmesser h_{max}/h_{min} bei einer optimalen Verfeinerung gegen unendlich. Eine weitere Besonderheit der h -Verfeinerung ist, dass mit feiner werdendem Netz ebenfalls die Güte der Geometrieapproximation steigt, anders als bei der p -Version, bei der die Geometrie (streng genommen) immer exakt und unabhängig von der Netzdichte durch das Netz dargestellt werden muss.
- **p -Verfeinerung:**
Für glatte Lösungen konvergiert die reine p -Version sehr schnell. Die optimale exponentielle Konvergenzrate wird in diesem Fall durch eine minimale Anzahl an Elementen erreicht. Bei nichtglatten Lösungen stellt sich bestenfalls eine präasymptotisch exponentielle asymptotisch algebraische Konvergenz ein, da evtl. zu Beginn der Berechnung der Fehler im glatten Teil des Gebiets bestimmt, im späteren Verlauf aber im Bereich der Singularitäten im Verhältnis immer größer wird.

- *hp*-Verfeinerung:

Eine manuelle *hp*-Strategie ist nur bei Kenntnis der singulären Stellen möglich. In diesem Fall ist eine geometrische Netzverfeinerung sinnvoll. Ist das nicht der Fall, so müssen adaptive Strategien herangezogen werden, die eine optimale Polynomverteilung und Netzverdichtung durchführen. Es gilt die Regel: Je näher man an der singulären Stelle ist, desto feiner muss das Netz sein und desto geringer der Ansatzgrad. In glatten Bereichen gilt Gegenteiliges. Neben der Suche nach geeigneten Fehlerschätzern, die Singularitäten und glatte Bereiche ausmachen können, ist vor allem die Implementierung schwierig, da die einzelnen Programmpakete FE-Löser, Netzgenerator zur Verfeinerung und Geometriekern zur exakten Beschreibung der Struktur gekoppelt werden müssen.

Kapitel 3

Ansatzfunktionen für Tetraederelemente hoher Ordnung

Nach der kurzen allgemeinen Einführung in die prinzipielle Vorgehensweise der Finite Elemente Methode werden im folgenden Kapitel Ansatzfunktionen hoher Ordnung für Tetraederelemente diskutiert sowie verschiedene Methoden zu deren Konstruktion vorgestellt. Die prinzipiellen Überlegungen sind dabei gleich denen der Konstruktion von Ansatzfunktionen für Hexaeder [120], [33]. Es zeigt sich jedoch, dass das für Hexaeder verwendete Prinzip der Tensorproduktstruktur eindimensionaler Ansatzfunktionen für Tetraeder nicht angewandt werden kann. Der Grund hierfür liegt in den in der p -FEM üblichen topologischen Zwangsbedingungen des Elementes, d.h. die Unterteilung in verschiedene Moden: Knoten-, Kanten-, Flächen- und innere Moden (s. Kap. 3.1.4)¹

3.1 Anforderungen

Die Konstruktion der Ansatzfunktionen unterliegt in erster Linie numerischen und programmiertechnischen Anforderungen: Ersteres hinsichtlich Rechenzeit, letzteres in erster Linie hinsichtlich der Pflébarkeit des Codes. Es stellt sich heraus, dass bei der Gestaltung von Ansatzfunktionen hoher Ordnung auf die direkte Interpretationsfähigkeit des berechneten Ergebnisvektors - z.B. als Verschiebung konkreter Punkte wie bei der h -FEM üblich - verzichtet werden muss. Dies ist eine unmittelbare Folge von hierarchischen statt nodalen Ansatzfunktionen, die in der Regel zur Verbesserung der Konditionszahl der Steifigkeitsmatrizen verwendet werden.

Bekanntermaßen gibt es keinerlei funktionalanalytischen Gründe zwischen äquivalenten Polynombasen zu unterscheiden, da lediglich die aufgespannten Polynomräume (bzw. deren Folgen), nicht aber deren zugrunde liegende Basen, in Konvergenzbeweise einfließen. Aus numerischer Sicht lassen sich jedoch mehr oder weniger erwünschte Eigenschaften der auf dem Masterelement definierten Ansatzfunktionen formulieren. Diese sind

- Orthogonalität
- Hierarchie

¹Ein Kantenmode bspw. ist eine Funktion, die auf einer Kante ungleich null ist und auf allen anderen Kanten verschwindet. Flächenmoden erfüllen dies analog für Flächen.

- Symmetrie
- Topologische Struktur
- Kontinuität
- Struktur der resultierenden Gesamtsteifigkeitsmatrix

Die ersten vier Punkte sollen mit dem Schwerpunkt auf Tetraederelemente im Folgenden ausführlicher diskutiert werden. Kontinuität - hier ist C_0 Stetigkeit gemeint - ist eine Bedingung an den Ansatzraum, deren Umsetzung i.A. auf direktem Weg, d.h. über eine eins zu eins Beziehung benachbarter Ansatzfunktionen erfüllt wird.

Es wird nach Meinung des Autors gemeinhin angenommen, dass ein Erzwingen der Kontinuität über Gleichung 3.3 (s.u.) unvorteilhafte Auswirkungen auf die Struktur des Gesamtgleichungssystems hat, d.h. eine größere Bandweite sowie eine schlechtere Kondition der Gesamtsteifigkeitsmatrix mit sich bringt².

3.1.1 Orthogonalität

Der Begriff Orthogonalität auf einem Gebiet Ω bezüglich der Wichtungsfunktion 1 wird einer Menge Funktionen $\phi_j(\xi), j = 1, \dots, n$ mit der folgenden Eigenschaft zugeordnet:

$$\int_{\Omega} \phi_j(\xi) \phi_i(\xi) d\Omega \quad \begin{cases} \neq 0 & \text{wenn } i = j \\ = 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.1)$$

Die Orthogonalitätsbeziehung 3.1 wird bspw. durch Legendrepolynome im Bereich $x \in [-1; 1]$ erfüllt. In der Strukturmechanik interessiert allerdings oft nicht die Orthogonalität der Ansatzfunktionen, sondern die ihrer Ableitungen, weil diese in die Energieintegrale der Steifigkeitsmatrix eingehen [33], [120]. Betrachtet man bspw. die einem Dehnstab zugrunde liegende Bilinearform

$$\int_{\Omega} EA \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} d\Omega, \quad (3.2)$$

so wird deutlich, dass die Verwendung integrierter Legendrepolynome als Ansatz für u und v Vorteile bietet, da diese nach der Differentiation wieder die Orthogonalitätsbeziehung 3.1 erfüllen.

Man versucht durch die Wahl einer geeigneten Basis ein resultierendes Gleichungssystem mit einer möglichst geringen Anzahl von Nicht-null Einträgen zu erhalten, um einerseits Lösungsalgorithmen wie z.B. iterative Gleichungslöser oder die numerische Integration zu beschleunigen und andererseits generell die Kondition der Steifigkeitsmatrix zu verbessern. Ebenfalls von Bedeutung ist der Einfluss der Dünnbesetztheit des Gleichungssystems auf die Speicherverwaltung, die i.d.R. mit Hilfe entsprechender Listen-Datenstrukturen an Effizienz gewinnt.

²Alle weiteren im Verlauf zitierten Veröffentlichungen schließen diese Möglichkeit bis auf [134] a priori aus.

Verschiedene Autoren beschäftigten sich mit der Verbesserung der Kondition der resultierenden Matrix vor allem anhand des Standardbeispiels für elliptische Differentialgleichungen - der Laplace Gleichung.

So untersuchen in [7] BABUŠKA et al. die Kondition der Steifigkeitsmatrix eines zweidimensionalen Viereckselements hinsichtlich der Kopplung der verschiedenen Moden und deren Auswirkung auf die Anwendung iterativer Gleichungslöser. Ihre Untersuchungen ergeben, dass insbesondere die Kopplung zwischen Kanten- und Flächenmoden die Konditionszahl für das untersuchte Element erhöht, wobei diese als Quotient des maximalen und minimalen (von null verschiedenen) Eigenwertes definiert ist. Zur Lösung des Problems werden über statische Kondensation die inneren Moden bezüglich der Kantenmoden orthogonalisiert. Das Verfahren hat allerdings den Nachteil, dass eine Folge von nicht-hierarchischen Basen entsteht. Sie weisen des Weiteren darauf hin, dass zur Wahl der optimalen Ansatzfunktionen eine geeignete mathematische Theorie bis dato (1989) fehlt.

CARNEVALI et al. zeigen in [19], dass die in [120] angegebenen Ansätze für Tetraeder im Fall linearer Elastostatik mit steigendem Ansatzgrad p zu nahezu exponentiell wachsenden Konditionszahlen der Steifigkeitsmatrix führen. Das Element wird dabei an drei Knoten fixiert. Die Dünnbesetztheit der Matrix nimmt ebenfalls mit steigendem p stark ab. Die Autoren schlagen ebenfalls unter dem Aspekt maximaler Orthogonalität eine verbesserte Ansatzbasis in Baryzentrischen Koordinaten vor, die mit Hilfe eines Gram-Schmidt Orthogonalisierungsverfahrens berechnet wird. Bezüglich Dünnbesetztheit und Konditionszahl zeigen die in dieser Arbeit vorgestellten Ansatzbasen vergleichbare Ergebnisse.

Ebenfalls unter Verwendung des Gram-Schmidt Algorithmus werden von mehreren Autoren Orthogonalisierungen für Tetraeder und Dreiecke durchgeführt, so z.B. von ADJERID in [1] und ZITKA in [133] zur Generierung bezüglich des Laplace Operators orthogonaler innerer (Bubble-) Moden.

Das Prinzip der Anwendung orthogonaler Formfunktionen (bezüglich ihrer Ableitungen) macht Sinn, ist jedoch nicht das einzige Kriterium, wie die folgende Argumentation zeigen soll: Für ein beliebiges Problem $L(u) = 0$ mit einem Differentialoperator $L(u) = \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^l c_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_{ij}}$ ist nach Durchführung einer Gram-Schmidt Orthogonalisierung eine rein diagonale Elementsteifigkeitsmatrix möglich, wenn man (im eindimensionalen Fall) die topologische Unterteilung in Knoten- und innere Moden vernachlässigt. Dies ist aber aufgrund der Kontinuität des Verschiebungsfeldes dennoch keine geschickte Wahl, da sich die Lösung an der Elementgrenze als Linearkombination aller Ansatzfunktionen darstellt³. D.h. die Kontinuität des Verschiebungsfeldes in einer Raumdimension verlangt dort

$$u_L(+1) = \sum_i u_i^L N_i(+1) = \sum_i u_i^R N_i(-1) = u_R(-1). \quad (3.3)$$

Dabei kennzeichnen die Indizes L, R das linke, bzw. rechte Element. Gleichung 3.3 ergibt somit eine Bedingung, durch die künstlich die eins zu eins Kontinuität zerstört wird, was eine wesentlich größere Anzahl globaler Freiheitsgrade zur Folge hätte. Unter der eins zu eins Kontinuität

³Hierbei wird angenommen, dass nicht alle Ansatzfunktionen an den Elementgrenzen verschwinden.

wird hierbei verstanden, dass alle Ansatzfunktionen, die an den Elementgrenzen benachbarter Elemente nicht verschwinden, auf diesen Nachbarelementen (als ungleich null) definiert sind, also dort ihren Träger haben. Im eindimensionalen Fall sind dies die linearen 'Hutfunktionen'. Es wären im oben genannten Fall *alle* Ansatzfunktionen benachbarter Elemente beteiligt, wodurch die Gesamtsteifigkeitsmatrix zwangsläufig vergrößert und die Dünnbesetztheit der Matrix zerstört wird.

Im Detail:

Gesucht sei die Lösung der 1D-Laplace Gleichung mit beidseitigen null-Randbedingungen

$$\Delta u = u'' = f, \quad (3.4)$$

die auf folgende schwache Form führt

$$\int_a^b \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} dx = \int_a^b f v dx \quad (3.5)$$

Die FE-Diskretisierung (Bubnov Galerkin Verfahren) bestehe aus 2 Elementen. Die Ansatzfunktionen ϕ_n auf den Elementen sollen integrierte Legendrepolynome sein, für die gilt [120]:

$$\int_{\Omega} \frac{d\phi_i(\xi)}{d\xi} \frac{d\phi_j(\xi)}{d\xi} d\xi \quad \begin{cases} \neq 0 & \text{wenn } i = j \\ = 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.6)$$

Die *Elementsteifigkeitsmatrizen* sind somit Diagonalmatrizen. (Anm.: Die Erfüllung nicht homogener Randbedingungen kann mit Hilfe der klassischen Knotenmoden erfolgen). Das Verfahren verlangt C_0 Stetigkeit, wodurch Gleichung 3.3 erfüllt werden muss. Das Gesamtgleichungssystem besitzt nun eine größere Bandweite, da in dieser Gleichung alle Ansatzfunktionen vorkommen, die an den Elementrändern nicht verschwinden. Des Weiteren hat sich die Anzahl der globalen Ansatzfunktionen um eins erhöht, d.h. um die Anzahl der internen Randmoden. Im eindimensionalen Fall sind dies lediglich die Knotenmoden, im Mehrdimensionalen sind Kanten und/oder Flächenmoden beteiligt und die Anzahl punktwiser C_0 -Kontinuitätsgleichungen steigt um die Anzahl der Freiheitsgrade, für die eine eins zu eins Kopplung vorgenommen würde.

Es finden sich in der Literatur jedoch auch symmetrische Polynombasen, die die intuitive eins zu eins Kontinuität an Elementgrenzen vernachlässigen und unter Verwendung von Kopplungsmatrizen C_0 Stetigkeit garantieren, so z.B. von ZUMBUSCH in [134] vorgeschlagen. Ein abschließendes Urteil über Verfahren, die diese direkte Kontinuität vernachlässigen kann an dieser Stelle nicht gefällt werden.

3.1.2 Hierarchie

Wie bereits erwähnt versucht man im Unterschied zu der h -Version der FEM, bei der durch Netzverfeinerung Konvergenz erreicht wird, bei der p -Version durch das Prinzip der Erhöhung

des Grades des polynomiellen Ansatzraums die numerische Lösung zu verbessern. Unter Hierarchie der dabei verwendeten Polynomräume versteht man dabei deren folgende Eigenschaft:

$$\Phi_{j-1}(\xi) \subset \Phi_j(\xi) \quad (3.7)$$

wobei $\Phi_{j-1}(\xi)$ und $\Phi_j(\xi)$ die Mengen der Ansatzfunktionen zweier aufeinander folgender Polynomräume sind. Eine Erhöhung des Ansatzraumes erlaubt somit die Wiederverwendung zuvor verwendeter Steifigkeitsmatrizen, siehe z.B. [121].

Die in der Literatur zu findenden hierarchischen Polynombasen für Tetraeder sind unsymmetrisch (s.u.). Wird der den topologischen Zwangsbedingungen angepasste Ansatzraum (trunk space - s. Kap. 3.1.4) jedoch vergrößert, so lassen sich Symmetrie und Hierarchie nach ZUMBUSCH vereinbaren, siehe [134].

Lagrange Basen (s. Kap. 3.2.1), d.h. Basen der Ordnung n , die auf $(n + 1)$ Stützstellen die δ_{ij} -Bedingung erfüllen, sind nicht hierarchisch, da sich selbst unter Beibehaltung der zuvor verwendeten Stützstellen die Ordnung der zugehörigen Funktionen ändert.

Das Prinzip der Hierarchie bietet weitere Vorteile hinsichtlich Adaptivität, Fehlerschätzung [111] und Gleichungslösung [120].

3.1.3 Symmetrie

Unter Symmetrie wird hier Rotationssymmetrie verstanden, d.h. die globalen Ansatzfunktionen bleiben bei einer Rotation des Tetraeders bis auf den Faktor -1 gleich (schiefsymmetrisch). Symmetrie der Kanten- und Flächenmoden ist in erster Linie für die Implementierung von Bedeutung, da die Sicherstellung der C_0 Stetigkeit auf direktem Weg leichter zu gewährleisten ist. Andernfalls sind gewisse Bedingungen an die Lage der Koordinatensysteme benachbarter Elemente zu stellen. Symmetrische Ansatzfunktionen sind soweit dem Autor bekannt (ursprünglich) immer in baryzentrischen Koordinaten formuliert, aufgrund deren ebenfalls inhärenten Rotationssymmetrie.

In Abb. 3.1 sind die Symmetrieachsen durch den Schwerpunkt S eines Dreiecks dargestellt. Eine Veränderung der Lage des globalen Koordinatensystems (Rotation) dürfte den Plot der darauf definierten Flächenmodes nicht verändern. In Abb. 3.2 wird eine schräg liegende Fläche durch die Punkte $P2, P3, P4$ definiert. Die Projektion der Ansatzfunktionen auf eine achsenparallele Ebene muss im Falle von vorhandener Rotationssymmetrie immer gleich aussehen, egal, ob man von 'rechts' auf die ξ_2, ξ_3 -Ebene, von 'oben' auf die ξ_1, ξ_2 -Ebene oder von 'hinten' auf die ξ_1, ξ_3 -Ebene blickt.

Die in dieser Arbeit vorgestellten Ansatzfunktionen (s. Kap 3.3) sind nicht symmetrisch und verlangen daher nach einer Restriktion bezüglich benachbarter globaler Elementkoordinatensysteme, da auf eine aufwändige Umrechnung verschiedener Basen mit Hilfe von Kopplungsmatrizen auf den Flächen und Kanten verzichtet werden soll. Analog zur Argumentation bezüglich orthogonaler Ansatzfunktionen und Gesamtgleichungssystem würde in diesem Fall wieder Gleichung 3.3 zur Anwendung kommen.

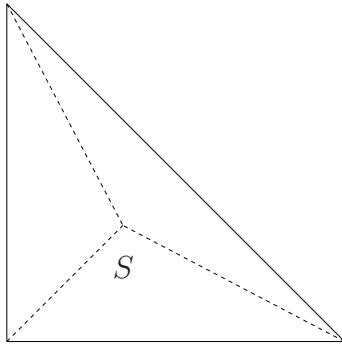


Abbildung 3.1: Dreieck

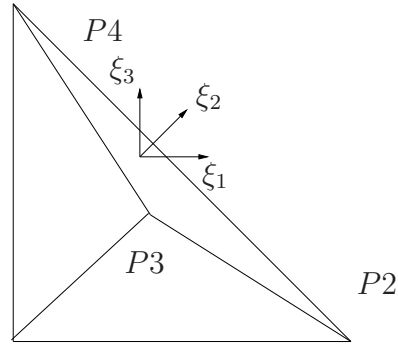


Abbildung 3.2: Tetraeder

Des Weiteren haben unsymmetrische Ansatzfunktionen die Eigenschaft, dass bei der Verwendung gekrümmter Elemente die Ergebnisse stärker als ohnehin von der Geometriebeschreibung abhängen, da man unendlich viele Möglichkeiten hat die Elementgeometrie darzustellen (s. Kap 4). Bekannt ist dieser Verzerrungseffekt durch das so genannte *Quarter Point Element*, das bei der Bruchmechanik zum Einsatz kommt.

3.1.4 Topologische Struktur

Die Struktur der in dieser Arbeit vorgestellten hierarchischen Ansatzbasen auf einem Tetraederelement gliedert sich aus den bereits erläuterten Umständen in Knoten-, Kanten-, Flächen-, und innere Moden. Ein *modale* Basis besitzt die folgenden Eigenschaften (Definition):

- Knotenmoden besitzen die Eigenschaft, dass sie an einem Knoten 1 und an den anderen drei Knoten und der durch diese definierten Ebene null sind. Sie entsprechen den linearen Ansätzen bei der h -Version.
- Kantenmoden sind an einer Kante \mathbf{E} ungleich null und an allen anderen Kanten sowie deren Flächen - soweit diese nicht an Kante \mathbf{E} stoßen null.
- Flächenmoden sind auf einer Fläche \mathbf{F} ungleich null und an allen anderen Flächen sowie allen Kanten null.
- Innere Moden sind im Inneren ungleich null und auf allen Knoten/Kanten/Flächen null.

Die topologische Struktur der Ansatzbasis beschränkt den Ansatzraum auf den so genannten *trunk space* S_{TS}^n (s.Abb. 3.3), der durch die folgende linear unabhängige Basis definiert ist:

$$S_{TS}^n : \quad \xi^i \eta^j \zeta^k \quad \text{mit} \quad 0 \leq i + j + k \leq n \quad (3.8)$$

Dies gilt jedoch nur dann, wenn auf die Zuweisung individueller Ansätze für Kanten, Flächen und das Innere verzichtet wird. D.h. n ist der maximale Ansatzgrad wodurch im äußersten Fall der trunk space aufgespannt werden kann.

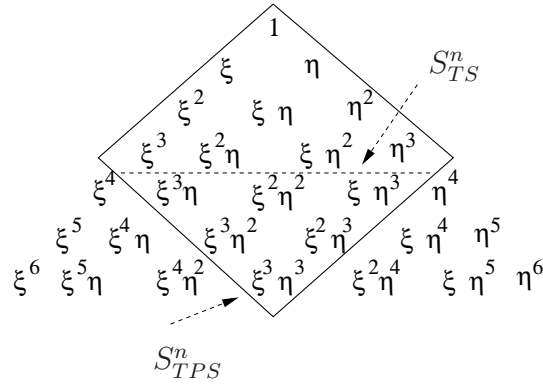


Abbildung 3.3: Pascal'sches Dreieck in 2D

Im Gegensatz dazu lassen sich auf Hexaedern Ansatzfunktionen definieren, die den *tensor product space* S_{TPS}^n exakt aufspannen.

$$S_{TPS}^n : \xi^i \eta^j \zeta^k \quad \text{mit} \quad 0 \leq i, j, k \leq n \quad (3.9)$$

Die Anzahl der auf den Knoten, Kanten, Flächen und dem Innern definierten Ansatzbasen gliedert sich für den trunk space der Ordnung p wie folgt:

$$\text{Knoten:} \quad 4 \quad (3.10)$$

$$\text{Kanten:} \quad 6(p-1) \quad (3.11)$$

$$\text{Flächen:} \quad 2(p-1)(p-2) \quad (3.12)$$

$$\text{Innere Moden:} \quad 1/6(p-1)(p-2)(p-3) \quad (3.13)$$

Es gibt somit insgesamt

$$n = \frac{(p+1)(p+2)(p+3)}{6} \quad (3.14)$$

Moden.

3.2 Konstruktion

Im Gegensatz zur Definition mehrdimensionaler Ansatzräume auf Vierecken oder Hexaedern, die sich als Tensorprodukt eindimensionaler Basen definieren lassen, gibt es für Tetraeder mehrere (teilweise recht trickreiche) Varianten, eine modale Basis zu erstellen.

3.2.1 Lagrange Basis

Bei Lagrange Basen handelt es sich wie in Kap. 3.1.2 bereits angesprochen nicht um hierarchische, sondern um *nodale* Basen. Sie unterscheiden sich durch die Wahl der Stützstellen $\underline{x}_i = (\xi_i, \eta_i, \zeta_i)$, die die Ansatzfunktionen ϕ_i definieren. Es gilt:

$$\phi_i(\underline{x}_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{wenn } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.15)$$

Die Wahl der Knoten bestimmt die Eigenschaften der Funktionen, die je nach Anwendungsbereich verschieden ausfallen können. Man findet in der Literatur verschiedene Stützstellenmengen besonders geeignet für Massenmatrix, Steifigkeitsmatrix und Geometrie. In der Strukturmechanik ist das quadratische zehn Knoten Element ihr bekanntester Vertreter. Des Weiteren finden verschiedene symmetrisch verteilte Integrationspunkte als Stützstellen Verwendung. Die Konstruktion der Lagrange Basis auf dem Tetraeder erfolgt über die Erstellung einer generalisierten Vandermonde Matrix (s. Kap. 4.2.4) und deren Invertierung. Auch hier ist eine Konstruktion wie auf dem Hexaeder über ein Tensorprodukt eindimensionaler Funktionen nicht möglich, da die Stützstellen i.d.R. nicht auf einem Raster liegen. Generell besitzt die Vandermonde Matrix eine schlechte Konditionszahl. Diese Problematik wird bspw. in [11] für Stützstellenmengen auf Dreiecken behandelt.

In dieser Arbeit wurden im Zusammenhang mit der Geometriebeschreibung Lagrange Basen mit Hilfe so genannter BABUŠKA-CHEN Punkte [22] im Computeralgebrasystem *Maple* mit Hilfe der im Rahmen dieser Arbeit vorgestellten modalen Basen mit mäßigem Erfolg erstellt - zumindest was deren Konvertierung in die Programmiersprache *C* angeht. Von ungenügender Genauigkeit stellte sich dabei die geforderte δ_{ij} Eigenschaft heraus. Durch den Verlust der vierten Nachkommastelle, d.h. 0.9998 statt 1, ist die Geometrie bereits zu ungenau. Zur Geometriebeschreibung wurden daher die Ansatzfunktionen direkt verwendet - ähnlich dem bekannten isoparametrischen Konzept, wobei allerdings auch sub- oder superparametrische Ansätze zugelassen werden.

3.2.2 Ansätze in Baryzentrischen Koordinaten

Baryzentrische Koordinaten sind aufgrund ihrer Symmetrieeigenschaften gut für die Erstellung von Ansatzfunktionen auf Dreiecken und Tetraedern geeignet. Zunächst sollen im Folgenden deren Eigenschaften in 2D diskutiert werden. In Abb. 3.4 sind baryzentrische Koordinaten für ein Dreieck dargestellt. Jedem Punkt sind 3 Koordinaten $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ zugeordnet (obwohl es

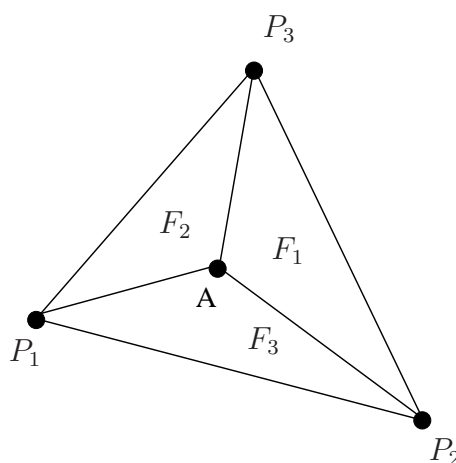


Abbildung 3.4: Baryzentrische Koordinaten eines Dreiecks

sich um eine 2D Geometrie handelt), die sich über die Flächenverhältnisse

$$\lambda_i = \frac{F_i}{F} \quad (3.16)$$

definieren, wobei F_i die Teilfläche des jeweiligen dem Punkt gegenüberliegenden Dreiecks und F die Gesamtfläche ist. Es gilt somit:

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 1 \quad \text{und} \quad \lambda_i = \begin{cases} 1 & \text{wenn } A = P_i \\ 0 & \text{wenn } A = P_j, j \neq i \end{cases} \quad (3.17)$$

Der Punkt A ergibt sich als Linearkombination

$$A = \lambda_1 P_1 + \lambda_2 P_2 + \lambda_3 P_3 \quad (3.18)$$

wobei die Punkte P_i (normalerweise) wiederum über kartesische Koordinaten definiert sind $P = (P_x, P_y)$. Die Umrechnung in kartesische Koordinaten erfolgt über die linearen Knotenmoden des $[-1; +1]^2$ Dreiecks, definiert durch die Punkte $(-1,-1), (1,-1), (-1,1)$.

$$\lambda_i = N_i(\xi_1, \xi_2) \quad \text{mit} \quad N_i(\xi_1, \xi_2) = \begin{cases} 1/2(-\xi_1 - \xi_2) & , \quad i = 1 \\ 1/2(\xi_1 + 1) & , \quad i = 2 \\ 1/2(\xi_2 + 1) & , \quad i = 3 \end{cases} \quad (3.19)$$

Dies läßt sich leicht über die Beziehungen 3.17 und 3.18 erkennen, die für die Knotenmoden analog gelten.

Eine zur Konstruktion einer modalen Basis nützliche Eigenschaft ist, dass eine baryzentrische Koordinate für jeweils eine Kante verschwindet, z.B. $\lambda_1 = 0$ für $A \in (P2, P3)$, da die Fläche $F_1 = 0$. Somit lässt sich der erste Kantenmode für Kante $(P2, P3)$ einfach als Produkt

$$N_{(P2,P3)}^2 = \lambda_2 \lambda_3 \quad \begin{cases} \neq 0 & \text{für } (P2, P3) \\ = 0 & \text{für } (P1, P2), (P3, P1) \end{cases} \quad (3.20)$$

schreiben, wodurch das Konstruktionsprinzip deutlich wird. Die Konstruktion der verschiedenen Kanten, Flächen und innere Moden in 3D erfolgt durch Multiplikation mit diesen Funktionen, wodurch die topologischen Bedingungen, die eine modale Basis definieren (s.o), automatisch erfüllt werden. Diese sind in der Literatur in kartesischer Formulierung auch unter dem Namen *blending term* zu finden [30], [114]. Von Vorteil ist vor allem die leichte und direkte Gewährleistung der C_0 Stetigkeit der Funktionen, da z.B. $\lambda_1 \lambda_2$ auf $(P1, P2)$ offensichtlich genauso aussieht wie $\lambda_2 \lambda_3$ auf $(P2, P3)$ (Glg. 3.20).

Die Formulierung für Tetraeder gestaltet sich analog. Hierbei werden durch einen Punkt A statt Flächen Volumina definiert.

Polynombasen, die in baryzentrischen Koordinaten definiert sind, werden z.B. von SZABÓ und ZUMBUSCH verwendet und sind in [120], [134] zu finden.

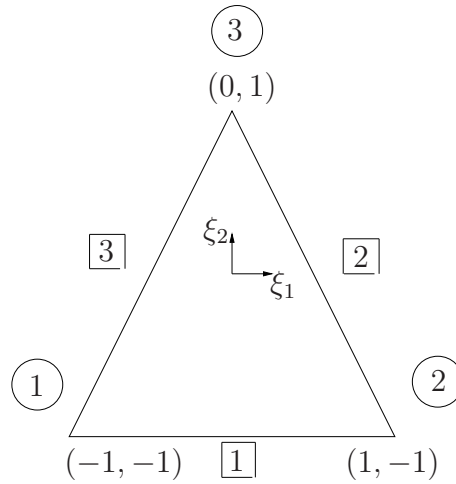


Abbildung 3.5: Schöberl, Lokales Referenzelement

3.2.3 Ansätze nach Schöberl

SCHÖBERL stellt in [110] eine Konstruktion einer modalen Basis in kartesischen Koordinaten für Dreiecke auf direktem Weg vor. In Abb. 3.5 ist das verwendete Referenzdreieck dargestellt. Die implizite und explizite Beschreibung der Kanten ist wie folgt:

$$\text{Kante 1: } \quad \xi_2 + 1 = 0 \quad \text{oder} \quad \xi_2 = -1 \quad (3.21)$$

$$\text{Kante 2: } \quad \xi_2 + 2\xi_1 - 1 = 0 \quad \text{oder} \quad 2\xi_1 = 1 - \xi_2 \quad (3.22)$$

$$\text{Kante 3: } \quad \xi_2 - 2\xi_1 - 1 = 0 \quad \text{oder} \quad 2\xi_1 = - (1 - \xi_2) \quad (3.23)$$

Seine Ansatzfunktionen basieren auf integrierten Jacobipolynomen $\hat{p}_n^{\alpha,\beta}$ mit $\beta = 0$. Die zugehörigen Jacobipolynome sind wie folgt definiert:

$$p_n^\alpha = \frac{1}{2^n n! (1-x)^\alpha} \frac{d^n}{dx^n} ((1-x)^\alpha (x^2-1)^n), \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (3.24)$$

Anm.: Mit dem Wichtungsfaktor $\alpha = 0$ ergeben sich die Legendrepolynome.

Die untere Integrationsgrenze der integrierten Polynome ist -1 .

$$\hat{p}_n^\alpha(x) = \int_{-1}^x p_{n-1}^\alpha(y) dy \quad n \geq 1 \quad p_0^\alpha(x) = 1 \quad (3.25)$$

Die Funktionen $\hat{p}_n^\alpha(x)$ sind in Tabelle 3.1 und Abb. 3.6, 3.7 für $\alpha = 0, 1$ bis zur Ordnung 4 angegeben.

Von Bedeutung für die Konstruktion ist die folgende Eigenschaft der integrierten Polynome

$$\hat{p}_n^\alpha(-1) = 0 \quad \text{für} \quad n \geq 1 \quad (3.26)$$

$$\hat{p}_n^0(+1) = 0 \quad \text{für} \quad n \geq 2 \quad (3.27)$$

Ordnung	$\alpha = 0$	$\alpha = 1$
1 :	$\xi + 1$	$\xi + 1$
2 :	$\frac{1}{2}(\xi^2 - 1)$	$\frac{1}{4}(3\xi^2 + 2\xi - 1)$
3 :	$\frac{1}{2}(\xi^3 - \xi)$	$\frac{1}{6}(5\xi^3 + 3\xi^2 - 3\xi - 1)$
4 :	$\frac{1}{8}(5\xi^4 - 6\xi^2 + 1)$	$\frac{1}{32}(35\xi^4 + 20\xi^3 - 30\xi^2 - 12\xi + 3)$

Tabelle 3.1: Integrierte Jacobipolynome für $\alpha = 0, 1$ und $\beta = 0$

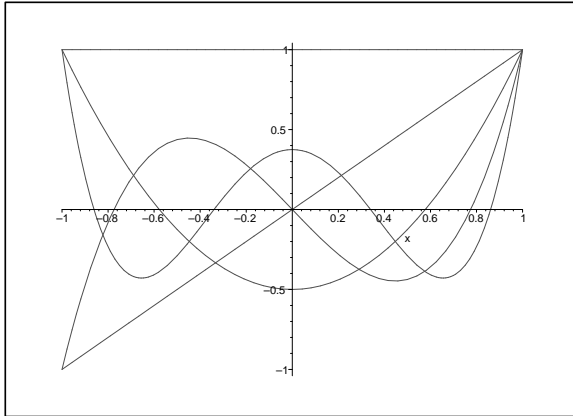


Abbildung 3.6: Jacobipolynome $\alpha = 0$

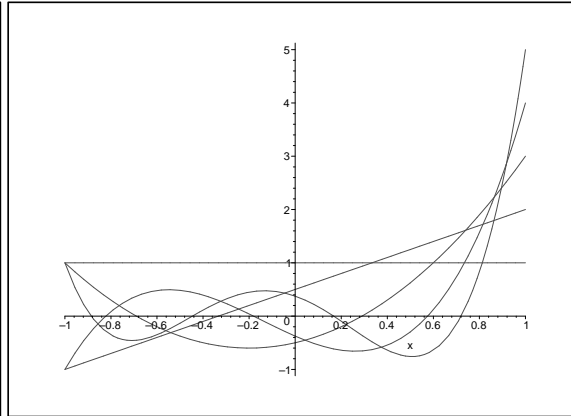


Abbildung 3.7: Jacobipolynome $\alpha = 1$

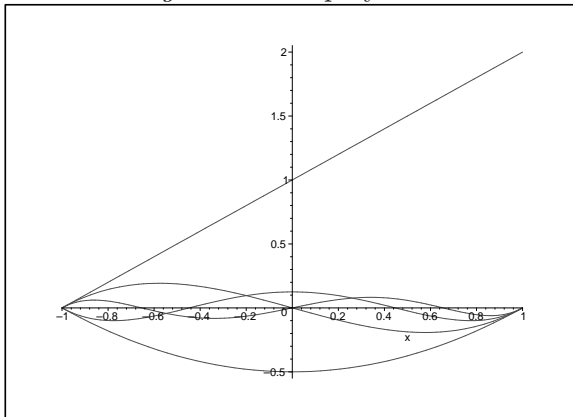


Abbildung 3.8: Int. Jacobipolynome $\alpha = 0$

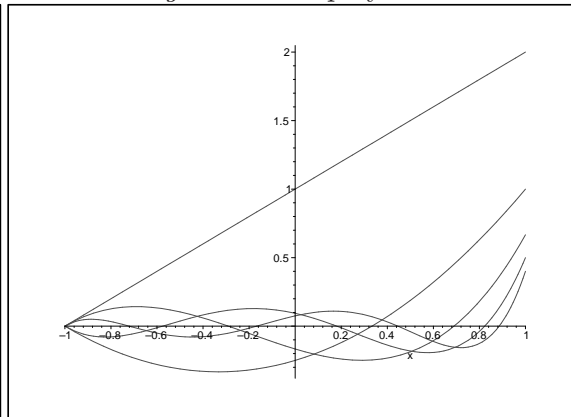


Abbildung 3.9: Int. Jacobipolynome $\alpha = 1$

Die Beziehung 3.26 ergibt sich aus der unteren Integrationsgrenze. Gleichung 3.27 gilt nur für integrierte Legendrepolynome ($\alpha = 0$). Die Gleichungen 3.26, 3.27 zeigen, dass bei einer Funktion $f = p_n^\alpha p_n^0$ die Terme $(1+x)$ 3.26 und $(1-x)$ 3.27 ausfaktoriert werden können (nullstelleneigenschaft von Polynomen), d.h. durch diese beiden zu dividieren resultiert in einem Polynom der Ordnung $(n-2)$.

Um nun eine Funktion zu generieren, die für Kante 2 und 3 verschwindet, wird ein Argument x für $\hat{p}_n^0(x)$ derart konstruiert, dass es für die beiden Kanten zu $+1$ bzw. -1 wird. Dies wird erfüllt durch

$$x = \frac{2\xi_1}{1 - \xi_2} = \begin{cases} \xi_1 & \text{für Kante 1} \\ \pm 1 & \text{für Kante 2 und 3} \end{cases} \quad (3.28)$$

(Einsetzen der Gleichungen 3.21 - 3.23.)

Das bedeutet, dass das Polynom für Kante 1

$$\hat{p}_n^0(\xi^*) = \hat{p}_n^0\left(\frac{2\xi_1}{1-\xi_2}\right)$$

auf Kante 1 ein integriertes Legendrepolynom der Ordnung n ist und auf Kante 2 und 3 zu null wird. Betrachtet man Tabelle 3.1 erkennt man, dass die Funktion im Dreieck durch den Bruch des Argumentes rational ist. Dieses Problem wird gelöst durch Multiplikation mit

$$\left(\frac{1-\xi_2}{2}\right)^n \quad (= 1 \quad \text{für Kante 1}).$$

Somit ergeben sich die Moden auf der ersten Kante zu:

$$\psi_{e1}^i(\xi_1, \xi_2) = \hat{p}_i^0\left(\frac{2\xi_1}{1-\xi_2}\right) \left(\frac{1-\xi_2}{2}\right)^i; \quad i = 2, \dots, n \quad (3.29)$$

Der zweite Kantenmode wird ähnlich konstruiert. Zunächst wird als Basisterm ein integriertes Legendrepolynom in ξ_2 Richtung gewählt. Für Kante 1 wird die Funktion dort zu null ($\xi_2 = -1$). Um das Verschwinden der Funktion auf der gegenüberliegenden Kante 3 zu gewährleisten, wird mit

$$1 + 2\xi_1 - \xi_2 \quad (= 0 \quad \text{auf Kante 3})$$

multipliziert. Die resultierende Funktion hat daher die Ordnung $n+1$ statt n , weswegen noch durch $(1-\xi_2)$ dividiert wird. Die Moden für Kante 2 lauten somit

$$\psi_{e2}^i(\xi_1, \xi_2) = \hat{p}_i^0(\xi_2) \left(\frac{1+2\xi_1-\xi_2}{2(1-\xi_2)}\right)^i; \quad i = 2, \dots, n \quad (3.30)$$

Um C_0 Stetigkeit auf einfachem Wege zu realisieren, sollte diese Funktion auf der Kante ebenfalls ein integriertes Legendrepolynom (in $\xi_2 \in [-1..1]$ Richtung) sein. Wertet man die Funktion auf der Kante aus erhält man für

$$\frac{1+2\xi_1-\xi_2}{2-2\xi_2} = 1$$

somit erwünschte Ergebnis. Für Kante 3 lässt sich analog argumentieren.

Die inneren Moden sind definiert durch

$$\psi_b^{ij}(\xi_1, \xi_2) = \hat{p}_i^0\left(\frac{2\xi_1}{1-\xi_2}\right) \left(\frac{1-\xi_2}{2}\right)^i \hat{p}_j^{2i-1}(\xi_2); \quad i = 2..n-1; \quad j = 1..n-i \quad (3.31)$$

Diese unterliegen keinerlei Kontinuitätszwängen, weswegen an dieser Stelle nicht weiter auf sie eingegangen werden soll. Im Rahmen dieser Arbeit wird entsprechend diesem Konstruktionsprinzip im Anhang A ein Vorschlag für Ansätze auf einem Tetraeder, die aber nicht implementiert wurden, gemacht.

3.2.4 Abgebildete Basis

Das Konzept einer abgebildeten Basis geht zurück auf DUBINER [31]. Die Idee dabei ist auf einem Hexaeder geeignete Ansatzfunktionen zu definieren, die durch eine Abbildung auf ein Tetraeder transformiert werden. Die Integration kann wahlweise auf dem Tetraeder oder dem Hexaeder durchgeführt werden. Sind die Ansatzfunktionen auf dem Hexaeder in Tensorproduktstruktur gegeben, d.h.

$$\psi(\eta_1, \eta_2, \eta_3) = f(\eta_1)g(\eta_2)h(\eta_3), \quad (3.32)$$

so lassen sich vor allem zur Berechnung der Massenmatrix schnelle Integrationsverfahren anwenden, da durch

$$\iiint f(\eta_1)g(\eta_2)h(\eta_3) d\eta_1 d\eta_2 d\eta_3 = \int f(\eta_1) d\eta_1 \int g(\eta_2) d\eta_2 \int h(\eta_3) d\eta_3 \quad (3.33)$$

die drei innereinander geschachtelten Schleifen zur Integration entkoppelt werden können. Ebenfalls gibt es die Möglichkeit die Integration durch Speicherung, bzw. Einmalberechnung von Funktionswerten zu beschleunigen. Das ist das Hauptaugenmerk dieser Basis, wodurch u.a. auf Symmetrie der Ansatzfunktionen bei Tetraedern verzichtet wird.

Zunächst muss die Transformation zwischen dem Hexaeder und dem Tetraeder formuliert werden. Diese ist auch als Duffy Transformation bekannt, s. Abb. 3.10. Das Hexaeder ist auf dem Gebiet $(-1; 1)^3$ definiert. Die Achsen des Koordinatensystems werden mit η_1, η_2, η_3 bezeichnet. Das Tetraeder besitzt die 4 Eckpunkte $P1(-1, -1, -1)$, $P2(1, -1, -1)$, $P3(-1, 1, -1)$, $P4(-1, -1, 1)$. Hier sind die Koordinatenachsen mit ξ_1, ξ_2, ξ_3 bezeichnet. Die Tetraeder Koordinaten ergeben sich somit durch (wir geben auch die Jacobideterminante $j_{\eta \rightarrow \xi}$ an):

$$\xi_1 = \frac{1}{4} [(\eta_1 + 1)(\eta_2 - 1)(\eta_3 - 1)] - 1 \quad (3.34)$$

$$\xi_2 = \frac{1}{2} (\eta_2 + 1)(1 - \eta_3) - 1 \quad (3.35)$$

$$\xi_3 = \eta_3 \quad (3.36)$$

$$j_{\eta \rightarrow \xi} = \frac{1}{8} (\eta_2 - 1)(\eta_3 - 1)^2 \quad (3.37)$$

Die Rücktransformation ist gegeben durch

$$\eta_1 = \frac{-2(1+\xi_1)}{\xi_2+\xi_3} - 1 \quad (3.38)$$

$$\eta_2 = \frac{2(1+\xi_2)}{1-\xi_3} - 1 \quad (3.39)$$

$$\eta_3 = \xi_3 \quad (3.40)$$

$$j_{\xi \rightarrow \eta} = \frac{4}{(\xi_2+\xi_3)(\xi_3-1)} \quad (3.41)$$

Die Transformation ist nicht bijektiv, da z.B. einige Flächen des Hexaeders auf Punkte im Tetraeder abgebildet werden. Das bedeutet, dass gewisse Flächenmoden im Hexaeder zu Knotenmoden im Tetraeder werden. Für die Integration auf dem Hexaeder hat das jedoch keine Auswirkungen, da an Stellen, wo die Transformation entartet, die Jacobideterminante zu null wird. Die Abbildung stellt sicher, dass die Integration auf dem Hexaeder bspw. über alle 6 Flächen das gleiche Ergebnis, wie die Integration auf dem Tetraeder über 4 Flächen ergibt

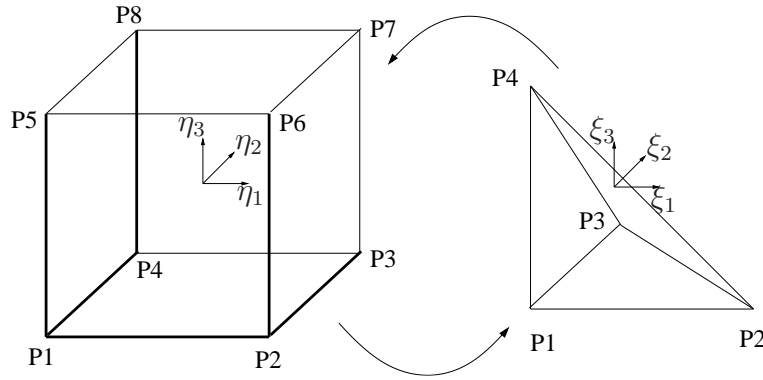


Abbildung 3.10: Duffy Transformation - Dunkle Kanten bleiben erhalten

(z.B. eine Einwirkende Normalkraft). Die topologischen Unterschiede werden durch die Jacobideterminante eliminiert.

Das Verfahren wird hauptsächlich im Bereich der Spektralelemente angewandt, wodurch sich auf die Massenmatrix optimierte Ansatzfunktionen ergeben, die aus dem Tensorprodukt *nicht* integrierter Jacobipolynome bestehen. Für den Bereich der Strukturmechanik wurde das Konstruktionsprinzip in dieser Arbeit daher zur Erstellung von Ansatzfunktionen, die auf integrierten Legendrepolyminen basieren angewandt. Die neuen Ansatzbasen werden im folgenden Kapitel vorgestellt.

3.3 Elementansätze auf Basis integrierter Legendrepolynome

Im vorhergehenden Kapitel wurde die Duffy Transformation bereits eingeführt. In diesem Kapitel werden nun Ansatzfunktionen vorgestellt, die auf dem Hexaeder definiert sind und dort eine Tensorproduktstruktur integrierter Legendrepolynome aufweisen - zuzüglich eines Terms der die rationalen Abbildungen 3.38, 3.39 auffängt und in eine ganzrationale überführt. Im Folgenden werden die Formfunktionen im Hexaeder-Koordinatensystem angegeben, da eine geschlossene analytische Darstellung im Tetraeder nicht möglich ist. In Abb. 3.11 ist das $[-1; +1]^3$ Referenztetraeder dargestellt, auf das sich die im folgenden definierten Ansatzfunktionen beziehen.

3.3.1 Knotenmoden

Die Definition der Knotenmoden ψ_{vi} auf dem Hexaeder lautet wie folgt:

$$\psi_{v1}(\eta_1, \eta_2, \eta_3) = \frac{1}{8}((1 - \eta_1)(1 - \eta_2)(1 - \eta_3)) \quad (3.42)$$

$$\psi_{v2}(\eta_1, \eta_2, \eta_3) = \frac{1}{8}((1 + \eta_1)(1 - \eta_2)(1 - \eta_3)) \quad (3.43)$$

$$\psi_{v3}(\eta_1, \eta_2, \eta_3) = \frac{1}{4}((1 + \eta_2)(1 - \eta_3)) \quad (3.44)$$

$$\psi_{v4}(\eta_1, \eta_2, \eta_3) = \frac{1}{2}(1 + \eta_3) \quad (3.45)$$

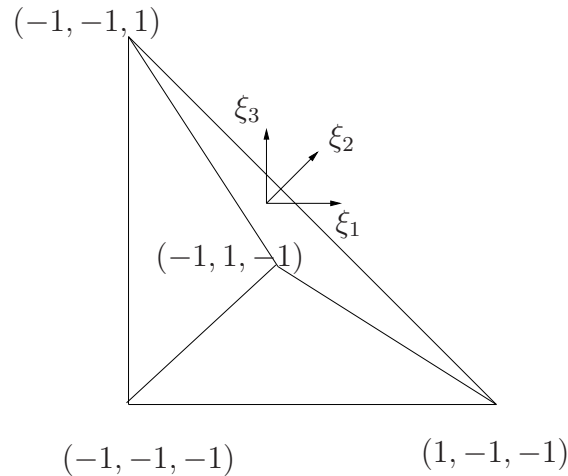


Abbildung 3.11: Standardtetraeder

Man erkennt, dass die Ansätze im Hexaeder nicht den modalen Voraussetzungen genügen. Zumindest die ersten beiden Moden entsprechen den trilinearen Ansätzen für Hexaeder. Die Funktion ψ_{v4} ist auf der gesamten oberen Fläche des Hexaeders eins. Diese Fläche entartet durch die Duffy Transformation auf einen Punkt im Tetraeder, wodurch auf diesem die Eindeutigkeit des Funktionswerts gewährleistet ist. Für ψ_{v3} verhält es sich ähnlich. Hier entartet eine Kante zu einem Punkt.

Nach Abbildung auf das Tetraeder (Einsetzen von 3.38-3.40) ergeben sich jedoch die linearen (Standard-) Ansatzfunktionen

$$\psi_{v1}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{2}(-1 - \xi_1 - \xi_2 - \xi_3) \quad (3.46)$$

$$\psi_{v2}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{2}(1 + \xi_1) \quad (3.47)$$

$$\psi_{v3}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{2}(1 + \xi_2) \quad (3.48)$$

$$\psi_{v4}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{2}(1 + \xi_3) \quad (3.49)$$

mit der Eigenschaft

$$\psi_{vi} = \begin{cases} 1 & \text{für } V = V_i \\ 0 & \text{für } V = V_j, j \neq i \end{cases} \quad (3.50)$$

3.3.2 Kantenmoden

Die 6 Kantenmoden stellen sich auf dem Hexaeder wie folgt dar. Der tiefgestellte Index e_i kennzeichnet die Nummerierung der Kanten im Tetraeder, P_i, P_j bezeichnen die begrenzenden

Punkte im Tetraeder. Der Index i beschreibt die Ordnung der Polynome.

$$\psi_{e1,P1-P2}(\eta_1, \eta_2, \eta_3)^i = \hat{p}_i^0(\eta_1) \left(\frac{1-\eta_2}{2}\right)^i \left(\frac{1-\eta_3}{2}\right)^i; \quad i = 2..n \quad (3.51)$$

$$\psi_{e2,P2-P3}(\eta_1, \eta_2, \eta_3)^i = \hat{p}_i^0(\eta_2) \left(\frac{1+\eta_1}{2}\right) \left(\frac{1-\eta_3}{2}\right)^i; \quad i = 2..n \quad (3.52)$$

$$\psi_{e3,P1-P3}(\eta_1, \eta_2, \eta_3)^i = \hat{p}_i^0(\eta_2) \left(\frac{1-\eta_1}{2}\right) \left(\frac{1-\eta_3}{2}\right)^i; \quad i = 2..n \quad (3.53)$$

$$\psi_{e4,P1-P4}(\eta_1, \eta_2, \eta_3)^i = \hat{p}_i^0(\eta_3) \left(\frac{1-\eta_1}{2}\right) \left(\frac{1-\eta_2}{2}\right); \quad i = 2..n \quad (3.54)$$

$$\psi_{e5,P2-P4}(\eta_1, \eta_2, \eta_3)^i = \hat{p}_i^0(\eta_3) \left(\frac{1+\eta_1}{2}\right) \left(\frac{1-\eta_2}{2}\right); \quad i = 2..n \quad (3.55)$$

$$\psi_{e6,P3-P4}(\eta_1, \eta_2, \eta_3)^i = \hat{p}_i^0(\eta_3) \left(\frac{1+\eta_2}{2}\right); \quad i = 2..n \quad (3.56)$$

Betrachtet man die Kantenmoden für Kante 1, erkennt man, dass diese in einem integrierten Legendrepolynom \hat{p}_i^0 der Ordnung i in ξ_1 -Richtung resultieren. Setzt man die Abbildungsvorschrift für η_1 3.38 in $\hat{p}_i^0(\eta)$ ein, so erhält man einen Term der $(\xi_2 + \xi_3)^i$ im Nenner hat, dementsprechend kein Polynom mehr darstellt und durch die Multiplikation mit

$$\left(\frac{1-\eta_2}{2}\right)^i \left(\frac{1-\eta_3}{2}\right)^i = \left[-\frac{1}{2}(\xi_2 + \xi_3)\right]^i$$

reguliert wird. Die Funktion entspricht im Hexaeder ebenfalls einem echten Kantenmode, da sie dort die dafür notwendigen Eigenschaften aufweist. Ähnliche Argumentationen gelten für die anderen Kantenmoden. Eine Ausnahme bildet Kante Nr. 6, aufgrund der Tatsache, dass diese aus einer entarteten Fläche resultiert. Da dort die Jacobideterminante verschwindet, lässt sich auf dem Hexaeder keine Integration über diese Kante durchführen, dies wäre z.B. eine (in 3D unerlaubte, bzw. nicht sinnvolle) Linienlast. In Abb. 3.12 - 3.17 sind Kantenmoden für Kante 2 dargestellt.

Wie bereits erwähnt wurde für die Darstellung auf dem Tetraeder im Rahmen dieser Arbeit keine geschlossene formelmäßige Darstellung gefunden. Um jedoch einen Eindruck zu vermitteln, geben wir die Ansätze für $p = 5$ im Anhang B an.

3.3.3 Flächenmoden

Die Flächenmoden werden im Hexaeder als Tensorprodukt integrierter Legendrepolynome definiert. Die Bezeichnung der Indizes erfolgt analog zu den Kantenmoden.

$$\psi_{f1,P1-P2-P3}^{ij} = \hat{p}_i^0(\eta_1) \hat{p}_j^0(\eta_2) \left(\frac{1-\eta_2}{2}\right)^i \left(\frac{1-\eta_3}{2}\right)^{i+j} \quad (3.57)$$

$$\psi_{f2,P1-P2-P4}^{ij} = \hat{p}_i^0(\eta_1) \hat{p}_j^0(\eta_3) \left(\frac{1-\eta_2}{2}\right) \left(\frac{1-\eta_3}{2}\right)^i \quad (3.58)$$

$$\psi_{f3,P2-P3-P4}^{ij} = \hat{p}_i^0(\eta_2) \hat{p}_j^0(\eta_3) \left(\frac{1+\eta_1}{2}\right) \left(\frac{1-\eta_3}{2}\right)^i \quad (3.59)$$

$$\psi_{f4,P1-P3-P4}^{ij} = \hat{p}_i^0(\eta_2) \hat{p}_j^0(\eta_3) \left(\frac{1-\eta_1}{2}\right) \left(\frac{1-\eta_3}{2}\right)^i \quad (3.60)$$

$$i = 2, \dots, n; \quad j = 1, \dots, n - i$$

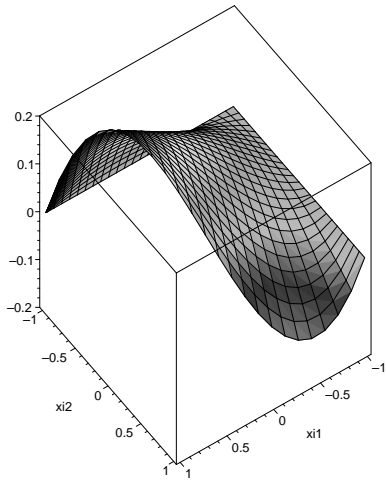


Abbildung 3.12: Kantenmode $p = 3$

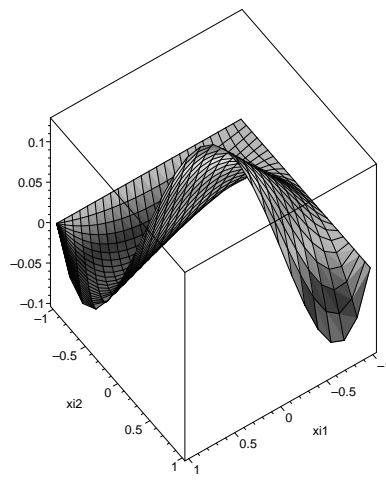


Abbildung 3.13: Kantenmode $p = 4$

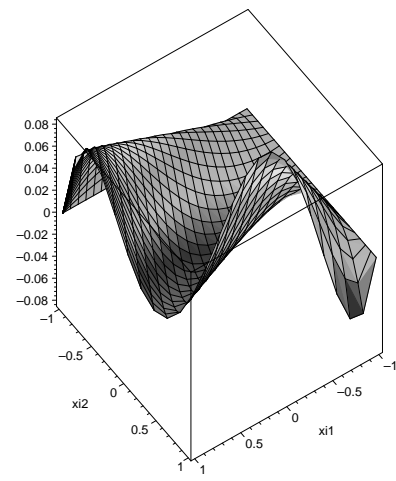


Abbildung 3.14: Kantenmode $p = 5$

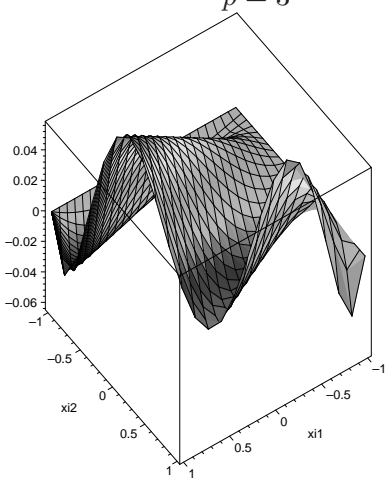


Abbildung 3.15: Kantenmode $p = 6$

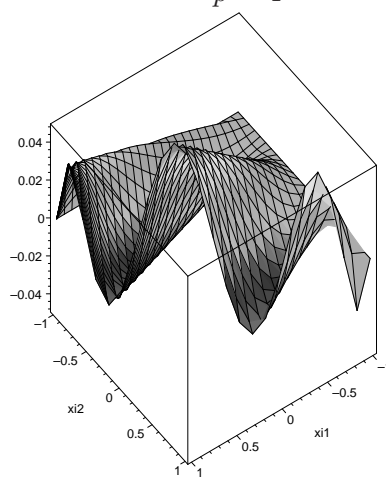


Abbildung 3.16: Kantenmode $p = 7$

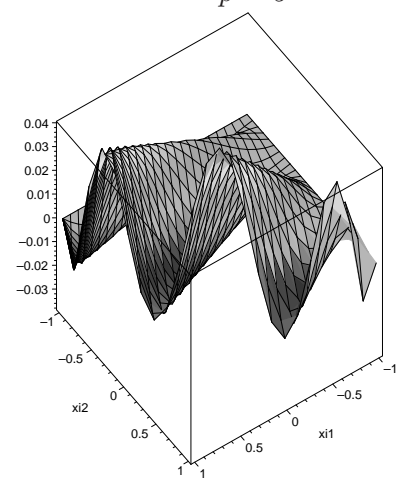


Abbildung 3.17: Kantenmode $p = 8$

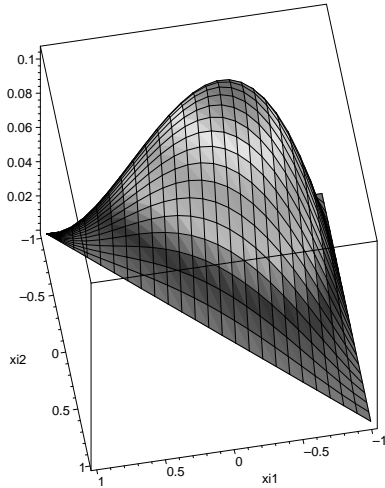


Abbildung 3.18: Flächenmode
 $q = 2, p = 2$

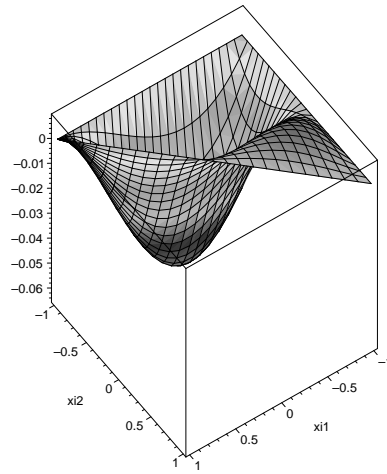


Abbildung 3.19: Flächenmode
 $q = 2, p = 3$

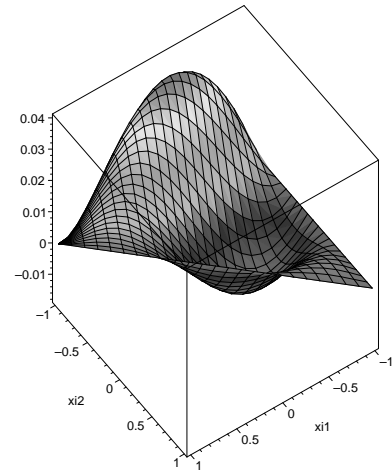


Abbildung 3.20: Flächenmode
 $q = 2, p = 4$

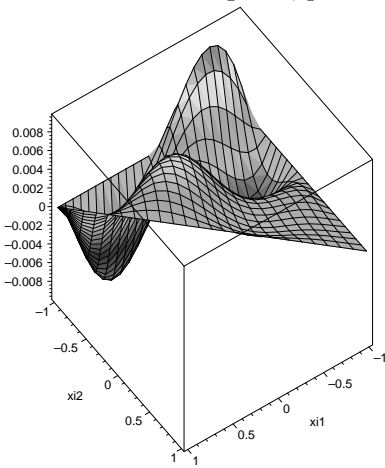


Abbildung 3.21: Flächenmode
 $q = 2, p = 5$

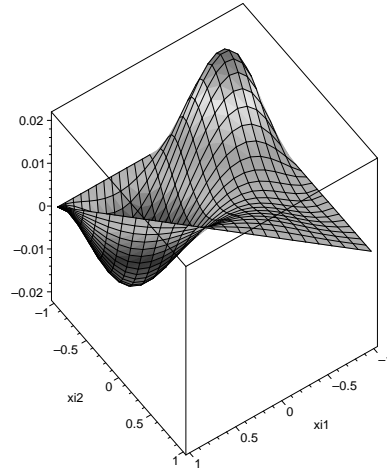


Abbildung 3.22: Flächenmode
 $q = 3, p = 3$

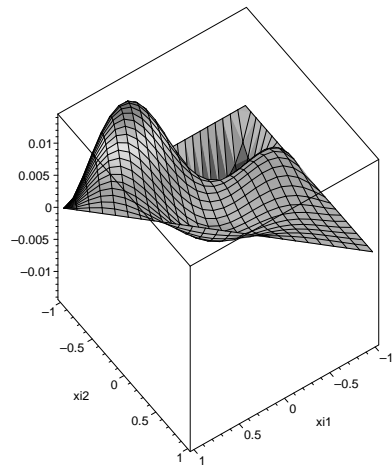


Abbildung 3.23: Flächenmode
 $q = 3, p = 3$

Hier gelten analoge Argumentationen wie für die Kanten, d.h. Terme, wie z.B. $(\frac{1-\eta_2}{2})^i (\frac{1-\eta_3}{2})^{i+j}$ tauchen auf, um die Nenner rationaler Funktionen zu egalisieren und dementsprechend Polynome auf dem Tetraeder zu erhalten. Einige Flächenmoden für Fläche 1 werden in den Abbildungen 3.18 - 3.23 dargestellt.

Auf eine Darstellung der Funktionen im Tetraeder-Koordinatensystem soll hier verzichtet werden.

3.3.4 Innere Moden

Die inneren Moden werden ebenfalls als Produkt integrierter Legendrepolynome definiert

$$\psi_b^{ijk} = \hat{p}_i^0(\eta_1) \hat{p}_{j+1}^0(\eta_2) \hat{p}_{k+1}^0(\eta_3) \left(\frac{1-\eta_2}{2}\right)^i \left(\frac{1-\eta_3}{2}\right)^{i+j} \quad (3.61)$$

$$i = 2, \dots, n-2; \quad j = 1, \dots, n-i; \quad k = 1, \dots, n-i-j$$

Alle Basen spannen gemeinsam den trunk space auf. Man erkennt dies durch die folgenden Sachverhalte:

- Die Basis ist linear unabhängig:
Kein Knotenmode kann durch andere Modes dargestellt werden. Dasselbe gilt für die Kantenmoden, da eine Linearkombination der Knotenmoden an den Knoten null ergeben müsste. Die Flächenmoden können auch nicht als Linearkombination der Kanten- und Knotenmoden dargestellt werden, da sie sonst auf den Kanten $\neq 0$ wären. Für die inneren Moden gilt dies analog.
- Die Anzahl der Funktionen ist $1/6(p+1)(p+2)(p+3)$
- Der maximale Ansatzgrad ist p

3.3.5 Kontinuität

Wie bereits erwähnt handelt es sich bei der vorgestellten Basis *nicht* um eine rotationssymmetrische Formulierung. Um Kontinuität über Elementgrenzen zu erhalten wird folgendes von WARBURTON [123] entwickelte Organisationsprinzip der Abbildungen von lokal nach global eingeführt.

- Die Reihenfolge der lokalen Knotennummerierung entspricht der Reihenfolge der globalen Nummerierung.

Dieses Prinzip lässt sich bezüglich der verschiedenen Moden folgendermaßen interpretieren:

- Knotenmoden sind symmetrisch, d.h. es sind hier keine Probleme bezüglich einer eins zu eins Kontinuität zu erwarten.
- Kanten sind definiert durch Start- und Endpunkt der Kante. Startpunkt ist der Punkt mit der kleineren Knotennummer. Dies gilt lokal als auch (durch das vorgegebene Organisationsprinzip) global. Alle Kantenmoden sind derart konstruiert, dass sie bei Einhaltung der Abbildungsvorschrift auf den sich berührenden Flächen identisch sind.
- Flächen sind über die 3 Eckpunkte definiert, ebenfalls aufsteigend, d.h. auch hier entspricht die lokale Nummerierung der globalen (im Sinne der Reihenfolge). Zwei aufeinandertreffende Flächen besitzen lokal immer dieselbe Nummerierung. Die 4 Flächenmoden wurden ebenfalls derart konstruiert, dass sich dadurch eine eins zu eins Kontinuität ergibt.
- Innere Moden unterliegen keinerlei Kontinuitätsbedingungen.

Das Organisationsprinzip erlaubt eine sehr einfache programmiertechnische Handhabung der eins zu eins Kontinuität. Es sind keinerlei benachbarte Koordinatensysteme miteinander zu vergleichen und darauf aufbauend die Ansatzfunktionen umzurechnen. Dies müsste auf Grund der mangelnden Symmetrie anhand Glg. 3.3 erfolgen. (Eine Multiplikation mit -1 würde nicht ausreichen).

Diese Vorgehensweise besitzt jedoch die ungewohnte Eigenschaft, dass sich aus einem lokal rechtsdrehenden Koordinatensystem global ein linksdrehendes ergeben darf. In dem Fall wird die Jacobideterminante der Abbildung negativ. Sie wechselt innerhalb des Elementes jedoch nicht das Vorzeichen, so dass die Umkehrabbildung eindeutig ist. Demzufolge ist die Flächenorientierung nicht eindeutig. Bei Aufbringen einer Normalkraft muss die Richtung des Normalenvektors überprüft und evtl. korrigiert werden.

3.4 Integration auf dem Tetraeder

Die numerische Integration der Ansatzfunktionen auf dem Tetraeder ist von entscheidender Bedeutung für die Leistungsfähigkeit eines FE-Codes. Die Anzahl der Veröffentlichungen zu diesem Thema nimmt jedoch von Vierecken über Hexaeder, Dreiecken bis hin zu Tetraedern deutlich ab, da sich die theoretische Herleitung von geeigneten Integrationspunkten und zugehörigen Wichtungsfaktoren schwierig gestaltet.

Der Leser, der sich für allgemeine theoretischen Grundlagen der numerischen Integration interessiert, sei auf das Standardwerk von DAVIS und RABINOWITZ [26] verwiesen. Als Startpunkt für die numerische Integration auf dem 2D-Simplex kann die Abhandlung von LYNESS und COOLS [82] und die darin zitierte Literatur empfohlen werden.

3.4.1 Eigenschaften von Integrationsformeln

Primär sind die im Bereich der FEM erwünschten Eigenschaften einer Integrationsformel und deren Stützstellen die folgenden:

- Symmetrie
- Geringe Anzahl an Stützstellen
- Verfügbarkeit für hohe Ordnungen
- Lage der Stützstellen innerhalb eines Elementes
- Positivität der Gewichte

Prinzipiell gilt es zwischen zwei praxisrelevanten Anwendungsfällen zu unterscheiden: einerseits der Integration über ein durch eine affine Abbildung erhaltenes geometrisch lineares Tetraeder, andererseits derer über gekrümmte Tetraederelemente. Die Anwendung auf letztere wird im Rahmen dieser Arbeit aufgrund der Notwendigkeit der exakten Geometriebeschreibung als der wichtigere Aspekt aufgefasst. In diesem Fall sind durch die Abbildung des Tetraeders von lokal nach global im Allgemeinen gebrochene rationale Funktionen zu integrieren, wodurch die letzten beiden aufgeführten Stichpunkte, Lage der Stützstellen und Positivität der Gewichte, deutlich werden. Negative Gewichte könnten die Ergebnisse der (für Polynome exakten Integrationsformeln) sehr stark verfälschen, ebenso wie außerhalb des Elementes liegende Stützstellen, die sich bei gekrümmten Elementen aufgrund der Abbildung lokal-global theoretisch in singulären Punkten befinden könnten oder bei Algorithmen für materielle Nichtlinearität (Projektion auf die Fließfläche an den Gausspunkten) nicht sinnvoll sind. Aus den genannten Gründen werden

vom Autor die von DUNAVANT [32] vorgeschlagenen Stützstellen und Gewichte nicht empfohlen.

Die Symmetrie der Stützstellenverteilung (s. Abb. 3.24) im lokalen Referenzelement gewährleistet die Unabhängigkeit des Ergebnisses der numerischen Integration von der Lage und Ausrichtung des globalen Elementkoordinatensystems, das durch die Abbildung des lokalen Referenzelements auf das globale Element definiert wird. Die auf dem Masterelement definierten Polynome verzerren sich im Fall einer nicht affinen Abbildung⁴ in einem a priori nicht bekannten Maß, so dass man im Rahmen dieser Arbeit von einer Integration einer unbekannt Funktion ausgehen muss. Ein hypothetisches Beispiel für eine nichtsymmetrische Verteilung wäre das folgende: Es sei eine Stützstellenverteilung gegeben, bei der alle Integrations-Stützstellen im Masterelement relativ dicht in der Nähe eines Eckpunktes lägen. Dieser Eckpunkt kann je nach Definition der Abbildung von lokal nach global in vier Knoten des globalen Elementes transformiert werden. Die konzentrierte Lage der Stützstellen in seiner Nähe hätte im Fall gekrümmter Oberflächen des globalen Elementes demzufolge einen Einfluss auf das numerische Ergebnis. Der Sachverhalt stellt sich anders dar, wenn die Stützstellenverteilung im lokalen Referenzelement in der Nähe aller vier Eckknoten gleich dicht und symmetrisch wäre.

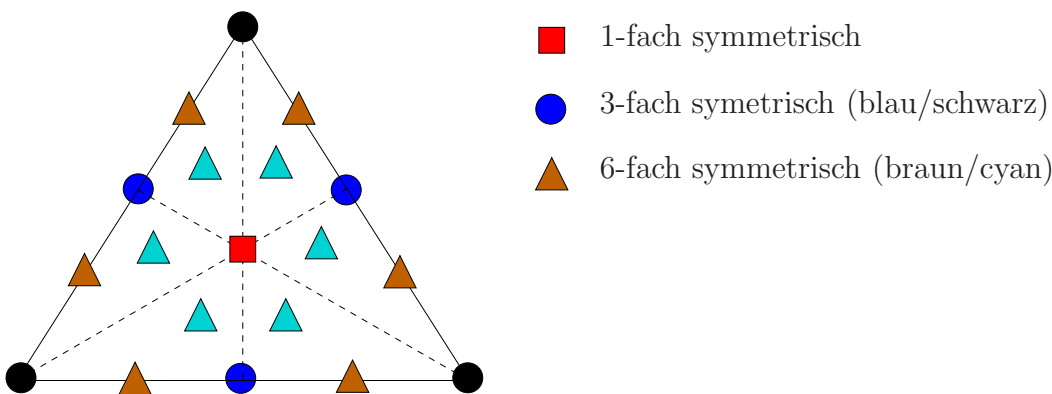


Abbildung 3.24: Symmetrisch verteilte Integrationsstützstellen auf einem Dreieck

Die Abbildung von lokal nach global besitzt jedoch selbstverständlich immer noch einen großen Einfluss auf das Ergebnis, da das lokale Referenzelement (und somit ebenfalls die Stützstellen) durch diese verzerrt wird.

Im Fall einer symmetrischen Verteilung kann jeder Punkt 1/4/6/12/24-fach vorhanden sein, maximal 24-fach, da es $4! = 24$ lineare Abbildungen gibt, die das Tetraeder auf sich selbst abbilden⁵. Punkte mit geringerer Vielfachheit als 24 werden durch mehrere dieser Abbildungen auf dieselben Punkte transformiert - ein Knotenpunkt bleibt ein Knotenpunkt, der Schwerpunkt verändert seine Lage bei Anwendung dieser Abbildungen ebenfalls nicht.

⁴Eine affine Abbildung erhält Längenverhältnisse und Winkel.

⁵Seien die lokalen Knoten mit 1–4 bezeichnet, die globalen mit A–D, so wären diese Abbildungen definiert durch $ABCD, ABDC, ACBD, \dots$

Aufgrund der Entstehung gebrochen rationaler Funktionen relaxiert sich die Forderung nach einer möglichst geringen Anzahl von Stützstellen im Element, da über den Fehler des Integrals relativ wenig Aussagen getroffen werden können, d.h. man ist in der Regel ohnehin gezwungen eine hohe Gaussordnung zu wählen, wobei Aussagen über die notwendige Integrationsordnung erst im Nachhinein gemacht werden können.

Ein entscheidender Faktor, warum in dieser Arbeit keine tabellierten Integrationsformeln verwendet wurden, ist jedoch die in der Literatur verfügbare Anzahl an Integrationspunkten, die lediglich bis zur Ordnung 11 [83] ermittelt werden konnten. Aus diesem Grund wurde das im folgenden Kapitel beschriebene Verfahren der Produktintegration angewandt.

3.4.2 Produktintegration über das globale Element

Im folgenden werden wir zunächst die Standard-Gaussintegration für lineare Elemente, danach für Quadrate und Dreiecke und schließlich für Tetraeder aufführen. Die Vorgehensweise entspricht einer Verallgemeinerung des von HILLION [61], [62] vorgeschlagenen Verfahrens. Alle Summenformeln sind im Folgenden im Sinne einer Gaussintegration zu verstehen.

Allen Varianten ist gemein, dass die Gebiete, über die integriert wird immer auf ein Standardgebiet $[-1, +1]^n$ abgebildet werden und die Integration dort durchgeführt wird.

1D Integration:

Das Integral über das 1D Standardgebiet wird dabei durch die Summe einzelner Funktionswerte, multipliziert mit unterschiedlichen Wichtungsfaktoren, ausgedrückt:

$$\int_{-1}^1 f(\eta) d\eta = \sum_{i=1}^n f(\eta_i) w(\eta_i) \quad (3.62)$$

Dabei bezeichnet n die Integrationsordnung. Ein Integral mit beliebigen Integrationsgrenzen (a, b)

$$\int_a^b f(x) dx \quad (3.63)$$

wird durch die Transformation

$$x = \frac{1}{2}(1 - \eta)a + \frac{1}{2}(1 + \eta)b \quad \text{mit} \quad x(-1) = a \quad , \quad x(+1) = b \quad (3.64)$$

$$dx = \frac{1}{2}(b - a) d\eta \quad (3.65)$$

wie bereits erwähnt auf $[-1, +1]$ abgebildet. Somit ergibt sich:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{1}{2}(b - a) \sum_i^n f(x(\eta_i)) w(\eta_i) \quad (3.66)$$

Rechteckintegration:

Für das Integral über das Standardquadrat lässt sich die folgende Näherung angeben

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f(\eta_1, \eta_2) d\eta_1 d\eta_2 = \sum_i^n \sum_j^n f(\eta_1^i, \eta_2^j) w(\eta_1^i) w(\eta_2^j) \quad (3.67)$$

Bei konstanten globalen Integrationsgrenzen $x \in [a, b]$, $y \in [c, d]$ führt die affine Transformation

$$x = \frac{1}{2}(1 - \eta_1)a + \frac{1}{2}(1 + \eta_1)b \quad (3.68)$$

$$y = \frac{1}{2}(1 - \eta_2)c + \frac{1}{2}(1 + \eta_2)d \quad (3.69)$$

$$dx = \frac{1}{2}(b - a) d\eta_1 \quad (3.70)$$

$$dy = \frac{1}{2}(d - c) d\eta_2 \quad (3.71)$$

das Integral wieder auf $[-1, 1]^2$ zurück. Somit gilt

$$\int_a^b \int_c^d f(x, y) dx dy = \frac{1}{4}(b - a)(d - c) \sum_i^n \sum_j^n [f(x(\eta_1^i)w(\eta_1^i))] [f(y(\eta_2^j)w(\eta_2^j))], \quad (3.72)$$

bzw.

$$\int_a^b \int_c^d f(x, y) dx dy = \frac{1}{4}(b - a)(d - c) \sum_i^n \sum_j^n [f(x(\eta_1^i)w_i)] [f(y(\eta_2^j)w_j)]. \quad (3.73)$$

Dreieckintegration:

Betrachtet werden soll im Folgenden zunächst der allgemeine Fall variabler Integrationsgrenzen, s. Abb. 3.25. Dabei sei nur eine Integrationsrichtung variabel (d.h. das Gebiet wird durch vertikale Linien für $x = a$, $x = b$ begrenzt).

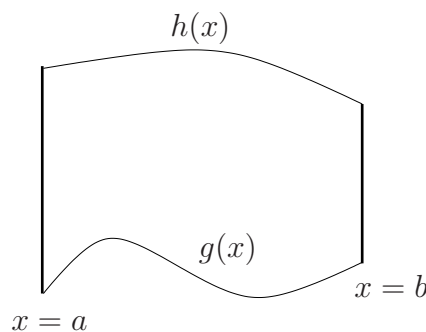


Abbildung 3.25: Variable Integrationsgrenzen in y-Richtung

$$I = \int_a^b \int_{g(x)}^{h(x)} f(x, y) dy dx \quad (3.74)$$

Zunächst wird das innere Integral mit variablen Integrationsgrenzen auf ein Einheitsgebiet transformiert. Die Variable x wird dabei festgehalten. Diese Vorgehensweise entspricht dem Blending Verfahren für die Geometrieabbildung von Rechteckelementen.

$$y = \frac{1}{2}(1 - \eta_2)g(x) + \frac{1}{2}(1 + \eta_2)h(x) \quad (3.75)$$

$$y(\eta_2 = -1) = g(x) \quad y(\eta_2 = +1) = h(x) \quad (3.76)$$

$$dy = \frac{dy}{d\eta_2} d\eta_2 = \left[-\frac{1}{2}g(x) + \frac{1}{2}h(x) \right] d\eta_2 = \frac{1}{2} [h(x) - g(x)] d\eta_2 \quad (3.77)$$

Einsetzen in das Mehrfachintegral liefert ein Produkt der ursprünglich zu integrierenden Funktion mit der Differenz der Integrationsgrenzen

$$\int_a^b \int_{-1}^1 \frac{1}{2} [h(x) - g(x)] f(x, y(\eta_2^j)) d\eta_2 dx \quad (3.78)$$

Als Quadraturformulierung ergibt sich somit:

$$\int_a^b \left[\frac{1}{2} [h(x) - g(x)] \sum_{j=1}^n w_j f(x, y(\eta_2^j)) \right] dx = \int_a^b \sum_{j=1}^n w_j \left[\frac{1}{2} [h(x) - g(x)] f(x, y(\eta_2^j)) \right] dx, \quad (3.79)$$

und mit der Transformation von x auf η_1 (Glg. 3.68):

$$\int_a^b \int_{g(x)}^{h(x)} f(x, y) dy dx = \frac{1}{4} (b - a) \sum_{i=1}^n w_i [h(x(\eta_1^i)) - g(x(\eta_1^i))] \left[\sum_{j=1}^n w_j f(x(\eta_1^i), y(\eta_2^j)) \right]$$

Das Standard Dreieck sei durch $\xi_1 \in [-1, +1]$, $\xi_2 \in [-1, +1]$, $\xi_1 + \xi_2 \leq 0$ definiert (s. Abb.3.26).

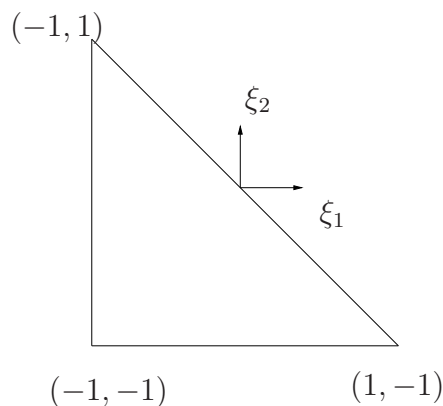


Abbildung 3.26: Standard Dreieck

Somit ist

$$g(x) = -1 \quad (3.80)$$

$$h(x) = -\xi_1 \quad (3.81)$$

$$x = \eta_1 \quad (3.82)$$

$$y = -\frac{1}{2}(1 - \eta_2 + \eta_1 + \eta_1\eta_2) = y(\eta_1, \eta_2) \quad (3.83)$$

Einsetzen liefert:

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^{-\xi_1} f(\xi_1, \xi_2) d\xi_2 d\xi_1 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w_i (1 - \eta_1^i) \left[\sum_{j=1}^n w_j f(\eta_1^i, y(\eta_1^i, \eta_2^j)) \right] \quad (3.84)$$

Dabei sind η_1, η_2 die auf einem Raster definierten Stützstellen auf dem Einheitsquadrat. Man kann den Ausdruck 3.84 auch durch modifizierte Stützstellen $\eta_1^* = x$, $\eta_2^* = y$ und Gewichte $w_i^* = \frac{1}{2}w_i(1 - \eta_1^i)$, $w_2^* = w_2$, die man aus diesem Raster erhält, ausdrücken

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^{-\xi_1} f(\xi_1, \xi_2) d\xi_2 d\xi_1 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_i^* w_j^* f(\eta_1^{*i}, \eta_2^{*j}), \quad (3.85)$$

so dass man die Struktur einer normalen Gaussformel erhält.

Die modifizierten Stützstellen, bzw Gewichte sind folgende:

$$\eta_1^{*i} = \eta_1^i \quad (3.86)$$

$$\eta_2^{*i} = 0.5(-\eta_1^i * \eta_2^i + \eta_2^i - \eta_1^i - 1) \quad (3.87)$$

$$w_i^* w_j^* = 0.5(w_1^i * w_2^j) * (1 - \eta_1^i) \quad (3.88)$$

Tetraederintegration:

Analog dazu lassen sich modifizierte Gausspunkte, bzw. Gewichte für Tetraeder aus der Integration auf dem Einheitswürfel generieren. Es sei

$$\xi_1 \in [-1, 1], \quad \xi_2 \in [-1, 1], \quad \xi_3 \in [-1, 1], \quad \xi_1 + \xi_2 \leq 0, \quad \xi_1 + \xi_2 + \xi_3 \leq 0$$

die Definition des Standardtetraeders (s. auch Abb. 3.11). Gesucht ist eine Integrationsformel für

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^{-\xi_1} \int_{-1}^{-\xi_1 - \xi_2} f(\xi_1, \xi_2, \xi_3) d\xi_3 d\xi_2 d\xi_1 \quad (3.89)$$

Die modifizierten Stützstellen und Gewichte sind dabei wie folgt:

$$\eta_1^{*i} = \eta_1^i \quad (3.90)$$

$$w_1^{*i} = \frac{1}{2}w_1^i(1 - \eta_1^{*i}) \quad (3.91)$$

$$\eta_2^{*j} = \frac{1}{2}(-\eta_1^i \eta_2^j + \eta_2^j - \eta_1^i - 1) \quad (3.92)$$

$$w_2^{*j} = -\frac{1}{2}w_2^j(\eta_1^{*i} + \eta_2^{*j}) \quad (3.93)$$

$$\eta_3^{*k} = \frac{1}{4}(-\eta_1^i \eta_3^k + \eta_1^i \eta_2^j \eta_3^k - \eta_2^j \eta_3^k + \eta_3^k + \eta_1^i \eta_2^j - \eta_2^j - 3) \quad (3.94)$$

$$w_3^{*k} = w_3^k \quad (3.95)$$

Man erhält somit:

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^{-\xi_1} \int_{-1}^{-\xi_1-\xi_2} f(\xi_1, \xi_2, \xi_3) d\xi_3 d\xi_2 d\xi_1 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n w_i^* w_j^* w_k^* f(\eta_1^{*i}, \eta_2^{*j}, \eta_3^{*k}) \quad (3.96)$$

3.5 Numerische Beispiele

Um die Konvergenzeigenschaften des vorgestellten Ansatzraumes für Tetraeder zu untersuchen werden im Folgenden verschiedene Beispiele berechnet, um die theoretisch vorhergesagten Aussagen zu verifizieren. Je nach Typ der exakten Lösung ist exponentielle oder algebraische Konvergenz zu erwarten. Die meisten der hier verwendeten Netze sind mit Hilfe des Netzgenerators *Netgen* [109], [108] erstellt worden. Alle untersuchten Körper besitzen eine lineare Geometrie, also planare Oberflächen.

3.5.1 Manufactured Solution

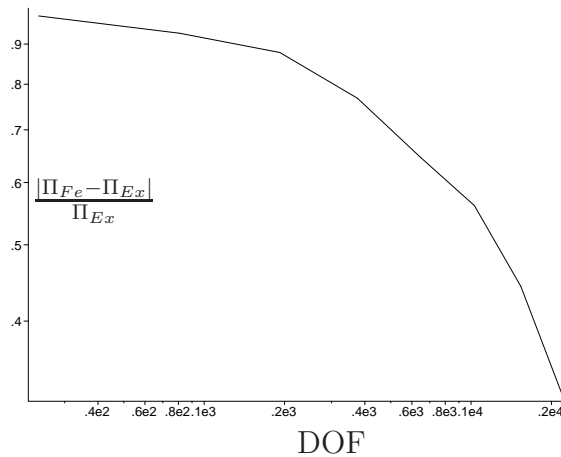


Abbildung 3.27: Konvergenz in der Energienorm

Das erste Beispiel ist der Einheitswürfel $[-1, 1]^3$ (s. auch Abb. 3.29), auf dem eine glatte sinusförmige Volumenlast aufgebracht wird. Materialparameter sind $E = 1$ und $\nu = 0.3$. Der Würfel wird mit sechs Elementen diskretisiert.

Unter einer *manufactured solution* versteht man das Vorgeben einer Lösung \mathbf{u}_{E_x} mit anschließender Berechnung der Volumenlast \mathbf{f} und der Oberflächenlasten. Gegeben sei dementsprechend die folgende Verschiebung \mathbf{u}_{E_x} :

$$u_x = u_y = u_z = \sin(3\pi x) \sin(4\pi y) \sin(5\pi z)$$

Die Lösung impliziert nullrandbedingungen auf der gesamten Oberfläche des Würfels. Sie entspricht zwar bei weitem nicht der Forderung nach kleinen Verschiebungsgradienten, kann aber

ohne weiteres dementsprechend skaliert werden. Nach Berechnung der zugehörigen Dehnungen und Spannungen mit Hilfe von Maple, erhält man die Dehnungsenergie des Systems zu:

$$W = 65.243779093739750485$$

Unter reiner p -Verfeinerung ergibt sich die in Abb. 3.27 dargestellte Konvergenzkurve im log-log plot. Man sieht hier sehr schön, dass die zu erwartende exponentielle Konvergenz gegeben ist.

Dieser Test wurde noch für weitere vorgegebene Funktionen durchgeführt, u.a. für:

$$u_x = u_y = u_z = \sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z)$$

$$u_x = u_y = u_z = \sin(2\pi f(x)) \sin(2\pi f(y)) \sin(2\pi f(z))$$

mit

$$f(x) = 0.5(2x - 1.5)^2 - x - 0.125$$

Das exponentielle Konvergenzverhalten wird dabei für alle Beispiele durch die abfallende Kurve im log-log plot bestätigt.

3.5.2 Patch Test

Der Patch Test ist ein Standardbeispiel zur Verifizierung von Elementformulierungen. Er besteht in der Berechnung eines quaderförmigen Gebietes unter konstanter Last und fordert die Approximation linearer Verschiebungen und konstanter Spannungen. Die Problemstellung

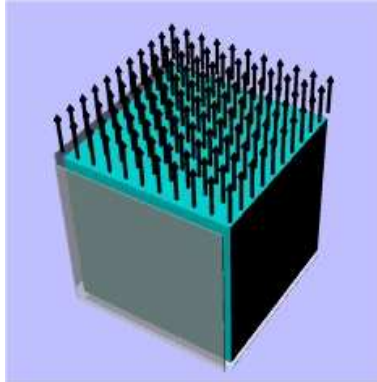


Abbildung 3.28: Würfel unter konstanter Last - SymmetrieRB

wird in 3.28 dargestellt, wobei Symmetrierandbedingungen das Modell auf ein Achtel reduzieren. Die grauen Flächen bedeuten null Verschiebungs-Randbedingungen in Normalenrichtung. Das dargestellte Hexaeder wird mit sechs Tetraedern vernetzt (Abb. 3.29). Die Ansatzordnung wird auf $p = 4$ fixiert, und enthält somit die ersten beiden Flächenmoden. Getestet wird in diesem Beispiel das Konzept zur Erhaltung der globalen C_0 -Stetigkeit nach WARBURTON (s. Kap. 3.3.5). Somit wird in diesem Beispiel die Nummerierung der acht Knoten variiert, so dass $8! = 40320$ verschiedene Konfigurationen getestet werden. Die Ergebnisse sind bei Überprüfung der Dehnungsenergie exakt und identisch. Das Verschiebungsfeld wurde stichprobenartig überprüft, s. Abb. 3.30.

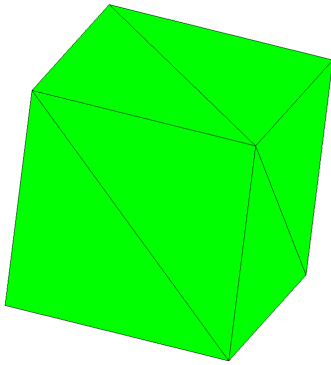


Abbildung 3.29: Netz

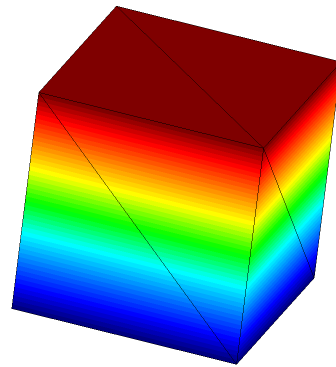


Abbildung 3.30: Lineares Verschiebungsfeld

3.5.3 Mikroskopische Knochenstruktur

Als ein weiterer Test, der die Leistungsfähigkeit der implementierten Elemente aufzeigen soll, wird ein Problem aus der Biomechanik gewählt. Die orthopädische Forschung bedient sich zur Untersuchung von Knochenproben der Röntgen Micro-Tomographie (microCT), um die Knochenstruktur im Mikrometerbereich aufzulösen. In Abb. 3.31 ist das Voxelmodell einer solchen Struktur dargestellt. Die bei diesem Beispiel analysierte Problemstellung entspricht einem verschiebungsgesteuerten Versuch. Dabei wird der Knochen im unteren Bereich in alle drei Richtungen fixiert sowie oben um 0.1 mm nach unten verschoben. Die beiden anderen Verschiebungskomponenten werden ebenfalls fixiert. Verglichen wird die resultierende Kraft auf der

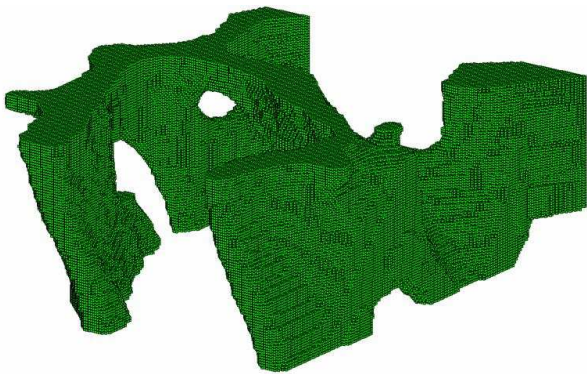


Abbildung 3.31: Voxel Modell, Auflösung 238 × 220 × 90

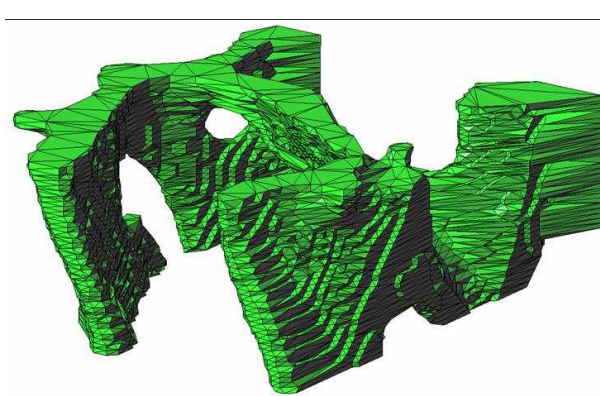


Abbildung 3.32: Netz

oberen Fläche mit einer 'Overkill' Lösung erstellt mit Abaqus⁶ mit bis zu 10.0 Millionen Elementen [36]. Verwendet wurden dabei zehnknotige Tetraederelemente unter h -Verfeinerung. Die Materialparameter sind $E = 1000$ und $\nu = 0.3$. In Abb. 3.33 sind die Konvergenzkurven für den h -Ansatz und den im Rahmen dieser Arbeit verwendete p -Ansatz auf einem fixen Netz von 23717 Elementen (s. Abb. 3.32) dargestellt. Systeme mit einer größeren Anzahl von Freiheitsgraden waren auf den verwendeten Desktop PC's nicht rechenbar, obwohl dies unter Betrachtung der dargestellten Konvergenzkurve durchaus wünschenswert gewesen wäre.

⁶Abaqus ist eingetragenes Markenzeichen von ABAQUS, Inc., Rising Sun Mills, Providence, RI, US

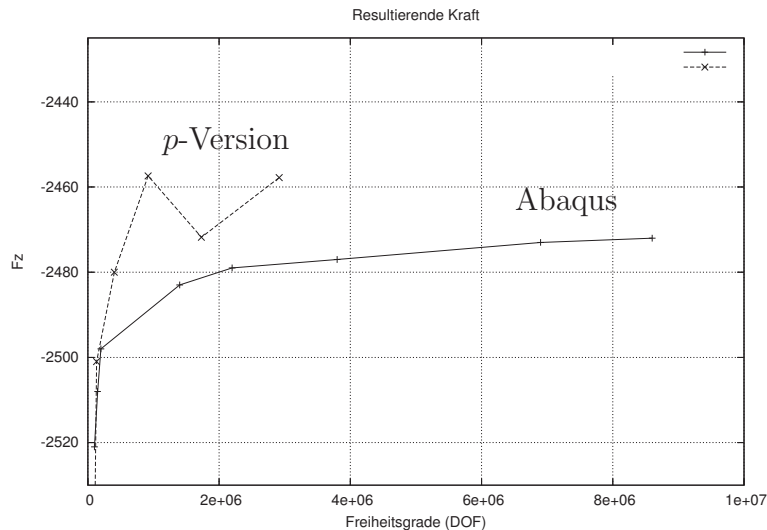


Abbildung 3.33: Resultierende Kraft F_z

Bezüglich der Diskussion des dargestellten Ergebnisses können folgende Aussagen getroffen werden:

- Die resultierende Kraft der durch die p -Version erhaltenen Lösung wurde durch eine direkte Differentiation der Verschiebungslösung erhalten. Dem Autor sind diesbezüglich keinerlei theoretische Aussagen hinsichtlich Konvergenz bekannt, anders als bei Nachlaufgrößen, die eine stetige Abhängigkeit zur Dehnungsenergie besitzen, siehe z.B. [8]. Das oszillierende Verhalten der resultierenden p -Kurve ist aufgrund der Komplexität der zugrunde liegenden Struktur ebenfalls nicht a priori als divergent zu betrachten [120].
- Eine identische Problemdefinition, d.h. das Setzen von Randbedingungen, auf dem zugrunde liegenden Gebiet, das in einer Dreiecksbeschreibung (*.stl) der Oberfläche gegeben ist, ist aufgrund der extrem großen Anzahl an Dreiecken schwer durchführbar. Die Vorgehensweise ist die, dass man alle Dreiecke, deren drei Knoten über- oder unterhalb einer gewissen Schranke liegen selektiert.
- Ergebnisse, die mit der Finite Cell Methode berechnet wurden, bewegen sich im Bereich $F_z \in [-2500; -2600]$ [36].

Kapitel 4

Geometrische Aspekte bei der p -Version

Die exakte bzw. möglichst genaue Beschreibung gekrümmter Oberflächen ist für die p -Version auf Grund der erwünschten Größe der Elemente von besonderer Bedeutung. Insbesondere in Bereichen, wo die Lösung glatt ist, ist ein möglichst grobes Netz von Vorteil, das die Geometrie exakt darstellen sollte. Aus rein mathematischer Sicht wird andernfalls keine Konvergenz erreicht. Im Falle einer nur angenäherten Geometrie wird nicht das originale Problem analysiert, sondern nur ein ähnliches. Untersuchungen von DEY und LUO hierzu sind bspw. in [30], [81] und von DÜSTER ET AL. in [33], [121], [98] zu finden.

Aufgrund der Diskretisierungsstrategie konvergiert bei der h -Version -anders als bei der p -Version- das immer feiner werdende Netz gegen die exakte Geometrie, so dass dieser geometrische Aspekt kein Hindernis hinsichtlich Konvergenz darstellt.

4.1 Netze mit gekrümmten Oberflächen

Bei Netzen mit gekrümmten Elementen besteht für alle Elemente die Notwendigkeit, dass die Jacobideterminante, Glg. 2.24, der Abbildung vom Master- auf das globale Element innerhalb des Gebietes nicht verschwinden darf. Anschaulich bedeutet dies, dass sich Linien, die sich im Masterelement nicht schneiden, dies durch die Abbildung $\mathbf{x}(\xi, \eta, \zeta)$ auch im globalen Element nicht tun.

In Abb. 4.1 ist ein Fall dargestellt, in dem die Bedingung verletzt ist. Man erkennt eine ungültige Geometriebeschreibung eines Viereckselementes mit jeweils fünf äquidistanten Stützstellen in ξ, η -Richtung auf Basis von Lagrangepolynomen. An den Stellen, an denen sich die Höhenlinien mit dem unteren Rand schneiden, ist die Umkehrabbildung nicht mehr eindeutig, die Determinante verschwindet und wechselt das Vorzeichen. Der Verlauf der Jacobideterminante ist rechts daneben in Abb. 4.2 zu sehen.

Es besteht die Möglichkeit die Vernetzung etwas zu glätten, indem man statt der Lagrange Beschreibung über das gesamte Gebiet die von GORDON und HALL entwickelte Blending Funktionen Methode [55], [56] verwendet. Dabei wird die Geometriebeschreibung der äußeren

Ränder in das Element 'reingeblendet'. Das zugehörige Netz mit Verlauf der Jacobideterminante ist in Abb. 4.3, 4.4 zu sehen. Man erkennt, dass die Linien eine gleichmäßigere Verteilung und die Elemente eine deutlich geringere Verzerrung aufweisen.

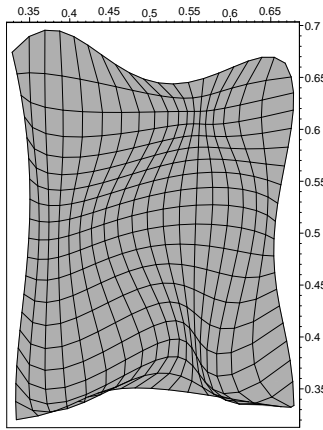


Abbildung 4.1: Ungültiges Netz

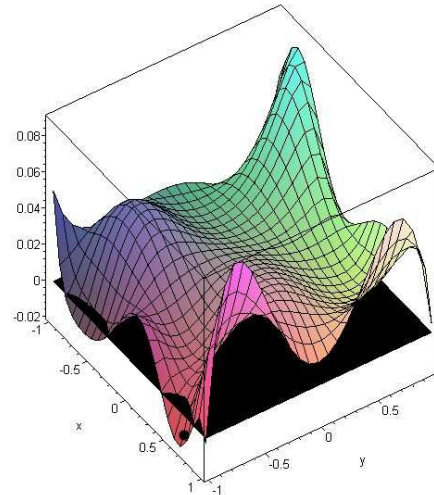


Abbildung 4.2: Jacobideterminante

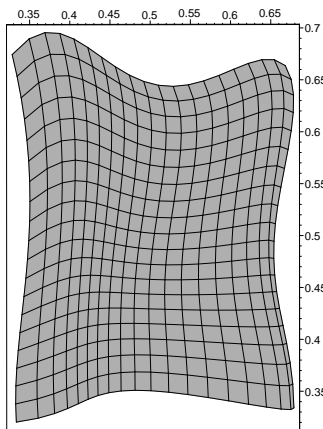


Abbildung 4.3: Geblendetes Netz

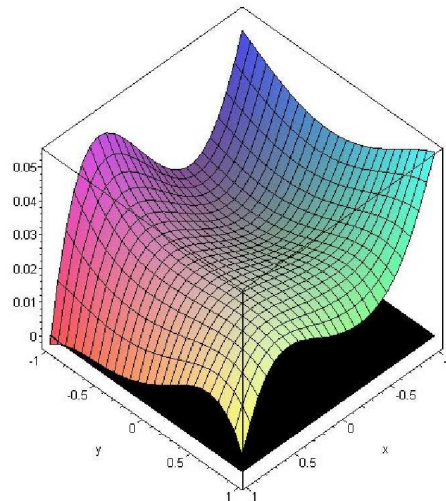


Abbildung 4.4: Jacobideterminante

Die Notwendigkeit, ungültige Elemente zu korrigieren, führt auf die Entwicklung von Tests, die während der Netzgenerierung die Geometriebeschreibung des Elementes überprüfen. Eine Möglichkeit besteht darin, den Rand mit Hilfe von kubischen Bezierpolynomen zu beschreiben, s. Abb. 4.5, 4.6. Bezier Polynome besitzen vier Kontrollpunkte $P_1 - P_4$, mit denen Anfangs-

und Endpunkt sowie Anfangs- und Endsteigung der Kurve definiert werden. Die vier Punkte definieren das so genannte Kontrollpolygon. Eine ungültige gekrümmte Kante besitzt die

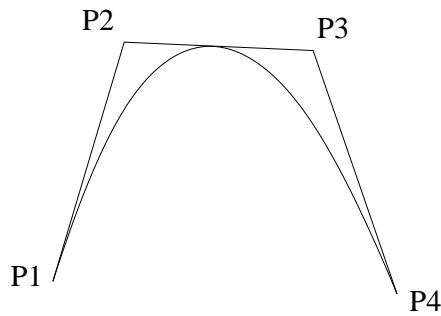


Abbildung 4.5: Bezier Polynom

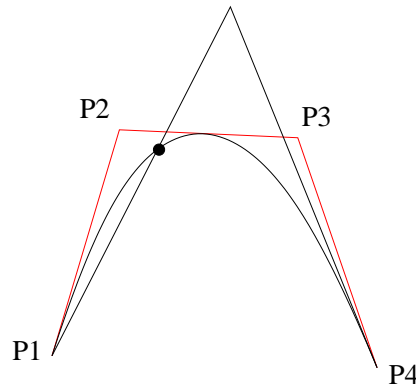


Abbildung 4.6: Ungültiges Element

Eigenschaft, dass ihr Kontrollpolygon sich mit den geraden Kanten des Elementes überschneidet. Eine gültige Elementbeschreibung ist, wie in [80] beschrieben, gleichbedeutend mit der Forderung, dass die Jacobideterminante an den Kontrollpunkten des Polynoms positiv ist. Der Test reduziert sich somit auf die Berechnung der Jacobideterminante an den Kontrollpunkten oder die Schnittpunktbestimmung zweier Linien, wenn man den pathologischen Fall, dass das Polygon die Kanten komplett umschließt, ausschließt.

Nach Vorstellung der grundlegendem Problematik der Eindeutigkeit der Geometriebeschreibung bei gekrümmten Elementen, werden in den folgenden Kapiteln die beiden Methoden

- Polynomielle Interpolation
- Blending Funktionen Methode oder Transfinite Interpolation

für Tetraeder genauer untersucht. Es sei darauf hingewiesen, dass die beiden Methoden verschiedene Ziele verfolgen. Mit Hilfe der ersteren versucht man die Geometrie direkt zu erfassen. Die zweite definiert lediglich das Verhältnis zwischen der Beschreibung des Randes eines Gebiets und der Beschreibung seines Inneren. Eine Verknüpfung beider, als Quasi-regional mapping bezeichnet, wird von KIRÁLYFALVI und SZABÓ in [69] vorgeschlagen.

4.2 Polynomielle Interpolation

Die klassische Interpolation dient im Rahmen dieser Arbeit als polynomielle Beschreibung der Geometrie. Sie stellt somit i.d.R. eine Annäherung einer CAD-Geometrie dar, bei der davon auszugehen ist, dass sie durch NURBS, also durch gebrochen rationale Funktionen, beschrieben wird.

Für Definitionen und weiterführende Erläuterungen zum Thema CAD/NURBS sei an dieser Stelle auf [45], [95] verwiesen.

4.2.1 1D-Interpolation

Zunächst sollen hier die Grundlagen der Interpolation im eindimensionalen Fall zusammengefasst werden. Das Problem der polynomiellen Interpolation einer beliebigen Funktion f besitzt eine lange Historie. Obwohl sich z.B. bereits Newton mit dem Algorithmus der dividierten Differenzen beschäftigt hat, ist das Feld immer noch ein aktives Forschungsgebiet, insbesondere für den mehrdimensionalen Fall. Kurze geschichtliche Abrisse, die ebenfalls als Einführung geeignet sind, finden sich in der Abhandlung von MEIJERING [88] für den eindimensionalen und von GASCA [52] für den mehrdimensionalen Fall.

Der im Folgenden dargestellte Ansatz ist eher ein ingenieurtechnischer als ein mathematischer. Es wird daher auf tiefere theoretische Beweise aus der Funktionentheorie verzichtet. Die konkrete Aufgabenstellung ist folgende:

Gegeben sei eine Funktion $f(x)$. Gesucht ist ein Polynom $p^n(x)$ der Ordnung n , das diese Funktion in $n + 1$ Stützstellen x_i exakt darstellt:

$$p^n(x_i) = f(x_i) \quad i = 1, \dots, n + 1 \quad (4.1)$$

Anmerkung: Ein Polynom der Ordnung n ist eindeutig durch $n + 1$ (verschiedene) Stützstellen beschrieben.

Eine Methode der Konstruktion eines solchen Polynoms ist die Lagrange Interpolation. Dazu werden zunächst die Lagrangepolynome aufgestellt:

$$l_j(x) = \prod_{i=1, i \neq j}^{n+1} \frac{x - x_i}{x_j - x_i} \quad (4.2)$$

Es gilt

$$l_j(x_i) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } i = j \\ 0 & \text{wenn } i \neq j \end{cases} \quad (4.3)$$

Daraus folgt das (eindeutige) Interpolationspolynom zu

$$p_n(x) = \sum_{i=1}^{n+1} f(x_i) l_i(x) \quad (4.4)$$

Man erkennt in der Aufgabenstellung Analogien zur p -Version der FEM, bei der ebenfalls eine 'beliebige' Funktion f durch Polynome approximiert wird. Dementsprechend sollte man auch hier die punktweise Konvergenz einer Folge von Polynomen mit steigendem Polynomgrad erwarten. Dies ist jedoch erstaunlicherweise nicht der Fall [43]. Der Grund liegt in der punktwisen Bedingung 4.1, die für die p -Version nicht gefordert wird. Dieses Ergebnis der Divergenz für die polynomielle Interpolation gilt zumindest für Funktionen f , an die keine weiteren Bedingungen bezüglich ihrer Glattheit gestellt werden, siehe z.B. [116].

4.2.2 Lebesgue Konstante und Fehlerschätzung

Es stellt sich im folgenden die Frage nach der Güte der Approximation, insbesondere die Frage nach dem Einfluss der Stützstellen auf den Fehler $E(f(x), p_n(x))$, wobei E ein zunächst beliebiges Maß sein kann. Eine Möglichkeit den Fehler zu beziffern, ist den maximalen Abstand zwischen originaler Funktion und Interpolationspolynom zu nehmen, also die Maximumsnorm

$$E = \max |f(x) - p_n(x)|, \quad x \in [a, b] \quad (4.5)$$

Die Konvergenz in der Maximumsnorm ist gleichbedeutend mit punktweiser Konvergenz. Für die folgende Argumentation wird von zwei ähnlichen Funktionen $f(x)$, $\hat{f}(x)$ ausgegangen. Ähnlich bedeutet in diesem Fall, dass zwei verschiedene Punktmengen resultierend aus diesen Funktionen

$$F_i = \{f(x_1), f(x_2) \dots f(x_{n+1})\},$$

$$\hat{F}_i = \{\hat{f}(x_1), \hat{f}(x_2) \dots \hat{f}(x_{n+1})\},$$

im Gebiet und somit an den Stützstellen paarweise leicht voneinander abweichen, d.h.

$$f(x) = \hat{f}(x) \pm \varepsilon(x), \quad 0 < \varepsilon \ll 1 \quad (4.6)$$

Die Funktion $\hat{f}(x)$ kann dabei als Variation der ersten aufgefasst werden. Man kann die Funktionswerte $f(x_i)$ auch als korrekte Werte einer physikalischen oder geometrischen Größe betrachten, und $\hat{f}(x_i)$ als eine mit Messfehlern behaftete Messreihe. Man wünscht für diese beiden ähnlichen Funktionen ebenfalls ähnliche Interpolationspolynome, also eine Art Stabilitätsbedingung. Im Folgenden wird sich herausstellen, dass die Lage der Punkte x_i , für die Glg. 4.1 gelten soll, einen großen Einfluss auf den Fehler E besitzt.

Um die Sensitivität der resultierenden Polynome bezüglich der Funktionswerte an den Stützstellen zu erhalten, wird das Interpolationspolynom 4.4 nach diesen differenziert (im Folgenden ist $f(x_i) = y_i$):

$$\frac{dp_n(x)}{dy_i} = l_i(x) \quad (4.7)$$

Fasst man die Sensitivität bezüglich aller Stützstellen zusammen, so erhält man

$$\sum_{i=1}^{n+1} \frac{dp_n(x)}{dy_i} = \sum_{i=1}^{n+1} l_i(x) \quad (4.8)$$

Von Interesse ist entsprechend Glg. 4.5 nun die maximal mögliche Sensitivität in der Maximumsnorm für $x \in [a, b]$:

$$\Lambda_n = \max_{x \in [a, b]} \sum |l_i(x)| \quad (4.9)$$

Des Weiteren wird die Lebesguefunktion Λ definiert:

$$\Lambda = \sum |l_i(x)| \quad (4.10)$$

Λ_n wird als *Lebesguekonstante* bezeichnet, die ausschließlich von der Lage der Stützstellen abhängt. Diese bestimmen somit die Sensitivität des Interpolationspolynoms gegenüber abweichenden Funktionswerten. Man kann erkennen, dass Lagrangepolynome, die mit einer größeren Amplitude oszillieren, zu einer erhöhten Sensitivität des Interpolationspolynoms gegenüber der Lage der Stützstellen führen. Um zur Analogie der Messreihe zurückzukommen:

Möchte man einen möglichst geringen Einfluss von Messfehlern auf das Interpolationspolynom haben, so sollte die Lebesguekonstante einen möglichst geringen Wert annehmen. Dasselbe gilt für zwei Funktionen, von denen angenommen wird, dass in den Stützstellen ähnliche Werte gleichzeitig Ähnlichkeit bedeutet (Glg. 4.6).

Nach der Definition der maßgeblichen Kenngröße Λ_n für die Lage der Stützstellen, werden im Folgenden Fehlerabschätzungen angegeben [102]:

$$\max |f(x) - p(x)| \leq (1 + \Lambda_n) \max_{q(x) \in P_n} |f(x) - q(x)| \quad (4.11)$$

Darin sind $p(x)$ das Interpolationspolynom der Ordnung n und $q(x)$ ein beliebiges Polynom gleicher Ordnung, d.h. die Gleichung gilt für alle Polynome $q_i(x)$ vom Grad n . Die Aussage gewinnt an Schärfe, wenn man annimmt, dass ein nicht (zwangsläufig) interpolatorisches $q^*(x)$ den minimalen Abstand zu $f(x)$ besitzt, d.h. $\max |f(x) - q^*(x)|$ minimal wird.

Des Weiteren kann folgende Fehlerabschätzung angegeben werden:

$$\max |f(x) - p(x)| \leq 6(1 + \Lambda_n)\omega(f, n^{-1}) \quad (4.12)$$

Darin ist

$$\omega(f, \delta) = \max_{|a-b| \leq \delta} |f(a) - f(b)| \quad (4.13)$$

der Modulus der Kontinuität. Gleichung 4.12 beinhaltet somit direkt einen Ausdruck für die Glattheit der zu interpolierenden Funktion. Es lässt sich erkennen, dass bei entsprechendem $\omega(f, \delta)$ bei hinreichend glatten Funktionen die Möglichkeit der punktweisen Konvergenz gegeben ist. In diesem Fall verringert sich $\omega(f, \delta)$ stärker als Λ_n wächst.

Von praktischem Interesse ist ebenfalls die *Lagrange Formel mit Restglied*

$$f(x) - p(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)W(x) \quad (4.14)$$

Hierin ist $f^{(n+1)}(\xi)$ die $(n+1)$ te Ableitung an einer Stelle $\xi \in (a, b)$ und $W(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$. Die Glg. 4.14 ist deshalb interessant, da sie eine Aussage für bekannte, zu interpolierende Funktionen macht. So ist bspw. jede $(n+1)$ te Ableitung von $\sin(x)$ durch 1 beschränkt und somit eine relativ gute Approximation durch Polynome zu erwarten.

Prinzipiell gilt für die Abschätzung der Lebesguekonstante die folgende Beziehung:

$$\Lambda_n \geq \frac{2}{\pi} \log n + c \quad (4.15)$$

Dabei liegt c zwischen 0.5 und 0.75. Dieses Ergebnis bedeutet wie bereits erwähnt, dass für jede Stützstellenmenge gilt: Für $n \rightarrow \infty$ auch $\Lambda_n \rightarrow \infty$ [43].

4.2.3 Stützstellenmengen

Es stellt sich nun die Frage nach den Stützstellenmengen mit der kleinsten Lebesguekonstante Λ_n . Prinzipiell stellen die Ungleichungen 4.11, 4.12 nur Abschätzungen nach oben dar. Sie schließen nicht aus, dass eine Knotenmenge mit größerer Lebesguekonstante nicht doch das bessere Interpolationspolynom liefert als eines mit kleinerer Λ_n . Alle numerischen Experimente sprechen jedoch dafür, dass Stützstellen mit kleinerer Lebesguekonstante ebenfalls bessere Approximationen liefern.

Die Bedingung für eine optimale Lage der Interpolationsknoten x_i ist, dass die Lebesguefunktion 4.10 in allen Abschnitten -begrenzt durch zwei Stützstellen- dasselbe Maximum annimmt, siehe DEBOOR [27]. Dies erkennt man in Abb. 4.7, in der die Lebesguefunktionen für eine equidistante und optimale Punktverteilung dargestellt ist ($n=7$).

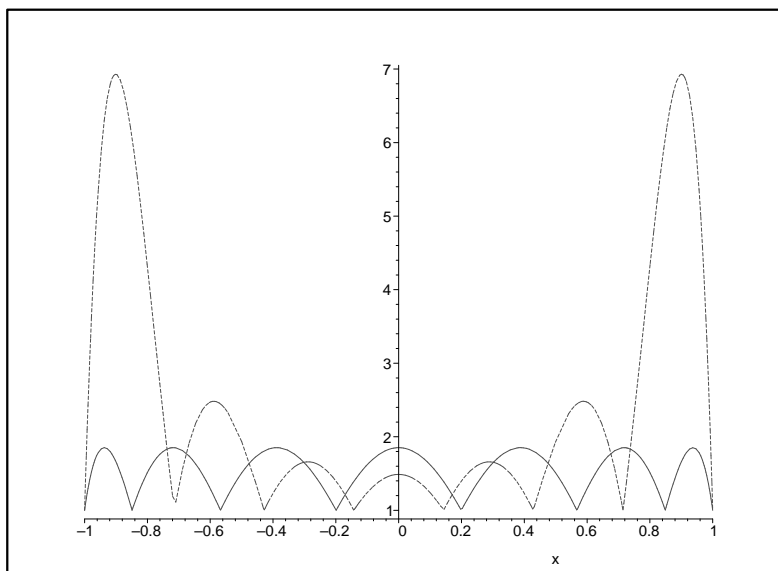


Abbildung 4.7: Lebesguefunktion für optimale (durchgezogen) und equidistante (gestrichelt) Stützstellen ($n=7$)

Im Folgenden werden einige in der Literatur gemachten Vorschläge für das Intervall $x \in [-1, +1]$ diskutiert. Es bestehen Analogien zur Gauss'schen Integration, da auch dort in gewisser Hinsicht optimale Stützstellen gesucht werden. Die Anzahl der Interpolationspunkte ist n , der Laufindex wird durch k gekennzeichnet.

- Äquidistante Knoten:

$$x_{k,n} = -1 + \frac{2(k-1)}{n-1}$$

Hier kann gezeigt werden, dass die Lebesguekonstante

$$\Lambda_n \sim \frac{2^n}{n \log n}$$

exponentiell mit steigendem n anwächst.

- Čebyšev Knoten:

$$x_{k,n} = \cos(2k - 1) \frac{\pi}{2n}$$

Hier gilt die Abschätzung

$$\Lambda_n \leq \frac{2}{\pi} \log n + 1$$

Ein Vergleich mit der Gleichung 4.15 zeigt, dass diese Knotenmenge eine relativ gute Lebesguekonstante aufweist. Weiterer Vorteil ist, dass sie für jede Ordnung n explizit berechenbar ist.

- Erweiterte Čebyšev Knoten:

Hier wird die Knotenmenge noch um -1 und $+1$ erweitert (Variante 1) oder die Knotenmenge auf $[-1, +1]$ skaliert (Variante 2) - Für den Fall, dass der Rand mitinterpoliert werden muss, wie bei der FEM. Solche Basen werden als Kanonische Basen bezeichnet. Beide Knotenmengen besitzen eine schlechtere Lebesguekonstante als die originalen Čebyšev Knoten. Die Lebesguekonstante der Variante 1 ist dabei doppelt so hoch wie die der Variante 2.

- Gauss-Lobatto/Fekete Knoten:

Gauss-Lobatto oder auch Fekete Knoten sind aus der numerischen Integration bekannt. Sie beinhalten im Gegensatz zur normalen Gauss-Legendre Integration die beiden Randknoten $-1, +1$. Für die Lebesguekonstante existieren zwei Abschätzungen (zusammenfassend s. z.B. [13], [12]):

$$\Lambda_n \leq \sqrt{n+1}$$

$$\Lambda_n = O(\log n)$$

Sie besitzen ebenfalls ein gutes Interpolationsverhalten. Eine ihrer mathematischen Eigenschaften ist, dass sie die Vandermonde Determinante (Glg. 4.19) maximieren. Sie werden daher teilweise in der Literatur dementsprechend bezeichnet.

- Optimale Knoten:

Eine explizite Beschreibung für beliebige n ist für diese Knotenmengen nicht verfügbar, weswegen die Čebyšev Knoten z.B. im Bereich der Experimentalphysik für größere Stützstellenmengen ($n > 100$) vorgezogen werden müssen. Die numerischen Werte der Stützstellen wurden bis zur Ordnung 100 von ANGELOS ET AL. in [4] berechnet¹ (s. auch BABUŠKA und CHEN [21]).

Neben der Lagrangeinterpolation gibt es noch andere Interpolationsmethoden, genannt seien hier zwei weitere:

¹Die Autoren stellen dabei ausschließlich den Algorithmus vor.

- Die Hermite Interpolation basiert auf Polynomen höherer Ordnung, die neben den Funktionswerten an den Stützstellen auch deren Ableitungen interpoliert.
- Die klassische Splineinterpolation arbeitet mit kubischen Polynomen und ist der FEM darin relativ ähnlich, als dass sie die Bereiche zwischen den Knoten in gewisser Hinsicht als Element betrachtet. Das Verfahren liefert dementsprechend abschnittsweise definierte Polynome dritter Ordnung mit der Eigenschaft der globalen C_1 Stetigkeit.

4.2.4 Interpolation auf Dreiecken und Tetraedern

Nach dem eindimensionalen Fall soll im Weiteren die Interpolation von Funktionen, bzw. der Geometrie, auf Dreiecken und Tetraedern, d.h. auf dem Simplex, behandelt werden. Eine Übersicht über mehrdimensionale Interpolation ist z.B. in [51] zu finden.

Um die Geometrie eines Dreiecks oder Tetraeders für die Anwendung auf die p -FEM zu interpolieren sind topologische Zwangsbedingungen zu erfüllen. Es muss gefordert werden, dass die Mengen der Interpolationspunkte ausreichend Randpunkte beinhalten, um im Falle zweier benachbarter Elemente geometrische Klaffungen ausschließen zu können. Auf jedem Randobjekt sollte ein der Dimension des Objektes entsprechender vollständiger Ansatzraum dargestellt werden, d.h. beim Durchlaufen einer Kante muss sich ein Polynom der Ordnung n ergeben können und es müssen entsprechend viele $(n+1)$ Knoten auf dieser Kante liegen. Entsprechendes gilt für die Flächen, für die sich der 2D trunk space ergeben muss. Dies sind notwendige Forderungen für die Anwendung der *Blending Funktionen Methode* und praktikable Forderungen für eine sub- oder isoparametrische Darstellung der Geometrie. Folgt man dieser Argumentation, so sind auf den/im:

- Knoten des Tetraeders/Dreiecks: 1
- Kanten : $n - 1$
- Flächen: $(n - 1)(n - 2)/2$
- Inneren: $(n - 1)(n - 2)(n - 3)/6$

Interpolationsstützstellen zu platzieren, analog zu den Ausführungen zu den Ansatzfunktionen in Kap. 3.

Des Weiteren ist eine Symmetrie der Punkteverteilung vorteilhaft, da man davon ausgehen muss, dass keinerlei Informationen zu der zu interpolierenden Funktion vorhanden sind². Dies gilt ebenfalls für die Geometriebeschreibung eines evtl. anzusteuernenden CAD Programms. Diese Forderungen schränken die Wahl der Stützstellen ein und könnten evtl. die Lebesguekonstante der Punktmengen suboptimal gestalten. Untersuchungen zu diesem Thema sind dem Autor jedoch nicht bekannt.

Innerhalb der letzten Jahrzehnte beschäftigten sich verschiedene Autoren mit der Fragestellung nach optimalen Stützstellenmengen auf Dreiecken und Tetraedern. Im Folgenden sollen

²Prinzipiell gelten bezüglich der Symmetrie dieselben Ausführungen wie in Kap. 3.1.3.

zum weiterführenden Studium nur die wichtigsten Artikel jüngerer Vergangenheit aufgeführt werden:

BOS verwendet in [12] analog zu den 1D-Fekete Punkten die Idee der Maximierung der Vandermonde Determinante, um geeignete Stützstellenmengen zu berechnen, s. auch [122]. In [58] wird von HEINRICHS auf deren Basis eine verbesserte Stützstellenmenge berechnet. Das darin erzielte Ergebnis liefert eine unsymmetrische optimale Punktverteilung. Der Autor gibt jedoch auch eine etwas schlechtere symmetrisch verteilte Punktmenge an. Eine physikalische Interpretation wird von HESTHAVEN in [60] verwendet, und zwar die Beobachtung, dass die Nullstellen gewisser Jacobipolynome mit der Gleichgewichtsverteilung einer Menge elektrostatischer Teilchen übereinstimmt. WARBURTON generiert in [124] eine Stützstellenmenge über eine geometrische Verzerrung eines Standardelements mit Hilfe eines zu optimierenden Parameters α . Die Ergebnisse hierin sind höherer Ordnung - ebenfalls für Tetraeder. Dasselbe gilt für die von BLYTH in [11] vorgestellten Punktmengen.

BABUŠKA und CHEN stellen in [21], [22] verschiedene Stützstellenmengen für Dreiecke, bzw. Tetraeder vor, die den oben genannten Ansprüchen genügen. Ihr Ziel ist dabei nicht die Minimierung der Lebesguekonstanten, da sich deren Berechnung für Dreiecke bzw. Tetraeder ihren Angaben zufolge bis dato (1995) zu rechenintensiv ist. Sie minimieren für Dreiecke und Tetraeder die folgende Norm

$$\eta_2 = \min_x \int \sum_{i=1}^{n+1} |l_i(x)|^2 dx, \quad (4.16)$$

wobei sie annehmen, dass die gefundenen Mengen ebenfalls kleine Lebesguekonstanten aufweisen. Die Ergebnisse liegen tabelliert vor.

Zusammenfassend lassen sich für den Anwender die folgenden Schlüsse ziehen:

- Für die Interpolation im eindimensionalen Fall der Ordnung $p \leq 100$ liegen optimale kanonische Stützstellenverteilungen vor [4], [21]. Für höhere Ordnungen sind Čebyšev oder Gauss-Lobatto Verteilungen vorzuziehen.
- Für die Interpolation auf dem Dreieck sind bis zur Ordnung 10 die von HEINRICHS erstellten Knoten [58] und die von BABUŠKA und CHEN [21] fast gleich gut. Für tabellierte Ergebnisse höherer Ordnung sind weiterhin die nach HEINRICHS [58] empfehlenswert.
- Für die Interpolation beliebig hoher Ordnung auf dem Dreieck weisen die von WARBURTON erstellten (explizit berechenbaren) Knotenmengen die kleinste Lebesguekonstante auf [124].
- Für Tetraeder sind die tabellierten Werte nach BABUŠKA und CHEN [22] bis zur Ordnung 9 optimal. Für höhere Ordnungen empfehlen sich wiederum diejenigen nach WARBURTON [124].

Im Rahmen dieser Arbeit wurde aus Gründen der Rechenzeit bzgl. der Berechnung der Jacobi-matrix auf eine Darstellung der Tetraedergeometrie mit Polynomen der Ordnung größer als 9 verzichtet. Grundlage der Geometriebeschreibung sind die Stützstellenmengen nach BABUŠKA

und CHEN [22].

Die Berechnung der zu den Stützstellen gehörenden Interpolationsfunktionen erfolgt wie bereits angesprochen im allgemeinen mehrdimensionalen Fall über die Vandermonde Determinante (Glg. 4.19), da für beliebig verteilte Punktmengen keine explizite Formel wie im eindimensionalen Fall (Glg. 4.2) angegeben werden kann. Ein Sonderfall sind hierbei rasterartige Punktmengen, bei denen sich die Interpolationspolynome aus dem Tensorprodukt der Lagrangefunktionen $l_i(x)$ ergeben. Wir wiederholen an dieser Stelle den Begriff Tensorprodukt $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ von Funktionen, der als Produkt eindimensionaler Funktionen in mehreren Variablen verstanden wird:

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = f_i(x_1)f_j(x_2) \dots f_k(x_n), \quad i, j, \dots, k \in \mathbb{N} \quad (4.17)$$

Für die Interpolationspolynome auf dem Simplex gilt natürlich analog zum eindimensionalen Fall die δ_{ij} Bedingung, Glg. 4.1. Die Berechnung der Funktionen gestaltet sich wie folgt:

Gegeben sei eine polynomielle Basis P^n , die den trunk space der Ordnung m aufspannt

$$n = \frac{1}{6}(m+1)(m+2)(m+3) \quad \text{in 3D.}$$

Die Basisfunktionen seien mit $p_1^n, p_2^n, \dots, p_n^n$ bezeichnet. Jedes Interpolationspolynom l_j lässt sich auf Grund dieser Voraussetzungen als Linearkombination

$$l_j = \sum_{i=0}^n \alpha_i^n p_i^n \quad (4.18)$$

schreiben. Insgesamt werden n Interpolationspolynome gesucht, für die jeweils n Bedingungen 4.1 gelten. Nach Auswertung der Basen an den Stützstellen, die als x_j bezeichnet werden, erhält man eine generalisierte Vandermonde Matrix V

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} p_1(x_1) & p_2(x_1) & p_3(x_1) & \dots & \dots & p_n(x_1) \\ p_1(x_2) & p_2(x_2) & \dots & \dots & \dots & p_n(x_2) \\ p_1(x_3) & \dots & \dots & \dots & \dots & p_n(x_3) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ p_1(x_n) & \dots & \dots & \dots & \dots & p_n(x_n) \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

Die originale Vandermonde Matrix ergibt sich durch Anwendung auf Monome $p_i = x^i$.

Für die j -te Stützstelle gilt

$$\mathbf{V}\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{e}_j \quad (4.20)$$

mit \mathbf{e}_j , dem j -ten Einheitsvektor und $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_0^n, \dots, \alpha_i^n)$. Zur Berechnung der α_i^n Werte ist die Vandermonde Matrix demnach lediglich zu invertieren.

Die Wahl der Basen $p_i(x)$ hat großen Einfluss auf die Kondition der Matrix, was auf die Qualität der Inversen einen großen Einfluß besitzt. Tiefergehende Untersuchungen sind von BLYTH

in [11] gemacht worden. Im Rahmen dieser Arbeit wurden für die p_n die topologisch sortierten Elementansatzfunktionen $\psi_v, \psi_e, \psi_f, \psi_b$ gewählt (s. Kap. 3.3). Liegt für die Stützstellen ein Verteilungsschema analog zu den modalen Basen vor, d.h. gilt für deren Verteilung 3.10 - 3.13, so ergeben sich in gewisser Hinsicht *modale* Lagrange Basen.

Beispiel:

Es sei $m = 3, n = 20$. Es gibt insgesamt 4 Stützstellen auf den Knoten, 12 auf den Kanten und 4 auf den Flächen. Als modale Basen werden ψ_v, ψ_e und ψ_f der Ordnung drei gewählt. Gesucht sei die Lagrange Funktion L für eine Stützstelle A auf einer Kante.

- Die Knotenmoden haben keinen Anteil an dieser Funktion $\alpha_i^{Knoten} = 0$, da sonst die Interpolationsbedingung 4.1 verletzt würde. Man erkennt dies daran, dass man mit keinem anderen Mode einen Funktionswert auf einem Knoten α_i^{Knoten} eliminieren könnte, da dort $\psi_{e,f} = 0$, siehe Abb. 4.8.

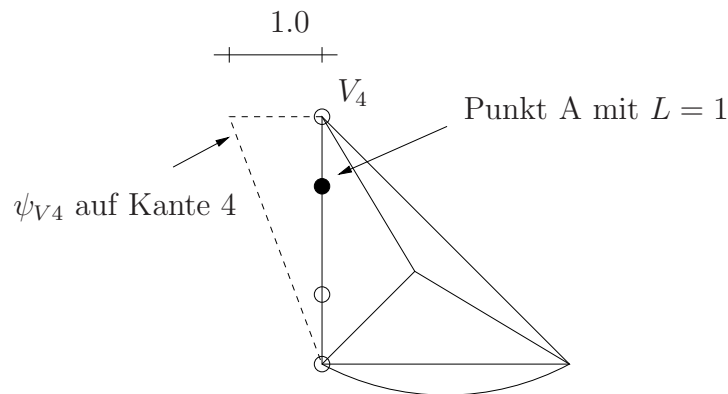


Abbildung 4.8: Knotenmode 4 hat keinen Anteil an L , da sonst $L(V4) \neq 0$

- Es gibt zwei Punkte auf der Kante. Die Interpolationsbedingung (d.h. um auf der Kante an einer beliebigen Stelle eine 1 zu generieren) erzwingt eine Linearkombination der beiden Kantenmoden, da alle anderen Basisfunktionen ψ_e und $\psi_f = 0$ auf der Kante (und $\alpha_i^{Knoten} = 0$) sind, siehe Abb. 4.9.

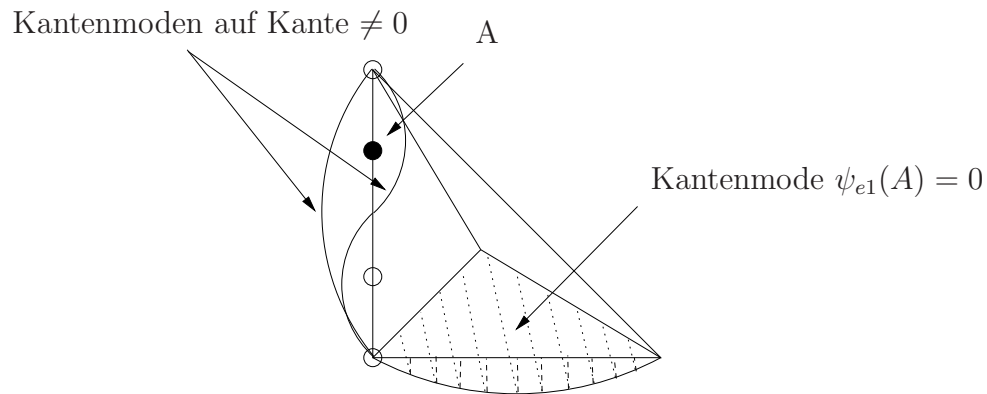


Abbildung 4.9: Nur Kantenmoden auf der Kante haben einen Anteil an L auf der Kante

- Auf den beiden benachbarten Flächen liegt jeweils ein Punkt. Die bisherige Linearkombination der beiden Kantenmoden ist dort i.A. $\neq 0$. Um diese Null zu erzwingen stehen die verbleibenden $\psi_{e,f}$ zur Verfügung. Auf anderen Kanten „lebende“ Moden können daran jedoch nicht beteiligt sein, da sonst keine Möglichkeit besteht, dort die Nullfunktion zu erstellen.
- Dieser Argumentation folgend kann der dortige Funktionswert nur durch die jeweiligen Flächenmoden eliminiert werden (siehe Abb. 4.10).

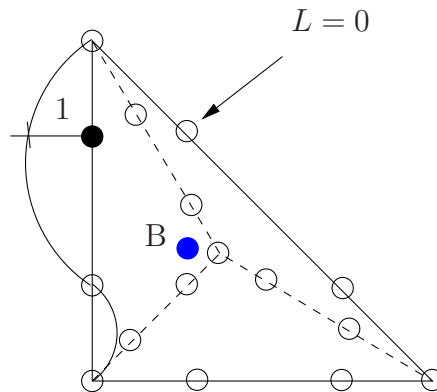


Abbildung 4.10: $L = 0$ gilt für alle Punkte, die mit einem leeren Kreis gekennzeichnet sind. Der Funktionswert von L am blauen Punkt B auf der 'vorderen' Fläche wird durch diesen Flächenmode zu Null gesetzt.

Es ergibt sich somit eine Linearkombination aus zwei Kanten- und zwei benachbarten Flächenmoden, so dass die unter Kap. 3.1 angeführten topologischen Bedingungen erfüllt werden, da diese vier Funktionen auf den übrigen Knoten/Kanten/Flächen verschwinden.

Es lässt sich demnach folgende Aussage treffen: Liegt eine Punktverteilung vor, die der topologischen Sortierung einer modalen Basis entspricht, so sind die resultierenden Lagrangepolynome ebenfalls modal.

Dieses Ergebnis resultiert in einer blockweise strukturierten Inversen der allgemeinen Vandermonde Matrix mit positivem Einfluß auf die Konditionierung des Problems. Die Wahl der Elementansatzfunktionen für die p_i in Glg. 4.19 stellt sich demnach als günstig für die Berechnung der Lagrangepolynome dar.

4.3 Blending Funktionen Methode für Tetraeder

Die von GORDON und HALL entwickelte *Blending function method* [55], [56] ist ebenfalls unter dem Begriff *Transfinite Interpolation* bekannt. Sie ist für Vierecke und Hexaeder gut etabliert [69], während sie für Tetraeder auf Grund der rationalen Blending Terme im Rahmen dieser Arbeit keine guten Ergebnisse lieferte. Die folgenden Darstellungen der Methode erfolgen analog zu den beiden p -FEM Büchern [117], [120].

Die Idee der Blending Funktionen Methode ist es, die topologischen Einheiten durch Funktionen von der Dimension ihrer Mannigfaltigkeit zu approximieren und durch Multiplikation mit einem Blending Term auf den anderen Kanten/Flächen zu eliminieren. Konkret bedeutet dies, dass man zur Beschreibung von Kanten eindimensionale und für Flächen zweidimensionale Polynome verwendet. Diese werden mit einer weiteren Funktion multipliziert und somit in das Element geblendet.

Die Vorgehensweise für ein Simplex besteht in einer aufeinander folgenden Approximation der Geometrie durch Knoten, Kanten und Flächen (in dieser Reihenfolge). Dadurch werden Null-Randbedingungen für die Kanten und Flächen erzwungen. Man kann dies als eine Projektion der Geometrie zunächst auf die Knoten sehen. Die Differenz wird dann auf die Kanten projiziert und schließlich diese Differenz wieder auf die Flächen. Die Abbildung beinhaltet einige unangenehme gebrochene rationale Funktionen, die an den Knoten und Kanten nicht definiert sind. Die mathematische Beschreibung des Verfahrens ist folgende:

Gegeben sei eine exakte Geometriebeschreibung

$$X = X(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \begin{pmatrix} x(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \\ y(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \\ z(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

Zunächst werden die Knotenwerte ausgewertet, was als lineare Approximation der Geometrie mit Hilfe der linearen Ansatzfunktionen interpretiert werden kann.

$$X_v = \sum_{i=1}^4 X_i X(P_i)$$

mit $X(P_i)$ den linearen Ansatzfunktionen.

Im nächsten Schritt wird die Differenz $X - X_v$ auf die Kanten projiziert. Das erfolgt wegen der nicht definierten Funktionswerte der Kanten-Blending Terme EB_i an den Knoten (s.u.) erst im zweiten Schritt. Die darzustellende Funktion \hat{X}_v wird hier nun zu null. Mit

$$\hat{X}_v = X - X_v \quad (4.22)$$

$$X_e = \sum_{i=1}^6 EB_i \hat{X}_v(E_i) \quad (4.23)$$

erhalten wir eine exakte Darstellung X_{ev} der Geometrie auf den Kanten.

$$X_{ev} = X_v + X_e \quad (4.24)$$

Vor der Projektion der verbleibenden Geometrie auf die Flächen wird noch auf Details des Kanten-Blendings eingegangen. Wir diskutieren ausschließlich den Blending Term EB_1 für Kante 1 (für das $[-1, +1]^3$ Tetraeder). Die Argumentation läuft für die anderen Kanten analog. Der Blending Term EB_1 für diese Kante ist folgender:

$$EB_1 = 4 \frac{(\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 + 1)(1 + \xi_1)}{(4 + 2\xi_1 + \xi_2 + \xi_3)(2\xi_1 + \xi_2 + \xi_3)} \quad (4.25)$$

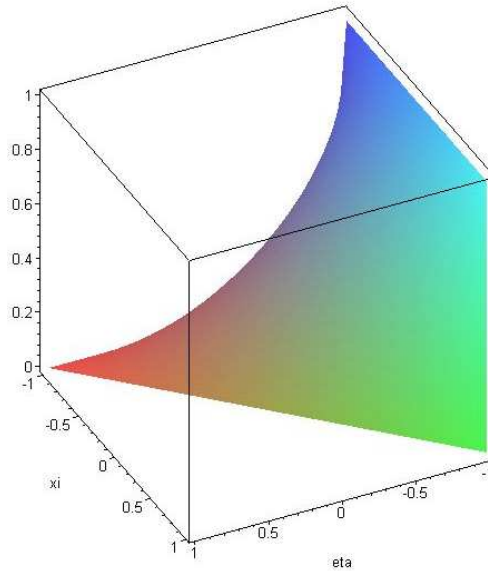


Abbildung 4.11: Kanten Blending Term

Die Funktion (auf der Fläche 1, $\xi_3 = -1$) ist in Abb. 4.11 zu sehen. Für Kante 1 gilt $\xi_3 = -1$ und $\xi_2 = -1$. Setzt man dies in EB_1 ein, erhält man:

$$EB_1|_{Kante1} = 4 \frac{(\xi_1 + -1 + -1 + 1)(1 + \xi_1)}{(4 + 2\xi_1 + -1 + -1)(2\xi_1 + -1 + -1)} = 4 \frac{(\xi_1 - 1)(1 + \xi_1)}{2(1 + \xi_1)2(\xi_1 - 1)} = 1$$

Auf den Kanten 3, 4 und 6 gilt $\xi_1 = -1$, wodurch der Zähler zu null wird. Für Kante 2 ($\xi_1 = -\xi_2$, $\xi_3 = -1$) und für Kante 5 ($\xi_2 = -1$ und $\xi_1 = -\xi_3$) ebenso. Eine exakte Untersuchung liefert ebenfalls, dass im Innern des Tetraeders durch den Bruch keine Singularitäten auftreten.

Der Blending Term EB_1 erfüllt demnach die folgenden Anforderungen:

$$EB_1 = \begin{cases} 1 & \text{für Kante 1} \\ 0 & \text{für alle anderen Kanten} \end{cases} \quad (4.26)$$

Würden diese Bedingungen nicht erfüllt, so würden weitere Kanten durch die Geometriebeschreibung der Kante 1 ebenfalls verzerrt. Der Funktionswert ist an den Randknoten der Kante 1 nicht definiert (0 oder 1). Dies stellt sich aber für die Darstellung der Geometrie selbst als unproblematisch heraus, da durch die vorhergehende Projektion X_v auf die Knoten an diesen Stellen der 'Rest' X_e verschwindet. Neben der Funktion selbst sind allerdings auch die Ableitungen an diesen Punkten nicht definiert, was für die Berechnung der Jacobimatrix, bzw. -determinante von Bedeutung ist.

Die Funktion X_{ev} wird dem Schema entsprechend im nächsten Schritt auf die Flächen projiziert. X_{ev} ist nun gebrochen rational wie man an Glg. 4.23-4.25 erkennen kann. D.h. selbst

wenn die vorherige exakte Geometriebeschreibung polynomial war, dann ist sie es jetzt nicht mehr. Ein deutlicher Nachteil dieser Methode, wenn man Polynome zur Geometriebeschreibung verwenden möchte.

Wir diskutieren hier nur den Blending Term für die Fläche 1. Die Argumentation ist für die anderen Flächen analog. Der Flächen-Blending Term für Fläche 1 ist:

$$FB_1 = \frac{(1 + \xi_2)(1 + \xi_1)(\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 + 1)}{(-1 + \xi_1 + \xi_2 - \xi_3)(\xi_2 + 2 + \xi_3)(\xi_1 + 2 + \xi_3)} \quad (4.27)$$

Für Fläche 1 gilt $\xi_3 = -1$. Setzt man das in FB_1 ein,

$$FB_1|_{F_1} = \frac{(1 + \xi_2)(1 + \xi_1)(\xi_1 + \xi_2 - 1 + 1)}{(-1 + \xi_1 + \xi_2 + 1)(\xi_2 + 2 - 1)(\xi_1 + 2 - 1)} = \frac{(1 + \xi_2)(1 + \xi_1)(\xi_1 + \xi_2)}{(\xi_1 + \xi_2)(\xi_2 + 1)(\xi_1 + 1)} = 1$$

Für Fläche 2 ($\xi_2 = -1$), Fläche 4 ($\xi_1 = -1$) und Fläche 3 ($\xi_3 = -1 - \xi_1 - \xi_2$) wird der Zähler zu null. Wir haben wieder gebrochen rationale Funktionen, so dass man Singularitäten im Innern überprüfen muss. Wir führten Funktionsauswertungen auf einem äquidistanten Raster durch. Auf den Kanten sind die Funktionen nicht definiert (1 oder 0). Das macht auch hier keine Probleme, da die zu interpolierende Funktion \hat{X}_{ev} dort verschwindet. Für die Ableitungen gilt dieselbe Argumentation wie für Kanten, d.h. diese sind auf den Kanten nicht definiert.

Wir können nun den restlichen Teil der Geometrieabbildung

$$\hat{X}_{ev} = X - X_{ev} \quad (4.28)$$

durch

$$X_f = \sum_{i=1}^4 FB_i \hat{X}_{ev}(F_i) \quad (4.29)$$

ausdrücken. Die komplette Abbildung erhält man somit durch

$$X = X_{vef} = X_v + X_e + X_f \quad (4.30)$$

Die in dieser Arbeit getesteten Blending Terme sind durch Umrechnung der von SOLIN ET AL. [117] in baryzentrischen Koordinaten angegebenen Blending Terme auf das $[-1; +1]^3$ Tetraeder ermittelt worden und sind in Anhang C angegeben.

Wie bereits angedeutet führte die Blending Funktionen Methode für Tetraeder im Rahmen dieser Arbeit zu nicht zufriedenstellenden Ergebnissen. Die resultierenden Spannungen zeigten bspw. für den Patch-Test, Achteckkugel unter hydrostatischem Druck, im Bereich der Kanten deutliche Abweichungen von der exakten Lösung. Grund hierfür könnten neben dem oben erwähnten Nachteil des Nicht-Erhalts von polynomial beschriebenen Oberflächen vor allem die Ableitungen auf Knoten und Kanten sein. Probleme mit dieser Form der Geometriebeschreibung hat auch DEY in [30], [29] erwähnt. Der Autor verliert für ein glattes Problem durch die Verwendung rationaler Blending Terme die exponentielle Konvergenz der p -FEM Lösung in der globalen (verschmierenden) Energienorm.

Die Geometrieabbildung wurde im Rahmen dieser Arbeit daher in einem sub-, bzw. isoparametrischen Konzept durchgeführt. Die polynomielle Beschreibung der Geometrie erfolgt durch Interpolation in den in [22] tabellierten Stützstellen. Die Funktionswerte in den Interpolationspunkten wurden entsprechend dem vorherigen Abschnitt (s. Glg 4.19, 4.20) mit Hilfe einer allgemeinen Vandermonde Matrix in die Ansatzbasis umgerechnet.

4.4 Beispiele

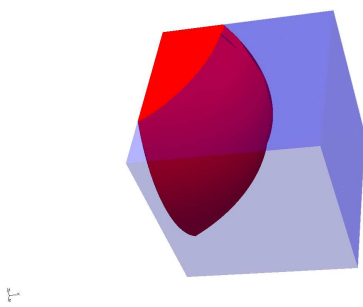


Abbildung 4.12: Bsp.1 - bestanden

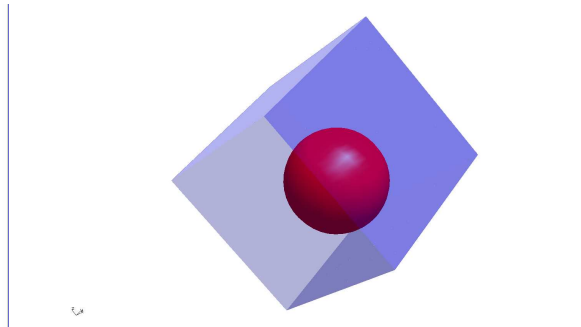


Abbildung 4.13: Bsp.2 - bestanden

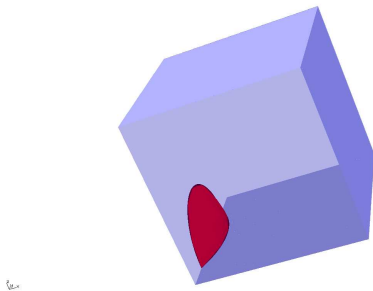


Abbildung 4.14: Bsp.3 - NICHT bestanden

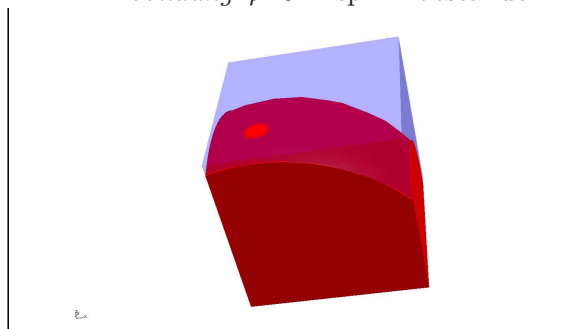


Abbildung 4.15: Bsp.4 - NICHT bestanden

Im Folgenden werden die Möglichkeiten der umgesetzten Geometriebeschreibung und die Anbindung an den Netzgenerator Netgen [109], [108], mit dem hier alle gezeigten Gebiete vernetzt wurden, anhand von Beispielen aus der linearen Elastizitätstheorie aufgezeigt. Die exportierten Netze wurden an ca. 700 Punkten anhand des Vorzeichenwechsels der Jacobideterminante innerhalb eines Elementes auf ihre Gültigkeit überprüft.

4.4.1 Patch Test mit gekrümmten Elementen

Der Patch Test, der in Kap 3.5.2 (s. Abb. 3.28) an Elementen mit linearer Geometrie durchgeführt wurde, wird nun auf verschiedene Netze mit Elementen mit gekrümmten Oberflächen erweitert. Die Volumenkörper zur Erstellung der Netze sind in den Abbildungen 4.12-4.15 dargestellt. Hierbei werden die roten und blauen Teilbereiche getrennt, aber konform vernetzt. Die Geometriebeschreibung ist polynomial bis zur Ordnung 9. Der Patch Test wird für rela-

tiv gutartige Geometrien bestanden, Abb. 4.12, 4.13. Allerdings hat die verwendete Netgen Version Probleme bei relativ flachen Schnittflächen, s. Abb. 4.14, 4.15³.

4.4.2 Achtelkugel unter hydrostatischem Druck

Ein weiteres Beispiel, für das eine analytische Lösung vorliegt, ist eine Kugel unter hydrostatischem Druck, deren Spannungszustand durch drei gleiche Hauptspannungen und ein in radialer Richtung lineares Verschiebungsfeld gekennzeichnet ist. Aus Symmetriegründen genügt auch hier die Betrachtung eines Achtels der Kugel mit Null Verschiebungsrandbedingungen in Normalenrichtung. Die Problemstellung ist in Abb. 4.16 dargestellt. Das Gebiet wurde mit

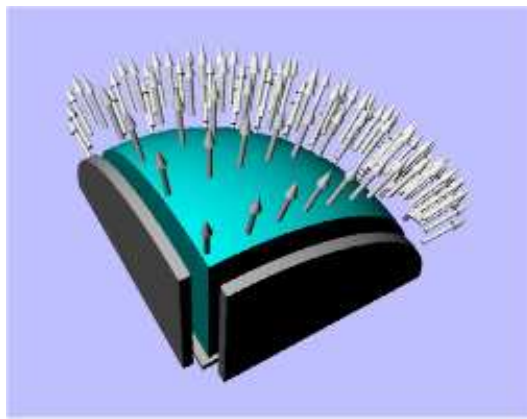
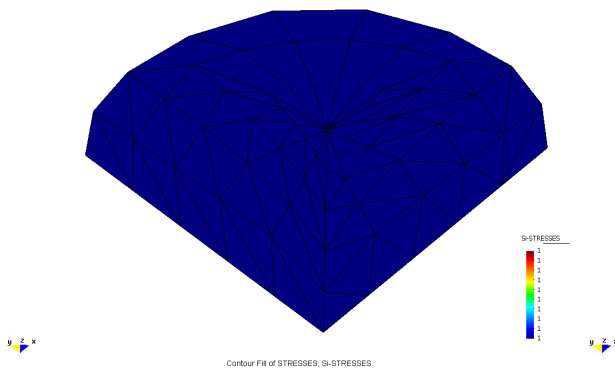


Abbildung 4.16: Achtelkugel

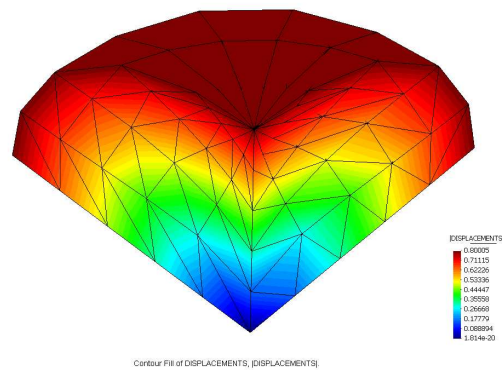
einem Tetraederelement vernetzt. Die Berechnung erfolgte für die Polynomräume mit Ansatzgrad vier bis neun. Die Ergebnisse zeigen bis auf Geometriefehler die exakte Lösung für die Spannungen. Material und Last wurden so gewählt, dass die maximale Radialverschiebung $u_{r,Ex,max} = 0.8$ beträgt. Ein isoparametrischer Ansatz der Ordnung $p = 9$ führte zu einem Vergleichswert von $u_{r,Fe,max} = 0.8005$, der auf die durch Netgen nur angenäherte Geometrie zurückzuführen ist. Ein selbst erstelltes Vergleichsnetz lieferte für die FE-Lösung die exakte Maximalverschiebung. In den Abbildungen 4.17, 4.18 werden die Ergebnisse für $p = 9$ dargestellt, wobei das dargestellte feine Tetraedernetz nicht das Berechnungsnetz ist (dieses besteht nur aus einem Element), sondern lediglich zum Postprocessing verwendet wird. Der verwendete Postprozessor ist *GID* [50].

Dieses Beispiel wurde ebenfalls mit einer Geometriebeschreibung auf Basis der Blending Funktionen Methode berechnet. Die resultierenden Spannungen zeigten an den Kanten deutliche Oszillationen, was vom Autor auf die schwierig zu handhabenden partiellen Ableitungen zurückgeführt wird.

³Persönliche Gespräche mit J. Schöberl (Netgen Entwickler) bestätigten, dass in solchen Fällen Probleme entstehen können.



Contour Fill of STRESSES, [I1-STRESSES]



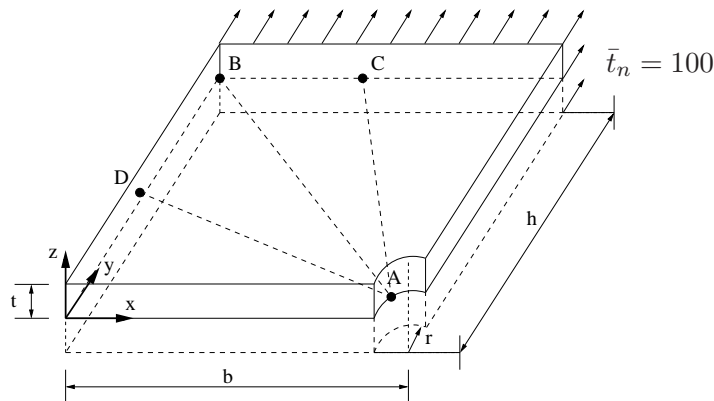
Contour Fill of DISPLACEMENTS, [DISPLACEMENTS]

Abbildung 4.17: Erste Spannungsinvariante

Abbildung 4.18: Radialverschiebungen

4.4.3 Lochscheibe

Ein klassisches Benchmark Problem für dreidimensionale Probleme der Strukturmechanik ist eine axial beanspruchte Lochscheibe, s. z.B. [41]. Die aus Symmetriegründen reduzierte Problembeschreibung ist aus Abb. 4.19 ersichtlich. Die Randbedingungen des reduzierten Systems sind Verschiebungsfreiheit in Normalenrichtung an den an das Loch angrenzenden Flächen. Das Netz ist in Abb. 2.3 dargestellt. Die hier angesetzten Materialparameter sind $E = 206900$, $\nu = 0.29$ und die aufgebrachte Last beträgt $\bar{t}_n = 100$.

Abbildung 4.19: Lochscheibe unter Randlast, Dicke $t = 1$

Als Referenzlösung wird eine Hexaeder-Berechnung auf einem feinen Netz aus 2280 Elementen mit bis zu 615788 Freiheitsgraden (Polynomgrad $p = 8$) verwendet, bei der sich die Dehnungsenergie, $W = 2.4748111071$, vom Schritt $p = 7$ auf $p = 8$ nicht mehr verändert. Die Berechnung auf einem Tetraedernetz mit einer Geometriebeschreibung der Ordnung 9 auf 84 Elementen ergibt eine Dehnungsenergie von $W = 2.474860702$. Die Ansatzordnung beträgt dabei $p = 10$, was zu 46660 Freiheitsgraden führt. Die Abweichung vom Referenzergebnis beträgt somit $2.0 \times 10^{-3}\%$. Auch in diesem Fall ist streng genommen keine Konvergenz auf-

grund der inexakten Geometriebeschreibung zu erwarten⁴. Untersucht wird im Folgenden die Vergleichsspannung, die in den Abb. 4.20 und 4.21 zu sehen ist. Die Ergebnisse sind optisch nicht mehr unterscheidbar.

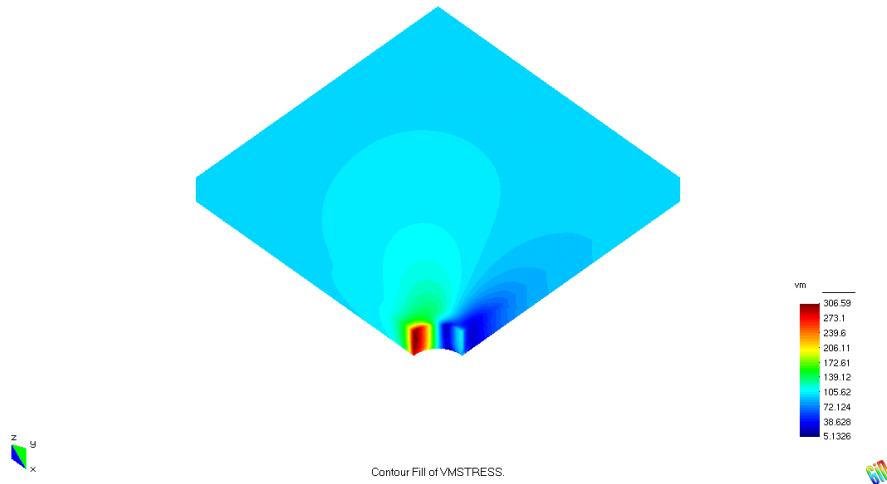


Abbildung 4.20: S_{vgl} -Hex Berechnung / 615788 DOF

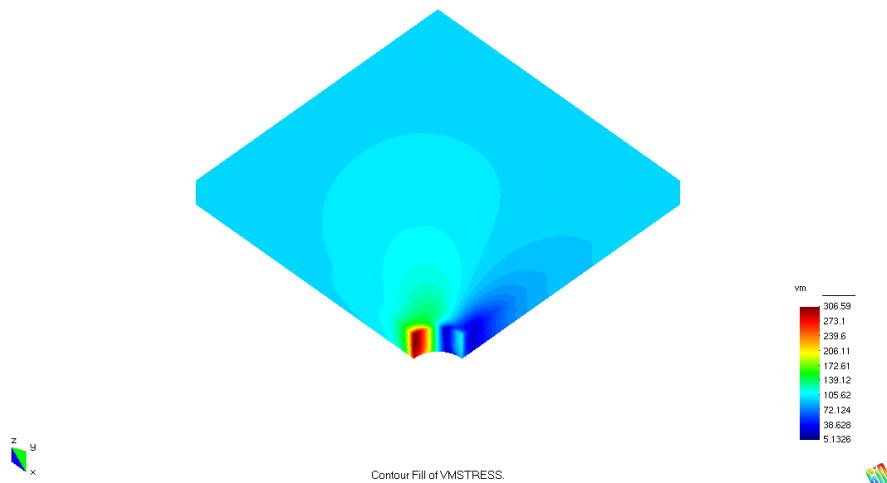


Abbildung 4.21: S_{vgl} -Tet Berechnung / 46660 DOF

⁴Bei höher werdender Genauigkeit der Approximation der Geometrie durch steigende Polynomgrade ist auch mathematisch gesehen Konvergenz zu erwarten. Zu beachten sind allerdings die Ausführungen in Kapitel 4.2.

4.4.4 Scordelis-Lo Schale

Ein ebenfalls klassisches Benchmark Problem ist die Schalenstruktur nach SCORDELIS und LO [112]. Die Struktur steht unter Eigenlast. Sie wird an den Querrändern in zwei Koordinatenrichtungen fixiert, s. Abb. 4.22. Als Referenzlösung wird die von RANK ET AL. in [98] durch Extrapolation erhaltene (s. Kap. 2.3.3) Dehnungsenergie von $SE = 3.933076912 \times 10^{-3}$ verwendet. Die Tetraederberechnung wird auf einem Netz mit 677 Elementen und einer Geometriebeschreibung der Ordnung $p = 4$ vorgenommen. Das Netz der extrem dünnen Schale ist in Abb. 4.23 dargestellt. Man erkennt aufgrund der Größe der Elemente, dass die für die h -Version notwendigen Begrenzungen des *aspect ratio*, d.h. die zulässigen Innenwinkel- und Seitenlängenbeschränkungen, bei diesem Beispiel deutlich überschritten werden. Die Ansatz-

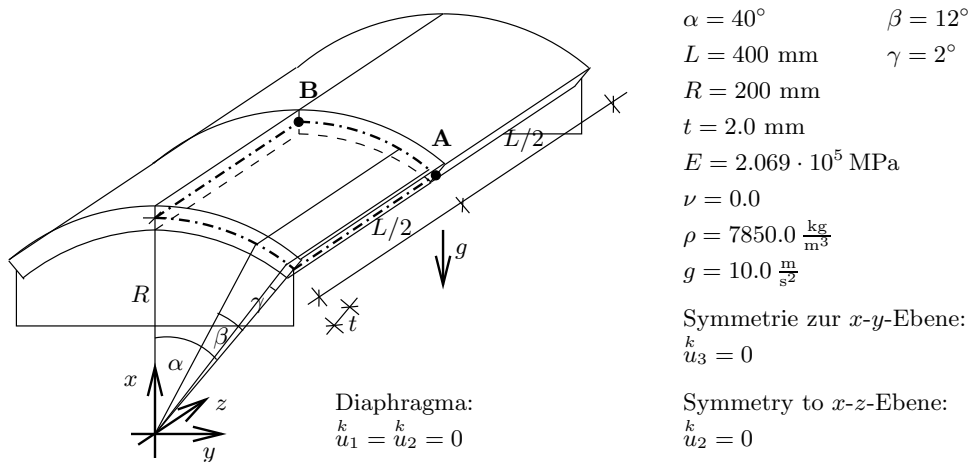


Abbildung 4.22: Scordelis Lo Schale unter Eigenlast

ordnung beträgt $p = 7$, was zu 133840 Freiheitsgraden führt und schließlich zu einer Dehnungsenergie von $SE = 3.933054564 \times 10^{-3}$. Die Abweichung von der Referenzlösung beträgt somit $5.7 \times 10^{-4} \%$.

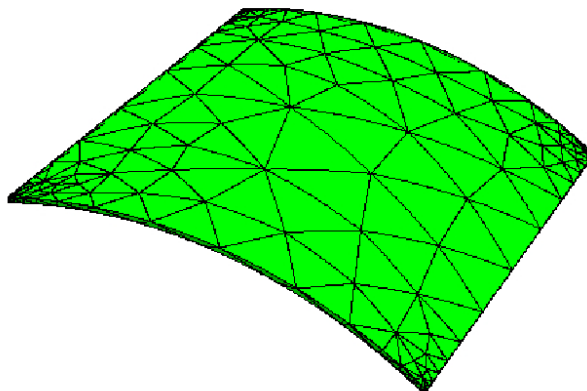


Abbildung 4.23: Scordelis Lo -Netz

4.4.5 Halbkugelförmige Schale mit Versteifungsring

Als weiteres Beispiel wird die in Abb. 4.24 dargestellte halbkugelförmige Schale mit Versteifungsring im Sinne einer vollen 3D linearen elastischen Theorie analysiert. Der Ring wird am unteren Ende aufgelagert. Die Belastung erfolgt durch eine Normalbeanspruchung auf der gesamten äußeren Oberfläche sowie durch Eigenlast. Auch hier reduziert sich das zu untersuchende System aufgrund von Symmetriebedingungen auf ein Viertel. Die stärkste Singularität der exakten Lösung wird an der inneren Berührungskante Schale-Versteifungsring erwartet. Als

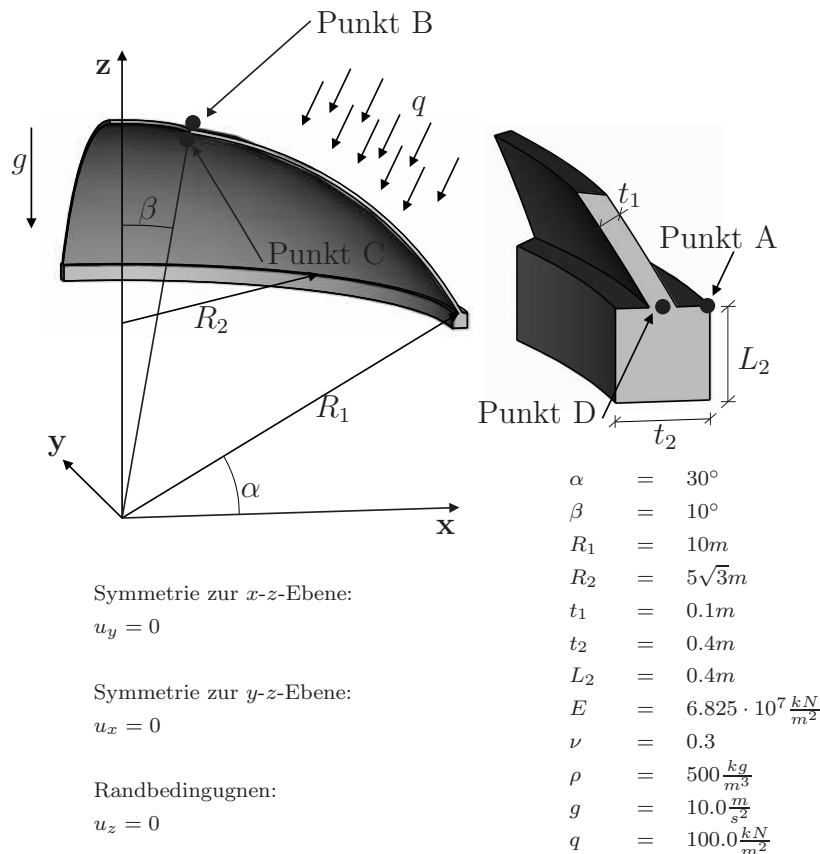


Abbildung 4.24: Halbkugelförmige Schale mit Versteifungsring

Referenzlösung für das System dienen die von RANK ET AL. in [98] ebenfalls auf Basis einer vollen linear elastischen Theorie veröffentlichten Ergebnisse (117 Elemente), mit denen jedoch bezüglich Performance und Genauigkeit in keinsten Weise konkurriert werden kann. Während in [98] ein 'von Hand' generiertes Hexaedernetz verwendet wurde, das sich möglichst optimal der zu erwartenden Lösungscharakteristik anpasst, d.h. hierbei wurde ein Netz verwendet, das sehr große Elemente im Bereich der Schale, eine geometrische Verfeinerung in Richtung der zu erwartenden Singularitäten und die Anisotropie der Lösung (geringerer Ansatzgrad in Dickenrichtung) ausnutzt, wird hier mit Netgen nur aufgrund der vorgegebenen Geometrie ein Netz erzeugt. Des Weiteren lieferte Netgen 4.5 bei einer kubischen Geometriebeschreibung ein gültiges Netz erst ab einer Elementanzahl von 2935 (s. Abb. 4.25), so dass man die Analyse als eine eher beschränkte p -Berechnung auf einem h -Netz beschreiben kann. Ein besseres Konvergenzverhalten würde mit einer deutlich geringeren Anzahl von Elementen erzielt.

In den Abbildungen 4.26 - 4.29 sind die Absolutverschiebungen und Vergleichsspannungen für die Punkte C und D dargestellt. Für die Punkte A und B ergeben sich vergleichbare Ergebnisse.

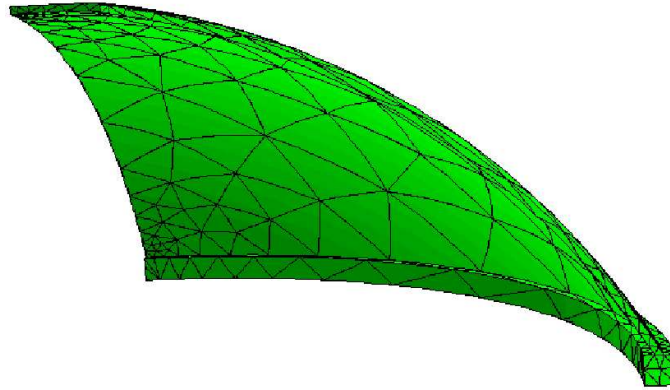


Abbildung 4.25: Schale mit Zugring -Netz

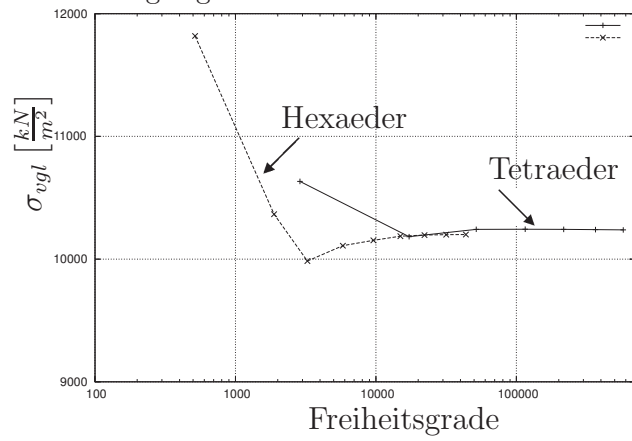
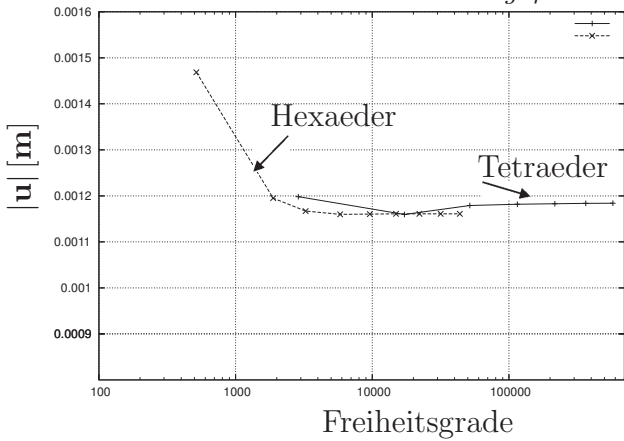


Abbildung 4.26: Absolutverschiebungen Punkt C

Abbildung 4.27: Vergleichsspannungen Punkt C

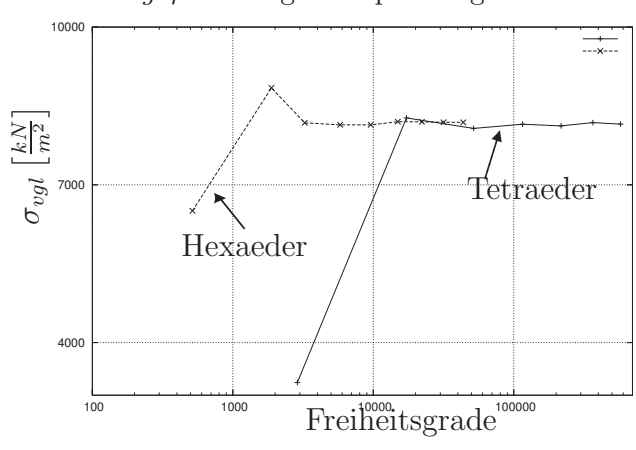
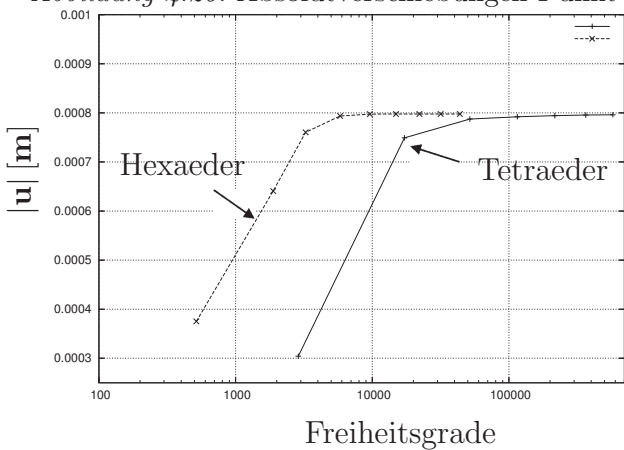


Abbildung 4.28: Absolutverschiebungen Punkt D

Abbildung 4.29: Vergleichsspannungen Punkt D

4.4.6 Turbine

Um die Möglichkeiten der gekrümmten Tetraederformulierung aufzuzeigen wurde des Weiteren als Beispiel die in Abb. 4.30 als Netz dargestellte Turbine gewählt.

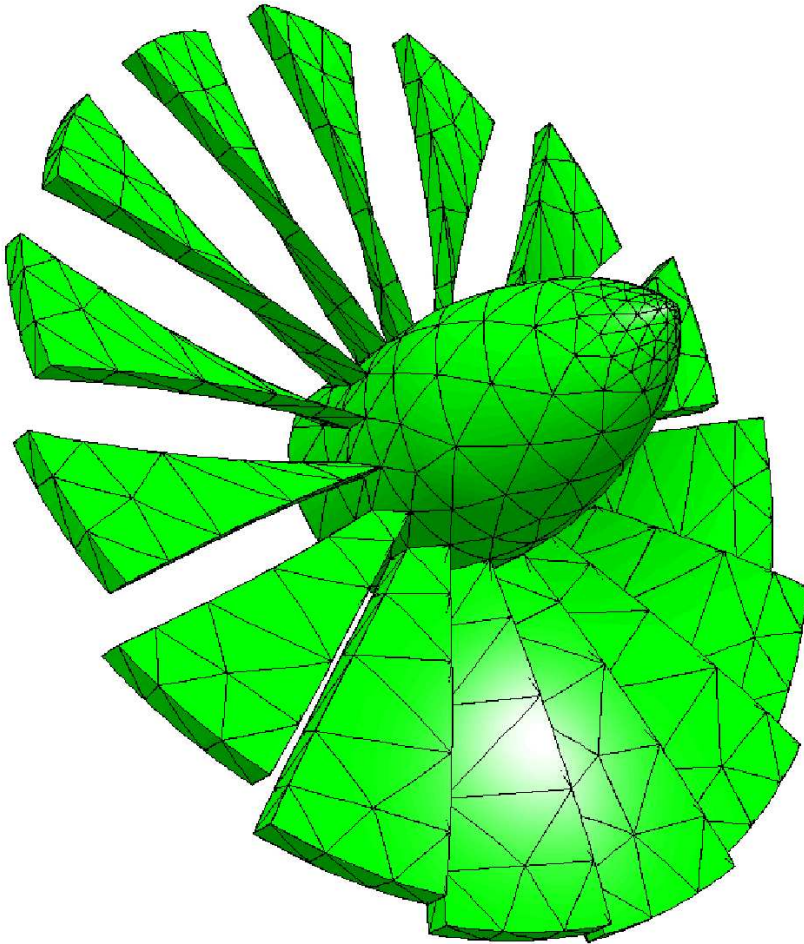


Abbildung 4.30: Turbinenvernetzung

Auch bei diesem Beispiel steht nicht die physikalische Realität im Mittelpunkt, sondern die Möglichkeiten der im Rahmen dieser Arbeit aufgezeigten Methodik. Die Anzahl der Elemente beträgt $n = 1414$, die Geometriebeschreibung erfolgt mit der Ordnung $q = 2$. Der Staudruck auf die Rotorblätter wird durch eine konstante Normalkraft modelliert. Die Ergebnisdarstellung beschränkt sich hier auf die Vergleichsspannung σ_{vgl} , Abb. 4.32, bei der die Spannungsspitzen an den Befestigungspunkten der Rotorblätter deutlich hervortreten und auf die Verschiebung in Axialrichtung, Abb. 4.32.

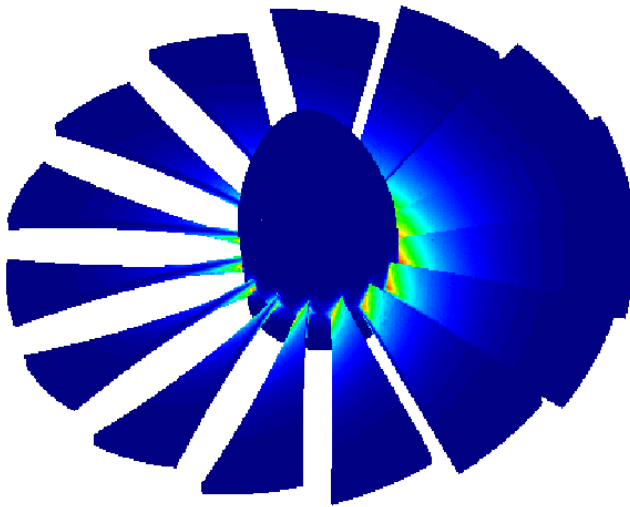


Abbildung 4.31: von Mises Vergleichsspannung

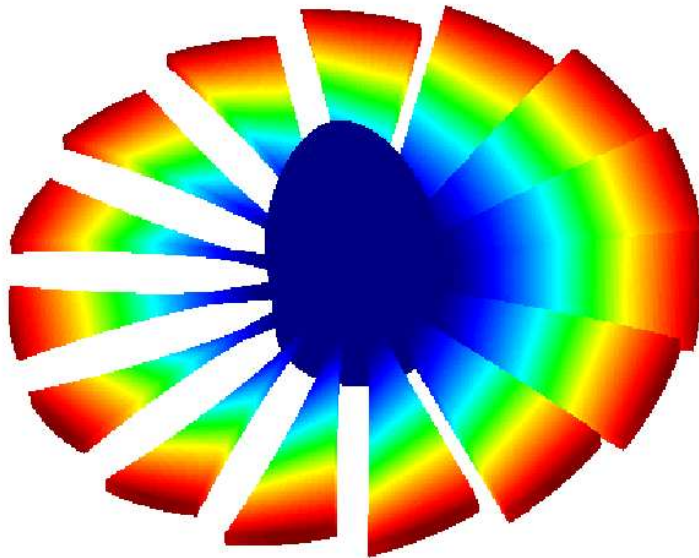


Abbildung 4.32: Verschiebung (axial)

An den Abbildungen 4.31 und 4.32 ist ein symmetrischer Spannungs- und Verschiebungsverlauf zu erkennen. Dieses Ergebnis ist plausibel, ebenso wie die Spannungsspitzen an den Auflagern der in sich verdrehten Rotorblätter.

Kapitel 5

Die Mortar Element Methode

Die Mortar Element Methode gehört zur Gruppe diskontinuierlicher Finite Elemente Verfahren, die die Forderung der C_0 Stetigkeit an den Ansatzraum der FE-Lösung innerhalb des Gebietes Ω aufhebt. Sie fordert stattdessen eine Gleichheit der Näherungslösung \mathbf{u}_{Fe} in einem integralen (abgeschwächten) Sinn, i.d.R. lediglich an einigen Elementrändern Γ_i innerhalb des Gebietes. Der maßgebliche Vorteil des Verfahrens liegt darin, dass mit ihm konvergente Finite Elemente Berechnungen auf nicht-konformen Netzen durchgeführt werden können. Unter einem nicht-konformen Netz wird in diesem Zusammenhang verstanden, dass die Begrenzung (Knoten in 2D, Kanten in 3D) von Elementrändern benachbarter Elemente nicht zusammenfallen (s. Abb. 5.1). Das Mortar Verfahren führt entlang dieser Ränder eine Gebietsteilung durch, separiert die Gebiete und 'mörtelt' (engl. mortar = Mörtel) diese wieder zusammen.

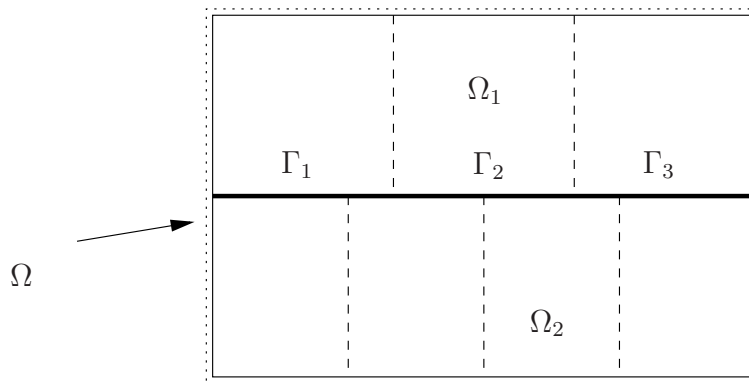


Abbildung 5.1: Nicht-konformes Netz und Teilung des Gesamtgebietes Ω in zwei Teilgebiete Ω_1, Ω_2

Die Mortar Methode geht auf BERNARDI ET AL. [10] zurück. Sie existiert in verschiedenen Varianten. Das ursprüngliche Verfahren beruht auf einer vorweggenommenen Beschränkung des Ansatzraums und anschließendem Einsetzen in die schwache Form 2.16. Die zweite Formulierung, die auch im Rahmen dieser Arbeit angewendet wurde, lässt sich in die Theorie der Lagrangen Multiplikatoren einbetten. Vorgestellt wurde sie von BELGACEM [9]. Diese Variante erlaubt die Identifikation der zu diskretisierenden Lagrangen Multiplikatoren mit Spannungen, die auf der Kontaktfläche zwischen beiden Teilgebieten wirken. In diesem Zu-

sammenhang spricht man von einer gemischten Variationsformulierung, da mehrere zusammenhängende Größen, in dem Fall Verschiebungen und Spannungen als Größen im Variationsproblem vorkommen. Mathematisch betrachtet handelt es sich um ein Sattelpunktproblem, für das eindeutige Konvergenzbedingungen aus der Funktionalanalysis anwendbar sind. Die maßgebenden Kriterien, so die inf-sup Bedingung, bzw. die LBB-Bedingung (Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi), die von der FE-Diskretisierung zu erfüllen sind, sind in [17] spezifiziert.

Es sind verschiedene Derivate des Mortar Verfahrens in der Literatur zu finden, deren Gemeinsamkeiten sich aus ingenieurwissenschaftlicher Sichtweise teilweise nur schwer erkennen lassen. Um die Methode gegenüber konformen Verschiebungsformulierungen und komplett diskontinuierlichen Verfahren abzugrenzen, soll daher eine *im Rahmen dieser Arbeit* gültige Definition gegeben werden:

Unter einer Mortar Methode wird im Folgenden verstanden, dass die Forderung nach punktweiser C_0 Stetigkeit der Näherungslösung \mathbf{u}_{Fe} an Teilgebietsgrenzen Γ_i im Innern des Gebietes Ω ersetzt wird, und zwar durch eine schwache, integrale Kontinuitätsbedingung. Diese Lockerung der Stetigkeit gilt dabei nur für Bereiche in denen eine nicht konforme Vernetzung vorliegt. Die Technik zur Umsetzung dieser schwachen Stetigkeitsbedingung entspricht der eines Gebietsteilungsverfahrens, d.h. es findet eine komplette Zerschneidung des Gebietes entlang nicht-konformer und evtl. konformer Elementränder statt. Die Methode resultiert in *einem* Gleichungssystem (monolithisch).

Der Lockerung der Bedingungen an die Stetigkeit der Näherungslösung \mathbf{u}_{Fe} folgt konsequenterweise die Relaxation der Bedingungen an das zugrunde liegende Netz. Dies führt zu zusätzlichen Freiheiten insbesondere bei der Vernetzung von Körpern mit stark variierender Geometrie, also z.B. Körpern mit kompakten sowie eher flächigen, dünnwandigen Gebieten (s. Abb. 5.2), da einzelne Teilbereiche voneinander getrennt und separat vernetzt werden können.

Insbesondere bei der Berechnung mit Elementen hoher Ordnung steht man bei der strukturellen Analyse komplex geformter Körper vor dem Problem, geeignete Netze zu generieren. Die Algorithmen des Netzgenerators müssen geometrische Feinstrukturen erfassen können und sollten insbesondere bei der p -Version eine graduelle Vergrößerung der Elemente ausgehend von einspringenden Ecken und Kanten ermöglichen. Im Falle von 3D-Analysen steht man wie bereits in der Einleitung (Kap. 1.4) erwähnt vor dem Problem, dass derzeit für allgemeine Körper, die durch Freiformoberflächen beschrieben werden, noch kein Hexaeder Netzgenerator verfügbar ist, der die für die p -Version notwendigen großen Elemente liefert. Hier ist man auf Tetraedervernetzer angewiesen. Diese liefern allerdings bei dünnwandigen Strukturen aufgrund diverser Winkel- und Seitenlängenkriterien zu feine Netze, auf denen zwar konvergente Analysen auch für sehr verzerrte Tetraederlemente möglich sind, jedoch immer noch zu viele Freiheitsgrade einbringen.

Die Mortar Methode bietet die Möglichkeit der Kopplung der beiden Elementtypen Hexaeder und Tetraeder. In diesem Fall können beide Diskretisierungsparameter, Netz und Ansatzfunktionen, diskontinuierlich, bzw. von unterschiedlicher Ordnung sein. In Abb. 5.2 ist ein möglicher Anwendungsfall dargestellt. Die massive Struktur am Ende des Kragarms kann

mit Hilfe von Tetraederelementen vernetzt werden, während sich für das dünnwandige Blech großflächige Hexaeder eignen.

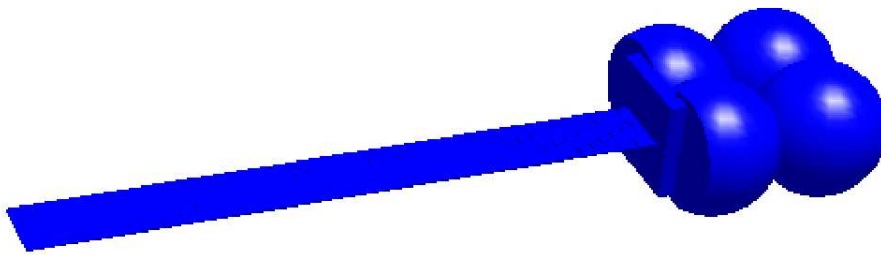


Abbildung 5.2: Körper mit großflächigen und sehr kompakten Teilgebieten

Um eine kurze Übersicht über wissenschaftliche Arbeiten aus dem Mortar-Bereich zu geben, sollen an dieser Stelle einige in der Literatur untersuchten kontinuumsmechanische Anwendungsfälle zitiert werden.

Die ersten wissenschaftlichen Publikationen zum Thema Mortar finden sich im Bereich der Spektralelemente Methode in den beiden Dissertationen von MAVRIPLIS [86] und ANAGNOSTOU [3]. Problemstellungen der Strukturmechanik werden für gekrümmte zweidimensionale Gebiete von FLEMISH in [49] sowie im Kontext großer Deformationen in 3D von PUSO in [97] behandelt. Als Anwendungsfall ebenfalls relativ stark vertreten sind Kontaktprobleme aufgrund der probleminhärenten Gebietsteilung zweier in Kontakt tretender Körper, z.B. MCDEVITT [87], LAURSEN [74], HÜEBER [63] und PUSO [96]. Für Algorithmen aus reinen Gebietsteilungsverfahren - hier liegt der Schwerpunkt auf einer Berechnungsbeschleunigung - sei auf die Arbeit von STEFANICA [118] verwiesen. Eine FEM-BEM Kopplung wird von RÜBERG in [105] vorgenommen. Weitere Anwendungsfelder sind beispielsweise die Fluid-Struktur Interaktion [5] und so genannte *sliding meshes* wie sie bei dynamischen Problemen auftauchen können. Die Anwendung auf verschiedene gekoppelte kontinuumsmechanische Probleme wurde von LAMICHANE in [70] untersucht. Eine umfassende mathematische Abhandlung wird von WOHLMUT in [130] gegeben. Die Berechnung von Körpern mit stark variierender Geometrie ist der Fokus der vorliegenden Arbeit.

5.1 Approximationsmethoden

Es erweist sich an dieser Stelle als hilfreich, zunächst einige Grundbegriffe von Approximationsmethoden zu wiederholen. Darunter werden ganz allgemein Verfahren verstanden, die eine gegebene Funktion f in 'irgendeiner' Form annähern. Die Interpolation einer Funktion (s. Kap. 4.2) ist ein Beispiel eines solchen Verfahrens. Die folgenden Kapitel beschäftigen sich jedoch mit Methoden, die analog zur Mortar Methode nicht auf punktweisen, sondern auf integralen (gemittelten) Bedingungen beruhen.

Im Folgenden soll daher eine integrale Kontinuitätsbedingung bei nicht-konformen Netzen und deren Eigenschaften anhand einfacher Überlegungen für eindimensionale Funktionen etwas

genauer untersucht werden. Die dargestellten Ergebnisse sind allgemein bekannt und sollen an dieser Stelle einen qualitativen Eindruck der schwachen Stetigkeit eines Verschiebungsfeldes vermitteln.

5.1.1 L_2 -Projektion

Der Begriff Projektion einer gegebenen Funktion f in einen Funktionenraum U^h bedeutet, dass die bestmögliche Approximation von f mit Hilfe einer Linearkombination einer Basis von U^h vorgenommen wird. Der Begriff *bestmöglich* wird bei der L_2 -Projektion entsprechend der Definition eines Skalarproduktes für Funktionenräume in einem integralen Sinn verstanden. Es soll an dieser Stelle zunächst einmal der Begriff Orthogonalität (vgl. Kap 3.1.1) wiederholt werden. Zwei Funktionen f, v sind zueinander orthogonal, wenn deren L_2 -Skalarprodukt verschwindet.

$$\langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle = \int f v dx = 0 \quad (5.1)$$

Anm.: In der Vektoralgebra ist das Skalarprodukt zweier Vektoren definiert durch:

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \sum a_i b_i \quad (5.2)$$

Betrachtet man die Problemstellung für Vektoren im \mathbb{R}^3 , so muss bei einer bestmöglichen Approximation \mathbf{u}^h des Vektors \mathbf{f} durch Elemente aus U^h nach den Regeln der Vektoralgebra die Differenz des Vektors und der Näherung, d.h. der Fehler $\mathbf{e} = \mathbf{f} - \mathbf{u}^h$, senkrecht auf der Näherungslösung \mathbf{u}^h stehen (s. Abb. 5.3), also

$$\langle \mathbf{f} - \mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h \rangle = 0.$$

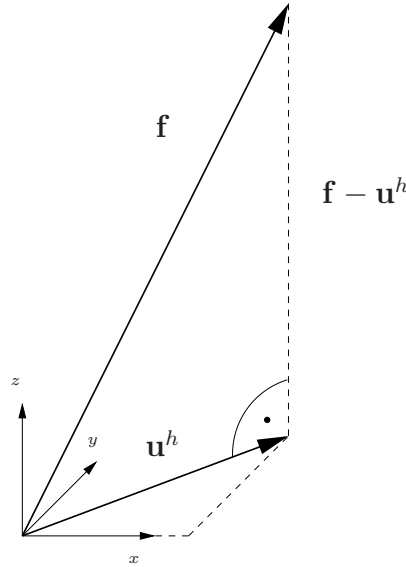
Der Näherungsraum U_h wird in dem Beispiel dabei durch die xy -Ebene definiert. Für eine bestmögliche Approximation einer Funktion f durch eine Näherung u^h gilt mit der Definition des Skalarproduktes für Funktionen ganz analog

$$\int (f - u^h) u^h dx = 0. \quad (5.3)$$

Die Orthogonalitätsbedingung lässt sich noch durch eine weitere Eigenschaft charakterisieren, und zwar ist der Fehler $f - u^h$ ebenfalls dadurch definiert, dass er senkrecht auf *allen* Vektoren in U^h steht, dementsprechend auch auf den gewählten Basisvektoren. In Abb.5.3 bspw. steht $\mathbf{f} - \mathbf{u}^h$ senkrecht auf dem Einheitsvektor in x - und y -Richtung. Die Basisfunktionen des Raums U^h seien mit N_j bezeichnet. Es gilt somit:

$$\int (f - u^h) N_j dx = 0, \quad \forall N_j \in U^h \quad (5.4)$$

Um dem Mortar Verfahren vorzugreifen: Der Term $(f - u^h)$ entspricht der Differenz der FE-Lösungen ($u_{Fe}^M - u_{Fe}^S$) am Kopplungsinterface und die N_j sind Basen des Lagrangen Multiplikatorraums. An dieser Stelle können gleich zwei weitere Begriffe eingeführt werden, die im weiteren Verlauf auftreten werden. Die Funktion f ist der *Master*, an den sich der *Slave* u^h

Abbildung 5.3: \mathbf{u}^h senkrecht zu $\mathbf{f} - \mathbf{u}^h$

mit Hilfe einer Basis seines Raums N_j anzunähern versucht.

Zur Lösung des Problems lässt sich nun analog zur Finite Elemente Methode ein Ansatz für u^h als Linearkombination der Basisvektoren des Raumes U^h formulieren:

$$u^h = \sum_{i=1}^n \alpha_i N_i \quad (5.5)$$

Eingesetzt in Glg. 5.4 ergibt sich:

$$\int \left(\sum_i \alpha_i N_i \right) N_j dx = \int f N_j dx, \quad j = 1, \dots, n \quad (5.6)$$

Die Indizes i, j laufen bis zur Dimensionalität n von U^h . Im Fall des in Abb. 5.3 dargestellten Problems wäre $n = 2$, da U^h durch zwei Basisvektoren ($\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$) definiert ist. Die Glg. 5.6 stellt ein $n \times n$ Gleichungssystem für die Unbekannten α_i dar, durch das man die Approximationslösung u^h (Glg. 5.5) erhält.

$$\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{f} \quad (5.7)$$

Dabei gilt mit dem Matrixeintrag $K_{i,j}$ an der Stelle i, j und rechter Seite f_i :

$$K_{i,j} = \int N_i N_j dx \quad \text{und} \quad f_i = \int f N_i dx \quad (5.8)$$

5.1.2 Least Squares Fit

Die bisher gezeigte Vorgehensweise der L_2 -Projektion führt auf die Formulierung eines gewichteten Residuums (Glg. 5.3, 5.4):

$$\int (f - u) v dx \quad (5.9)$$

Ein Maß E für die Güte einer Approximationslösung u^h lässt sich durch das Quadratintegral des Fehlers e ,

$$e = f - u^h \quad (5.10)$$

angeben, d.h.

$$E = \int e^2 dx = \int (f - u^h)^2 dx \quad (5.11)$$

Im Folgenden wird wieder der Ansatz für u^h entsprechend Glg. 5.5 gemacht.

$$E = \int \left(f - \sum_i \alpha_i N_i \right)^2 dx \quad (5.12)$$

Um die optimalen Koeffizienten α_i zu berechnen für die E minimal wird, wird Glg. 5.12 nach diesen differenziert und die Ableitungen zu null gesetzt, d.h.

$$E \rightarrow \text{minimal} \quad (5.13)$$

für

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_j} = \int 2 \left(f - \sum_i \alpha_i N_i \right) N_j dx \stackrel{!}{=} 0, \quad j = 1, \dots, n. \quad (5.14)$$

Umformuliert ergibt sich folgender Ausdruck:

$$\int \left(\sum_i \alpha_i N_i \right) N_j dx = \int f N_j dx, \quad j = 1, \dots, n \quad (5.15)$$

Ein Vergleich mit Glg. 5.6 zeigt, dass der Ansatz der L_2 -Projektion und der des Least Squares Fit identisch sind. Um ein weiteres Mal auf das folgende Kapitel vorzugreifen: Für die Mortar Element Methode bedeutet dies, dass das Quadratintegral des gemittelten (=integrierten) Sprungs der FE-Lösung an den Kopplungsrändern minimal werden soll.

Anmerkung: Glg. 5.15 gilt wie bereits erwähnt für alle Basen N_j von U^h . Wählt man eine beliebige Basis N_1, N_2, \dots, N_n mit $N_1 = 1$, d.h. man kann konstante Funktionen mit Hilfe dieser Basis darstellen, so reduziert sich die Glg. 5.15 zu

$$\int \left(\sum_i \alpha_i N_i \right) dx = \int f dx. \quad (5.16)$$

D.h. das Integral der zu approximierenden Funktion muss gleich dem Integral der Approximation sein. Man sieht an dieser Stelle, dass die Forderung 5.4, bzw. 5.13 besonders für hohe Polynomgrade wesentlich stärker ist, als nur die Gleichheit des Integrals der beiden Funktionen 5.16, die gleichbedeutend ist mit der Tatsache, dass die Durchdringung im (einfachen¹)

¹In der Literatur wird teilweise unter einer Approximation im Mittel eine L_2 -Projektion verstanden

Mittel verschwindet.

Anmerkung: Um die Äquivalenz der L_2 -Projektion und dem Least Square Fit aufzuzeigen, wurden die jeweiligen Gleichungen in den vorhergehenden Abschnitten diskretisiert. Mit Hilfe der Variationsrechnung lässt sich dieses Ergebnis formal in recht kurzer Form darstellen.

Die Funktionalableitung oder auch Variation δF eines Funktionals $F(u)$ ist definiert als:

$$\delta F(u, \delta u) = \left[\frac{\partial}{\partial \varepsilon} F(u + \varepsilon \delta u) \right] \Big|_{\varepsilon=0} \quad (5.17)$$

Die Variablen δu , u sind hier als Funktion zu betrachten, ε als Skalar.

Das zu minimierende Potential zu einer gegebenen Funktion f ist laut Aufgabenstellung:

$$F(u) = \int (f - u)^2 dx \quad (5.18)$$

Die Variation dieser Gleichung liefert:

$$\delta F(u, \delta u) = \left[\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left\{ \int (f - u - \varepsilon \delta u)^2 dx \right\} \right] \Big|_{\varepsilon=0} = \left[\int -2(f - u - \varepsilon \delta u) \delta u dx \right] \Big|_{\varepsilon=0} \quad (5.19)$$

Um das Extremum zu finden, muss der Ausdruck zu null gesetzt werden. Daraus folgt direkt die Projektionsgleichung $(f - u) \perp \delta u$:

$$\int (f - u) \delta u dx = 0 \quad (5.20)$$

unter der Annahme, dass u und δu im selben Raum liegen.

5.1.3 Beispiele

Im Folgenden soll an einem Beispiel eine Konvergenzuntersuchung für eine nicht-konforme Diskretisierung und vordefinierter zu approximierender Funktion f aufgeführt werden.

Beispiel 1:

Gegeben sei ein Interface Γ_i , $x \in [-1; +1]$, das aus zwei Teilrändern Γ_1 , $x \in [-1; 0]$ und Γ_2 , $x \in [0; +1]$ besteht (s. Abb. 5.4). Die Funktion (FE-Lösung) f des Gebietes Ω_3 auf dieser Kante sei als Polynom zehnter Ordnung gegeben:

$$f = \prod_{i=1}^{10} [x + 0.5(i - 5)] \quad (5.21)$$

Prinzipiell sind im Rahmen dieser Arbeit lediglich Polynome für die Funktion f von Interesse, da sie den Ansatzraum der FE-Lösung aufspannen.

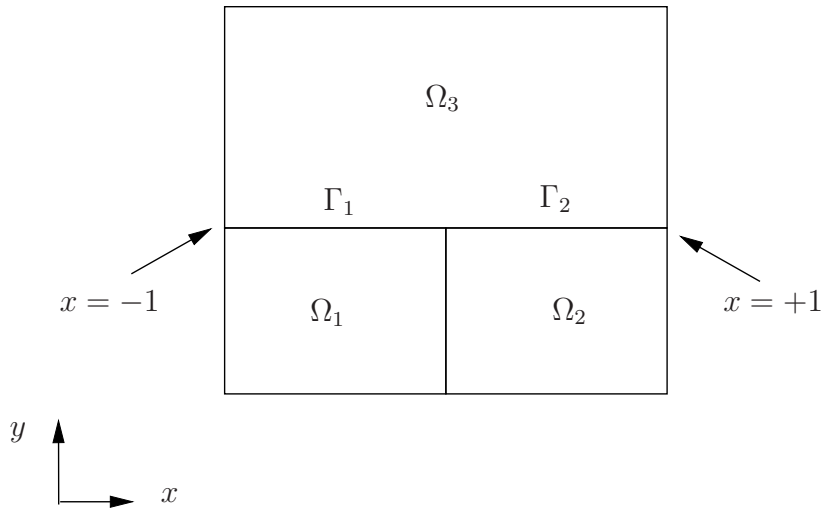


Abbildung 5.4: Nicht-konforme Diskretisierung

Die Knoten-Ansatzfunktionen der Elemente $\Omega_{1/2}$ (mit 1 und $n + 1$ indiziert) auf den beiden Kopplungskanten $\Gamma_{1/2}$ sind linear. Die inneren Ansatzfunktionen sind für Γ_1 und Γ_2 definiert als das Produkt der Knotenmoden mit einem Monom entsprechender Ordnung (Geeigneter wäre in diesem Fall allerdings das Legendrepolynom der Ordnung $j - 2$).

$$N_j^1 = (-x)(1+x)x^{j-2}, j = 2 \dots n \quad (5.22)$$

$$N_j^2 = (+x)(1-x)x^{j-2}, j = 2 \dots n \quad (5.23)$$

Des Weiteren wird C_0 -Stetigkeit der FE-Lösung für $\Omega_{1/2}$ gefordert, d.h. $[N_{n+1}^1 = N_1^2]_{|x=0}$. Für Ansätze dritter Ordnung, $n = 3$ ergeben sich folgende Ansatzfunktionen:

$$N^1 = \begin{bmatrix} -x \\ -x(x+1) \\ -x^2(x+1) \\ x+1 \end{bmatrix} \quad N^2 = \begin{bmatrix} 1-x \\ (1-x)x \\ (1-x)x^2 \\ x \end{bmatrix} \quad (5.24)$$

Nach Einsetzen in Glg. 5.6 und Einbau der Stetigkeit der Näherungslösung für $x = 0$ ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{bmatrix} 1/3 & 1/12 & -1/20 & 1/6 & 0 & 0 & 0 \\ 1/12 & 1/30 & -1/60 & 1/12 & 0 & 0 & 0 \\ -1/20 & -1/60 & 1/105 & -1/30 & 0 & 0 & 0 \\ 1/6 & 1/12 & -1/30 & 2/3 & 1/12 & 1/30 & 1/6 \\ 0 & 0 & 0 & 1/12 & 1/30 & 1/60 & 1/12 \\ 0 & 0 & 0 & 1/30 & 1/60 & 1/105 & 1/20 \\ 0 & 0 & 0 & 1/6 & 1/12 & 1/20 & 1/3 \end{bmatrix} \alpha = \begin{bmatrix} 0.43678977 \\ 0.092614937 \\ -0.069511478 \\ 0.47869318 \\ 0.03934789 \\ -0.01724811 \\ -0.15033143 \end{bmatrix}, \quad (5.25)$$

mit entsprechender Lösung, (s. Abb. 5.5 - 5.8). Man erkennt bereits für $n = 4$ eine sehr gute Übereinstimmung von f und seiner Näherung u^h .

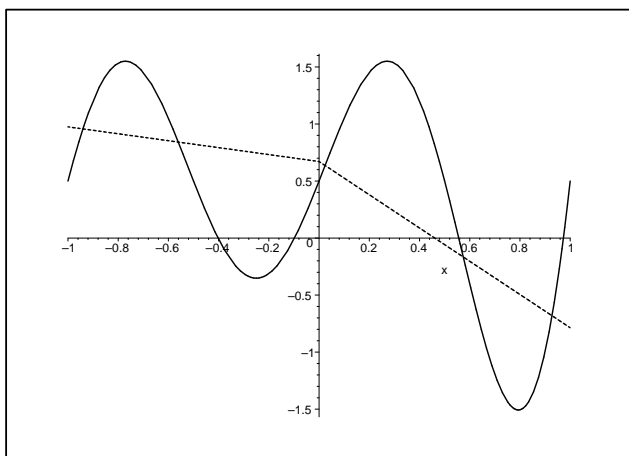


Abbildung 5.5: Lösung für lineare Ansätze

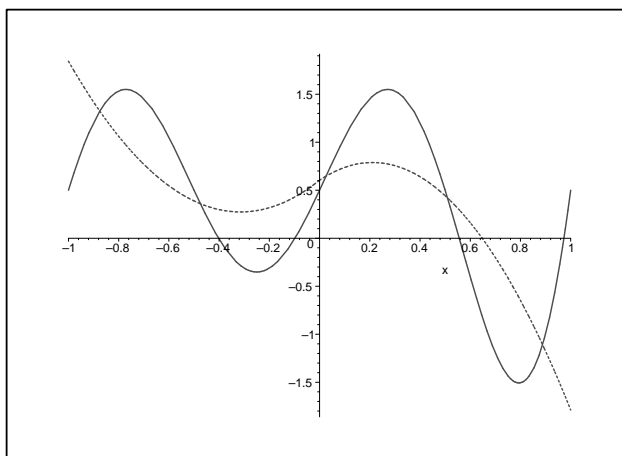


Abbildung 5.6: Lösung für quadratische Ansätze

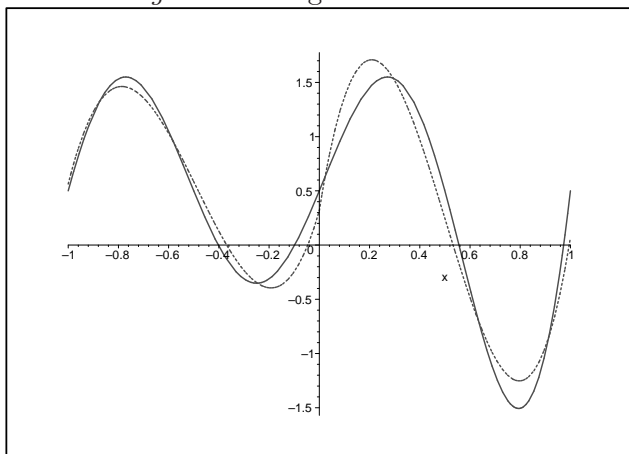


Abbildung 5.7: Lösung für kubische Ansätze

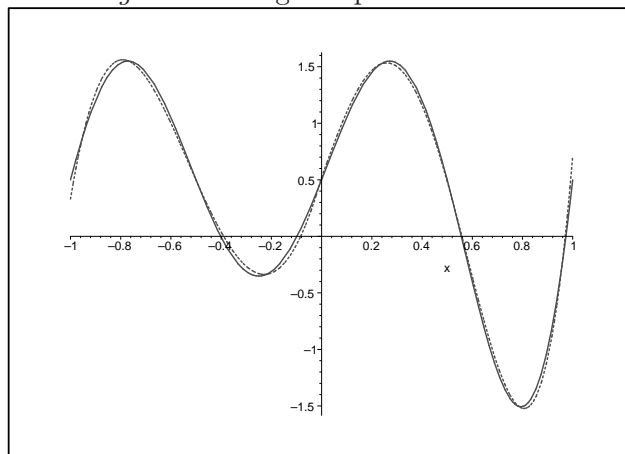


Abbildung 5.8: Lösung für n=4

Von Interesse sind die Konvergenzeigenschaften des Verfahrens. Für den Fehler bieten sich zwei Normen an, die L_2 -Norm und die Maximumnorm. Die L_2 -Norm $\|\bullet\|_{L_2}$ einer Funktion f ist definiert als die Wurzel ihres Quadratintegrals:

$$\|f\|_{L_2} = \sqrt{\int f^2 dx} \quad (5.26)$$

Die Maximumnorm $\|\bullet\|_{\infty}$ ist definiert als das Supremum -in diesem Fall entspricht es dem Maximum- des Absolutbetrags einer Funktion:

$$\|f\|_{\infty} = \sup |f| \quad (5.27)$$

In Abb. 5.9 ist der relative Fehler in der L_2 -Norm und in Abb. 5.10 der relative Fehler in der Maximumnorm über die Anzahl der Ansatzfunktionen n dargestellt. Für $n = 10$ wird das exakte Ergebnis erzielt (nicht dargestellt). Es lässt sich für beide Fehlermaße eine exponentielle

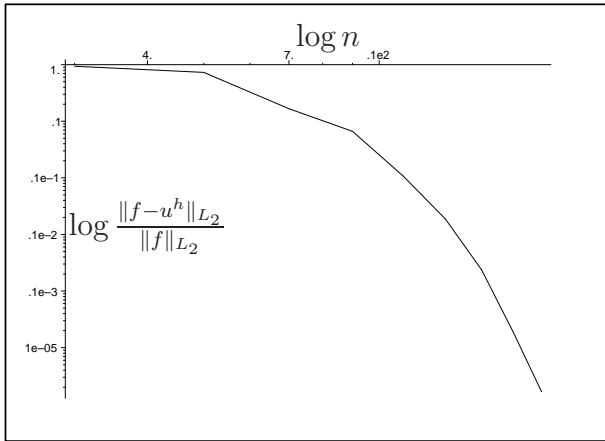
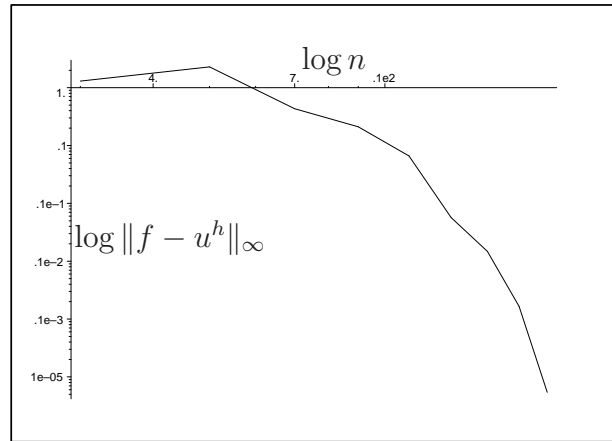
Abbildung 5.9: Relativer Fehler in L_2 -Norm

Abbildung 5.10: Relativer Fehler in der Maximumnorm

Konvergenz erkennen.

Das Beispiel zeigt starke Analogien zur Finite Elemente Methode, bzw. ist fast damit gleichzusetzen. Man erkennt dieselben Konvergenzeigenschaften und Einschränkungen. So ist bspw. zu beachten, dass die Forderung der globalen C_0 -Stetigkeit der Approximation u^h die *elementweise* Erfüllung² der Glg. 5.11 verhindert. So erhält man bspw. für das Integral nach Glg. 5.16 ($n = 3$) für $\Gamma_{1,2}$

$$\int_{\Gamma_1} (f - u^h) dx = 0.02585045 \dots$$

$$\int_{\Gamma_2} (f - u^h) dx = -0.02585045 \dots$$

D.h. die Forderung, dass das Integral der beiden Funktionen f , u^h gleich ist, gilt nur in *globalem* Sinn:

$$\int_{\Gamma_1} \dots + \int_{\Gamma_2} \dots = 0. \quad (5.28)$$

Beispiel 2:

Dieses Beispiel entspricht dem vorherigen (s. Abb. 5.4), bis auf die Forderung, dass nicht ein vorgegebenes Polynom f approximiert werden soll, sondern eine Folge von Polynomen f_n mit ansteigendem Polynomgrad. Dies entspricht dem Verhalten einer FE-Lösung bei p -Verfeinerung für die Teilgebiete $\Omega_{1/2/3}$. Dabei sollen zwei Folgen f_n^1 , f_n^2 untersucht werden. Um dem Ergebnis vorzugreifen: Das erste Beispiel (f_n^1) ist derart konstruiert, dass die Projektion in der L_2 -Norm divergiert, das zweite Beispiel konvergiert (ohne Beweis).

²Eigentlich *elementkantenweise* Erfüllung.

Gegeben sei der Ansatzgrad n für die beiden unteren Kanten. Die Funktionen f_n^1 , f_n^2 sind definiert als:

$$f_n^1 = \prod_{i=1}^m x - 1 + (i - 1)h, \quad m = \lfloor 1.75^n \rfloor, \quad h = \frac{2}{m - 1} \quad (5.29)$$

$$f_n^2 = \prod_{i=1}^m [x + 0.5(i - 5)], \quad m = \lfloor 1.75^n \rfloor \quad (5.30)$$

(Die Gaussklammer $\lfloor \bullet \rfloor$ bedeutet, dass das Argument immer nach unten gerundet wird.) In Worten: f_n^1 ist ein Polynom mit exponentiell wachsendem Polynomgrad m (im Vergleich zum Ansatzgrad der Näherungslösung auf der Slave-Seite), das zwischen -1 und $+1$ äquidistante Stützstellen hat. f_n^2 entspricht dem Polynom aus Beispiel 1 ebenfalls mit exponentiell wachsendem Polynomgrad. Diese Funktionen werden analog zum vorherigen Beispiel durch die beiden Polynome der Ordnung n , die auf $\Gamma_{1,2}$ definiert sind, mittels Least Square Fit approximiert. In Abb. 5.11, 5.12 sind die Fehler bis $n = 10$ in der L_2 -Norm dargestellt. Man erkennt ein für das erste Beispiel divergentes Verhalten, für das zweite eine Konvergenz. Der Grund für die

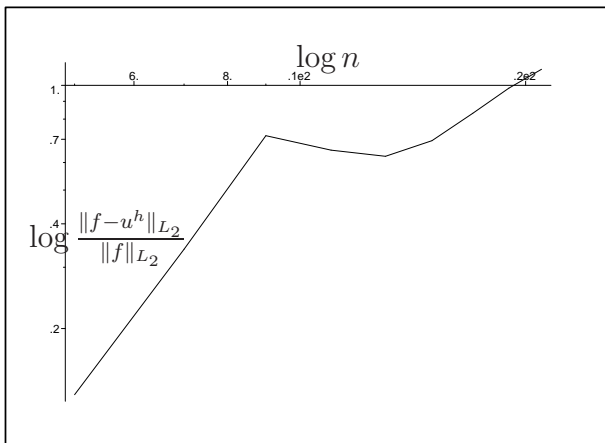


Abbildung 5.11: Rel. Fehler in L_2 -Norm für f_n^1

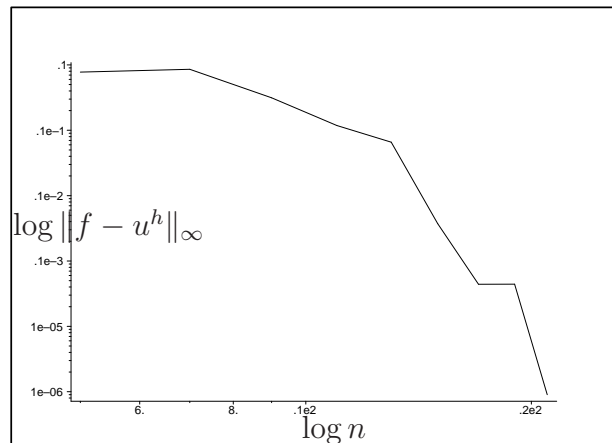


Abbildung 5.12: Rel. Fehler in L_2 -Norm für f_n^2

unterschiedlichen Konvergenzeigenschaften scheint im immer stärker oszillierenden Verhalten von f_n^1 im Bereich $x \in [-1; +1]$ zu liegen. Die Funktion f_n^2 besitzt dort zwar auch Nullstellen, jedoch nimmt deren Anzahl mit wachsendem m dort nicht zu. D.h. man beobachtet, dass die Divergenz im ersten Fall durch zwei Dinge erfolgt, immer stärkere Oszillation **und** exponentiell wachsender Polynomgrad m auf der oberen Kante gegenüber der unteren mit Ansatzgrad n . Ein solches Verhalten einer FE-Lösung ist aus Ingenieurssicht jedoch auszuschließen, da der Grenzwert, bzw. die Grenzfunktion

$$f^1 = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n^1 = -\delta(x + 1) - \delta(x - 1), \quad \text{mit } m = 2^n$$

keiner zu erwartenden physikalischen Verschiebung entspricht (δ = Dirac-Delta Distribution). Ebenfalls hat man die Kontrolle über die Ansatzgrade auf beiden Seiten des Interface, d.h. es lässt sich eine exponentiell wachsende Differenz der Ansatzgrade beidseitig des Kopplungsrandes vermeiden.

5.2 Herleitung der Mortar Element Methode

Nachdem die prinzipiellen Eigenschaften einer gemittelten bzw. integrierten Gleichheit zweier Funktionen aufgezeigt wurden, kann nun auf die Anwendung auf nicht-konforme Netze eingegangen werden.

Wie bereits erwähnt lässt sich die Mortar Element Methode mathematisch gesehen als hybride FE-Methode interpretieren, was unter gewissen Bedingungen zu Stabilitätsproblemen führen kann. Stabilität im Rahmen des Mortar Verfahrens im Falle einer Netzverfeinerung (h -Version) bedeutet dabei, dass die Differenz der Approximationslösung beiderseitig der Kopplungsfläche nicht anfängt immer stärker zu oszillieren, wie dies exemplarisch im vorangegangenen Beispiel gezeigt wurde, sondern, dass evtl. auftretende Oszillationen mit feiner werdendem Netz ebenfalls immer kleiner werden. Für die p und hp -Version ist neben der Sicherstellung der Stabilität unter Netzverfeinerung dabei ebenfalls Stabilität bei der Polynomgraderhöhung zu gewährleisten. In diesem Fall müssen Oszillationen mit steigendem Polynomgrad in der Maximumsnorm ebenfalls gegen Null gehen.

5.2.1 Mortar mit Lagrangen Multiplikatoren

Die allgemeinere Theorie, in die sich die Mortar Element Methode einbetten lässt ist die Methode der Lagrangen Multiplikatoren. Die Anwendung der Methode im Bereich der Finite Elemente Methode ist schon recht alt, so z.B. bereits in [6] untersucht worden. Eine der ersten Formulierungen als Variationsprinzip ist in [67] zu finden.

Die Methode der Lagrangen Multiplikatoren hat sich im Umfeld von Optimierungsverfahren entwickelt und ermöglicht es, die Minima oder Maxima einer gegebenen Funktion unter Zwangsbedingungen zu finden, siehe z.B. [23]. D.h. gesucht ist ein Extremwert einer Funktion $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ unter Zwangsbedingungen $g^i(x_1, \dots, x_n) = 0$, die den Raum der zulässigen Werte von x_1, x_2, \dots, x_n einschränken. Das Verfahren ermöglicht die Lösung des gestellten Problems, allerdings zum Preis der Einführung zusätzlicher Unbekannter λ_i , den Lagrangen Multiplikatoren. Prinzipiell können bei Sattelpunktformulierungen numerische Stabilitätsprobleme auftreten, die jedoch durch eine geeignete Diskretisierung der Lagrangen Multiplikatoren vermieden werden können.

Auch linear elastische Problemstellungen der Strukturmechanik können als Minimierungsproblem aufgefasst werden. Die zu minimierende Größe stellt hier das elastische Gesamtpotential $\Pi(\mathbf{u})$ dar.

$$\Pi(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \, d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{u} \mathbf{f} \, d\Omega - \int_{\Gamma_t} \mathbf{u} \bar{t} \, d\Gamma_t \quad (5.31)$$

Eine Zwangsbedingung an die FE-Lösung ist die der C_0 -Stetigkeit an Rändern (Kanten, Flächen) benachbarter Elemente. Mit der Sprungfunktion $\bar{\mathbf{u}}$ gilt dort:

$$\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{u}_M - \mathbf{u}_S = \mathbf{0} \quad (5.32)$$

Dabei sind die Indizes S für *Slave* und M für *Master* eingeführt worden. Im Sonderfall einer konformen Vernetzung lässt sich die Bedingung der C_0 -Stetigkeit entsprechend den vorhergehenden Kapiteln ebenfalls folgendermaßen schreiben:

$$\int_{\Gamma_i} \bar{\mathbf{u}} N_j d\Gamma_i = 0, \quad \bar{\mathbf{u}}, N_j \in P^N, \quad j = 1, \dots, N + 1 \quad (5.33)$$

Die N_j stellen dabei eine Basis des polynomiellen Ansatzraumes P^N dar. Im Fall einer konformen Diskretisierung hinsichtlich Netz und Ansatzgrade sind die Bedingungen 5.32 und 5.33 äquivalent. In Sonderfällen gilt dies sogar für nicht-konforme Diskretisierungen (s. das Beispiel in Kap. 5.1.3 für $p = 10$).

Im Fall der nicht-konformen Diskretisierung wie in Kap. 5.1.3 ließe sich die punktweise Stetigkeit für $p = 10$ über den Rand hinweg auch über ein punktweise aufgestelltes, also nicht 'integrales' (wie über Glg. 5.33), Gleichungssystem garantieren. Diese Vorgehensweise würde der Interpolation eines Polynoms mit einem Polynom gleicher Ordnung entsprechen.

Die Forderung der punktweisen Stetigkeit entlang der Ränder bei nicht-konformen Diskretisierungen (*node to edge map*) führt allerdings im allgemeinen Fall dazu, dass man Freiheitsgrade verliert, da das Polynom f wie im Beispiel über die gesamte Kante C_∞ -Stetigkeit erzwingen würde, d.h. die Näherungslösung \mathbf{u}_{Fe} kann auf der Kante keinen Knick mehr machen. Bei sich überschneidenden Elementkanten (s. Abb 5.13) reduziert sich die Anzahl unabhängiger Ansatzfunktionen, da die FE-Lösung sich auf dem gesamten Interface Γ_i als *ein* Polynom entsprechenden Grades darstellen würde.

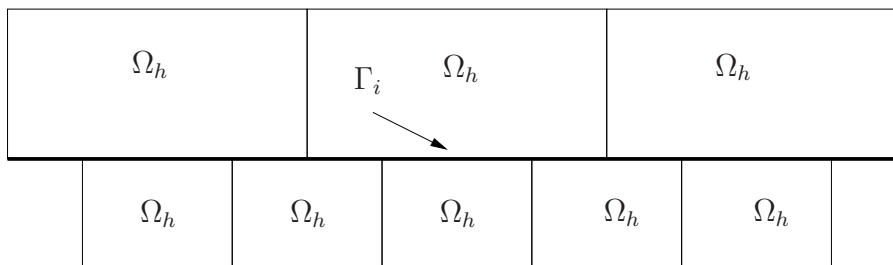


Abbildung 5.13: Sich überschneidende Elementkanten

5.2.2 Physikalische Herleitung

Nach der Diskussion der Stetigkeitsbedingungen an Elementrändern als Zwangsbedingungen an die FE-Lösung kann nun die mathematische Formulierung des Verfahrens erfolgen. Es sei angemerkt, dass die resultierenden Gleichungen der Mortar Element Methode im Sinne von Lagrangen Multiplikatoren *bis zum Punkt der Diskretisierung* absolut identisch sind mit denen der FETI Methode (Finite Element Tearing and Interconnecting). Die FETI Methode arbeitet jedoch auf konformen Netzen, vgl. hierzu [9], [44].

Im Folgenden soll eine eher nicht-formale Herleitung der Mortar Element Methode im Sinne von Lagrangen Multiplikatoren aufgeführt werden, um grundlegende Prinzipien und Begriffe zu veranschaulichen. Strenge Konvergenzbeweise mit funktionalanalytischen Hilfsmitteln sind in entsprechenden mathematischen Veröffentlichungen zu finden. Verwiesen sei an dieser Stelle auf [10], [9], [130] und allgemein für gemischte FE-Methoden auf [17]. Für die hp -Version wird in [113] exponentielle Konvergenz bewiesen. Die folgende Herleitung erfolgt derart, dass ein mechanischer Bezug zu den Randspannungen auf dem Interface hergestellt werden kann. Auf mathematische Strenge wird dabei verzichtet.

Die Problemstellung ist folgende, s. z.B. [66]:

Gesucht ist $u \in H_{\bar{u}}^1(\Omega)$, so dass

$$B(u, v) = F(v) \quad \forall \quad v \in H_0^1 \quad (5.34)$$

gilt mit

$$B(u, v) = \sum_{i,j=1}^3 \int_{\Omega} \left(2\mu \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] + \lambda [u_{i,i} v_{j,j}] \right) d\Omega \quad (5.35)$$

$$F(v) = \int_{\Omega} v_i f_i d\Omega + \int_{\Gamma_{\bar{q}}} v_i \bar{q}_i d\Gamma_{\bar{q}} \quad (5.36)$$

Dabei ist $H_{\bar{u}}^1$ der Raum aller Funktionen, deren Quadratintegral und das ihrer Ableitungen endlich sind, sowie die Verschiebungsrandbedingungen erfüllen. Sei nun der Körper Ω in zwei Teile Ω_1, Ω_2 geteilt (s. Abb. 5.14), die ein gemeinsames Interface Γ_i besitzen, auf dem die Wichtungsfunktionen v definiert sind und die Spannungen $q^{M/S}$ wirken, so gilt:

$$B(u, v)|_{\Omega_1} + B(u, v)|_{\Omega_2} = \int_{\Omega} v_i f_i d\Omega + \int_{\Gamma_{\bar{q}}} v_i \bar{q}_i d\Gamma_{\bar{q}} + \int_{\Gamma_i} v_i^M q_i^M d\Gamma_i + \int_{\Gamma_i} v_i^S q_i^S d\Gamma_i \quad (5.37)$$

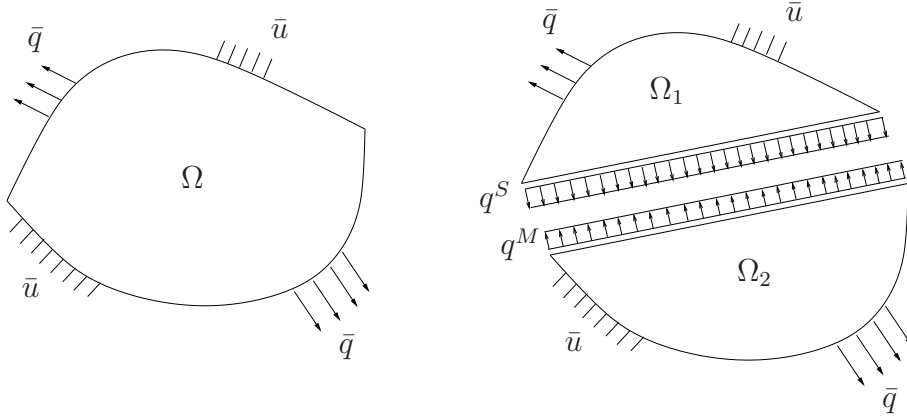
Hierbei kennzeichnen die mit M , bzw. S (**M**aster und **S**lave) gekennzeichneten Terme die Funktionswerte der beiden gegenüber liegenden Seiten des Interface Γ_i , deren Integrale sich bei Gleichheit der Spannungen q^M, q^S und der Funktionen v^M, v^S unter Annahme ausreichender Stetigkeit eliminieren würden. Sie können für die beiden separierten Körper $\Omega_{1/2}$ als externe Lasten $q^{M/S}$ interpretiert werden. Gleichung 5.37 wird auch als erweitertes elastisches Potential bezeichnet [54].

Aus Konformitätsgründen mit anderen Veröffentlichungen wird im Folgenden für die unbekanntes Spannungen die Schreibweise λ eingeführt:

$$\lambda = q_i^S = -q_i^M. \quad (5.38)$$

An dieser Stelle erkennt man, dass die Lagrangeschen Multiplikatoren λ mit den Spannungen auf dem Interface identifiziert werden können. Das Minus Zeichen für die Master Seite ergibt sich aus der Forderung des Gleichgewichts der Spannungen. Für die beiden Interface Integrale ergibt sich somit

$$\int_{\Gamma_i} v_i^S \lambda d\Gamma_i - \int_{\Gamma_i} v_i^M \lambda d\Gamma_i = \int_{\Gamma_i} \lambda (v_i^S - v_i^M) d\Gamma_i \quad (5.39)$$

Abbildung 5.14: Geteiltes Gebiet Ω

Eingesetzt in 5.37:

$$B(u, v)|_{\Omega_1} + B(u, v)|_{\Omega_2} + \int_{\Gamma_i} \lambda (v_i^M - v_i^S) d\Gamma_i = \int_{\Omega} v_i f_i d\Omega + \int_{\Gamma_{\bar{q}}} v_i \bar{q}_i d\Gamma_{\bar{q}} \quad (5.40)$$

Bis zu diesem Punkt ist lediglich die unbekannte Funktion λ eingeführt worden, weswegen das resultierende Gleichungssystem nach der Diskretisierung unterbestimmt sein wird (n Wichtungsfunktionen, $n + m$ Ansätze). Es kann jedoch gezeigt werden, dass zusammen mit der folgenden Bedingung die Lösung des Problems eindeutig ist, und mit der Lösung für Glg. 5.34 übereinstimmt.

$$\int_{\Gamma_i} \mu (u_i^M - u_i^S) d\Gamma_i = 0 \quad (5.41)$$

Die Gleichung 5.41 ist so zu interpretieren, dass sie analog zu Kap. 5.1.1 für *alle* Funktionen μ , die im selben Raum M liegen wie die Spannung λ , gilt. Dieser Funktionenraum M ist auf dem Interface definiert und soll hier aber zunächst nicht weiter spezifiziert werden. Die Funktion $u_i^M - u_i^S$ entspricht der Sprungfunktion \mathbf{u} aus Glg. 5.32. Die Gleichung sagt aus, dass die Forderung der punktwweisen C_0 Stetigkeit an die gesuchte -exakte- Funktion u durch eine L_2 -Projektion ersetzt werden kann. Insgesamt ergibt sich also folgendes Problem:

Gesucht ist $u \in H_{\bar{u}}^1(\Omega)$, $v \in H_0^1$, $(\mu, \lambda) \in M$ so dass gilt:

$$B(u, v)|_{\Omega_1} + B(u, v)|_{\Omega_2} + \int_{\Gamma_i} \lambda (v_i^M - v_i^S) d\Gamma_i = F(v)|_{\Omega_1} + F(v)|_{\Omega_2} \quad (5.42)$$

$$\int_{\Gamma_i} \mu (u_i^M - u_i^S) d\Gamma_i = 0 \quad (5.43)$$

Die Problemstellungen 5.42, 5.43 und 5.34 sind identisch [9].

Anmerkung:

Die Gleichungen 5.42, 5.43 lassen sich auch mit Hilfe der Variationsrechnung herleiten. Dabei wird die Zwangsbedingung an die Sprungfunktion, $\bar{\mathbf{u}} = 0$ im Sinne der Lagrangen Multiplikator Methode auf das Potential 5.31 addiert, die Variation gebildet und zu null gesetzt. Diese Vorgehensweise ist jedoch in dem Sinne etwas irreführend, da die Zwangsbedingung ($\bar{\mathbf{u}} = 0$) bei der Mortar Methode i.d.R. nicht exakt erfüllt wird, sondern nur das gewichtete Integral der Sprungfunktion zu null wird (Glg. 5.43).

5.2.3 FE-Diskretisierung

Vor dem Aufstellen des resultierenden Gleichungssystems sollen an dieser Stelle noch die Konvergenzbedingungen für eine nicht-konforme Diskretisierung diskutiert werden. Mathematische Beweise sind in den bereits zitierten Veröffentlichungen zu finden. Beim Mortar Verfahren gilt i.d.R. nicht

$$u_h^M - u_h^S = 0,$$

sondern

$$\lim_{\substack{p \rightarrow \infty \\ h \rightarrow 0}} (u_h^M - u_h^S) = 0. \quad (5.44)$$

Konvergenz bei einer nicht-konformen Diskretisierung bedarf der Bedingung, dass *im Grenzfall* $h \rightarrow 0$ oder $p \rightarrow \infty$ die beiden Bedingungen 5.32 und 5.43 identisch sind. Entsprechend der Analogie zwischen L_2 -Projektion und dem Least Square Fit erkennt man, dass das Quadratintegral des Fehlers $e = u_h^M - u_h^S$ des Verschiebungsfeldes auf dem Interface im Grenzfall zu null werden muss. Dazu muss für μ_h in der diskretisierten Glg. 5.43 eine Basis des Raums angenommen werden, in dem auch der Slave Ansatz auf dem Kopplungsrand, $u_h^S|_{\Gamma_i}$ liegt.

Der Ansatz für die Lagrangen Multiplikatoren λ_h liegt ebenfalls im selben Raum wie der für μ_h und $u_h^S|_{\Gamma_i}$. Anschaulich gesprochen liegt in Abb. 5.3 λ_{Fe} wie u_{Fe}^S in der xy -Ebene, u_{Fe}^M stellt den Vektor f dar und μ_h sind die Basisvektoren $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$. Seien die Lösungen des diskretisierten Systems u_{Fe} und λ_{Fe} berechnet, dann verschwindet i.d.R. für ein Γ_i^k (der Index k kennzeichnet das Slave-Element) *nicht* der Term

$$\int_{\Gamma_i^k} \lambda_{Fe} (u_{Fe}^M - u_{Fe}^S) d\Gamma_i^k \neq 0, \quad (5.45)$$

wenn für λ_{Fe} C_0 -Stetigkeit über ganz Γ_i gefordert wird ($\lambda_{Fe} \in M$). Vgl. Bsp. 1 aus Kap. 5.1.3, Glg. 5.21.

In der Gleichung 5.45 stehen die Verschiebungen u_{Fe} , nicht die Wichtungsfunktionen v^h . Das bedeutet, dass lokal Energie durch die Unstetigkeit der Näherungslösung am Interface generiert wird, global aber verschwindet. Man erkennt dies durch die Summation über alle Slave-Ränder

$$\begin{aligned}
\Gamma_i^k: \\
\sum_{k=1}^n \int_{\Gamma_i^k} \lambda_{Fe} (u_{Fe}^M - u_{Fe}^S) d\Gamma_i^k &\stackrel{\text{Glg. 5.50}}{=} \sum_{k=1}^n \int_{\Gamma_i^k} \sum_j \lambda_j \mu_j (u_{Fe}^M - u_{Fe}^S) d\Gamma_i^k = \\
&\sum_{k=1}^n \sum_j \lambda_j \int_{\Gamma_i^k} \mu_j (u_{Fe}^M - u_{Fe}^S) d\Gamma_i^k \stackrel{\text{Glg. 5.43}}{=} 0
\end{aligned} \tag{5.46}$$

Aus ingenieurmäßiger Sicht muss dieser Term als Bedingung für Konvergenz im Grenzfall ebenfalls *punktweise* gegen null gehen und für λ_{Fe} gleichzeitig die exakten Spannungen liefern. Bei späteren Konvergenzuntersuchungen in der Energienorm ist Glg. 5.46 nicht zu berücksichtigen. Wie beim Originalproblem 5.34 reicht ebenfalls die Betrachtung der globalen Energienorm $\sqrt{0.5B(u_h, u_h)}$.

Eine Aussage über das Vorzeichen des Integrals aus Unglg. 5.45 lässt sich nicht treffen, da der Term $u_h^M - u_h^S$ von der Diskretisierung abhängt -im Prinzip also willkürlich ist- und das Vorzeichen von λ_h von der Wahl der Slave Seite (s. Glg. 5.38) sowie vom mechanischen System abhängt, d.h. ob im betrachteten Bereich des Kopplungsrandes vornehmlich Druck oder Zug herrscht.

Kommen wir nun zur Diskretisierung. Die Gleichungen 5.42, 5.43 lassen sich noch etwas vereinfachen. Unter der Annahme, dass die Wichtungsfunktionen v jeweils nur auf einem Gebiet Ω_1 oder Ω_2 , sowie einige auf dem Interface Γ_i definiert sind, lässt sich die Problemstellung folgendermaßen zusammenfassen:

$$B(u, v)|_{\Omega_1} + \int_{\Gamma_i} \lambda v_i^M d\Gamma_i = F(v)|_{\Omega_1} \tag{5.47}$$

$$B(u, v)|_{\Omega_2} - \int_{\Gamma_i} \lambda v_i^S d\Gamma_i = F(v)|_{\Omega_2} \tag{5.48}$$

$$\int_{\Gamma_i} \mu (u_i^M - u_i^S) d\Gamma_i = 0 \tag{5.49}$$

Die Diskretisierung des Problems liefert für die beiden Bilinearformen $B(u, v)|_{\Omega_1, \Omega_2}$ die Steifigkeitsmatrizen \mathbf{K}_1 und \mathbf{K}_2 , s. Kap. 2. Für die Lagrangen Multiplikatoren wird folgender Ansatz gemacht:

$$\lambda = \sum_j \lambda_j \mu_j \tag{5.50}$$

Mit $\mu_i = v_i^S = N_i^S|_{\Gamma_i}$, den Ansatzfunktionen auf dem Slave-Rand.

Für die Integrale über das Interface

$$\int_{\Gamma_i} \lambda_h^S v_i^M d\Gamma_i \text{ und } - \int_{\Gamma_i} \lambda_h^S v_i^S d\Gamma_i$$

ergeben sich die Massenmatrizen \mathbf{G}_1 (Master) und \mathbf{G}_2 (Slave). Dabei sind für \mathbf{G}_1 die Ansatzfunktionen beidseitig der Kontaktfläche definiert, d.h. zu dessen Berechnung müssen die Elemente verschnitten werden. Nimmt man für die Wichtungsfunktionen μ_h^S dieselben Ansätze für λ_h^S , so ergibt sich ein symmetrisches Gleichungssystem. Das Gesamtgleichungssystem besitzt demnach die folgende Form:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{G}_1 \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_2 & \mathbf{G}_2 \\ \mathbf{G}_1^T & \mathbf{G}_2^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{f}_2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.51)$$

Mit den Einträgen von $\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2$ analog zu Glg. 2.32 und den Einträgen für die Massenmatrizen $\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2$ an der Stelle (i, j) für jede Koordinatenrichtung x, y, z

$$\begin{aligned} G_{1,ij} &= \int_{\Gamma_i} (N_i^M N_j^S) d\Gamma_i \\ G_{2,ij} &= - \int_{\Gamma_i} (N_i^S N_j^S) d\Gamma_i \end{aligned} \quad (5.52)$$

Anmerkungen:

- Nicht alle in der Literatur zu findenden Ansätze bezüglich der Lagrangen Multiplikatoren sind auf der Kontaktfläche C_0 stetig. So führt in [105] die Identifikation der Lagrange-schen Multiplikatoren mit Spannungen, die sich aus der Ableitung der linear angesetzten Verschiebungen ergeben, zu konstanten Ansätzen mit Sprüngen an den Elementgrenzen.
- Wie bei den Ansätzen für die Verschiebungen beeinflusst auch die Wahl für λ die Kondition der Steifigkeitsmatrix. In [129; 71; 77] wird daher ein so genannter dualer Ansatzraum für die Lagrangen Multiplikatoren gewählt, der für die Integrale über das Interface an der Slave-Seite (\mathbf{G}_2) eine Orthogonalitätsbeziehung $c_i \delta_{ij}$ ergibt.
- In den Einträgen der Steifigkeitsmatrizen sind die Materialkoeffizienten E, ν enthalten. In den Massenmatrizen $\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2$ ist dies nicht der Fall. Die Folge können, je nach Material, schlecht konditionierte Gleichungssysteme sein, mit Einträgen verschiedener Größenordnung für \mathbf{K}_i und \mathbf{G}_i . Anhand der physikalischen Betrachtungsweise des Problems, d.h. der Identifikation der λ_i als gegengleiche Spannungen auf dem Interface, sollte jedoch eine Skalierung der Matrizen $\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2$ mit jedem konstanten Faktor α möglich sein ohne das Ergebnis zu beeinflussen. Dies lässt sich auch als Skalierung der Basen von M interpretieren ($\mu_h, \lambda_h \in M$).
- Bei der Diskretisierung ist darauf zu achten, dass auf dem Rand des Interface keine Dirichlet Randbedingungen gegeben sind. An diesen Stellen existieren keine Wichtungsfunktionen, da $v \in H_0^1$ (Bem: Die 0 steht für „null am Rand“). Um die Lösbarkeit zu gewährleisten dürfen hier auch keine Spannungen angesetzt werden, da das Integral

$$\int_{\Gamma_i} \lambda_h^S (v_i^M - v_i^S) d\Gamma_i = 0$$

ist, wegen $v_i^M = v_i^S = 0$. Die Gleichung verliert somit ihren Informationsgehalt. Diese Berücksichtigung ist jedoch dann nicht notwendig, wenn die Verschiebungsrandbedingungen über das Penalty-Verfahren implementiert werden. In dem Fall wird der Fehler sozusagen nachträglich eliminiert.

- In dieser Arbeit werden keine Diskretisierungen betrachtet, die zu so genannten *cross-points* führen. Bei einem cross-point handelt es sich um einen Punkt, der an mehr als zwei Teilgebiete, die 'zusammengemörtelt' werden, angrenzt (s. Abb. 5.15). An diesen Stellen ist die Diskretisierung der Lagrangen Multiplikatoren gesondert zu behandeln [70]. Eine Behandlung dieser Stellen in 3D, deren Entsprechung in diesem Fall Kanten sind, sind vom Autor in der Literatur nicht ausfindig gemacht worden.
- Bei der per Definition (nicht zufällig) konformen Methode 5.34 führt die Elliptizität der Bilinearform B , d.h.

$$B(u, u) \geq \alpha |u|^2 \quad \forall u$$

letztendlich zu einer positiv definiten Steifigkeitsmatrix, die im Falle eines Bubnov-Galerkin Verfahrens ebenfalls symmetrisch ist. Zur Lösung des resultierenden Gleichungssystems bietet sich *im Fall einer konformen Diskretisierung* die Methode der konjugierten Gradienten an. Die Matrix des Mortar-Verfahrens in Glg. 5.51 ist allerdings nicht positiv definit, da es sich um ein Sattelpunktproblem handelt. Zur Lösung des Gleichungssystems, wie es in Glg. 5.51 angegeben ist, kann somit ohne weitere Modifikation kein CG-Verfahren eingesetzt werden. In [73] wird jedoch ein Verfahren basierend auf der Berechnung von Schur-Komplementen vorgeschlagen, das die Anwendung eines CG-Lösers erlaubt.

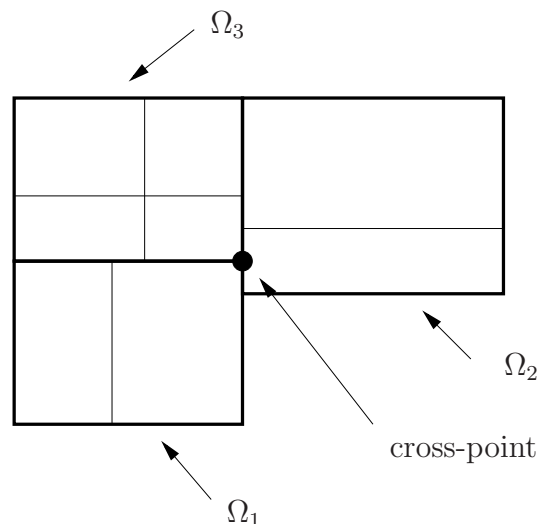


Abbildung 5.15: Cross-point bei drei Teilgebieten

5.3 Zusammenfassung des Verfahrens und Algorithmische Umsetzung

In diesem Kapitel soll die Umsetzung des Verfahrens hinsichtlich der nicht-konformen Koppelung von Hexaeder- und Tetraederelementen diskutiert werden. Die einzelnen Teilschritte, die auszuführen sind, sind folgende:

1. Festlegung der Slave oder Non-Mortar Seite (Tetraeder oder Hexaeder):
Auf dieser Seite leben die Ansätze für die Spannungen λ . Dies wird vom Benutzer festgelegt.
2. Feststellung des Interface:
Die Beschreibung des Interface soll nicht vom Nutzer angegeben werden, sondern automatisiert berechnet werden.
3. Feststellung, ob Dirichlet Randbedingungen auf einem Rand des Interface gegeben sind.
4. Feststellung der benachbarten Elemente:
Die Integrale für die \mathbf{G}_1 -Matrix über die Kontaktfläche beinhalten die Ansatzfunktionen benachbarter Elemente.
5. Überführung der Elemente auf der Masterseite in das lokale Koordinatensystem der Slaveseite:
Die Netze müssen dazu verschnitten werden.
6. Integration:
Die Integration wird auf dem Masterelement (lokales Referenzelement) der Slaveseite durchgeführt.
7. Einbau in das Gesamtgleichungssystem:
Den zusätzlich eingeführten Freiheitsgraden für die Spannungen müssen noch Indizes zur Kennzeichnung in der Steifigkeitsmatrix zugewiesen werden. Dies erfolgt erst nach der Generierung der originalen Steifigkeitsmatrix.

5.3.1 Berechnung des Interface

Aufgrund der Tatsache, dass im zu erweiternden p -FEM Code AdhoC kein Geometriekern integriert ist, liegt die Geometrie in Form der Elementbeschreibungen vor. Für Hexaeder ist die polynomiale Oberflächenbeschreibung mit Hilfe der Blending Funktionen Methode formuliert, bei Tetraedern wird die Geometrie iso- bzw. subparametrisch direkt über die Ansatzfunktionen (s. Kap. 4) beschrieben. Die Berechnung gekrümmter Kontaktflächen in 3D ist keine triviale Aufgabe. Ein Algorithmus für die Verschneidung und Projektion von Hexaedernetzen wird in [74], [59] vorgestellt. Dabei handelt es sich allerdings um isoparametrische h -Elemente, d.h. eine bilineare Geometriebeschreibung, die durch die beidseitig unterschiedliche Interpolation der Krümmung Lücken zwischen den zu koppelnden Netzen aufweist (s. Abb. 5.16). Prinzipiell wäre eine exakte Geometriebeschreibung wünschenswert. Dies kann allerdings mitunter zu superparametrischen Elementen mit Problemen bei Starrkörperverschiebungen führen [18], [33]. Diese Arbeit beschränkt sich aufgrund der zu erwartenden Komplexität bei gekrümmten

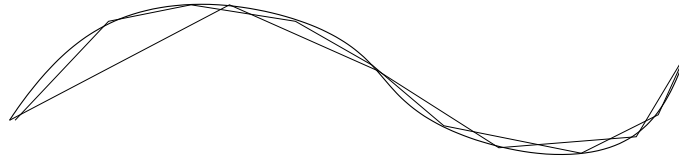


Abbildung 5.16: Klaffung durch lineare Interpolation

Kontaktflächen auf ebene Interfaces. Der Algorithmus läuft daher relativ unspektakulär ab. Im folgenden ist von zwei Körpern die Rede, die zusammengefügt den Gesamtkörper ergeben. Für den einen erfolgt eine Hexaeder-, für den anderen eine Tetraedervernetzung.

Algorithmus zur Bestimmung des ebenen Interface:

1. Vernetzung zweier aneinandergrenzender Körper mit Hexaeder- und Tetraederelementen.
2. Bestimmung aller Elemente, die an die Oberfläche der Körper grenzen. Diese Elemente sind dadurch gekennzeichnet, dass sie NICHT sechs Nachbarelemente (Hexaeder), bzw. nicht vier Nachbarelemente (Tetraeder) besitzen.
3. Bestimmung der ebenen Oberflächen (Vierecke, Dreiecke), an die nur ein Element angrenzt. Damit sind alle Oberflächen, die als Kandidat für das Interface dienen, herausgefiltert.
4. Berechnung der Hesseschen Normalenform (HNF) dieser Flächen. Diese kann als vier-Tupel (Normalenvektor plus Abstand vom Ursprung) gespeichert werden.
5. Gruppierung der Tupel für jeden Körper, d.h. mehrfach vorkommende Vektoren werden herausgenommen. Nach diesem Schritt sind alle ebenen Oberflächen der beiden Körper bekannt.
6. Gruppierung aneinandergrenzender Elemente eines Körpers mit gleicher HNF und Nachbarschaftsrelation, um Oberflächen zu identifizieren, die zwar die gleiche HNF besitzen, jedoch voneinander getrennt sind.
7. Vergleich der Tupel für beide Körper. Bei Gleichheit hat man eine mögliche Kontaktebene gefunden. Die zugehörigen Tetraeder- und Hexaederelemente können an dieser Stelle herausgefiltert werden.

Man sieht deutlich, dass bei gekrümmten Oberflächen der Ansatz über die Hessesche Normalenform nicht ausreicht und komplexere Verfahren gefunden werden müssen.

5.3.2 Verschneidung der Elemente

Wir gehen im Folgenden der Einfachheit halber von nur einer Kontaktebene aus. Nach Bestimmung der Kandidaten, werden im nächsten Schritt Nachbarschaften definiert, d.h. festgestellt welches Tetraederelement **A** grenzt an ein Hexaederelement **B**. Dazu muss eine der beiden folgenden Bedingungen erfüllt sein (Definition):

- Der Eckpunkt eines der Elemente liegt auf der Kante oder innerhalb des anderen Elementes.
- Eine Kante eines Dreiecks schneidet eine Kante des Vierecks.

Algorithmisch gesehen dient die Bestimmung der Nachbarschaften als Beschleunigung, um die Integration schneller durchführen zu können. Die Nachbarschaftsdefinition kann bei Punkt zu Punkt oder Kante zu Kante Berührung irrelevant werden, was sich allerdings als nebensächlich erweist.

Nach Bestimmung der Nachbarschaften findet die eigentliche Verschneidung statt. Zu verschneiden sind ausschließlich Linien, da eine so genannte *inplane* Krümmung im Folgenden ebenfalls ausgeschlossen wird. Die Überlappung eines Dreiecks und eines Vierecks kann in einem Drei- bis Siebeneck resultieren. Einige Verschneidungsmöglichkeiten sind in Abb. 5.17 dargestellt. Der Algorithmus läuft so ab, dass zunächst eine Punktmenge, die das polygonale Überschneidungsgebiet definiert, bestimmt wird.

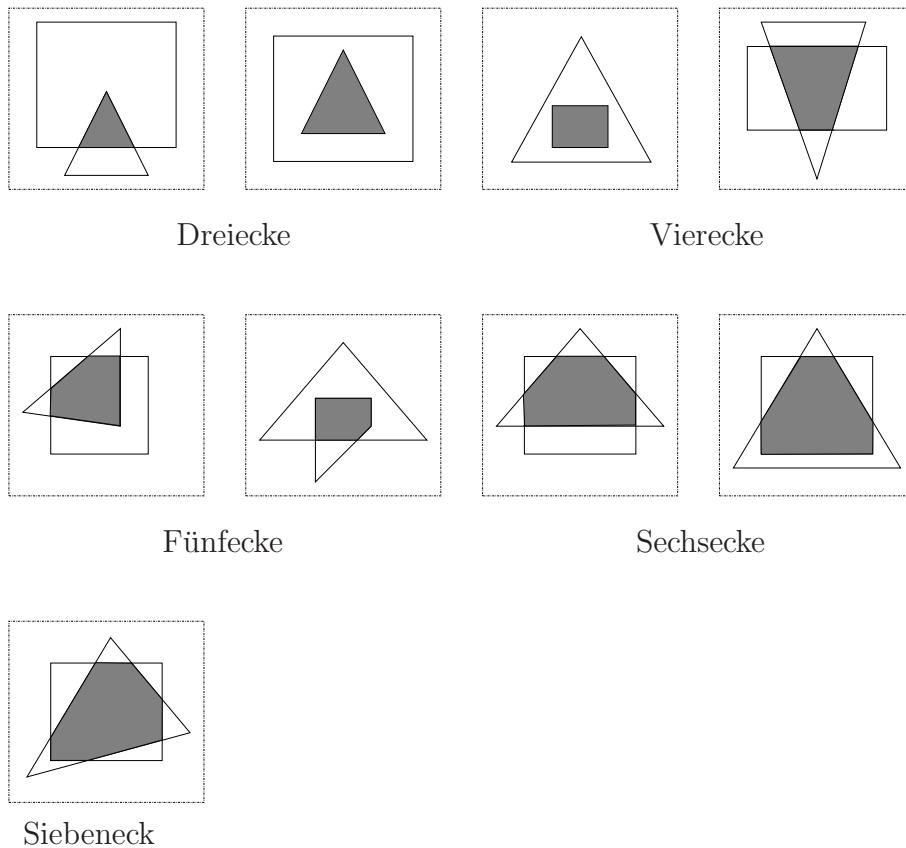


Abbildung 5.17: Einige Verschneidungsmöglichkeiten

1. Zunächst wird überprüft, welche Eckpunkte des Dreiecks im Viereck liegen oder umgekehrt. Diese werden in die Punktmenge übernommen.

2. Danach werden alle Schnittpunkte der begrenzenden Linien berechnet. Damit ist die Punktmenge P_1, \dots, P_n bestimmt. Für Punktmenge mit weniger als drei Elementen wird der Algorithmus hier abgebrochen.
3. Berechnung des Schwerpunkts \bar{S} der Punktmenge
4. Generierung von Linien $P_i-\bar{S}$ und P_i-P_j
5. Verschneidung der Linien P_i-P_j mit den Linien, die die äußeren Punkte mit dem Schwerpunkt verbinden.
6. Die Begrenzungslinien L_i ergeben sich aus der Bedingung, dass sie sich mit den Schwerpunktslinien nur in einem Punkt schneiden. In Abb. 5.18 wird bspw. die Linie $\overline{P_2P_4}$ geschnitten durch $\overline{SP_3}$.
7. Im letzten Schritt wird eine Dreiecksvernetzung des Polygons mit den Begrenzungslinien und deren benachbarten Schwerpunktslinien vorgenommen

Damit ist ein Interfacenetz generiert, auf dem die Integration durchgeführt werden kann. Ebenfalls bekannt sind Nachbarschaftsbeziehungen zwischen Hexaedern und Tetraedern. Die Gaussintegration der gemischten Integrale für die Matrix \mathbf{G}_1 läuft über die Abbildung Dreieck \rightarrow globale Koordinaten \rightarrow Viereck lokale Koordinaten (oder umgekehrt) und Funktionsauswertung der Ansatzfunktionen an diesen Punkten. Der vorletzte Schritt (Berechnung der lokalen Hexaeder Koordinaten) läuft über ein Newton-Raphson Verfahren.

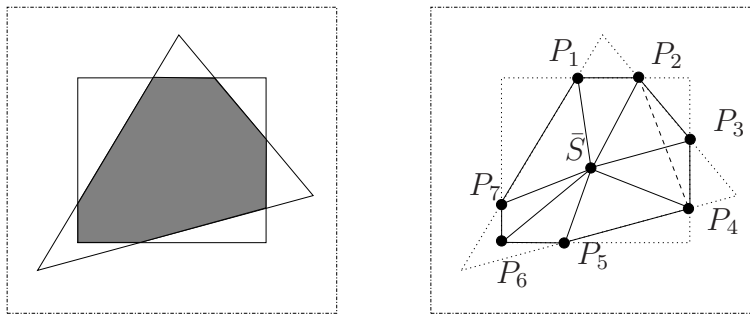


Abbildung 5.18: Interfacenetz

5.4 Rechenbeispiel

Ein einfaches Beispiel soll im Folgenden die prinzipielle Vorgehensweise der Mortar Element Methode zur Kopplung verschiedener Elementtypen aufzeigen. Implementiert wurde das Beispiel mit Hilfe des Computeralgebrasystems Maple [84]. Gegeben sei das in Abb. 5.19 dargestellte zweidimensionale Problem (Patch-Test):

Die Materialparameter seien $E = 1.0$ und $\nu = 0.3$. Unter den gegebenen Randbedingungen stellt sich in x- und y-Richtung ein lineares Verschiebungsfeld ein, mit der maximalen y-Verschiebung 1.0 am oberen Ende und maximalen x-Verschiebung 0.333 auf der rechten Seite. Die Spannungen in y-Richtung entsprechen der Belastung 1.0, in x-Richtung 0.0. Diskretisiert

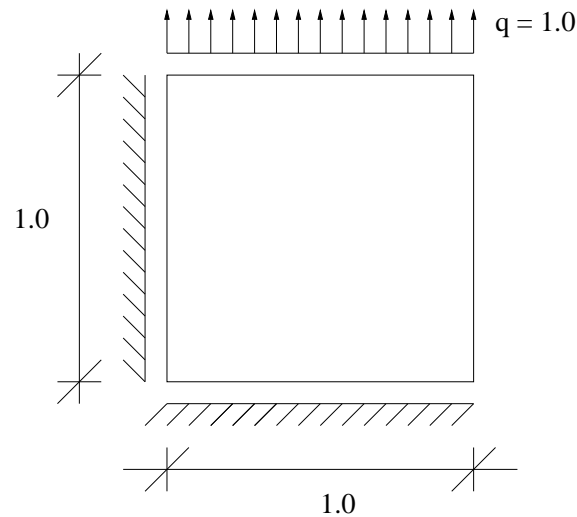


Abbildung 5.19: Patch Test

wird das Gebiet mit einem Vierecks- und drei Dreieckselementen, s. Abb. 5.20. Dabei kennzeichnen die Knotennummern mit * die Nummerierung für das Viereck. Die Ansatzfunktionen für das Verschiebungsfeld \mathbf{u} seien linear, bzw. bilinear. Für die Lagrange Multiplikatoren werden konstante Ansätze angenommen, als Basis also $N_1 = 1.0$. Die Slave Seite sei die Kante des Vierecks. Die linearen Ansatzfunktionen sind in Abb. 5.21 dargestellt. Für die Integrale

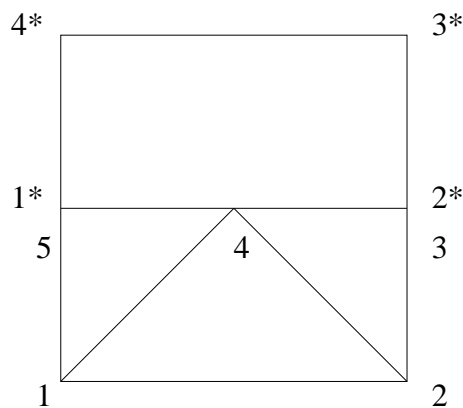


Abbildung 5.20: Diskretisierung

der Massenmatrix ergeben sich für das Viereck $\int_0^1 1x dx = \int_0^1 1(1-x) dx = 0.5$. und für die Dreiecke 0.25, bzw 0.5 für die Ansatzfunktion an Punkt 4. Die Massenmatrizen sehen folgendermaßen aus. Der Lesbarkeit halber werden links davon die zugehörigen Freiheitsgrade

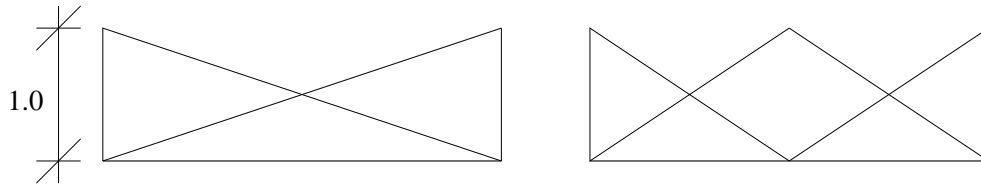


Abbildung 5.21: Ansatzfunktionen auf dem Interface, Viereck (links) und Dreiecke (rechts)

angegeben.

$$\mathbf{G}_1 = \begin{bmatrix} u_{1x} \rightarrow \\ u_{1y} \rightarrow \\ u_{2x} \rightarrow \\ u_{2y} \rightarrow \\ u_{3x} \rightarrow \\ u_{3y} \rightarrow \\ u_{4x} \rightarrow \\ u_{4y} \rightarrow \\ u_{5x} \rightarrow \\ u_{5y} \rightarrow \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0.25 & 0 \\ 0 & 0.25 \\ 0.5 & 0 \\ 0 & 0.5 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0.25 \end{bmatrix} \quad \mathbf{G}_2 = \begin{bmatrix} u_{1*x} \rightarrow \\ u_{1*y} \rightarrow \\ u_{2*x} \rightarrow \\ u_{2*y} \rightarrow \\ u_{3*x} \rightarrow \\ u_{3*y} \rightarrow \\ u_{4*x} \rightarrow \\ u_{4*y} \rightarrow \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -0.5 \\ -0.5 & 0 \\ 0 & -0.5 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.53)$$

Dabei sieht man, dass die Dirichlet Randbedingung des Punktes 5, bzw. $1^* u_x = 0$ berücksichtigt wurde, da diese Randbedingung nicht über einen Penalty-Wert gesetzt wurde. Das negative Vorzeichen der Matrix \mathbf{G}_2 ist durch deren Definition bestimmt. Die Struktur der Matrix folgt aus der Bedingung, dass die Differenz der Verschiebungen in x und y separat verschwinden (bzw. minimal werden) sollen.

Man erhält mit den zugehörigen Steifigkeitsmatrizen die exakte Lösung und für die Lagrangen Multiplikatoren

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = -1.$$

Das heisst, es ergeben sich als Lösung die exakten Spannungen.

Kapitel 6

Numerische Beispiele

In diesem Kapitel wird die Implementation der diskontinuierlichen Mortar Formulierung zur Kopplung von Hexaeder- und Tetraederelementen anhand numerischer Beispiele verifiziert. Die Ergebnisse zeigen für alle Beispiele ein konvergentes Verhalten mit Einschränkungen aufgrund der nicht exakt repräsentierten Geometrie. Verglichen werden jeweils ein Mortar-Netz mit einer vollständigen Hexaeder- oder Tetraeder-Vernetzung.

In Kap. 5.2.3 wurden an den Funktionenraum M , in dem die Lagrangen Multiplikatoren liegen, gewisse Forderungen gestellt. Es wurde in der Herleitung vorausgesetzt, dass dieser mit dem Raum der FE-Lösung auf der Slave Seite (auf dem Interface) identisch ist. Diese Forderung wird in den folgenden numerischen Beispielen teilweise aufgehoben, wodurch sich für diesen mehr Möglichkeiten ergeben. Folgende Optionen wurden im vorhandenen FE-Programm eingebaut:

Slave Seite:

Bei der Wahl der Slave Seite besteht die Möglichkeit, die Hexaeder- oder Tetraederseite zu wählen. Der Ansatz für die Lagrangen Multiplikatoren λ entspricht bis auf die weiter unten gemachten Ausführungen bzgl. polynomieller Ordnung und Stetigkeit, also im Standardfall, exakt dem Ansatz auf dem Hexaeder bzw. Tetraeder auf der Kontaktfläche, d.h. allen dort nicht verschwindenden Flächen-, Kanten- und Knotenmoden. Die Lösung für λ ist in diesem (Standard-) Fall also C_0 -stetig und besitzt dieselbe polynomielle Ordnung wie die Verschiebungslösung \mathbf{u}_{Fe}^S . In den weiter unten aufgeführten Beispielen ist die jeweilige Konfiguration mit 'Q' für 'Quadrilateral', bzw. mit 'T' für 'Triangle' als Slave Seite abgekürzt.

Polynomielle Ordnung:

Es bestehen zwei Möglichkeiten, die polynomielle Ordnung für den Multiplikatoransatz zu wählen. Dieser kann wie im Standardfall gleich der Ordnung für die Verschiebungslösung gewählt werden sowie um eine Ordnung reduziert, um dem Zusammenhang zwischen Verschiebungen und Spannungen (als Linearkombination deren Ableitungen) Rechnung zu tragen. Im letzteren Fall ergibt er sich, indem in 2D die horizontale Linie in Abb. 3.8 um eins 'nach oben' verschoben wird. In den weiter unten aufgeführten Beispielen ist die jeweilige Konfiguration mit 'F' für 'full Space' ('voller Ansatzraum'), bzw. mit 'R' für 'reduced Space' ('reduzierter Ansatzraum') abgekürzt.

Stetigkeit: Des Weiteren besteht die Option, die Stetigkeitsbedingung an den Multiplikatorraum aufzuheben, d.h. für den Multiplikatorraum *unstetige* Lösungen zuzulassen¹. Die möglichen Unstetigkeits-Stellen sind die Elementkanten des Slave-Netzes auf dem Kopplungsinterface. In den weiter unten aufgeführten Beispielen ist die jeweilige Konfiguration mit 'C' für 'continuous Space' ('stetiger Ansatzraum'), bzw. mit 'D' für 'discontinuous Space' ('unstetiger Ansatzraum') abgekürzt.

Alle Tetraeder-Netze sind wiederum mit dem Netzgenerator *Netgen* [108] erstellt und bis auf die Rechengenauigkeit exakt exportiert worden. Als Postprocessor dient *GID* [50].

6.1 Starrkörperverschiebungen

Zu testen ist zunächst die Verzerrungs- und Spannungsfreiheit im Fall von Starrkörperverschiebungen und -rotationen. Als Parameter wurden der Multiplikatorraum sowie unterschiedliche Ansatzordnungen für Hexaeder- und Tetraederelemente variiert. In Abb. 6.1 ist das verwendete Netz dargestellt. Alle Kombinationen der möglichen Multiplikatorräume (Viereck/Dreieck, voll/reduziert, stetig/unstetig) dieses Beispiels liefern die geforderten Ergebnisse, d.h. Spannungs- und Verzerrungsfreiheit.

6.2 Patch Test

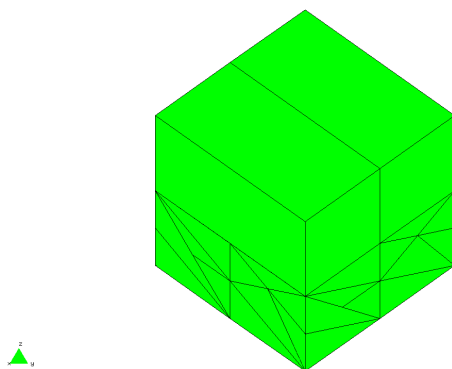


Abbildung 6.1: Netz

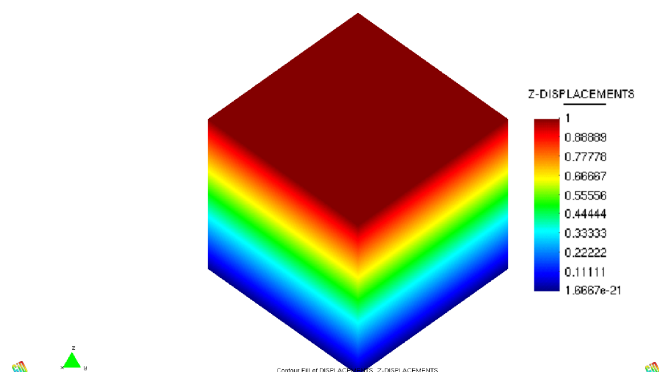


Abbildung 6.2: Verschiebung in Krafrichtung

Des Weiteren sollte von der Methode die Erfüllung des Patch Tests unter der gleichen Variierung bezüglich der Lagrangen Multiplikatoren beobachtet werden können. Der Test wird auf dem in Abb. 6.1 dargestellten Netz bestanden (zu sehen ist ein verfeinertes Postprocess-Netz). In Abb. 6.2 ist die exakte Verschiebung in Krafrichtung dargestellt. Anzumerken ist, dass die Implementierung ebenfalls auf anderen Netzen getestet wurde, wobei sich der unstetige Ansatzraum (s. auch Bsp 6.3) als am geeignetsten herausgestellt hat, d.h. der Test wird nicht auf jedem Netz mit jeder beliebigen Kombination für den Multiplikatorraum bestanden. Die folgenden Ergebnisse wurden mit dem trunk-Space auf dem Hexaeder- und Tetraedernetz mit einem Ansatzgrad von vier erzielt. Ein Ergebnis wird im Folgenden als richtig

¹Hiermit ist C_0 -Stetigkeit gemeint

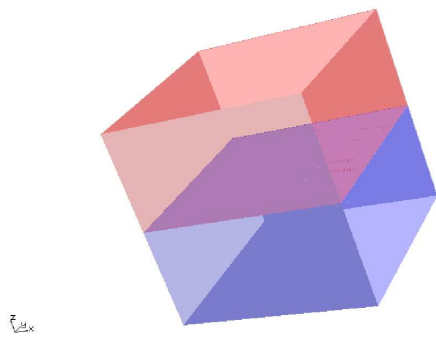
definiert, wenn die Dehnungsenergie exakt ist. Die Abkürzungen der Konfigurationen für den Lagrange Multiplikatorraum werden erneut angegeben: Q(uad)/T(ri) = Vierecks-, Dreiecksraum, F(ull)/R(educed) = voller, bzw. reduzierter Ansatzraum, C(ontinuous)/D(iscontinuous) = stetiger, bzw. unstetiger Ansatzraum. Die verwendeten Unterteilungen für die Hexaeder- und Tetraedervernetzungen sind in den Abbildungen 6.3(a)-(h) zu sehen. Es ergibt sich die folgende Tabelle ('+' für richtige Energienorm, '-' für falsche Energienorm):

	QFC	QFD	QRC	QRD	TFC	TFD	TRC	TRD
Bsp. 1	+	+	+	+	+	+	+	+
Bsp. 2	+	+	+	+	+	+	+	+
Bsp. 3	-	+	-	+	-	+	-	+
Bsp. 4	-	+	-	+	-	+	-	+
Bsp. 5	-	+	-	+	-	+	-	+
Bsp. 6	-	-	-	-	-	-	-	-
Bsp. 7	-	+	-	+	-	+	-	+
Bsp. 8	-	+	-	+	-	+	-	+

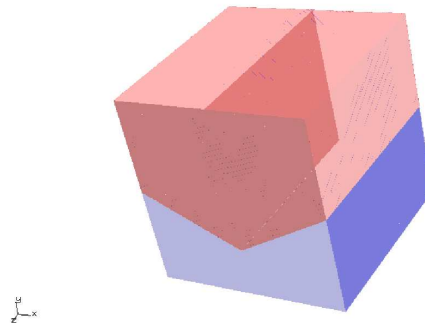
Man erkennt deutlich, dass fast alle mit dem diskontinuierlichen Ansatzraum berechneten Konfigurationen den Patch Test bestehen. Eine Ausnahme bildet Bsp. 6, wobei hier ein geometrisches Epsilon² auf 1.0×10^{-4} hochgesetzt werden musste, um überhaupt ein exaktes Interfacenetz durch den in Kap. 5.3.1 beschriebenen Algorithmus zu erhalten. Grund hierfür ist die leichte Schräglage des innenliegenden Würfels (um 5° um alle drei Hauptachsen gedreht), die in Netgen 4.5 ebenfalls schwer exakt nachzubilden ist. Es ist zu vermuten, dass dies der Grund für das Nicht-Bestehen in diesem Fall ist.

Ein generelles Fazit dieses ersten Beispiels ist, dass der diskontinuierliche Ansatzraum die besseren Ergebnisse liefert.

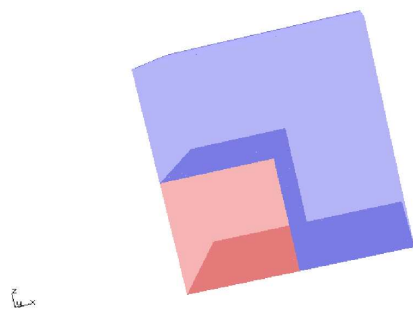
²Dieser Epsilon Wert kennzeichnet den Radius einer Kugel, bei dem angenommen wird, dass zwei nahe beieinanderliegende Punkte aufeinanderliegen.



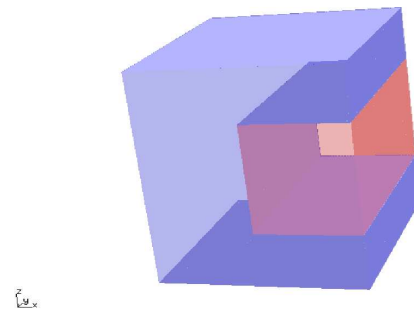
(a) Bsp. 1



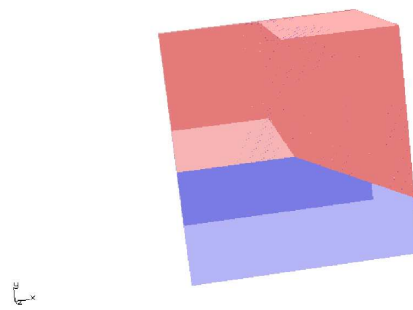
(b) Bsp. 2



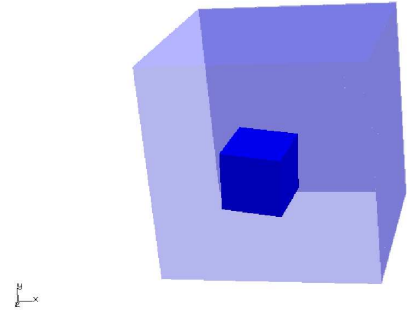
(c) Bsp. 3



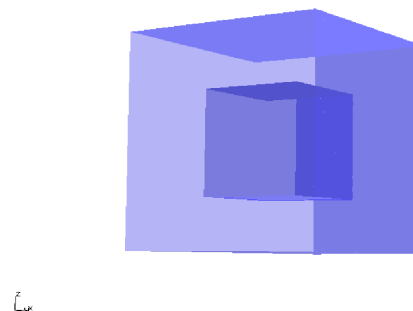
(d) Bsp. 4



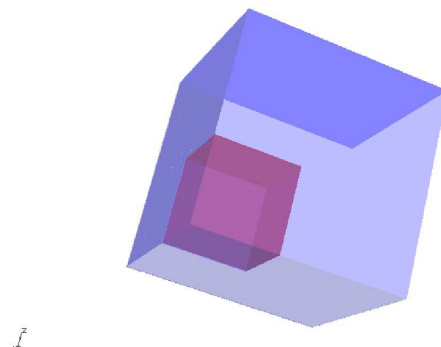
(e) Bsp. 5



(f) Bsp. 6



(g) Bsp. 7



(h) Bsp. 8

Netgen 4.5

Abbildung 6.3: Hexaeder (rot/dunkelblau) und Tetraeder(hellblau)

6.3 Achtelkugel unter hydrostatischem Druck

Als nächstes Beispiel wird wiederum eine Achtelkugel (Radius=1.0, E-Modul=1.0, $\nu = 0.\bar{3}$) unter hydrostatischem Druck ($q=1.0$) gerechnet. Aus der Kugel wird im Inneren ein Würfel der Kantenlänge 0.3 herausgeschnitten und die verbleibende Lochstruktur im Folgenden mit Tetraedern vernetzt. Das Loch selbst wird mit einem Hexaeder geschlossen, s. Abb. 6.4. Die Ordnung der Geometriebeschreibung beträgt $p = 6$.

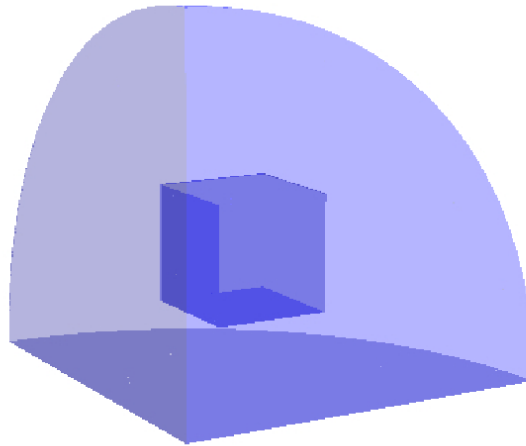


Abbildung 6.4: Achtelkugel mit herausgeschnittenem Würfel

Es stellt sich für das gegebene Problem bei exakt repräsentierter Geometrie eine lineare Verschiebung in alle drei Koordinatenrichtungen und ein konstantes Hauptspannungsfeld ein. Die Diskretisierung sollte somit in der Lage sein, das exakte Ergebnis bis auf Fehler, die durch die Geometrieapproximation der gekrümmten Oberfläche entstehen, zu reproduzieren. Um Geometrie induzierte Fehler möglichst gering zu halten, wird für Tetraeder und Hexaeder ein subparametrischer Ansatz der Ordnung $p = 7$ (trunk space) gemacht.

Generelles Fazit der Berechnung ist, dass dieser Test wiederum mit dem unstetigen Multiplikatorraum bestanden wird, mit dem stetigen jedoch nicht. Dabei spielen für das Verschiebungsfeld die beiden anderen Möglichkeiten, Dreieck/Viereck - voll/reduziert, keine Rolle. Für den Multiplikatorraum selbst sind die Ergebnisse, die mit dem Vierecksraum erzielt wurden, jedoch deutlich besser.

Die Abb. 6.5, 6.6 zeigen die Ergebnisse für die Multiplikator-Konfiguration 'TRD', also Dreieck - reduziert - unstetig. In Abb. 6.5 ist die erste Hauptspannung zu sehen. Die Spannungen liegen im Bereich zwischen 0.999996 und 1.000006 und zeigen an der Oberfläche die größten Schwankungen, so dass angenommen werden kann, dass diese auf die Geometriedarstellung zurückzuführen sind.

In Abb. 6.6 sind die Lagrangen Multiplikatoren auf dem Kopplungsinterface in z -Richtung dargestellt. Zu sehen ist ebenfalls das Dreiecksnetz, auf dem die Integration durchgeführt

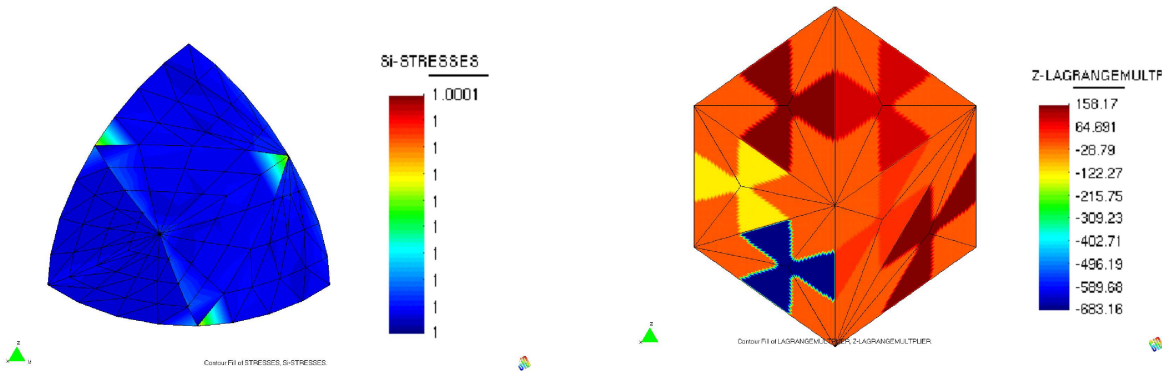


Abbildung 6.5: Erste Hauptspannung ('TRD') Abbildung 6.6: Multiplikator in z -Richtung ('TRD')

wird. Man erkennt, dass die Lösung für die Lagrangen Multiplikatoren deutlich vom exakten Ergebnis - konstante Spannungen $\sigma_{x,y,z}$ in x,y,z Richtung abweicht. Dies hat jedoch keinen merklichen Einfluss auf die Qualität der Spannungen, die aus den Ableitungen der Verschiebungslösung hervorgehen und trotz nicht-konformer Vernetzung über das gesamte Gebiet stetig sind.

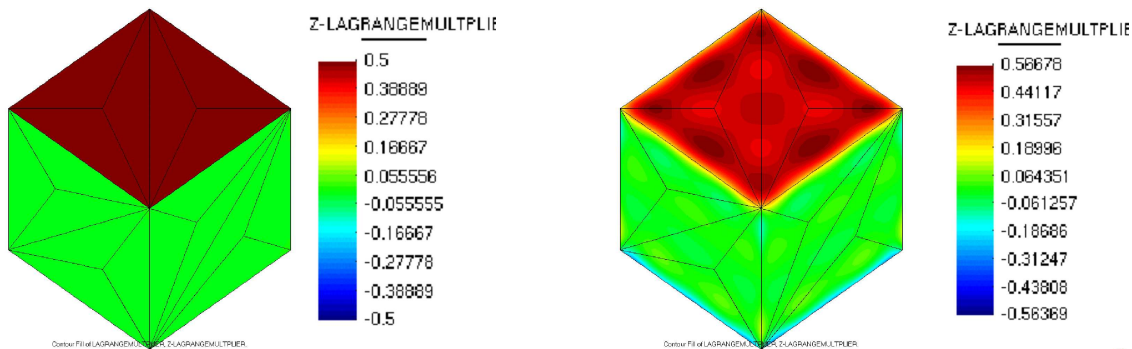


Abbildung 6.7: Multiplikator in z -Richtung ('QRD') Abbildung 6.8: Multiplikator in z -Richtung ('QFC')

In der Abb. 6.7 ist die Lösung für den Multiplikatorraum der Kombination Viereck-reduziert-unstetig ('QRD') dargestellt. Die Lösung ist somit für diese Kombination exakt, d.h. es ergeben sich konstante Spannungen in z -Richtung auf einer Oberfläche mit einem Normalenvektor in z -Richtung. Die Verschiebungslösung entspricht qualitativ der in Abb. 6.5.

In Bild 6.8 daneben ist die Lösung für den stetigen vollen Raum zu sehen. Auch hier erscheint die Lösung für den Multiplikatorraum relativ nah an der exakten Lösung zu sein. Das Bild zeigt eine um einen konstanten Wert oszillierende Funktion, die versucht an der Grenze der 'oberen' Begrenzungsfläche des Würfels einen Spannungssprung nach Null nachzubilden. Nichtsdestotrotz erhält man für die Spannungen aus der entsprechenden Verschiebungslösung für die Konfiguration 'QFC' keine guten Ergebnisse (nicht dargestellt). Anmerkung: In beiden Fällen (Abb. 6.7, 6.8) entspricht die Lösung auf der gegenüberliegenden Seite der dargestellten mit umgedrehten Vorzeichen - in der Legende blau gekennzeichnet.

Auch dieses Beispiel führt zu demselben Fazit wie der vorhergehende Patch-Test: Ein diskontinuierlicher Ansatz für die Lagrange Multiplikatoren erzielt die besseren Ergebnisse für die Verschiebungslösung \mathbf{u}_{Fe} und die daraus resultierenden Spannungen.

6.4 Manufactured solution

Analog zum Kapitel 3.5.1 wird auf dem Einheitswürfel die folgende glatte Verschiebungslösung vorgegeben

$$u_4 = \begin{bmatrix} \sin(\pi f_1) \sin(\pi f_2) \sin(\pi f_3) \\ \sin(2\pi f_1) \sin(2\pi f_2) \sin(\pi f_3) \\ \sin(2\pi f_1) \sin(2\pi f_2) \sin(2\pi f_3) \end{bmatrix} \quad (6.1)$$

mit

$$f_1 = 0.5 * (2x - 1.5)^2 - 1.0x - 0.125$$

$$f_2 = 0.5 * (2y - 1.5)^2 - 1.0y - 0.125$$

$$f_3 = 0.5 * (2z - 1.5)^2 - 1.0z - 0.125$$

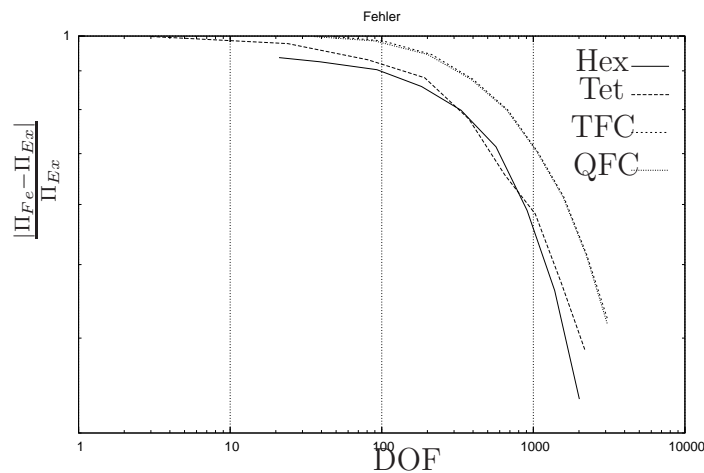


Abbildung 6.9: Konvergenzverhalten

Das Beispiel ist derart gewählt, dass das Verschiebungsfeld keine Symmetrie aufweist. Die Energienorm des Systems beträgt $\Pi_{Ex} = 43.14973078$. Die zugrunde liegende Vernetzung entspricht der in Abb. 6.1 dargestellten mit sechs Tetraeder- und zwei Hexaederelementen. Verglichen wird die Berechnung mit einer Tetraedervernetzung bestehend aus sechs Elementen und einer Hexaedervernetzung bestehend aus acht Elementen (trunk space). In Abb. 6.9 ist das Konvergenzverhalten für den vollen stetigen Dreiecks- und Vierecksraum sowie für die Referenzlösungen dargestellt. Man erkennt sehr deutlich, dass die Mortar Element Methode

die exponentielle Konvergenz der reinen p -Version für glatte Probleme aufweist. Dies bestätigt theoretische Aussagen von SESHAIYER ET AL. [113]. Des Weiteren ist kein bedeutender Unterschied zwischen dem vollen und stetigen Dreiecks ('TFC')- und Vierecksraum ('QFC') für die Lagrangen Multiplikatoren festzustellen.

6.5 Lochscheibe - Lineares Materialgesetz

Analog zu Bsp. 4.4.3 wird im Folgenden die Lochscheibe unter Zugbeanspruchung berechnet. Die zugrunde liegende Tetraeder-Vernetzung ist in Abb. 6.11 dargestellt (in Abb. 6.10 ist wiederum ein verfeinertes Postprocessing-Netz mit linearen Tetraedern dargestellt). Das Netz besteht aus 55 Tetraedern und zwölf Hexaedern.

Der Multiplikatorraum ist auf den Interface-Dreiecken als voll und stetig definiert ('TFC').

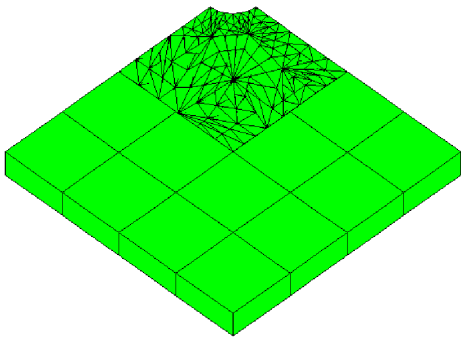
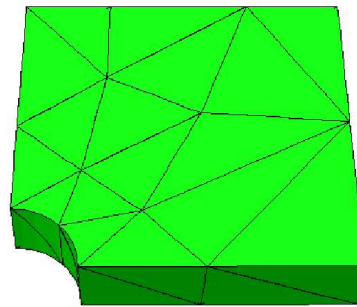


Abbildung 6.10: Hybrides Netz



Netgen 4.5

Abbildung 6.11: Original-Tetraedernetz

In Abb. 6.12 sind die Vergleichsspannungen einer moderat genauen ($p = 8$, 21175 DOF) Berechnung über das gesamte Gebiet dargestellt. Mit dem bloßen Auge lässt sich hierbei keine Unstetigkeit am Kopplungsinterface erkennen. Die sehr gute Qualität des Ergebnisses wird dadurch unterstrichen, dass es sich bei der abgebildeten Funktion um eine Linearkombination der *Ableitungen* des als unstetig angenommenen Verschiebungsfeldes handelt. Für das Verschiebungsfeld selbst wäre ein derart glatter Verlauf schon als sehr zufrieden stellend zu bezeichnen³.

³In keinem der in dieser Arbeit gezeigten Beispiele ließen sich unter Verwendung des gewählten Postprozessors *optisch* für das Verschiebungsfeld Unstetigkeiten erkennen.

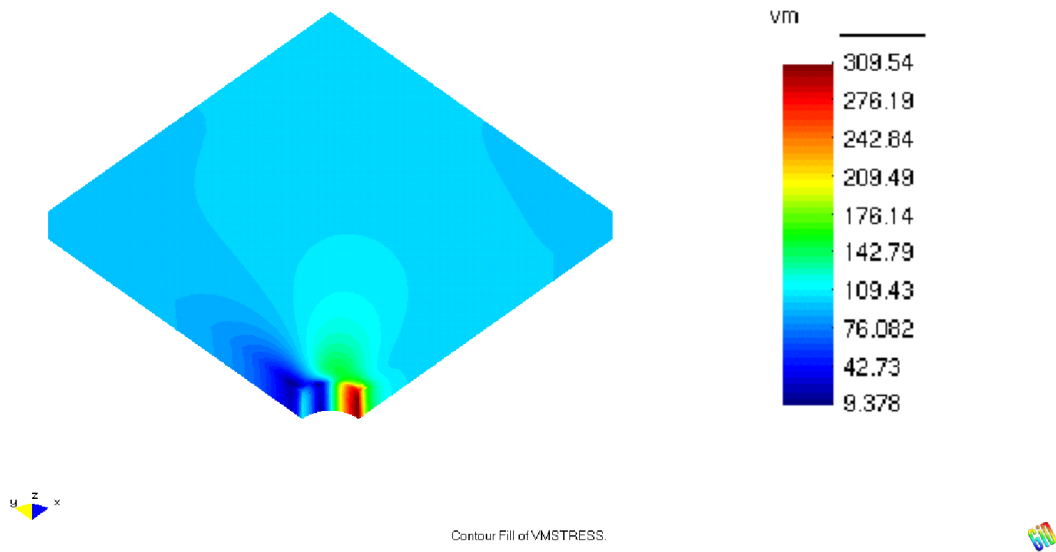


Abbildung 6.12: Vergleichsspannungen

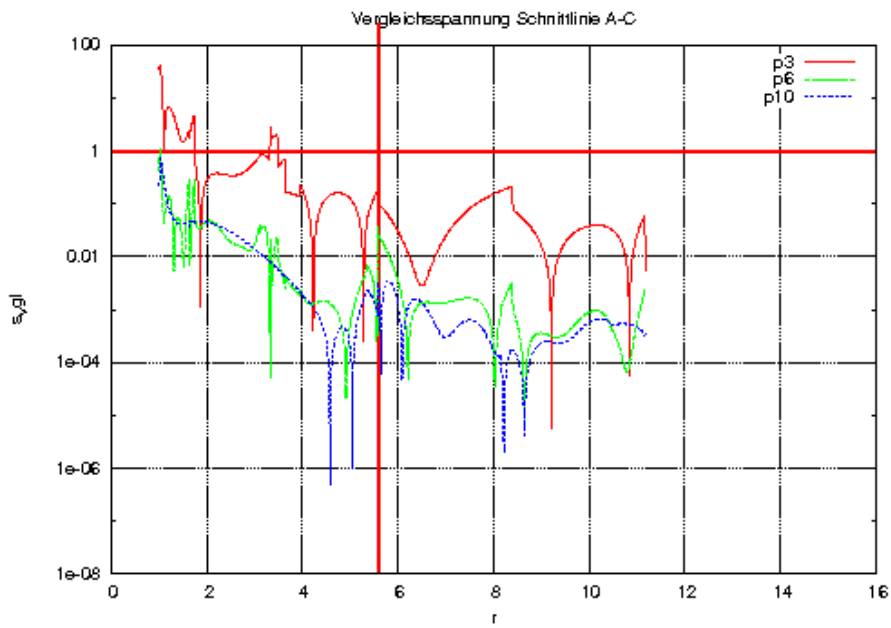


Abbildung 6.13: Rel. Fehler σ_{vgl} Schnitt A-C

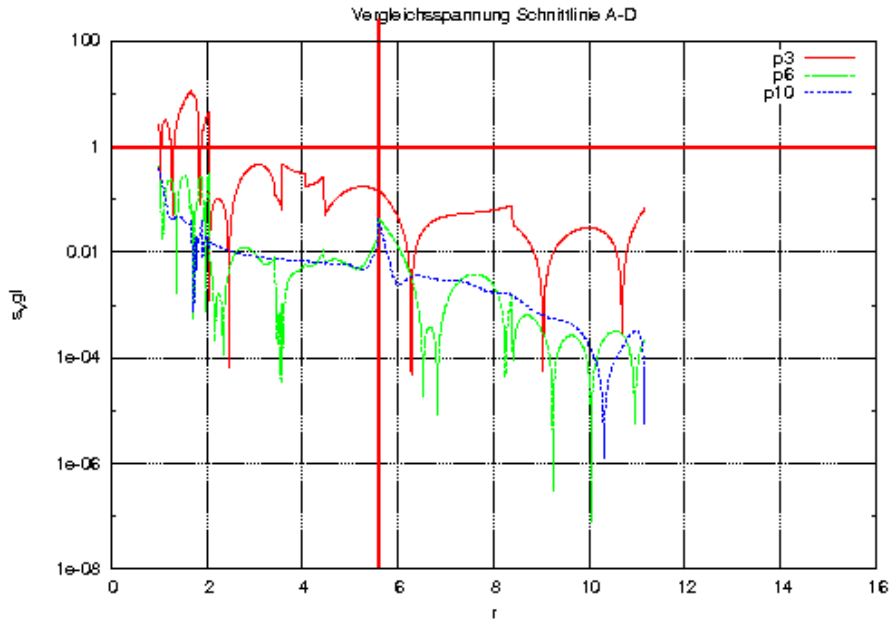


Abbildung 6.14: Rel. Fehler σ_{vgl} Schnitt A-D

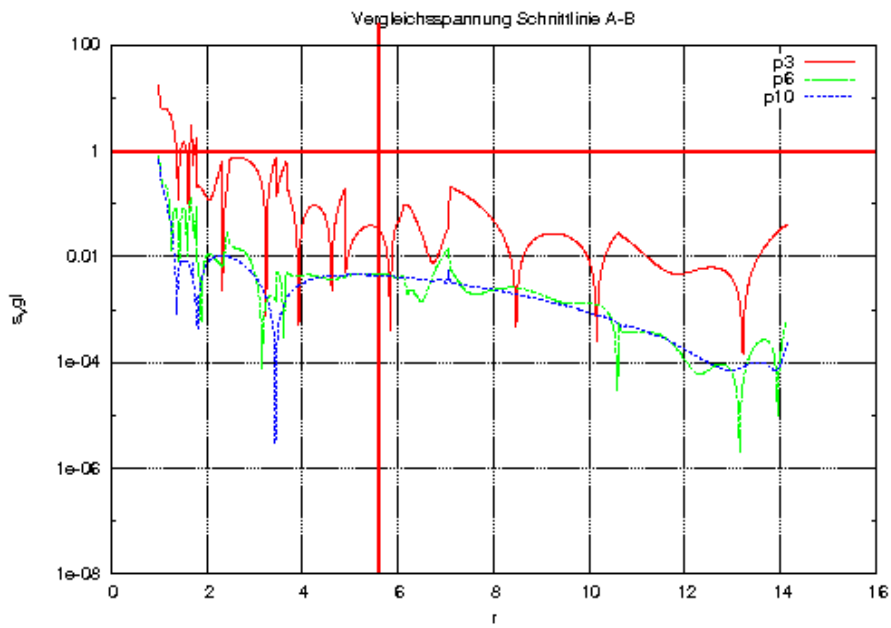
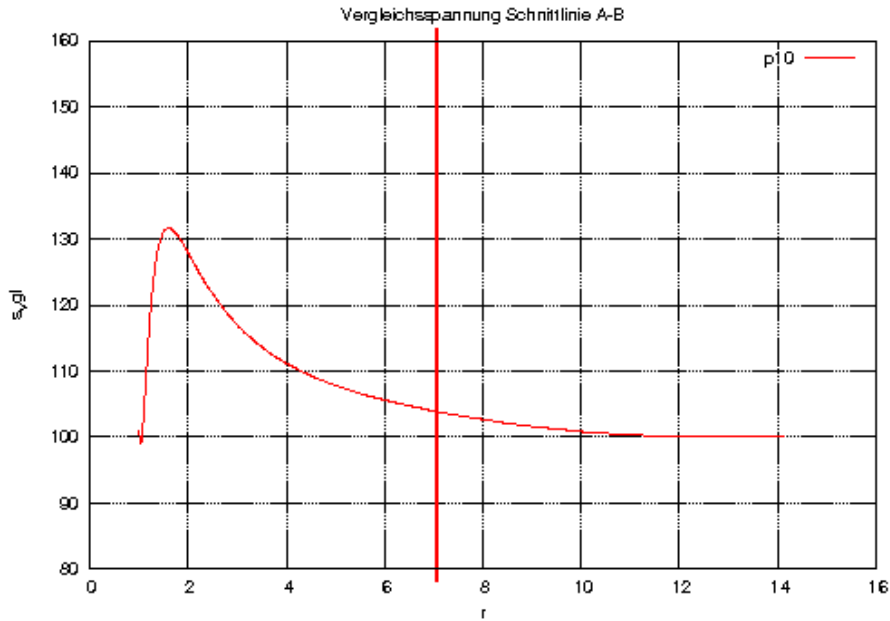


Abbildung 6.15: Rel. Fehler σ_{vgl} Schnitt A-B

Abbildung 6.16: Vgl.-Spannung σ_{vgl} Schnitt A-B

Untersucht werden nun die Vergleichsspannungen entlang der Schnittlinien A-B, A-C, A-D (s. Abb. 4.19). Als Referenzlösung wird wiederum eine Hexaederlösung mit 2280 Elementen und $p = 8$ verwendet. In Abb. 6.13, 6.14, 6.15 ist der relative Fehler der Vergleichsspannung im einfach logarithmischen Maßstab entlang der entsprechenden Schnittlinien für die Polynomgrade $p = 3$, $p = 6$ und $p = 10$ aufgetragen. Die vertikal eingezeichnete Linie markiert den Übergang zwischen Hexaeder- und Tetraedernetz. Die horizontale Linie kennzeichnet die Ein-Prozent Fehlermarke. Die Ergebnisse, die auch für moderat hohe Ansatzordnungen (größer fünf) vornehmlich unter einem Prozent liegen, bewegen sich in einer Größenordnung, die sich ohne Weiteres durch die geometrischen Abweichungen vom Referenzgebiet erklären lassen. Sie lassen die Vermutung zu, dass auch für Verschiebungsfelder, die nicht im selben Raum wie die

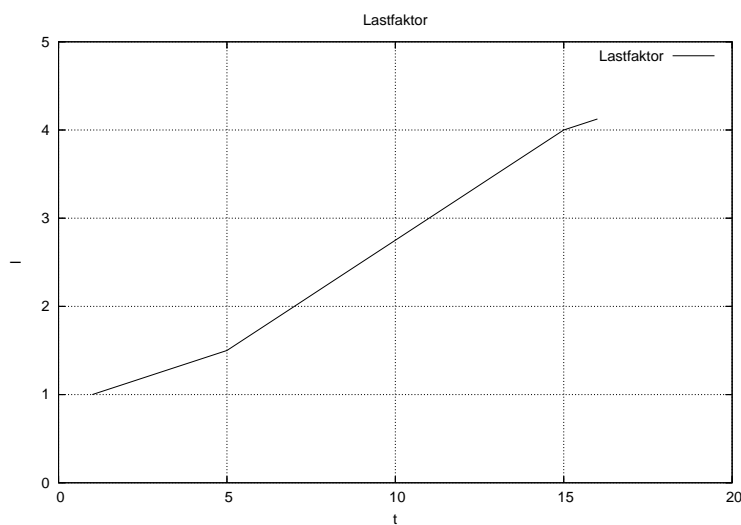


Abbildung 6.17: Lastfaktor

Ansatzfunktionen liegen (wie beim Patch Test), die Abweichungen der Spannungen von einer konformen Lösung vernachlässigbar klein sind. In Abb. 6.16 ist der Verlauf der Vergleichsspannungen entlang der Schnittlinie A-B für einen Ansatz der Ordnung zehn dargestellt. Die Abweichungen von der Referenzlösung bewegen sich hierbei im Bereich der Linienstärke.

6.6 Lochscheibe - Nichtlineares Materialgesetz

Eine weitere Fragestellung von Interesse ist, wie sich das Verfahren unter materieller Nichtlinearität verhält, d.h. wie verhält sich die Lösung für die Lagrangen Multiplikatoren, wenn auf dem Interface Plastifizierungen eintreten? Untersucht wird hierbei ein bereits implementiertes Materialmodell der Prandtl-Reuss Plastizität mit exponentiell isotroper Verfestigung (s. z.B. [128], [38], [35] und die darin ausgewiesene Literatur). Die Materialparameter sind wie folgt:

Kompressionsmodul	κ	164206.00 N/mm^2
Schermodul	μ	80193.80 N/mm^2
Fließspannung	K_0	450.00 N/mm^2
Saturationsspannung	K_∞	715.00 N/mm^2
linearer Verfestigungsmodul	H	129.24 N/mm^2
Verfestigungsexponent	ω	16.93

Die Belastungshistorie mit einem Basiswert von $\bar{t} = 100$ ist in Abb. 6.17 dargestellt.

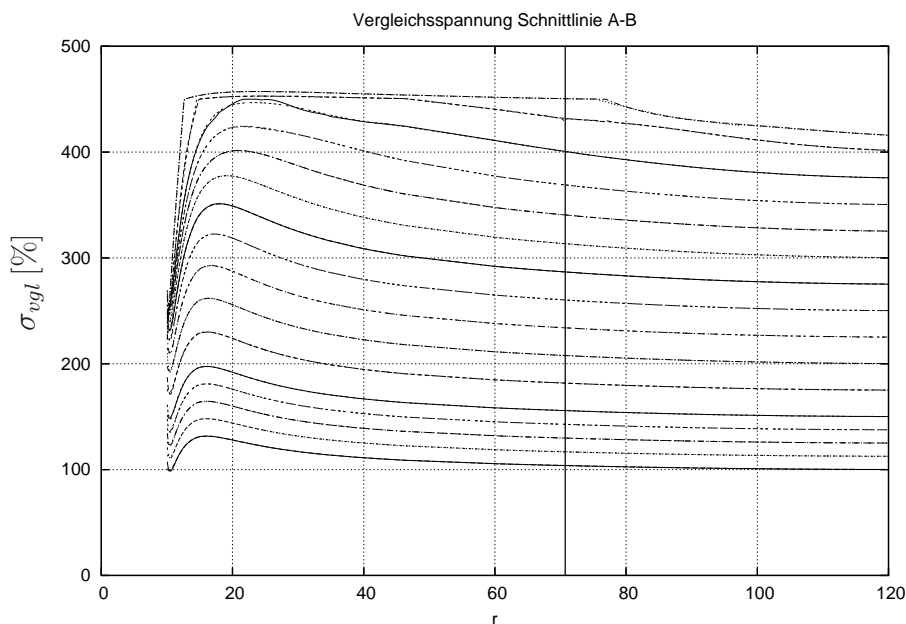


Abbildung 6.18: Vergleichsspannung σ_{vgl} Schnitt A-B

Simuliert wird mit dem aus dem vorherigen Beispiel bekannten Netz. Der Ansatzraum für den Multiplikatorraum besteht aus der Kombination Dreieck/Voll/Stetig ('TFC'). In den Abb. 6.18 - 6.20 sind die Vergleichsspannungen der Referenzlösung und der Mortar Lösung entlang der Schnittlinien A-B, A-C sowie A-D über die 16 Lastschritte dargestellt. Man erkennt auch hier mit dem bloßen Auge keine Unterschiede der dargestellten Kurven. In Abb. 6.21 ist

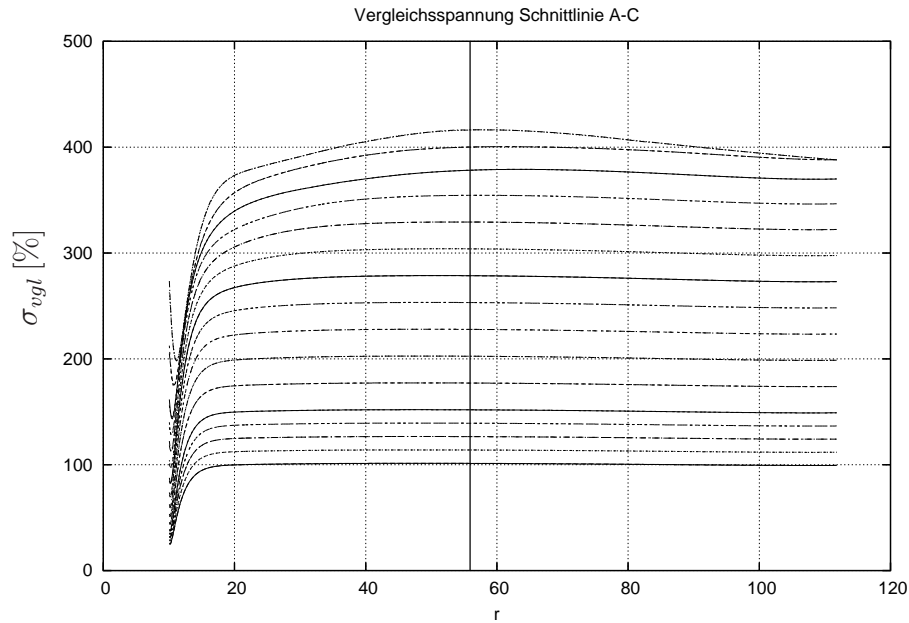


Abbildung 6.19: Vergleichsspannung σ_{vgl} Schnitt A-C

das Vergleichsspannungsfeld über Ω für den letzten Lastschritt dargestellt. Auch hier lassen sich keine Unstetigkeiten feststellen. Von Interesse ist des Weiteren, inwiefern die Lösung für die Lagrange Multiplikatoren mit den tatsächlichen Spannungsgrößen übereinstimmen. Für den gewählten Ansatzraum 'TFC' sind die Ergebnisse in den Abbildungen 6.22-6.27 dargestellt. Obwohl die aus der Verschiebungslösung erhaltenen Spannungen sehr gut mit der Referenzlösung übereinstimmen, lassen sich keine Übereinstimmungen zwischen den Multiplikatoren und den tatsächlichen Spannungsgrößen erkennen. In den dargestellten Abbildungen sind weder Größenordnungen noch Verlauf der Lösungen irgendeiner Form ähnlich, weswegen auf die Legende verzichtet wurde.

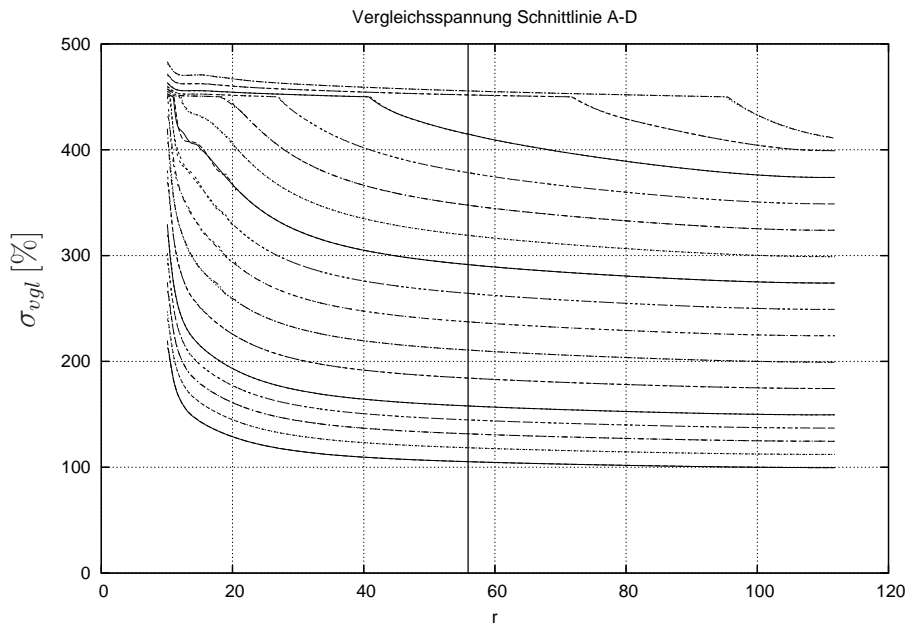
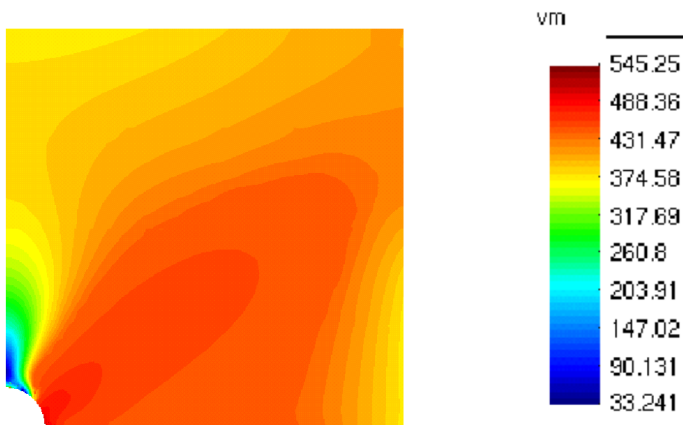


Abbildung 6.20: Vergleichsspannung σ_{vgl} Schnitt A-D



H

Contour Fill of VMSTRESS.



Abbildung 6.21: Vergleichsspannung σ_{vgl}

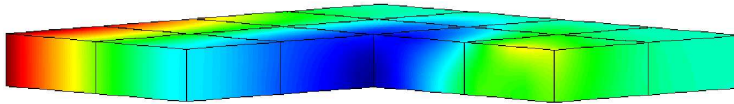


Abbildung 6.22: Spannungen σ_{xx} am Interface

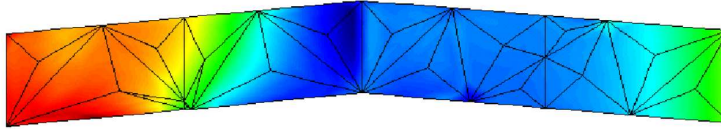


Abbildung 6.23: Lagranger Multiplikator in x -Richtung

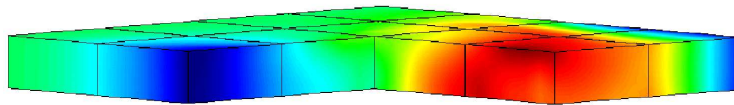


Abbildung 6.24: Spannungen σ_{yy} am Interface

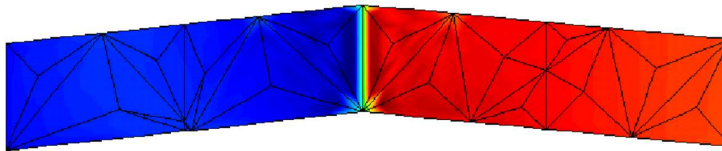


Abbildung 6.25: Lagranger Multiplikator in y -Richtung

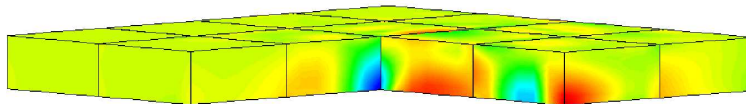


Abbildung 6.26: Spannungen σ_{zz} am Interface

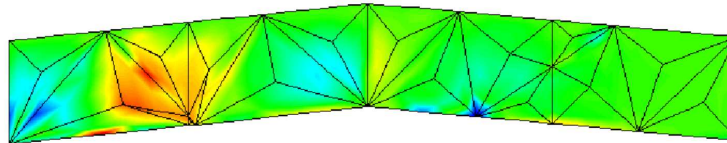


Abbildung 6.27: Lagranger Multiplikator in z -Richtung

6.7 Tunnel

Als abschließendes Modellbeispiel wird eine mögliche Anwendung der Mortar Element Methode zur Effizienzsteigerung einer dreidimensionalen Finite Elemente Berechnung im Tunnelbau aufgezeigt. Bei diesem Beispiel handelt es sich weniger um eine realitätsnahe Analyse, zu deren Umsetzung im Rahmen dieser Arbeit keine Kapazitäten verfügbar waren, als mehr um einen Ausblick auf eine mögliche Anwendung zur gezielten Nutzung eines nicht-konformen Netzes. Motiviert wird dieser Ansatz durch die Tatsache, dass der Fehler, der durch ein nicht stetiges Verschiebungsfeld induziert wird, in derselben Größenordnung liegt wie Annahmen bezüglich des Materialverhaltens und dessen Verteilung im Boden, über das in der Regel idealisierende Annahmen getroffen werden müssen. Die vorliegende Berechnung ist linear und berücksichtigt dementsprechend keinerlei materielle Nichtlinearitäten. Eine Konvergenzuntersuchung einer derartigen Problemstellung wurde im vorhergehenden Beispiel in Kap. 6.6 angestellt.

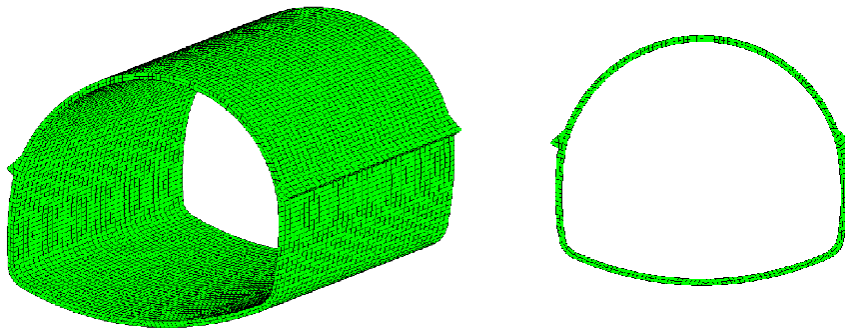


Abbildung 6.28: Tunnelquerschnitt - Netz

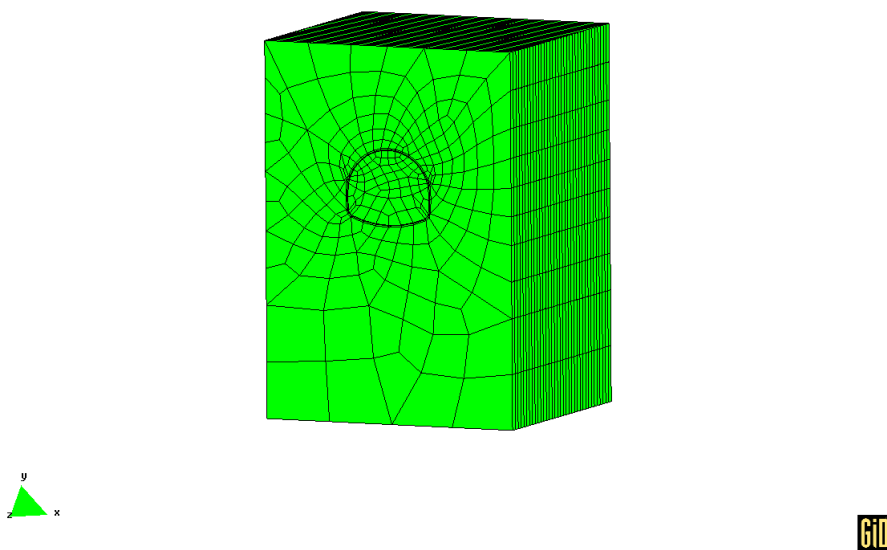


Abbildung 6.29: Gesamtnetz (nur Hexaeder)

Ein Hexaedernetz des zu untersuchenden Tunnels ist in Abb. 6.28 dargestellt. Eine realitätsnahe dreidimensionale Analyse des Bauvorhabens kann nur unter Berücksichtigung des Baufortschritts erfolgen, wodurch sich die Elementabmessungen in Tunnel-Vortriebsrichtung ergeben und im Folgenden zu 0.5 [m] angenommen werden. Das gesamte Netz mit 11515 Elementen ist in Abb. 6.29 dargestellt. Die Maße des betrachteten Bereichs betragen $38 \times 54 \times 35$ [m].

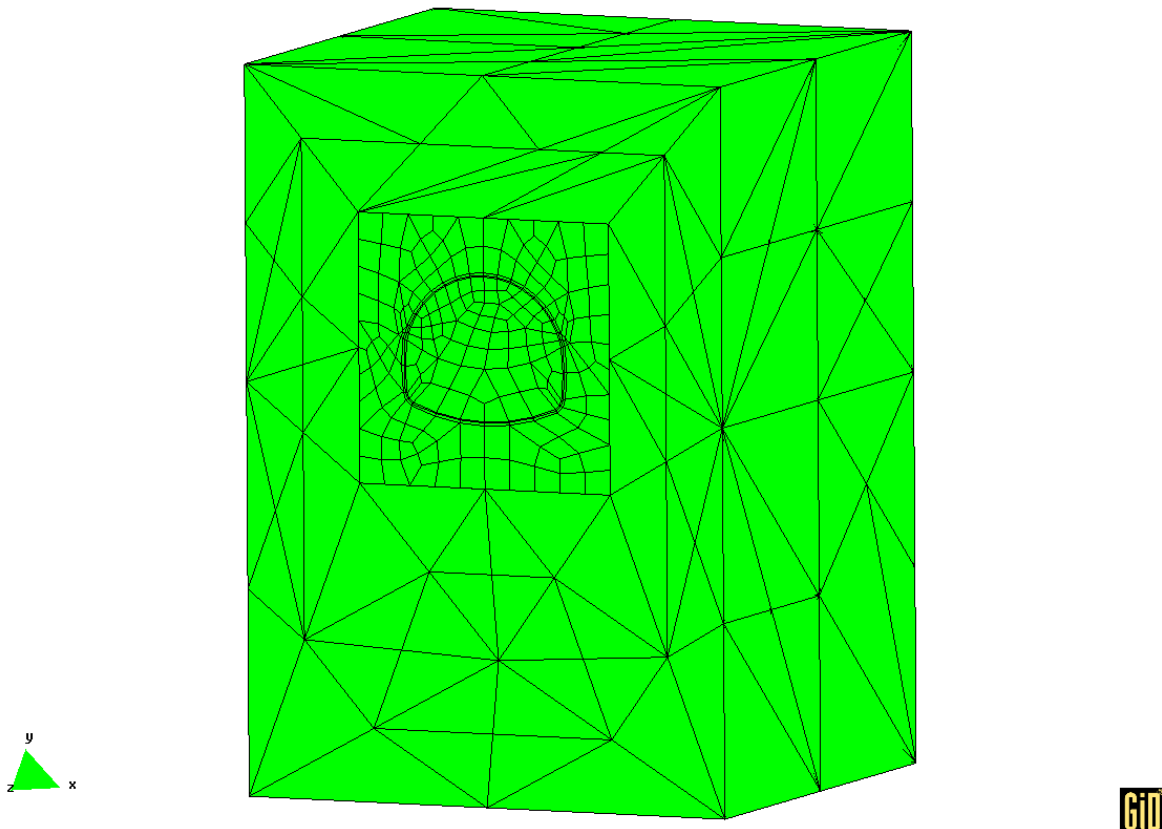


Abbildung 6.30: Mortar-Netz

Das verwendete hybride Mortar-Netz bestehend aus Hexaedern für den Tunnel und dessen Umgebung sowie Tetraedern wird in Abb. 6.30 gezeigt. Die räumliche Diskretisierung beruht auf dem Prinzip, dass für den Tunnel selbst sowie für das umliegende Erdreich die Elementgröße auf 0.5 [m] fixiert wird, jedoch in größerer Entfernung eine nicht-konforme Anbindung an ein äußeres Tetraedernetz vorgenommen wird. Hiermit wird angestrebt, die Anzahl der Freiheitsgrade des Gesamtsystems zu verringern, ohne einen signifikanten Genauigkeitsverlust in Kauf nehmen zu müssen. In Abb. 6.31 werden die Vertikalverschiebungen der Referenzlösung und in Abb. 6.32 die der Mortar-Lösung dargestellt.

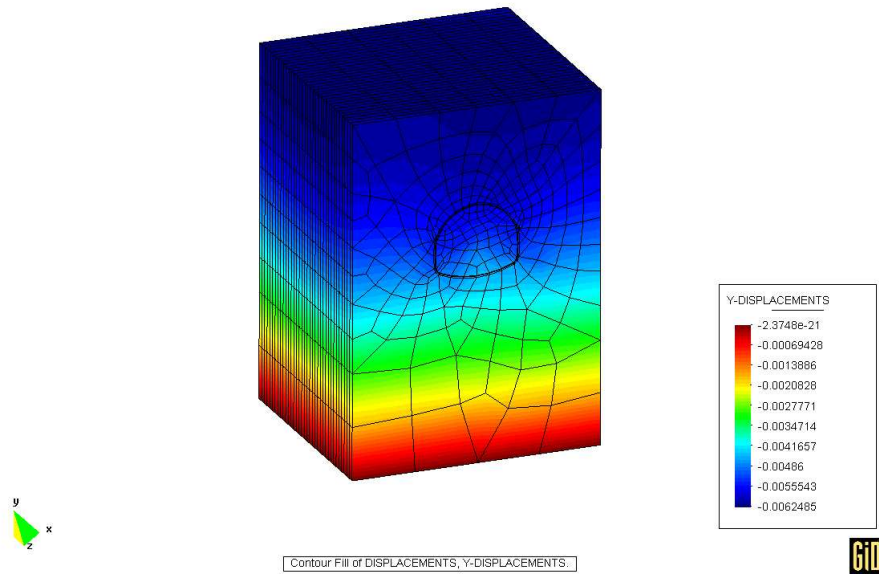


Abbildung 6.31: Referenzlösung-Vertikalverschiebungen

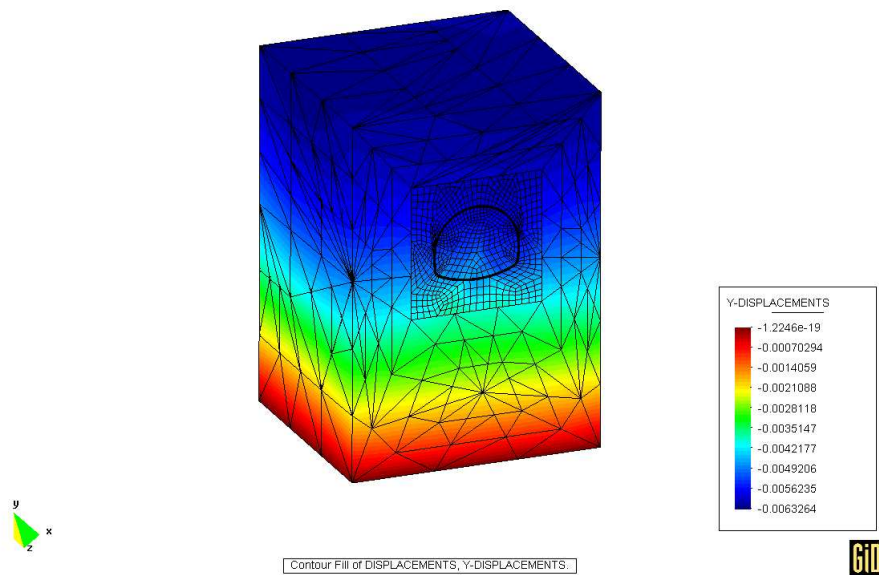


Abbildung 6.32: Mortar-Lösung-Vertikalverschiebungen

Auf dem dargestellten Hexaedernetz wird mit Hilfe der in Kap. 2.3.3 beschriebenen Extrapolationsmethode eine Referenzlösung der Dehnungsenergie mit einem System mit 1233667 Freiheitsgraden ermittelt. Diesem Ergebnis werden im Folgenden die mit der Mortar Methode erzielten Ergebnisse gegenübergestellt.

Polynomgrad	Freiheitsgrade	rel. Fehler
p=1	30742	8.89 %
p=2	119796	2.59 %
p=3	209163	1.21 %
p=4	384697	0.57 %

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit untersucht für strukturmechanische Probleme eine nicht C_0 -stetige Diskretisierungsstrategie mit Finiten Elementen hoher Ordnung, die mit Hilfe der so genannten Mortar Element Methode umgesetzt wird.

Die Arbeit zeigt die Möglichkeit auf, auch im Falle nicht-konformer Vernetzungen, konvergente Finite Elemente Berechnungen an dreidimensionalen Volumenmodellen durchzuführen. Die Ergebnisse wurden bezüglich der Kopplung von Tetraeder- und Hexaederelementen erzielt, lassen jedoch den Schluss zu, dass die Anwendung auf beliebige Elemente hoher Ordnung möglich ist. Mit Hinblick auf eine volumenorientierte Strukturanalyse am dreidimensionalen Gesamtmodell und der damit verbundenen Schwierigkeiten, was deren Vernetzung betrifft, führt die vorgestellte Methode aufgrund der Möglichkeit, nicht C_0 -stetige Verschiebungslösungen zuzulassen, zu größeren Freiheiten hinsichtlich der Netzgenerierung.

Eine neu-entwickelte Tetraeder-Ansatzbasis, basierend auf einer entarteten Abbildung von Hexaeder auf Tetraeder (Duffy Transformation), wurde in Kapitel 3 vorgestellt. Diese ist durch die Wahl integrierter Legendrepolynome abgestimmt auf strukturmechanische Berechnungen und lässt durch die Konstruktion als Tensorprodukt im Hexaeder noch Spielraum für optimierte Integrationsalgorithmen. Sie ist des Weiteren eng verbunden mit der Transformation von dem Master- auf das globale Element. Das umgesetzte Prinzip der Abbildung von lokal nach global erlaubt eine sehr einfache Anbindung an externe Netzgeneratoren.

Hinsichtlich der Mortar Element Methode wurden verschiedene Ansätze für die Lagrangen Multiplikatoren implementiert. Als am effizientesten zeichneten sich die diskontinuierlichen Ansätze aus, die auch im Fall von 'geknickten' Kontaktflächen, wie im Beispiel des aus einer Achtelkugel ausgeschnittenen Würfels, noch exakte Ergebnisse lieferten. Stetige Ansatzräume versuchen die tatsächlichen Spannungen zu erfassen und weisen bei Sprüngen des Spannungsfeldes Oszillationen auf, die die Gesamtlösung, d.h. auch das Verschiebungsfeld, deutlich verschlechtern. Besonders hervorzuheben ist, dass die Implementierung sogar im Fall von materieller Nichtlinearität über mehrere Lastschritte hinweg sehr robust ist.

Untersucht wurden im Rahmen dieser Arbeit lediglich nicht konforme Netze, die planare Kontaktflächen besitzen. Ausblickend wäre die Möglichkeit einer Anwendung auf gekrümmte Interfaces jedoch sehr wünschenswert, da mit ihr die Kopplung an die am Lehrstuhl für Com-

putation in Engineering entwickelten anisotropen Hexaederformulierungen für schalenförmige Strukturen möglich würde. Im Bereich der h -FEM gibt es diesbezüglich von FLEMISCH angestellte Untersuchungen, die sich jedoch nicht auf eine allgemeine geometrische Beschreibung konzentrieren [48; 47].

Bevor allgemeine Interfaces zugelassen werden, könnte ein erster Schritt in der Kopplung an Kontaktflächen liegen, die eine inplane Krümmung aufweisen, d.h. planare Kontaktflächen, die in ihrer Ebene verzerrt sind, und somit immer noch durch einen einheitlichen Normalenvektor gekennzeichnet sind.

Anhang A

Tetraeder Ansätze nach dem Prinzip von Schöberl

In diesem Anhang geben wir einen Vorschlag zur Erweiterung der Schöberl-Ansatzfunktionen (Kap.3.2.3) auf 3D. Dies entspricht einer Erweiterung der von SCHÖBERL vorgeschlagenen 2D-Basis [110]. Das Masterelement ist definiert durch die vier Punkte:

P:	ξ_1	ξ_2	ξ_3
P1:	-1	-1	-1
P2:	1	-1	-1
P3:	0	1	-1
P4:	0	0	1

Die Kanten werden durch folgende Gleichungen beschrieben:

$$\text{edge1 } (P1 - P2) : \quad \xi_2 = -1 \quad \xi_3 = -1 \quad (\text{A.1})$$

$$\text{edge2 } (P2 - P3) : \quad \xi_2 = 1 - 2\xi_1 \quad \xi_3 = -1 \quad (\text{A.2})$$

$$\text{edge3 } (P3 - P1) : \quad \xi_2 = 1 - \xi_1 \quad \xi_3 = -1 \quad (\text{A.3})$$

$$\text{edge4 } (P1 - P4) : \quad \xi_2 = \xi_1 \quad \xi_3 = 1 + 2\xi_1 \quad (\text{A.4})$$

$$\text{edge5 } (P2 - P4) : \quad \xi_2 = -\xi_1 \quad \xi_3 = 1 - 2\xi_1 \quad (\text{A.5})$$

$$\text{edge6 } (P3 - P4) : \quad \xi_1 = 0 \quad \xi_3 = 1 - 2\xi_2 \quad (\text{A.6})$$

Die Flächen werden beschrieben durch:

$$\text{face1 } (P1 - P2 - P3) : \quad \xi_3 = -1 \quad (\text{A.7})$$

$$\text{face2 } (P1 - P2 - P4) : \quad \xi_3 = 1 + 2\xi_2 \quad (\text{A.8})$$

$$\text{face3 } (P2 - P3 - P4) : \quad \xi_3 = 1 - 4\xi_1 - 2\xi_2 \quad (\text{A.9})$$

$$\text{face4 } (P3 - P1 - P4) : \quad \xi_3 = 1 + 4\xi_1 - 2\xi_2 \quad (\text{A.10})$$

A.1 Knotenmoden

Die Knotenmoden ψ_{vi} sind:

$$\psi_{v1} = \frac{1}{8}(1 - 4\xi_1 - 2\xi_2 - \xi_3) \quad (\text{A.11})$$

$$\psi_{v2} = \frac{1}{8}(1 + 4\xi_1 - 2\xi_2 - \xi_3) \quad (\text{A.12})$$

$$\psi_{v3} = \frac{1}{4}(1 + 2\xi_2 - \xi_3) \quad (\text{A.13})$$

$$\psi_{v4} = \frac{1}{2}(1 + \xi_3) \quad (\text{A.14})$$

A.2 Kantenmoden

Die Kantenmoden sind analog zum 2D Fall konstruiert. Um C_0 -Stetigkeit leichter zu gewährleisten, konstruieren wir Legendre Polynome entlang jeder Kante. Wir diskutieren dies für Kante 1, die dieselbe wie für den 2D Fall ist. Auf der Suche nach einem Argument für das Jacobi Polynom mit $\alpha = 0$ betrachten wir:

$$f = \frac{-4\xi_1}{1 - 2\xi_2 - \xi_3}$$

Mit $\xi_3 = -1$ für die Kanten 2/3 erhalten wir

$$f = \frac{2\xi_1}{1 - \xi_2}$$

mit derselben Argumentation wie für den 2D Fall. Auf den Kanten 4/5 ausgewertet, ergibt sich für f wiederum 1 und -1 . Für Kante 6: $f = 0$. Für Kante 1 gilt $f = \xi_1$, so dass wir die gewünschte Eigenschaft erhalten. Die Moden für Kante 1 sind somit:

$$\psi_{e1}^i(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \hat{p}_i^0\left(\frac{4\xi_1}{1 - 2\xi_2 - \xi_3}\right)\left(\frac{1 - 2\xi_2 - \xi_3}{4}\right)^i; \quad i = 2, \dots, n \quad (\text{A.15})$$

Ähnlichen Argumentationen folgend erhält man die Kantenmoden für die anderen Kanten:

$$\psi_{e1}^i(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \hat{p}_i^0\left(\frac{4\xi_1}{1 - 2\xi_2 - \xi_3}\right)\left(\frac{1 - 2\xi_2 - \xi_3}{4}\right)^i; \quad i = 2, \dots, n \quad (\text{A.16})$$

$$\psi_{e2}^i(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \hat{p}_i^0\left(\frac{2\xi_2}{1 - \xi_3}\right)\left(\frac{1 - \xi_3}{2}\right)^i\left(\frac{-1 - 4\xi_1 + 2\xi_2 + \xi_3}{2(-1 + 2\xi_2 + \xi_3)}\right); \quad i = 2, \dots, n \quad (\text{A.17})$$

$$\psi_{e2}^i(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \hat{p}_i^0\left(\frac{2\xi_2}{1 - \xi_3}\right)\left(\frac{1 - \xi_3}{2}\right)^i\left(\frac{-1 + 4\xi_1 + 2\xi_2 + \xi_3}{2(-1 + 2\xi_2 + \xi_3)}\right); \quad i = 2, \dots, n \quad (\text{A.18})$$

$$\psi_{e4}^i(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \hat{p}_i^0(\xi_3)\left(\frac{-1 + 4\xi_1 + 2\xi_2 + \xi_3}{4(1 - \xi_3)}\right); \quad i = 2, \dots, n \quad (\text{A.19})$$

$$\psi_{e5}^i(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \hat{p}_i^0(\xi_3)\left(\frac{-1 - 4\xi_1 + 2\xi_2 + \xi_3}{4(1 - \xi_3)}\right); \quad i = 2, \dots, n \quad (\text{A.20})$$

$$\psi_{e6}^i(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \hat{p}_i^0(\xi_3)\left(\frac{-1 - 2\xi_2 + \xi_3}{2(1 - \xi_3)}\right); \quad i = 2, \dots, n \quad (\text{A.21})$$

A.3 Flächenmoden

Die Flächenmoden sind analog zum 2D Fall konstruiert. Wir geben sie hier mit $\alpha = 2i - 1$ (Glg. 3.24) an, was aber ohne Ordnungsverlust durch $\alpha = 0$ ersetzt werden kann.

$$\psi_{b1}^{ij}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \hat{p}_i^0\left(\frac{4\xi_1}{1-2\xi_2-\xi_3}\right)\left(\frac{1-2\xi_2-\xi_3}{2}\right)^i \hat{p}_j^{2i-1}\left(\frac{2\xi_2}{1-\xi_3}\right)\left(\frac{1-\xi_3}{2}\right)^j; \quad i = 2, \dots, n \quad (\text{A.22})$$

$$\psi_{b2}^{ij}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \hat{p}_i^0\left(\frac{4\xi_1}{1-2\xi_2-\xi_3}\right)\left(\frac{1-2\xi_2-\xi_3}{2}\right)^i \hat{p}_j^{2i-1}(\xi_3); \quad i = 2, \dots, n \quad (\text{A.23})$$

$$\psi_{b3}^{ij}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \hat{p}_i^0\left(\frac{2\xi_2}{1-\xi_3}\right)(1-\xi_3)^i \hat{p}_j^{2i-1}(\xi_3)\left(\frac{-1-4\xi_1+2\xi_2+\xi_3}{2(-1+2\xi_2+\xi_3)}\right); \quad i = 2, \dots, n \quad (\text{A.24})$$

$$\psi_{b4}^{ij}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \hat{p}_i^0\left(\frac{2\xi_2}{\xi_3-1}\right)(1-\xi_3)^i \hat{p}_j^{2i-1}(\xi_3)\left(\frac{-1+4\xi_1+2\xi_2+\xi_3}{2(-1+2\xi_2+\xi_3)}\right); \quad i = 2, \dots, n \quad (\text{A.25})$$

A.4 Bubble Moden

Die inneren Moden können gewählt werden als:

$$\psi_b^{ijk}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \hat{p}_i^0\left(\frac{4\xi_1}{-1+2\xi_2+\xi_3}\right)(-1+2\xi_2+\xi_3)^i \hat{p}_j^{2i-1}\left(\frac{-\xi_3}{1+2\xi_2}\right)(1+2\xi_2)^j \hat{p}_k^{2i-1}(\xi_3) \quad (\text{A.26})$$

$$i = 2..n - 2; j = 1..n - i; k = n - i - j$$

Insgesamt haben wir

$$4 \quad \text{Knotenmoden} \quad (\text{A.27})$$

$$6(n-1) \quad \text{Kantenmoden} \quad (\text{A.28})$$

$$4(n-2)(n-1)/2 \quad \text{Flächenmoden} \quad (\text{A.29})$$

$$(n-1)(n-2)(n-3)/6 \quad \text{innere Moden} \quad (\text{A.30})$$

Anhang B

Abgebildete Basis

Im Folgenden werden die Kanten-Ansatzfunktionen auf dem Tetraeder für $n = 5$ angegeben. Es lässt sich keine geschlossene Formel angeben.

Kante 1:

$$\psi_{e1}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)^5 = 1/16 (1 + \xi_1) (2 + 2\xi_1 + \xi_2 + \xi_3) (\xi_2 + \xi_3 + 1 + \xi_1) \\ (7\xi_1^2 + 7\xi_1\xi_3 + 7\xi_1\xi_2 + 14\xi_1 + \xi_2^2 + 7\xi_3 + 2\xi_2\xi_3 + 7 + 7\xi_2 + \xi_3^2)$$

Kante 2:

$$\psi_{e2}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)^5 = 1/16 (1 + \xi_2) (1 + 2\xi_2 + \xi_3) (7\xi_2^2 + 7\xi_2\xi_3 + 7\xi_2 + 1 + 5\xi_3 + \xi_3^2) \\ (1 + \xi_1)$$

Kante 3:

$$\psi_{e3}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)^5 = 1/16 (1 + \xi_2) (1 + 2\xi_2 + \xi_3) (7\xi_2^2 + 7\xi_2\xi_3 + 7\xi_2 + 5\xi_3 + 1 + \xi_3^2) \\ (\xi_2 + \xi_3 + 1 + \xi_1)$$

Kante 4:

$$\psi_{e4}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)^5 = 1/8 (\xi_2 + \xi_3 + 1 + \xi_1) \xi_3 (1 + \xi_3) (7\xi_3^2 - 3)$$

Kante 5:

$$\psi_{e5}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)^5 = -1/8 (1 + \xi_1) \xi_3 (1 + \xi_3) (7\xi_3^2 - 3)$$

Kante 6:

$$\psi_{e6}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)^5 = -1/8 (1 + \xi_3) (7\xi_3^2 - 3) \xi_3 (1 + \xi_2)$$

Anhang C

Blending Terme für Kanten und Flächen

Kanten:

$$EB_1 = 4 \frac{(\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 + 1)(1 + \xi_1)}{(4 + 2\xi_1 + \xi_2 + \xi_3)(2\xi_1 + \xi_2 + \xi_3)} \quad (C.1)$$

$$EB_2 = 3 \frac{(1 + \xi_1)(1 + \xi_2)}{(-2 + 3\xi_2 + \xi_3)(2\xi_1 + \xi_2 + \xi_3)} \quad (C.2)$$

$$EB_3 = 3 \frac{(\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 + 1)(1 + \xi_2)}{(-2 + 3\xi_2 + \xi_3)(4 + 2\xi_1 + \xi_2 + \xi_3)} \quad (C.3)$$

$$EB_4 = -\frac{(\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 + 1)(1 + \xi_3)}{(-1 + \xi_3)(4 + 2\xi_1 + \xi_2 + \xi_3)} \quad (C.4)$$

$$EB_5 = \frac{(1 + \xi_1)(1 + \xi_3)}{(-1 + \xi_3)(2\xi_1 + \xi_2 + \xi_3)} \quad (C.5)$$

$$EB_6 = 2 \frac{(1 + \xi_2)(1 + \xi_3)}{(-2 + 3\xi_2 + \xi_3)(-1 + \xi_3)} \quad (C.6)$$

Flächen:

$$FB_1 = \frac{(1 + \xi_2)(1 + \xi_1)(\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 + 1)}{(-1 + \xi_1 + \xi_2 - \xi_3)(\xi_2 + 2 + \xi_3)(\xi_1 + 2 + \xi_3)} \quad (C.7)$$

$$FB_2 = -\frac{(1 + \xi_1 + \xi_2 + \xi_3)(1 + \xi_1)(1 + \xi_3)}{(1 - \xi_1 + \xi_2 - \xi_3)(\xi_2 + 2 + \xi_3)(\xi_1 + 2 + \xi_2)} \quad (C.8)$$

$$FB_3 = \frac{(1 + \xi_2)(1 + \xi_1)(-1 - \xi_3)}{(1 + 2\xi_1 + 2\xi_2 + \xi_3)(-\xi_1 - \xi_3)(-\xi_2 - \xi_3)} \quad (C.9)$$

$$FB_4 = \frac{(1 + \xi_1 + \xi_2 + \xi_3)(1 + \xi_2)(1 + \xi_3)}{(-1 - \xi_1 + \xi_2 + \xi_3)(\xi_1 + 2 + \xi_3)(\xi_1 + 2 + \xi_2)} \quad (C.10)$$

Literaturverzeichnis

- [1] S. Adjerid, M. Aiffa, and J.E. Flaherty. Hierarchical finite element bases for triangular and tetrahedral elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190:2925–2941, 1999.
- [2] A. Agouzal and N. Debit. A new approach to domain decomposition technics with non-matching grids. In *Proceedings of the 9th International Conference on Domain Decomposition Methods in Bergen*, pages 53–63, 1997.
- [3] G. Anagnostou. *Nonconforming sliding spectral element methods for the unsteady Incompressible Navier-Stokes Equations*. PhD thesis, Department of Ocean Engineering, Massachusetts Institute of Technology, 1991.
- [4] J.R. Angelos, E.H. Kaufman, M.S. Henry, and T.D. Lenker. *Optimal Nodes for Polynomial Interpolation, Approximation Theory VI*. Academic Press, 1989.
- [5] F. Baaijens. A fictitious domain/mortar element method for fluid-structure interaction. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 35:743–761, 2001.
- [6] I. Babuška. The Finite Element Method with Lagrangian Multipliers. *Numerische Mathematik*, 20:179–192, 1973.
- [7] I. Babuška, M. Griebel, and J. Pitkäranta. The problem of selecting the shape functions for a p-type finite element. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 28:1891–1908, 1989.
- [8] I. Babuška and A. Miller. The postprocessing approach in the finite element method—part 1: Calculation of displacements, stresses and other higher derivatives of the displacements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20:1085–1109, 1984.
- [9] F. Ben Belgacem. The mortar finite element method with Lagrange multipliers. *Numerische Mathematik*, 84:173–197, 1999.
- [10] C. Bernardi, Y. Maday, and A.T. Patera. A new non conforming approach to domain decomposition: The mortar element method. In Haim Brezis and Jacques-Louis Lions, editors, *Collège de France Seminar*. Pitman, 1994. Dieser Artikel erschien als technischer Report fünf Jahre früher.
- [11] M.G. Blyth and C. Pozrikidis. A lobatto interpolation grid over the triangle. *Journal of Applied Mathematics*, 71:153–169, 2006.

- [12] L.P. Bos. Bounding the Lebesgue function for Lagrange interpolation in a simplex. *Journal of Approximation Theory*, 38(1):43–59, 1983.
- [13] L.P. Bos and S. De Marchi. Fekete points for bivariate polynomials restricted to $y=xm$. *East journal on approximations*, 6(2):189–200, 2000.
- [14] D. Braess and W. Dahmen. Stability estimates of the mortar finite element method for 3-dimensional problems. *East-West Journal of Numerical Mathematics*, 6(4):249–264, 1998.
- [15] W. Braess, D. Dahmen and C. Wieners. A multigrid algorithm for the mortar finite element method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 37:48–69, 1999.
- [16] C.A. Brebbia and J. Dominguez. *Boundary Elements An Introductory Course*. WIT Press, Southampton, UK, 2001.
- [17] F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. Springer-Verlag, 1991.
- [18] H. Bröker. *Integration von geometrischer Modellierung und Berechnung nach der p-Version der FEM*. PhD thesis, Lehrstuhl für Bauinformatik, Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen, Technische Universität München, 2001.
- [19] P. Carnevali, R.B. Morris, Y. Tsuji, and G. Taylor. New basis functions and computational procedures for p-version finite element analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 36:3759–3779, 1993.
- [20] Chin-Yun Chen. *Adaptive numerische Quadratur und Kubatur mit automatischer Ergebnisverifikation*. PhD thesis, Universität Karlsruhe, 1998.
- [21] Q. Chen and I. Babuška. Approximate optimal points for polynomial interpolation of real functions in an interval and in a triangle. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 128:405–417, 1995.
- [22] Q. Chen and I. Babuška. The optimal symmetrical points for polynomial interpolation of real functions in the tetrahedron. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 137:89–94, 1996.
- [23] R. Courant and R. Hilbert. *Methods of Mathematical Physics*. Interscience, New York, 1953.
- [24] C. Dagnino. Extended product integration rules. *BIT Numerical Mathematics*, 23(4):487–499, 1983.
- [25] W. Dahmen, B. Faermann, I. Graham, W. Hackbusch, and S. Sauter. Inverse inequalities for non-quasiuniform meshes and applications to the mortar element method. Technical Report 201, 2001.
- [26] P. J. Davis and P. Rabinowitz. *Methods of numerical integration*. Academic Press, New York, 1975.

- [27] C. De Boor and A. Pinkus. Proof of the conjectures of Bernstein and Erdős concerning the optimal nodes for polynomial interpolation. *Journal of Approximation Theory*, 24:289–303, 1978.
- [28] L. Demkowicz. *hp-Adaptive Finite Elements*. Chapman and Hall CRC, 2006.
- [29] S. Dey. *Geometry Based Three-Dimensional hp-Finite Element Modelling And Computations*. PhD thesis, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, 1997.
- [30] S. Dey, M.S. Shephard, and J.E. Flaherty. Geometry representation issues associated with p-version finite element computations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 150:39–55, 1997.
- [31] M. Dubiner. Spectral methods on triangles and other domains. *Numerische Mathematik*, 6(3):345–390, 1991.
- [32] D.A. Dunavant. High degree efficient symmetrical gaussian quadrature rules for the triangle. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 21:1129–1148, 1985.
- [33] A. Düster. *High order finite elements for three-dimensional, thin-walled nonlinear continua*. PhD thesis, Lehrstuhl für Bauinformatik, Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen, Technische Universität München, <http://www.inf.bv.tum.de/~duester>, 2001.
- [34] A. Düster, H. Bröker, and E. Rank. The p-version of the finite element method for three-dimensional curved thin walled structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 52:673–703, 2001.
- [35] A. Düster, A. Niggel, V. Nübel, and E. Rank. A numerical investigation of high-order finite elements for problems of elasto-plasticity. *Journal of Scientific Computing*, 17:397–404, 2002.
- [36] A. Düster, J. Parvizian, Z. Yang, and E. Rank. The finite cell method for three-dimensional problems of solid mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(45–48):3768–3782, 2008.
- [37] A. Düster and E. Rank. The p-version of the finite element method for three-dimensional thin walled structures with physically non-linear behaviour. In *Proceedings of IASS-IACM 2000, Fourth International Colloquium on Computation of Shell & Spatial Structures*, Chania–Crete, Greece, 2000.
- [38] A. Düster and E. Rank. A p-version finite element approach for two- and three-dimensional problems of the J_2 flow theory with non-linear isotropic hardening. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 53:49–63, 2002.
- [39] A. Düster, D. Scholz, and E. Rank. *pq-Adaptive solid finite elements for three-dimensional plates and shells*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197:243–254, 2007.

- [40] C.M. Eastman. *Building Product Models: Computer Environments Supporting and Design and Construction*. CRC Press, 1999.
- [41] Erwin Stein (Ed.). *Error-controlled Adaptive Finite Elements in Solid Mechanics*. Wiley, Chichester, 2002.
- [42] Kenneth Eriksson, Donald Estep, Claes Johnson, and Peter Hansbo. *Computational Differential Equations*. Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [43] G. Faber. Über die interpolatorische Darstellung stetiger Funktionen. *Jahresbericht Deutsch. Math. Verein.*, 23:192–210, 1914.
- [44] C. Farhat and F.-X. Roux. A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32(6):1205–1227, 1991.
- [45] G. Farin. *Curves and surfaces for computer aided geometric design*. Academic Press, 4. edition, 1997.
- [46] M. Fekete. Über die Verteilung der Wurzeln bei gewissen algebraischen Gleichungen mit ganzzahligen Koeffizienten. *Mathematische Zeitschrift*, 17(1):228–249, 1923.
- [47] B. Flemisch, J.M. Melenk, and B. Wohlmuth. Mortar methods with curved interfaces. *Applied Numerical Mathematics*, 54:339–361, 2005.
- [48] B. Flemisch, M.A. Puso, and B. Wohlmuth. A new dual mortar method for curved interfaces: 2D elasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 63:813–832, 2005.
- [49] B. Flemisch, M.A. Puso, and B.I. Wohlmuth. A new dual mortar method for curved interfaces: 2d linear elasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 63:813–832, 2000.
- [50] International Center for Numerical Methods in Engineering. <http://gid.cimne.upc.es/>.
- [51] M. Gasca and T. Sauer. On the history of multivariate polynomial interpolation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 122(1):23–35, 2000.
- [52] M. Gasca and T. Sauer. Polynomial interpolation in several variables. *Advances in Computational Mathematics*, 12:377–410, 2000.
- [53] M. Gellert and R. Harbord. Moderate degree cubature formulas for 3-d tetrahedral finite-element approximations. *Communications in Applied Numerical Methods*, 7:487–495, 1985.
- [54] H. Glahn. Zur Konvergenz einiger finiter Elementmethoden. *Archive of Applied Mechanics*, 53(5):329–336, 1983.
- [55] W.J. Gordon and Ch.A. Hall. Construction of curvilinear co-ordinate systems and applications to mesh generation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 7:461–477, 1973.

- [56] W.J. Gordon and Ch.A. Hall. Transfinite element methods: Blending function interpolation over arbitrary curved element domains. *Numerische Mathematik*, 21:109–129, 1973.
- [57] D. Hartmann. *DFG-Schwerpunktprogramm 694: Objektorientierte Modellierung in Planung und Konstruktion, Abschlußbericht über das Forschungsprogramm 1991 - 1998*. Wiley-VCH, Weinheim, 2000.
- [58] W. Heinrichs. Improved Lebesgue constants on the triangle. *Journal of Computational Physics*, 207(2):625–638, 2005.
- [59] M. W. Heinstein and T. A. Laursen. A three dimensional surface-to-surface projection algorithm for non-coincident domains. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 19:421–432, 2003.
- [60] J. S. Hesthaven and C. H. Teng. Stable spectral methods on tetrahedral elements. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 21(6):2352–2380, 1999.
- [61] P. Hillion. Numerical integration on a triangle. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 11:797–815, 1977.
- [62] P. Hillion. Numerical integration on a tetrahedron. *Calcolo*, 18(2):117–130, 1979.
- [63] S. Hübner and B. Wohlmuth. Mortar methods for contact problems. In P. Wriggers and U. Nackenhorst, editors, *Analysis and Simulation of Contact Problems*, volume 27 of *Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics*, pages 39–47. Springer, 2006.
- [64] T.J.R. Hughes. *The finite element method*. Dover Publications, 2000.
- [65] T.J.R Hughes, J.A. Cottrell, and Y. Bazilevs. Isogeometric analysis: Cad, finite elements, nurbs, exact geometry and mesh refinement. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 7194:4135–4195, 2005.
- [66] M. Jung and U. Langer. *Methode der Finiten Elemente für Ingenieure*. Teubner, 2001.
- [67] F. Kikuchi and Y. Ando. A new variational functional for the finite element method and its application to plate and shell problems. *Nuclear engineering and design*, 21:95–113, 1972.
- [68] C. Kim, R.D. Lazarov, J.E. Pasciak, and P.S. Vassilevski. Multiplier spaces for the mortar finite element method in three dimensions. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 39:519–538, 2001.
- [69] G. Királyfalvi and B.A. Szabó. Quasi-regional mapping for the p-version of the finite element method. *Finite Elements in Analysis and Design*, 27:85–97, 1997.
- [70] B. Lamichhane. *Higher Order Mortar Finite Elements with Dual Lagrange Multiplier Spaces and Applications*. PhD thesis, Universität Stuttgart, 2006.

- [71] B.P. Lamichhane, R.P. Stevenson, and B. Wohlmuth. Higher order mortar finite element methods in 3D with dual Lagrange multiplier bases. *Numerische Mathematik*, 102:93–121, 2005.
- [72] B.P. Lamichhane and B.I. Wohlmuth. Mortar finite elements for interface problems. *Computing*, 72:333–348, 2004.
- [73] U. Langer, G. Of, O. Steinbach, and W. Zulehner. Inexact data-sparse boundary element tearing and interconnecting methods. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 29(1):290–314, 2007.
- [74] T. A. Laursen, M. A. Puso, and M. W. Heinstein. Practical issues associated with mortar projections in large deformation contact/impact analysis. In *Proceedings of the 5th World Congress on Computational Mechanics, Vienna, Austria*, pages 1–8, 2002.
- [75] M Lenoir. Optimal isoparametric finite elements and error estimates for domains involving curved boundaries. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 23(3):562–580, 1986.
- [76] R.J. Leveque. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhauser Verlag, 1992.
- [77] J. Li, M. Melenk, B. Wohlmuth, and J. Zou. Optimal convergence of higher order finite element methods for elliptic interface problems. *Applied Numerical Mathematics*, 60:19–37, 2010.
- [78] T. Liebich and Hoffeller (Herausgeber). *Anwenderhandbuch Datenaustausch BIM/IFC*. Industriallianz für Interoperabilität, <http://www.buildingsmart.de>, 2006.
- [79] T. Liebich and J. Wix. *IFC Technincal Guide - Release 2x*. International Alliance for Interoperability, 2000.
- [80] X. J. Luo, M. S. Shephard, R. M. O’bara, R. Nastasia, and M. W. Beall. Automatic p-version mesh generation for curved domains. *Engineering with Computers*, 20(3):273–285, September 2004.
- [81] X. J. Luo, M. S Shephard, and J.-F. Remacle. The influence of geometric approximation on high order methods. In *8th International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations*, 2002.
- [82] J. N. Lyness and R. Cools. A survey of numerical cubature over triangles. In *Proceedings of Symposia in Applied Mathematics*, pages 127–150. American Mathematical Society, 1994.
- [83] J.I. Maeztu and E. Sainz de la Maza. An invariant quadrature rule of degree 11 for the tetrahedron. *Comptes Rendus Mathematique, Academie des Science, Paris*, 321:1263–1267, 1995.
- [84] Maplesoft. www.maplesoft.com.

- [85] L. Marcinkowski. A mortar finite element method for plate problem. In Tony Chan, Takashi Kako, Hideo Kawarada, and Olivier Pironneau, editors, *Twelfth International Conference on Domain Decomposition Methods, Chiba, Japan*, pages 183–190, Bergen, 2001. Domain Decomposition Press.
- [86] C. Mavriplis. *Nonconforming discretizations and a posteriori error estimators for adaptive spectral element techniques*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology. Dept. of Aeronautics and Astronautics, 1989.
- [87] T. W. McDevitt and T. A. Laursen. A mortar-finite element formulation for frictional contact problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 48:1525–1547, 2000.
- [88] E. Meijering. A chronology of interpolation: From ancient astronomy to modern signal and image processing. *Proceedings of the IEEE*, 90(4):319–342, 2002.
- [89] U. Meißner, B. Möller, J. Diaz, U. Rüppel, V. Peters, and M. Petersen. Objektorientierte Tragwerksmodelle für die Systemintegration von Planungs- und Konstruktionsvorgängen im Bauwesen. *Wiley-VCH*, pages 266–288, 2000.
- [90] A. Niggli. *Tragwerksanalyse am Gesamtmodell - Ein Ansatz zur Verbesserung der computergestützten Zusammenarbeit im konstruktiven Ingenieurbau*. PhD thesis, Technische Universität München, 2007.
- [91] A. Niggli, E. Rank, R.-P. Mundani, and H.-J. Bungartz. Organising a p-version finite element computation by an octree-based hierarchy. In *Proceedings of the Second International Conference on adaptive Modeling and Simulation*, Barcelona, Spain, 2005.
- [92] A. Niggli, E. Rank, R.-P. Mundani, and H.-J. Bungartz. A framework for embedded structural simulation: Benefits in building design. In *Proceedings of the 11th International Conference on Computing in Civil and Building engineering*, Montreal, Canada, 2006.
- [93] A. Niggli, R. Romberg, E. Rank, R.-P. Mundani, and H.-J. Bungartz. A framework for concurrent structure analysis in building industry. In *Proceedings of the 5th European Conference on Product and Process Modelling in the Building and Construction Industry*, Balkema, Canada, 2004.
- [94] M. L. Parks, L. Romero, and P. Bochev. A novel Lagrange-multiplier based method for consistent mesh tying. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(35-36):3335–3347, July 2007.
- [95] L. Piegl and W. Tiller. *The Nurbs Book*. Springer-Verlag, 2. edition, 1997.
- [96] M. A. Puso and T. A. Laursen. A mortar segment-to-segment frictional contact method for large deformations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193:48914913, 2004.
- [97] Michael A. Puso. A 3d mortar method for solid mechanics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 59:315336, 2004.

- [98] E. Rank, A. Düster, V. Nübel, K. Preusch, and O.T. Bruhns. High order finite elements for shells. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194:2494–2512, 2004.
- [99] E. Rank, A. Halfmann, M. Rücker, C. Katz, and S. Gebhard. Integrierte Modellierungs- und Berechnungssoftware für den konstruktiven Ingenieurbau: Systemarchitektur und Netzgenerierung. *Bauingenieur*, 75:60–66, 2000.
- [100] E. Rank, R. Romberg, A. Niggel, H.-J. Bungartz, and R.-P. Mundani. Volumenorientierte Modellierung als Grundlage einer vernetzt kooperativen Planung im konstruktiven Ingenieurbau. *Springer*, 2007.
- [101] B. D. Reddy. *Introductory Functional Analysis: With Applications to Boundary Value Problems and Finite Elements*. Springer, 1997.
- [102] T. J. Rivlin. *An introduction to the approximation of functions*. Blaisdell Pub. Co. Waltham, Mass., 1969.
- [103] R. Romberg. *Gebäudemodell-basierte Strukturanalyse im Bauwesen*. PhD thesis, Lehrstuhl für Bauinformatik, Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen, Technische Universität München, 2005.
- [104] R. Romberg, A. Düster, and E. Rank. Solid modeling as a basis of co-operative planning in structural engineering. In *Proceedings of European Conference of Product and Process Modeling: eWork and eBusiness in AEC*, Portoroz, Slovenia, 2002.
- [105] T. Rüber. *Non-conforming FEM/BEM Coupling in Time Domain*, volume 3 of *Computation in Engineering and Sciences*. Verlag der Technischen Universität Graz, 2007.
- [106] U. Rüppel and U. Meißner. Integrierte Planung, Fertigung und Nutzung von Bauwerken auf Basis von Produktmodellen. *Bauingenieur*, 71:47–55, 1996.
- [107] M. Schanz and O. Steinbach. *Boundary Element Analysis: Mathematical Aspects and Applications*, volume 29 of *Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2007.
- [108] J. Schöberl. <http://www.hp fem.jku.at/netgen>.
- [109] J. Schöberl. Netgen, an advancing front 2d/3d-mesh generator based on abstract rules. *Computing and Visualization in Science*, 1:42–51, 1997.
- [110] J. Schöberl and S. Beuchler. New shape functions for triangular p-fem using integrated jacobi polynomials. *Numerische Mathematik*, 103(3):339–366, 2003.
- [111] D. Scholz. *An anisotropic p - adaptive method for linear elastostatic and elastodynamic analysis of thin-walled and massive structures*. PhD thesis, Technische Universität München, 2006.
- [112] A.C. Scordelis and K.S. Lo. Computer analysis of cylindrical shells. *Journal of the American Concrete Institute*, 61:539–561, 1969.

-
- [113] P. Seshaiyer and M. Suri. Uniform hp convergence results for the mortar finite element method. *Mathematics of Computation*, 69:521–546, 1999.
- [114] M.S. Shephard, S. Dey, and J.E. Flaherty. A straightforward structure to construct shape functions for variable p -order meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 147:209–233, 1997.
- [115] J.C. Simo and T.J.R. Hughes. On variational foundations of assumed strain methods. *Journal of Applied Mechanics*, 53:51–54, 1986.
- [116] S. J. Smith. Lebesgue constants in polynomial interpolation. *Annales Mathematicae et Informaticae*, 33:109–123, 2006.
- [117] P. Solin, K. Segeth, and I. Dolezel. *Higher-Order Finite Element Methods*. Chapman and Hall CRC, Boca Raton, London, New York, 2004.
- [118] D. Stefanica and A. Klawonn. The FETI method for mortar finite elements. In *Proceedings of 11th International Conference on Domain Decomposition Methods*, pages 121–129, 1999.
- [119] G. Strang and G.J. Fix. *An analysis of the finite element method*. Wellesley-Cambridge Press, 1988.
- [120] B.A. Szabó and I. Babuška. *Finite element analysis*. John Wiley & Sons, 1991.
- [121] B.A. Szabó, A. Düster, and E. Rank. The p -version of the finite element method. In E. Stein, R. de Borst, and T.J.R. Hughes, editors, *Encyclopedia of Computational Mechanics*. John Wiley & Sons, 2003.
- [122] M. A. Taylor, B. A. Wingate, and R. E. Vincent. An algorithm for computing feketé points in the triangle. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 38(5), 2000.
- [123] T. Warburton. *Spectral/hp Methods on Polymorphic Multi-Domains: Algorithms and Applications*. PhD thesis, Brown University, Providence, 1999.
- [124] T. Warburton. An explicit construction of interpolation nodes on the simplex. *Journal of Engineering Mathematics*, 56(3):247–262, 2006.
- [125] T.C. Warburton, S.J. Sherwin, and G.E. Karniadakis. Basis functions for triangular and quadrilateral high-order elements. *Journal of Scientific Computing*, 20(5):1671–1695, 1998.
- [126] K. Washizu. *Variational Methods in Elasticity and Plasticity*. Pergamon Press, Oxford, New York, Toronto, Sydney, Braunschweig, 2. edition, 1975.
- [127] D. Weill and M. O. Deville. Steady gap flows by the spectral and mortar element method. *Journal of Scientific Computing*, 17(1-4):639–648, 2002.
- [128] C. Wieners. *Theorie und Numerik der Prandtl-Reuß-Plastizität*. Postdoctoral thesis, Universität Heidelberg, 1999.

-
- [129] B. Wohlmuth. A mortar finite element method using dual spaces for the Lagrange multiplier. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 38:989–1012, 2000.
- [130] B. Wohlmuth. *Discretization Methods and Iterative Solvers Based on Domain Decomposition*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 2001.
- [131] J.D. Wörner, J. Reymendt, S. Gunnarson, and R. Stürmer. Objektorientierte Integration von Teilprozessen im Bauwesen mit Hilfe einer objektorientierten Datenbank für den Bereich der Bemessung und Konstruktion von Hochbauteilen im Massivbau. *Wiley-VCH*, pages 321–345, 2000.
- [132] S. Zaglmayr. *High Order Finite Element Methods for Electromagnetic Field Computation*. PhD thesis, Johannes Kepler Universität Linz, 2006.
- [133] M. Zitka, P. Solin, T. Vechodsky, and F. Avila. Imposing orthogonality to hierarchic higher-order finite elements. *Mathematics and Computers in Simulation*, 76:211–217, 2007.
- [134] G. Zumbusch. *Simultaneous h-p Adaption in Multilevel Finite Elements*. PhD thesis, Freie Universität Berlin, 1995.