

Implementierung eines netzfreien Diskretisierungsverfahrens und
seine Anwendung auf die Scherbandanalyse

von der Fakultät Maschinenbau
der Technischen Universität Dortmund
zur Erlangung des Grades
Doktor-Ingenieur
(Dr.-Ing.)
genehmigte Dissertation

von
Vadim Palnau
aus Omsk

2009

Dissertation eingereicht am:	11. Februar 2009
Tag der mündlichen Prüfung:	15. Mai 2009
Referent:	Prof. Dr.-Ing. K. Thermann
Korreferent:	Prof. Dr.-Ing. A. Menzel

Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachgebiet für Mechanik, insbesondere Maschinendynamik der Fakultät Maschinenbau der Technischen Universität Dortmund.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Klaus Thermann danke ich für die Betreuung dieser Arbeit. In regelmäßigen Diskussionen bekam ich immer wieder Anregungen für die Entwicklung neuer Ideen, schöpfte neue Motivation und hatte stets die Gelegenheit, von ihm zu lernen. Während der gesamten Dauer von sechs Jahren empfand ich die von ihm geschaffene Arbeitsatmosphäre am Fachgebiet als sehr fördernd und besonders angenehm. Dafür möchte ich ihm ganz herzlich danken.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Andreas Menzel danke ich für die Übernahme des Korreferates. Seine Unterstützung, insbesondere während der Endphase des Promotionsverfahrens, war mir eine wertvolle Hilfe.

Bei der Implementierung der in der vorliegenden Arbeit behandelten Techniken konnte ich in großem Umfang von der zur freien Verfügung gestellten Software zahlreicher Autoren profitieren. Ihnen allen gilt mein ganz besonderer Dank. Speziell möchte ich J. R. Shewchuk (`Triangle`), J. Dongarra (`LAPACK`), Numerical Analysis Group der Rutherford Appleton Laboratory (`HSL ARCHIVE`), C. Geuzaine und J.-F. Remacle (`GMSH`) und J. Burkard dankend erwähnen.

Meinen Eltern danke ich von ganzem Herzen für die unaufhörliche Hilfe, Förderung und Liebe.

Mein größter Dank gilt meiner Ehefrau, Katja Palnau, für ihr Verständnis und ihre unermüdliche Unterstützung. Ihr und unserem Sohn Ben widme ich diese Arbeit.

Dortmund, im September 2009

Vadim Palnau

Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit wird geprüft, inwiefern der Einsatz netzfreier Methoden für die Analyse materieller Instabilitäten geeignet ist. Es wird ein auf der *Moving Least Squares Approximation* (Lancaster und Salkauskas, 1981) basierendes Diskretisierungsverfahren implementiert, wobei eine effiziente Behandlung von Systemen mit einer großen Zahl von Freiheitsgraden im Vordergrund steht. Die Implementierung wird zunächst im Rahmen der linearen Elastostatik entwickelt und validiert und sodann für die endliche Elastoplastizität angepasst.

Die Grundlage für die numerischen Studien endlicher elasto-plastischer Deformationen bildet das Energiekriterium für stabile Deformationsprozesse (Petryk, 1982, 1985, 1991). In Verbindung mit einem zeitunabhängigen, inkrementell nichtlinearen Materialmodell wird der stabile Deformationspfad beim Auftreten einer Bifurkation automatisch ermittelt. Als ein geeignetes Materialmodell wird die *J₂ corner theory* (Christoffersen und Hutchinson, 1979) verwendet.

Es wird gezeigt, dass das implementierte Verfahren mit netzunabhängigen Ansatzfunktionen die zum Zeitpunkt des Elliptizitätsverlustes einer homogenen Deformation theoretisch vorhergesagte Ausbildung von Scherbändern gut approximiert. Sowohl der Zeitpunkt der ersten Bifurkation als auch die Orientierung der dann entstehenden Lokalisierungs-bänder des diskreten Systems stehen in guter Übereinstimmung mit den theoretischen Vorhersagen für das Kontinuum. Für die räumliche Diskretisierung des Grundgebietes können dabei nahezu beliebige, insbesondere unstrukturierte Stützstellenverteilungen genutzt werden.

Abstract

The present work examines the applicability of meshless methods to problems of material instability. A discretisation technique based on *Moving Least Squares Approximation* (Lancaster und Salkauskas, 1981) is implemented with emphasis on an efficient treatment of discretized systems with a large number of degrees of freedom. The implementation is developed and validated at first within the framework of linear elastostatics and then adapted to finite elastoplasticity.

Basis of the computational method for large elastic-plastic deformations is the energy criterion of path stability (Petryk, 1982, 1985, 1991). At a bifurcation point the stable deformation path is automatically selected if a time-independent, incrementally non-linear material model is used. The *J₂ corner theory* (Christoffersen und Hutchinson, 1979) is applied as a material model.

It is shown that the implemented meshless method is suitable for the simulation of theoretically predicted shear band formation at the instant of ellipticity loss of uniform straining. The instant of primary bifurcation as well as the corresponding orientation of localization bands for the discretized problem correspond well with theoretical values. The spatial discretisation can be performed using almost arbitrary, in particular unstructured sets of nodes.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Implementierung einer Diskretisierungstechnik mit netzunabhängigen Ansatzfunktionen	5
2.1	Ansatzfunktionen	5
2.1.1	Moving Least Squares Approximation	5
2.1.2	Direktes Auswerten der Konsistenzbedingung	8
2.1.3	Fensterfunktion	11
2.1.4	Ableitung der Ansatzfunktion nach den Ortskoordinaten	12
2.1.5	Numerische Auswertung der Ansatzfunktion und ihrer Ableitungen	13
2.2	Wahl einer hinreichenden Überdeckung	16
2.3	Behandlung wesentlicher Randbedingungen	22
2.3.1	Kopplung an Finite-Elemente mittels einer Rampenfunktion	24
2.3.2	Kopplung an Finite-Elemente mittels modifizierter Konsistenzbedingung	25
2.4	Das globale System linearer Gleichungen	28
2.4.1	Grundgleichungen der linearen Elastostatik	28
2.4.2	Die diskretisierten Grundgleichungen der linearen Elastostatik	30
2.4.3	Berechnung der Gebietsintegrale	32
2.4.4	Bestimmung der Konnektivitätsbeziehungen	39
3	Stützstellenverteilung auf der Grundlage der Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme	45
3.1	Voronoi-Diagramm und Delaunay-Triangulation	45
3.2	Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme	47
3.3	Die Lloyd-Iteration und ihre Erweiterungen	49
3.4	Ein neuer Algorithmus zur Stützstellenverteilung	52
3.4.1	Beschreibung des Grundgebietes	53
3.4.2	Klassifizierung der Stützstellen	53
3.4.3	Struktur des Algorithmus	55
3.4.4	Algorithmische Details	56
3.4.5	Erweiterung des PSLG durch Kreisbogensegmente	60
3.5	Ausgewählte Beispiele der Stützstellenverteilung	63
4	Numerische Untersuchungen im Rahmen der linearen Elastostatik	70
4.1	Vergleich der Techniken zur Behandlung kinematischer Randbedingungen	71
4.2	Fehler infolge der numerischen Integration	80
4.2.1	Simplexbasierte Gauß-Quadratur mit Zerlegung	80
4.2.2	Andere Integrationstechniken	87
4.3	Zur Effizienz der entwickelten Programme	96

5	Scherbandanalyse inkrementell nichtlinearer Kontinua	101
5.1	Theoretische Grundlagen	101
5.2	Numerische Ergebnisse	107
5.2.1	Problemstellung, räumliche Diskretisierung, algorithmische Details .	107
5.2.2	Ergebnisse für die Finite-Elemente-Methode	110
5.2.3	Exemplarische Ergebnisse für das MLS-Verfahren	113
5.2.4	Robustheit des MLS-Verfahrens	117
6	Zusammenfassung	127

1 Einleitung

Bei endlichen elasto-plastischen Deformationsprozessen können lokalisierte Deformationen auftreten, die sich in Bändern mit in der Regel dominierenden Schubverformungen konzentrieren. Man spricht deshalb meist vereinfacht von Scherbändern. Dieses Phänomen ist Folge einer Instabilität des Deformationsprozesses, die nicht durch geometrische oder kinetische Effekte bedingt ist, sondern durch das Material selbst. Für die Analyse materieller Instabilitäten stellt das klassische Materialmodell des plastischen Fließens mit Normalenregel und glatter Fließfläche eine zu drastische Vereinfachung des wirklichen Materialverhaltens dar, so dass Finite-Elemente-Berechnungen im nachkritischen Bereich, d. h. nach dem Verlust der Elliptizität, zu extremen Netzabhängigkeiten führen, die häufig als pathologisch bezeichnet werden.

Eine Möglichkeit zur realitätsnäheren Beschreibung des Materialverhaltens ist der Rückgriff auf Fließeckentheorien, die die kristalline Struktur metallischer Werkstoffe zwar nicht mikromechanisch explizit, aber indirekt auf phänomenologischer Basis berücksichtigen. Mit solchen Modellen können der Bifurkationszeitpunkt und der anfängliche nachkritische Bereich durch Dreieckselemente mit linearen Ansatzfunktionen in einer Finite-Elemente-Analyse korrekt abgebildet werden, *sofern* das FE-Netz an die theoretisch zu erwartende Bandstruktur angepasst ist (Petryk und Thermann, 2000, 2002, Lulla, 2002 Schütze, 2006). Das ist möglich, weil in dem eingeschränkten Prozessbereich das Auftreten eindimensionaler Deformationsmuster theoretisch vorhergesagt (Petryk, 1997) und auf der Basis des Energiekriteriums für stabile Deformationsprozesse (Petryk, 1982, 1985, 1991) analysiert werden kann.

Sobald sich jedoch bei fortgesetzter Deformation wirklich zweidimensionale Geschwindigkeitsfelder einstellen, ist eine Anpassung des FE-Netzes nicht mehr möglich, da man gar nicht weiß, woran man anpassen soll. Es ist in solchen Fällen zu erwarten, dass die Ergebnisse derartiger Rechnungen nur dann realistisch sind, wenn der Teilraum, auf dem die Lösung gesucht wird, die Lösung für das Kontinuum auch wirklich approximieren kann.

Die numerischen Studien von Schütze (2006) geben für den späten nachkritischen Bereich Hinweise, dass dies nicht der Fall ist. Sie zeigen für ein Zwei-Flächen-Modell mit innerer Fließecke (Petryk und Thermann, 1997) unter anderem, dass die qualitativ befriedigende Übereinstimmung zwischen der experimentell ermittelten Mikrostruktur beim Walzen (Bild 1.1a) und dem Simulationsergebnis für Stauchen mit überlagerter Scherung (Bild 1.1b) fragwürdig ist, da bei marginaler Änderung des FE-Netzes auch ein anderer Simulationsverlauf (Bild 1.1c) berechnet werden kann.

FE-Rechnungen zur Ermittlung des ersten Bifurkationszeitpunktes einer homogenen Deformation bei Verwendung nicht angepasster Netze sind praktisch unbrauchbar und überschätzen den kritischen Zeitpunkt erheblich, wie schon Lulla (2002) festgestellt hat.

Eine aussichtsreiche Alternative zur Finite-Elemente-Methode bietet der Einsatz sogenannter *netzfreier Verfahren*. Diese benötigen für die Diskretisierung der Grundgleichungen nur im Grundgebiet verteilte Stützstellen ohne explizite Vorgabe der Konnektivitätsbeziehungen in Form eines dem Stützstellensatz zugeordneten Netzes. Die Netzabhängigkeit der approximierten Lösung wird dadurch beseitigt, so dass auch eine deutlich geringere Empfindlichkeit der Näherungslösung gegenüber der Art der Stützstellenverteilung

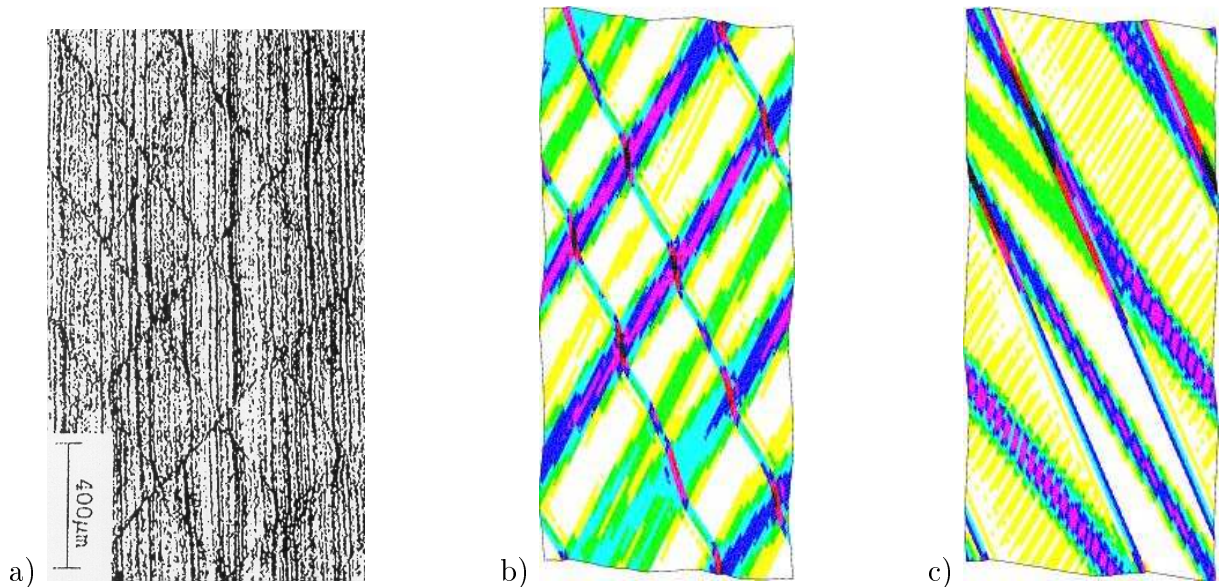


Bild 1.1: Vergleich der a) experimentell (Piela und Korbel, 1996) ermittelten Mikrostruktur für einen Walzprozess mit Simulationsergebnissen für isochores Stauchen und überlagerter Scherung nach b) Petryk und Thermann (2004) bzw. c) Schütze (2006)

erwartet werden kann. Basis solcher Diskretisierungsverfahren bilden meist Interpolations- bzw. Approximationstechniken, die einem diskreten Datensatz eine kontinuierliche Näherungsfunktion zuordnen. Zu den bekanntesten Techniken gehören *Moving Least Squares Approximation* (Lancaster und Salkauskas, 1981), *Radial Basis Functions* (vgl. Buhmann, 2003), *Natural Neighbour Interpolation* (Sibson, 1980, vgl. Sukumar et al., 1998) und *Maximum Entropy Approximation* (vgl. Arroyo und Ortiz, 2006, Sukumar, 2004).

In den vergangenen zwei Jahrzehnten ist eine Vielzahl netzfreier Diskretisierungstechniken vorgeschlagen worden. Zu den ersten Verfahren dieser Klasse zählen *Smoothed Particle Hydrodynamics* (Lucy, 1977) und *Diffuse Element Method* (Nayroles et al., 1992). Es folgten *Reproducing Kernel Particle Method* (Liu et al., 1993), *Element Free Galerkin* (Belytschko et al., 1994), *h-p clouds* (Duarte und Oden, 1996), *Partition of Unity Method* (Babuska und Melenk, 1997) und zahlreiche andere.

In den Übersichtsarbeiten von Belytschko et al. (1996b), Li und Liu (2002), Fries und Matties (2004) und Nguyen et al. (2008) werden einzelne Verfahren eingehender diskutiert. Für die Untersuchungen im Rahmen der vorliegenden Arbeit erwies sich die Studie von Fries und Matties als besonders hilfreich und als zuverlässiger Wegweiser durch die inzwischen umfangreiche Literatur. Die in den letzten Jahren erschienenen Bücher von Liu (2003), Li und Liu (2004), Liu und Gu (2005), Chen et al. (2006), Belytschko und Chen (2007), Fasshauer (2007) bieten neben einem tieferen Einblick in die Thematik gezielt Unterstützung bei der Implementierung netzfreier Verfahren.

- Ziel dieser Arbeit ist es zu prüfen, ob die Anwendung einer netzfreien Diskretisierungstechnik auf die Analyse materieller Instabilitäten grundsätzlich zum Erfolg führen kann. Insbesondere soll die Frage behandelt werden, ob der erste Bifurkationszeitpunkt einer homogenen Deformation und die zugehörigen Felder mit dieser Technik näherungsweise richtig erfasst werden, wenn unstrukturierte Punktevertei-

lungen ohne Rückgriff auf bekannte theoretische Zusammenhänge zu Grunde gelegt werden.

Eine positive Beantwortung dieser Frage ist Voraussetzung für zukünftige numerische Analysen im nachkritischen Bereich, auch wenn solche Berechnungen hier ausgeklammert werden, um den Untersuchungsumfang auf ein sinnvolles Maß einzuschränken.

Die numerische Analyse inkrementell nichtlinearer Werkstoffe im nachkritischen Bereich ist zeitaufwändig. Um die sich dabei einstellenden Mikrostrukturen erfassen zu können, müssen entsprechend feine Diskretisierungen zu Grunde gelegt werden. So erfordert etwa die FE-Berechnung für Bild 1.1 bei der dargestellten Dickenreduktion von 50% auf einem PC Rechenzeiten im mittleren zweistelligen Stundenbereich, wenn ein Netz mit 7321 Knoten benutzt wird, um die Feinstruktur in der Verteilung der betragsgrößten logarithmischen Hauptdehnung sichtbar werden zu lassen. Beim Einsatz netzfreier Methoden muss mit einem höherem Zeitbedarf gerechnet werden.

- Es sind deshalb Programme für ein netzfreies Diskretisierungsverfahren zu entwickeln, die eine effiziente Berechnung ebener Probleme mit vielen Freiheitsgraden erlauben.

Als Basis für die numerische Analyse soll weiterhin Petryks Kriterium für die Stabilität eines Deformationsprozesses genutzt werden, was für das diskretisierte Problem darauf hinausläuft, die inkrementelle Energie zu minimieren. Als Einschränkung an die zu entwickelnde Implementierung ergibt sich daraus:

- Die Lösung der diskretisierten Feldgleichungen soll auf einem Extremalprinzip basieren.

Erweiterte Variationsprinzipie scheiden wegen der Sattelpunkteigenschaften von vornherein aus.

Die Arbeit ist wie folgt gegliedert. In Kapitel 2 werden die für die Implementierung eines netzfreien Verfahrens benötigten Grundlagen zusammengetragen und neue Möglichkeiten zur Effizienzsteigerung präsentiert. Implementierungsaspekte werden detailliert beschrieben.

Hieraus ergibt sich eine Reihe von Fragestellungen der algorithmischen Geometrie, die in Kapitel 3 aufgegriffen werden und in einem Algorithmus zum Generieren unstrukturierter Stützstellenverteilungen für flexibel vorgebbare zweidimensionale Grundgebiete münden. Der Algorithmus erlaubt es, die lokale Stützstellendichte kontrolliert zu variieren und damit den Bedürfnissen eines konkreten Problems anzupassen.

In Kapitel 4 werden die entwickelten Programme auf Probleme der linearen Elastostatik angewendet. Neben der Validierung der Implementierung werden zwei aus der Literatur bekannte Techniken zur Behandlung kinematischer Randbedingungen bezüglich ihres numerischen Verhaltens verglichen. Der Einfluss des Approximationsfehlers infolge der näherungsweise Auswertung der Gebietsintegrale auf die gesuchte Lösung wird anhand von zahlreichen Testbeispielen untersucht.

Schließlich wird in Kapitel 5 das implementierte netzfreie Verfahren mit vorhandenen Unterprogrammen zur inkrementellen Energieminimierung kombiniert und zur Analyse

materieller Instabilitäten eingesetzt. Das Verhalten der Näherungslösung zum Zeitpunkt der ersten Bifurkation wird in Abhängigkeit von Art und Umfang der räumlichen Diskretisierung sowie von Verfahrensparametern der netzfreien Methode studiert.

Da zur Lösung der gestellten Aufgabe verschiedene thematische Schwerpunkte zu bearbeiten waren, schien es nicht ratsam, bekannte Grundlagen in einem gesonderten Kapitel zusammenzufassen. Um unnötige Querverweise zu vermeiden, sind diese vielmehr im thematischen Zusammenhang mit den eigenen Entwicklungen dargestellt. Um die Grundidee des netzfreien Verfahrens und die Probleme seiner Implementierung möglichst einfach herausarbeiten zu können, wird in Kapitel 2 und 4 nur die Theorie infinitesimal kleiner Verschiebungen und die lineare Elastostatik vorausgesetzt. Aspekte der nichtlinearen Kontinuumsmechanik endlicher Verzerrungen und die dann erforderlichen Anpassungen werden erst in Kapitel 5 behandelt.

Die Notation folgt Gurtin (1972) weitestgehend. Insbesondere bezeichnet ein Punkt zwischen Tensoren oder Vektoren stets ein inneres Produkt, also die Abbildung auf einen Skalar, z. B. $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_{ij}B_{ij}$ oder $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_i b_i$, wobei über doppelt auftretende Indices zu summieren ist. Tensoren vierter Stufen werden durch serifenlose Großbuchstaben in Fettdruck symbolisiert. Die lineare Abbildung, die dem Tensor zweiter Stufe \mathbf{B} den Tensor zweiter Stufe $\mathbf{A} = \mathbf{C} \mathbf{B}$ zuordnet, lautet in Komponentenform $A_{ij} = C_{ijkl} B_{kl}$. Komponentendarstellungen beziehen sich stets auf eine kartesische Basis.

2 Implementierung einer Diskretisierungstechnik mit netzunabhängigen Ansatzfunktionen

Bei der Vielzahl der in den letzten Jahren vorgeschlagenen netzfreien Diskretisierungsverfahren ist im ersten Schritt eine Entscheidung zu fällen, welche Technik intensiver verfolgt werden soll. Die für diese Entscheidung notwendige Klassifizierung der bekannten Verfahren kann unter Einbeziehung verschiedener Gesichtspunkte erfolgen, vgl. (Fries und Matthies, 2004). Eines der wesentlichen Merkmale eines Diskretisierungsverfahrens ist die Art der verwendeten Ansatzfunktionen. Die stärkste Verbreitung innerhalb netzfreier Methoden haben die häufig unter der Bezeichnung *Moving Least Squares (MLS)* subsumierten Ansatzfunktionen gefunden. Sie werden auch der hier zu entwickelnden Implementierung zu Grunde gelegt.

In diesem Kapitel werden die *MLS-Ansatzfunktionen* zunächst detailliert hergeleitet und für die numerische Auswertung aufbereitet. Anschließend werden zwei aus der Literatur bekannte Techniken zur Erfüllung kinematischer Randbedingungen erörtert. Die numerische Auswertung der bei schwacher Formulierung der Grundgleichungen auftretenden Gebietsintegrale und der Übergang zu den diskreten Gleichungen schließen das Kapitel ab.

2.1 Ansatzfunktionen

Wir beschreiben hier zwei Herleitungen für derartige Ansatzfunktionen, die trotz identischer Endergebnisse ihre spezifischen Vorzüge haben. Den klassischen Zugang bietet die *Moving Least Squares Approximation* (Kapitel 2.1.1). Das von Lancaster und Salkauskas (1981) beschriebene Verfahren mit den Wurzeln in der Approximationstheorie zeichnet sich durch seine anschauliche Interpretationsmöglichkeit aus. Der formalere, in Kapitel 2.1.2 erläuterte Weg, stellt eine Verbindung zu der ebenfalls verbreiteten Konstruktion der Ansatzfunktionen im Rahmen der *Reproducing Kernel Particle Methode* her und hebt einige wesentliche Eigenschaften der Ansatzfunktionen deutlicher hervor. Vergleichbare Darstellungen geben Belytschko et al. (1996b).

2.1.1 Moving Least Squares Approximation

Das Verfahren von Lancaster und Salkauskas soll hier am Beispiel einer eindimensionalen Approximationsaufgabe vorgestellt werden. Es sei eine Kurve $u(x)$ in den Stützstellen x_i , $i = 1, \dots, N$ durch die Stützwerte $u_i := u(x_i)$ gegeben. Für eine lokale Approximation der gesuchten Funktion in der Umgebung eines Punktes \bar{x} durch ein Polynom

$$u^h(x) = \sum_{\alpha=1}^m p_{\alpha}(x) a_{\alpha}(\bar{x}) \quad (2.1)$$

lassen sich die gesuchten Koeffizienten $a_{\alpha}(\bar{x})$ durch Minimierung der Summe gewichteter Fehlerquadrate

$$J = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N w_i(\bar{x}) (u^h(x_i) - u_i)^2 \quad (2.2)$$

berechnen. Die Monome $p_\alpha(x) = x^{\alpha-1}$, $\alpha = 1, \dots, m$ in (2.1) bilden die vollständige Polynombasis der Ordnung $m-1$. Der lokale Approximationscharakter wird dadurch erreicht, dass sogenannte Fenster- oder Gewichtsfunktionen $w_i(x)$ den Beitrag der Stützpunkte u_i weit entfernter Stützstellen x_i verringern bzw. gänzlich unterdrücken. Mit $w_i(x)$ werden daher Funktionen verwendet, die in einer Umgebung der Stützstelle x_i positiv sind und mit steigendem Abstand von der Stützstelle auf Null abfallen

$$w_i(x) = \begin{cases} w(|x_i - x|) > 0 & \text{für } |x_i - x| \leq r \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (2.3)$$

Der Parameter r in (2.3) legt die Größe der *Einflussbereiche* $\omega_i = \{x | w_i(x) > 0\}$ der Stützstellen fest. Demnach tragen nur solche Stützpunkte zur Approximation bei, deren Abstand zu \bar{x} kleiner ist als r . Bei stark veränderlicher Dichte in der Stützstellenverteilung ist es sinnvoll, einzelnen Stützstellen verschiedene Werte r zuzuordnen (Lancaster und Salkauskas, 1981). In (2.3) tritt dann r_i an die Stelle von r . Das aus der Stationaritätsbedingung

$$\frac{\partial J}{\partial a_\alpha} = \sum_{i=1}^N \sum_{\beta=1}^m w_i(\bar{x}) p_\alpha(x_i) p_\beta(x_i) a_\beta(\bar{x}) - \sum_{i=1}^N p_\alpha(x_i) w_i(\bar{x}) u_i = 0, \quad \alpha = 1, \dots, m \quad (2.4)$$

resultierende lineare Gleichungssystem

$$\sum_{\beta=1}^m M_{\alpha\beta}(\bar{x}) a_\beta(\bar{x}) = \sum_{i=1}^N p_\alpha(x_i) w_i(\bar{x}) u_i, \quad \alpha = 1, \dots, m \quad (2.5)$$

mit

$$M_{\alpha\beta}(\bar{x}) = \sum_{i=1}^N w_i(\bar{x}) p_\alpha(x_i) p_\beta(x_i), \quad \alpha, \beta = 1, \dots, m \quad (2.6)$$

liefert die optimalen Polynomkoeffizienten zu

$$a_\alpha(\bar{x}) = \sum_{i=1}^N \sum_{\beta=1}^m (\mathbf{M}^{-1})_{\alpha\beta}(\bar{x}) p_\beta(x_i) w_i(\bar{x}) u_i, \quad \alpha = 1, \dots, m. \quad (2.7)$$

Die Koeffizienten (2.6) formen die sogenannte Momentenmatrix \mathbf{M} . Damit ist der Näherungswert der gesuchten Funktion im Punkt \bar{x} durch

$$u^h(\bar{x}) = \sum_{\alpha=1}^m p_\alpha(\bar{x}) a_\alpha(\bar{x}) \quad (2.8)$$

festgelegt. Schließlich erhalten Lancaster und Salkauskas die globale Approximation der unbekanntenen Funktion $u(x)$, indem sie die lokale Näherung (2.8) in jedem Punkt x des Grundgebietes auswerten

$$u^h(x) = \sum_{\alpha=1}^m p_\alpha(x) a_\alpha(x), \quad (2.9)$$

den Punkt \bar{x} in (2.1) also über das gesamte Grundgebiet „bewegen“. Einsetzen von

$$a_\alpha(x) = \sum_{i=1}^N \sum_{\beta=1}^m (\mathbf{M}^{-1})_{\alpha\beta}(x) p_\beta(x_i) w_i(x) u_i, \quad \alpha = 1, \dots, m \quad (2.10)$$

in (2.9) liefert dann

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^N \phi_i(x) u_i, \quad (2.11)$$

wobei

$$\phi_i(x) = \sum_{\alpha=1}^m \sum_{\beta=1}^m (\mathbf{M}^{-1})_{\alpha\beta}(x) p_\alpha(x) p_\beta(x_i) w_i(x) \quad (2.12)$$

als die der Stützstelle x_i zugeordnete Ansatzfunktion interpretiert werden kann.

Bild 2.1 illustriert die Unterschiede zwischen einer gewöhnlichen Ausgleichsrechnung nach der Methode der kleinsten Quadrate und der besprochenen MLS-Technik.

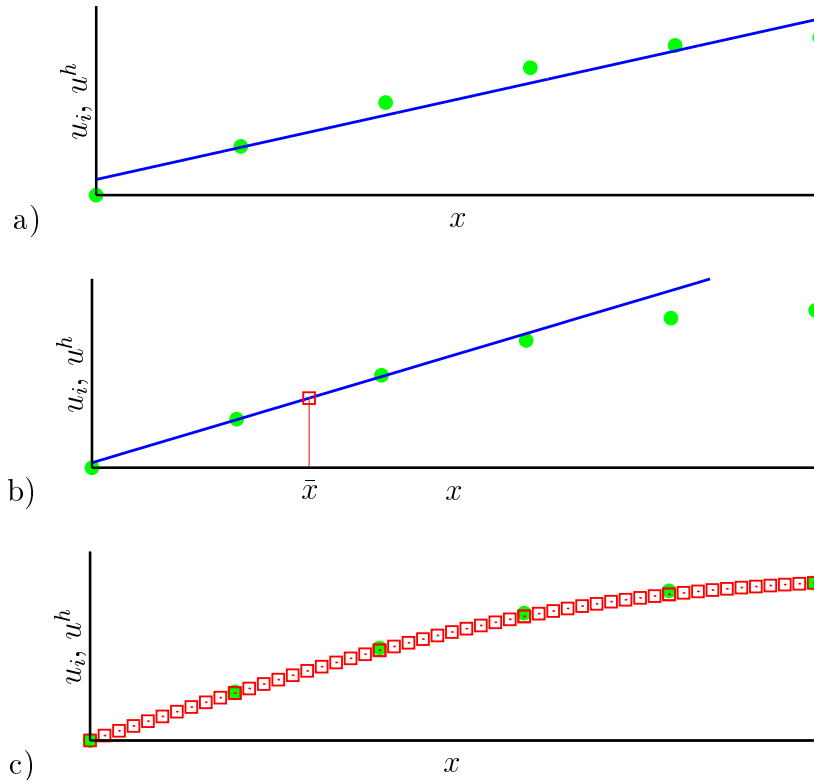


Bild 2.1: Verschiedene Approximationen einer durch 6 Stützstellen gegebenen Sinusfunktion bei Verwendung der Polynombasis $(1, x)$. a) Approximation durch eine Ausgleichsgerade mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate. b) Eine bessere lokale Approximation in der Umgebung des Punktes \bar{x} erhält man durch Minimieren der gewichteten Fehlerquadratsumme (2.2). Nur der Wert der lokalen Näherungsfunktion im Punkte \bar{x} wird benutzt, um die MLS-Näherung in diesem Punkte festzulegen. c) Die durch fortlaufende Minimierung der gewichteten Fehlerquadratsumme konstruierte MLS-Näherungsfunktion.

Beachtet man die positive Definitheit der Fehlerquadratfunktion (2.2), so kann man sich schnell klarmachen (Krongauz und Belytschko, 1996), dass der MLS-Ansatz (2.11, 2.12) jedes Polynom vom Grade $m - 1$ exakt wiedergibt. Die MLS-Approximation hat also die Konsistenzordnung $m - 1$ und erfüllt damit eine grundlegende Forderung an die Ansatzfunktionen zur näherungsweise Lösung von Differentialgleichungen der Ordnung $2(m - 1)$.

Man kann nun auch umgekehrt die Reproduzierbarkeitsbedingungen als Ausgangspunkt zur Herleitung der Ansatzfunktionen verwenden. Wir gehen im folgenden Kapitel darauf ein, da sich dieser Zugang später bei der Behandlung kinematischer Randbedingungen als nützlich erweist.

2.1.2 Direktes Auswerten der Konsistenzbedingung

Wir betrachten wieder die Aufgabe, eine durch N Wertepaare gegebene Kurve zu approximieren, und setzen die Näherungsfunktion $u^h(x)$ als Linearkombination

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^N \phi_i(x) u_i \quad (2.13)$$

der zunächst unbekannt, jeweils einer Stützstelle zugeordneten Funktionen $\phi_i(x)$ an. Die Forderung, dass der Ansatz (2.13) ein beliebiges Polynom der Ordnung $m - 1$ exakt reproduziert, liefert die Konsistenzbedingung

$$\sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^m \phi_i(x) a_\alpha p_\alpha(x_i) = \sum_{\alpha=1}^m a_\alpha p_\alpha(x), \quad (2.14)$$

in der die Koeffizienten a_α der Monome p_α beliebig sind. Die Ansatzfunktionen müssen also dem linearen Gleichungssystem

$$\sum_{i=1}^N \phi_i(x) p_\alpha(x_i) = p_\alpha(x), \quad \alpha = 1, \dots, m \quad (2.15)$$

genügen. Die Lokalität der Ansatzfunktionen kann durch die multiplikative Zerlegung

$$\phi_i(x) = w_i(x) \Phi_i(x)$$

sichergestellt werden, wobei $w_i(x)$ die in Kapitel 2.1.1 eingeführte Fensterfunktion ist, die nur in einer kleinen Umgebung einer Stützstelle positiv ist und ansonsten verschwindet. Die Funktionen $\Phi_i(x)$ korrigieren also die vorgegebenen Fensterfunktionen $w_i(x)$ so, dass die Konsistenzbedingung (2.14) erfüllt wird. Dies erklärt ihre verbreitete Bezeichnung als Korrekturfunktionen. Das verbleibende System aus m linearen Gleichungen

$$\sum_{i=1}^N w_i(x) \Phi_i(x) p_\alpha(x_i) = p_\alpha(x), \quad \alpha = 1, \dots, m \quad (2.16)$$

mit N unbekanntem $\Phi_i(x)$ kann nun aber nur für $N = m$ eine eindeutige Lösung besitzen. Die Approximation eines Knotensatzes mit $N > m$ Stützstellen wird möglich, wenn mit m linear unabhängigen Funktionen $q_\alpha(x)$ und von x abhängigen Koeffizienten a_α

$$\Phi_i(x) = \sum_{\alpha=1}^m q_\alpha(x_i) a_\alpha(x), \quad i = 1, \dots, N \quad (2.17)$$

gesetzt wird. Die Wahl

$$q_\alpha(x) = p_\alpha(x), \quad \alpha = 1, \dots, m \quad (2.18)$$

führt auf das Gleichungssystem

$$\sum_{i=1}^N \sum_{\beta=1}^m w_i(x) p_\beta(x_i) a_\beta(x) p_\alpha(x_i) = p_\alpha(x), \quad \alpha = 1, \dots, m \quad (2.19)$$

mit der Lösung

$$a_\alpha(x) = \sum_{\beta=1}^m (\mathbf{M}^{-1})_{\alpha\beta}(x) p_\beta(x), \quad \alpha = 1, \dots, m, \quad (2.20)$$

wobei \mathbf{M}^{-1} die Inverse der aus Kapitel 2.1.1 bekannten Momentenmatrix

$$(\mathbf{M})_{\alpha\beta}(x) = \sum_{i=1}^N w_i(x) p_\alpha(x_i) p_\beta(x_i), \quad \alpha, \beta = 1, \dots, m \quad (2.21)$$

ist. Wir setzen (2.20) in (2.19) ein

$$\sum_{i=1}^N \sum_{\beta=1}^m \sum_{\gamma=1}^m w_i(x) p_\beta(x_i) (\mathbf{M}^{-1})_{\beta\gamma}(x) p_\gamma(x) p_\alpha(x_i) = p_\alpha(x), \quad \alpha = 1, \dots, m \quad (2.22)$$

und erhalten mit

$$\phi_i(x) = \sum_{\alpha=1}^m \sum_{\beta=1}^m w_i(x) p_\alpha(x_i) (\mathbf{M}^{-1})_{\alpha\beta}(x) p_\beta(x), \quad i = 1, \dots, N \quad (2.23)$$

die gesuchten Ansatzfunktionen.

Es ist grundsätzlich offen, welche Kombination linear unabhängiger Funktionen $q_\alpha(x)$ in (2.17) verwendet wird. Die hier getroffene und in der Literatur übliche Wahl (2.18) hat zugleich mehrere Vorteile. Die Momentenmatrix ist dann symmetrisch. Unter der hier stets geltenden Voraussetzung, dass $p_\alpha(x)$, $\alpha = 1, \dots, m$ eine vollständige Polynombasis der Ordnung $m - 1$ bildet, ist die Momentenmatrix \mathbf{M} positiv definit (Lancaster und Salkauskas, 1981). Ferner lassen sich Monome mit relativ geringem Aufwand berechnen. Diese Eigenschaften erlauben eine vergleichsweise effiziente und robuste numerische Auswertung von (2.23). Eine weitere Verbesserung numerischer Eigenschaften der hergeleiteten Ansatzfunktion wird erzielt, wenn in der Konsistenzbedingung (2.15) die in den aktuellen Punkt x verschobene Polynombasis benutzt wird.

Manche Anwendungen legen die Erweiterung der Polynombasis durch andere problemspezifische Funktionen nahe. Als Spezialfall sei hier die Beschreibung des Spannungszustandes an einer Rissspitze genannt. Da solche Anwendungen jedoch nicht Gegenstand der vorliegenden Arbeit sind, sei für weitere diesbezügliche Informationen auf Belytschko et al. (1996b) verwiesen.

Wir sind im Weiteren an Ansatzfunktionen der Konsistenzordnung Eins interessiert. Die auf den Koordinatenursprung bezogene Polynombasis besitzt in diesem Fall die Form

$$\begin{pmatrix} p_1(x) \\ p_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ x \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Nach Verschieben der linearen Polynombasis (2.24) in den aktuellen Punkt folgt aus (2.19)

$$\sum_{i=1}^N w_i(x) \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & x_i - x \\ x_i - x & (x_i - x)^2 \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}_i(x)} \begin{pmatrix} a_1(x) \\ a_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

mit einer im Allgemeinen besser konditionierten Momentenmatrix $\mathbf{M}(x) = \sum_{i=1}^N \mathbf{M}_i(x)$. Die Ansatzfunktionen haben damit die Form

$$\phi_i(x) = w_i(x)(a_1(x) + a_2(x)(x_i - x)), \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.26)$$

Unter Beachtung der Symmetrie der Momentenmatrix stellen wir fest, dass (2.23) und (2.12) übereinstimmen. Damit gelten alle Aussagen des oberen Abschnittes auch für die Ansatzfunktionen, die das Verfahren von Lancaster und Salkauskas liefert. Dies nehmen wir zum Anlass, Ansatzfunktionen vom Typ (2.23) im Folgenden als MLS-Ansatzfunktionen zu bezeichnen.

Die Konstruktion entsprechender Ansatzfunktionen im Zweidimensionalen erfordert nun lediglich eine Erweiterung der Polynombasis

$$\begin{pmatrix} p_1(x, y) \\ p_2(x, y) \\ p_3(x, y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ y \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

womit die zu (2.25) analoge Konsistenzbedingung die Gestalt

$$\sum_{i=1}^N w_i(x, y) \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & x_i - x & y_i - y \\ x_i - x & (x_i - x)^2 & (x_i - x)(y_i - y) \\ y_i - y & (x_i - x)(y_i - y) & (y_i - y)^2 \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}_i(x, y)} \begin{pmatrix} a_1(x, y) \\ a_2(x, y) \\ a_3(x, y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

annimmt und die Ansatzfunktionen sich zu

$$\phi_i(x, y) = w_i(x, y)(a_1(x, y) + a_2(x, y)(x_i - x) + a_3(x, y)(y_i - y)), \quad i = 1, \dots, N \quad (2.29)$$

ergeben. In welcher Weise hier die Fensterfunktionen $w_i(x, y)$ einzuführen sind, wird im folgenden Unterkapitel besprochen.

2.1.3 Fensterfunktion

Neben der Lokalität vererbt die Fensterfunktion weitere wesentliche Eigenschaften an die Ansatzfunktionen. Ist die Fensterfunktion k -mal, die Komponenten der Basis p_α l -mal stetig differenzierbar, so besitzt die darauf basierende MLS-Ansatzfunktion (2.23) $\min(k, l)$ stetige Ableitungen (Lancaster und Salkauskas, 1981). Bei Verwendung einer Polynombasis legt damit die Fensterfunktion fest, wie oft sich die Ansatzfunktion stetig differenzieren lässt. Darüber hinaus kann die gewählte Fensterfunktion die Approximationsgüte nennenswert beeinflussen. Die Auswirkungen der Funktionswahl auf die Lösungsqualität sind jedoch schwer vorherzusagen (Liu et al., 1995).

In der Literatur sind mehrere Vorschläge bezüglich geeigneter Fensterfunktionen zu finden. Eine Übersicht liefern z. B. Fries und Matties (2004). In der vorliegenden Arbeit wird ein zweimal stetig differenzierbarer Spline dritter Ordnung

$$w(\lambda) = \begin{cases} \frac{1}{6} - \lambda^2 + \lambda^3 & \text{für } \lambda \leq \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} - \lambda + \lambda^2 - \frac{1}{3}\lambda^3 & \text{für } \frac{1}{2} < \lambda \leq 1 \\ 0 & \text{für } \lambda > 1 \end{cases} \quad (2.30)$$

verwendet¹. Neben dem häufigen Gebrauch dieser Fensterfunktion in der Literatur bestärken eigene Testrechnungen diese Entscheidung. Im Vergleich mit weiteren Spline- und Exponentialfunktionen lieferte (2.30) stets gute Ergebnisse. Wir belassen es bei dieser pauschalen Bewertung, da eine quantitative Begründung wegen der zahlreichen Einflussfaktoren wie Problemtyp, Knotenverteilung usw. problematisch ist. Oft wird (2.30) in der mit dem Faktor 4 skalierten Form angegeben. Ein konstanter Faktor ist allerdings für die Auswertung der Ansatzfunktionen der MLS-Approximation unerheblich. Gewöhnlich wird die Fensterfunktion als Funktion eines auf Eins normierten Parameters eingeführt, der hier mit λ bezeichnet wird. Damit kann jedem Knoten i , $i = 1, \dots, N$, eine Fensterfunktion

$$w_i(x) = w(\lambda(x)) \quad \text{mit} \quad \lambda(x) = |x_i - x|/r_i \quad (2.31)$$

in einer Dimension bzw.

$$w_i(x, y) = w(\lambda(x, y)) \quad \text{mit} \quad \lambda(x, y) = \sqrt{(x_i - x)^2 + (y_i - y)^2}/r_i \quad (2.32)$$

im zweidimensionalen Fall, wenn kreisförmige Einflussgebiete benutzt werden, zugewiesen werden. Für rechteckige Einflussbereiche kann die Fensterfunktion durch

$$w_i(x, y) = w(\lambda_x(x))w(\lambda_y(y)) \quad \text{mit} \quad \lambda_x(x) = |x_i - x|/r_{x_i} \quad \text{bzw.} \quad \lambda_y(y) = |y_i - y|/r_{y_i} \quad (2.33)$$

eingeführt werden.

Die für die Berechnung der Ableitungen der Ansatzfunktionen nach den Ortskoordinaten benötigte Ableitung der Fensterfunktion (2.30) ist durch

$$w_{,\lambda}(\lambda) = \begin{cases} -2\lambda + 3\lambda^2 & \text{für } \lambda \leq \frac{1}{2} \\ -1 + 2\lambda - \lambda^2 & \text{für } \frac{1}{2} < \lambda \leq 1 \\ 0 & \text{für } \lambda > 1 \end{cases} \quad (2.34)$$

gegeben.

¹In Kapitel 4 wird darüber hinaus eine Möglichkeit angesprochen, Fensterfunktionen von einem anderen Typ in Verbindung mit polygonal berandeten Einflussbereichen einzusetzen.

2.1.4 Ableitung der Ansatzfunktion nach den Ortskoordinaten

Für die eindimensionale Ansatzfunktion linearer Konsistenz (2.26) ergibt die Ableitung nach der Ortskoordinate

$$\phi_{i,x} = w_{i,x} \{a_1 + (x_i - x)a_2\} + w_i \{a_{1,x} + (x_i - x)a_{2,x} - a_2\}, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.35)$$

Die Abhängigkeit der Funktionen ϕ_i , w_i , a_1 und a_2 bzw. ihrer Ableitungen von x wurde hierbei im Interesse der besseren Lesbarkeit unterdrückt. Zum Auswerten benötigen wir neben der Fensterfunktion und ihrer Ableitung (siehe Kapitel 2.1.3) die Ausdrücke a_1 , a_2 , die durch (2.25) gegeben sind, und ihre Ableitungen $a_{1,x}$, $a_{2,x}$. Diese erhalten wir nach Differentiation von (2.25)

$$\mathbf{M}_{,x}(x) \begin{pmatrix} a_1(x) \\ a_2(x) \end{pmatrix} + \mathbf{M}(x) \begin{pmatrix} a_{1,x}(x) \\ a_{2,x}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

als Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\mathbf{M}(x) \begin{pmatrix} a_{1,x}(x) \\ a_{2,x}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1(x) \\ b_2(x) \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

mit der Momentenmatrix als Koeffizientenmatrix und der rechten Seite

$$\begin{pmatrix} b_1(x) \\ b_2(x) \end{pmatrix} = -\mathbf{M}_{,x}(x) \begin{pmatrix} a_1(x) \\ a_2(x) \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

Der für die numerische Auswertung der Ableitungen benötigte Aufwand kann durch Vereinfachungen der Ausdrücke (2.35)-(2.38) reduziert werden. Berücksichtigen wir (2.25), so lässt sich zunächst (2.38) nach kurzer Rechnung umschreiben in

$$\begin{pmatrix} b_1(x) \\ b_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \sum_{i=1}^N w_{i,x}(x) \begin{pmatrix} 1 & x_i - x \\ x_i - x & (x_i - x)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(x) \\ a_2(x) \end{pmatrix} + a_2(x) \begin{pmatrix} M_{11}(x) \\ M_{12}(x) \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

Für den letzten Summanden in (2.39) hat (2.37) die Lösung $(a_2(x), 0)^T$. Setzen wir diese in (2.35) ein, so verschwindet a_2 in der zweiten geschweiften Klammer. Wir können folglich anstelle von (2.35)

$$\phi_{i,x} = w_{i,x} \{a_1 + (x_i - x)a_2\} + w_i \{a_{1,x} + (x_i - x)a_{2,x}\}, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.40)$$

verwenden, wenn die rechte Seite in (2.37) gemäß

$$\begin{pmatrix} b_1(x) \\ b_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \sum_{i=1}^N w_{i,x}(x) \begin{pmatrix} 1 & x_i - x \\ x_i - x & (x_i - x)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(x) \\ a_2(x) \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

berechnet wird.

Der Übergang zum zweidimensionalen Fall gelingt auf einfache Weise. Ausgehend von der zweidimensionalen Ansatzfunktion (2.29) ist (2.40) durch

$$\phi_{i,j} = w_{i,j} \{a_1 + (x_i - x)a_2 + (y_i - y)a_3\} + w_i \{a_{1,j} + (x_i - x)a_{2,j} + (y_i - y)a_{3,j}\}, \quad (2.42)$$

$$i = 1, \dots, N, \quad j = x, y$$

zu ersetzen. (2.37) und (2.41) werden von

$$\mathbf{M} \begin{pmatrix} a_{1,x} \\ a_{2,x} \\ a_{3,x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{x1} \\ b_{x2} \\ b_{x3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M} \begin{pmatrix} a_{1,y} \\ a_{2,y} \\ a_{3,y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{y1} \\ b_{y2} \\ b_{y3} \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

und

$$\begin{pmatrix} b_{x1} \\ b_{x2} \\ b_{x3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \sum_{i=1}^N w_{i,x} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & x_i - x & y_i - y \\ x_i - x & (x_i - x)^2 & (x_i - x)(y_i - y) \\ y_i - y & (x_i - x)(y_i - y) & (y_i - y)^2 \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}_{i,x}^w} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} b_{y1} \\ b_{y2} \\ b_{y3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \sum_{i=1}^N w_{i,y} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & x_i - x & y_i - y \\ x_i - x & (x_i - x)^2 & (x_i - x)(y_i - y) \\ y_i - y & (x_i - x)(y_i - y) & (y_i - y)^2 \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}_{i,y}^w} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

abgelöst. Auch hier wurden die Abhängigkeiten von x und y unterdrückt.

2.1.5 Numerische Auswertung der Ansatzfunktion und ihrer Ableitungen

Nach den bisherigen Vorarbeiten kann nun eine Routine zur Berechnung der Ansatzfunktionen $\phi_i(\mathbf{x})$ und deren ersten Ableitungen $\phi_{i,x}(\mathbf{x})$ und $\phi_{i,y}(\mathbf{x})$ in einem Punkt $\mathbf{x} = (x, y)^T$ leicht erstellt werden. Wir geben einen möglichen Aufbau für den zweidimensionalen Fall unter Verwendung kreisförmiger Einflussbereiche als Pseudocode in Tabelle 1 an. Dabei gehen wir davon aus, dass durch die vorangegangene Bestimmung einer hinreichenden Überdeckung zu einem gegebenem Knotensatz die Radien der Einflussbereiche r_i , $i = 1, \dots, N$ bekannt sind.

Im Pseudocode ist die Symmetrie der Momentenmatrix berücksichtigt, so dass nur die Koeffizienten der oberen Dreiecksmatrizen abgelegt werden.

Belytschko et al. (1996a) verwenden die für das Gleichungssystem (2.28) durchgeführte Faktorisierung der Momentenmatrix zum Lösen des Gleichungssystems (2.43). Damit wird der für die Berechnung der Ableitungen der Ansatzfunktionen benötigte Aufwand deutlich verringert. Wir folgen diesem Vorschlag beim Aufbau der in Tabelle 1 beschriebenen Routine. Insbesondere wird in der aktuellen Implementierung das Unterprogramm DPPSV der LAPACK-Bibliothek verwendet, um die Cholesky-Zerlegung der Momentenmatrix durchzuführen und anschließend das Gleichungssystem (2.28) zu lösen. Die Unteroutine DPPTRS löst sodann das Gleichungssystem (2.43) ausgehend von der zuvor erzeugten Faktorisierung.

Die in Tabelle 1 beschriebene Routine ist insofern ineffizient, als die Schleife $i = 1, \dots, N$ mit anschließender Berechnung des Abstandes zwischen dem Punkt \mathbf{x} und dem i -ten Knoten unter 2. und 5. viel Rechenzeit beansprucht, insbesondere dann, wenn N groß ist. Da sich die Einflussbereiche einzelner Knoten nur über einen kleinen Teil des

Tabelle 1: Pseudocode: Auswertung der MLS-Ansatzfunktionen und ihrer Ableitungen

1. Initialisiere Felder für die Momentenmatrix und ihre Ableitungen:
Für $i = 1, \dots, 3$ und $j = i, \dots, 3$ setze $M(i, j) = 0$, $M_{,x}^w(i, j) = 0$, $M_{,y}^w(i, j) = 0$.
2. Assembliere die Gleichungssysteme (2.28) und (2.43):
Für $i = 1, \dots, N$
 - $dist = \sqrt{(x(i) - x)^2 + (y(i) - y)^2}$
 - Falls $dist \geq r(i)$, gehe zu 2.
 - $\lambda = dist/r(i)$
 - $win = w(\lambda)$ gemäß (2.30)
 - $dx = x(i) - x$, $dy = y(i) - y$
 - falls $dist = 0$
 $win_{,x} = 0$, $win_{,y} = 0$
 - sonst
 $win_{,x} = -w_{,\lambda}(\lambda) \cdot dx/(r(i) \cdot dist)$, $w_{,\lambda}(\lambda)$ gemäß (2.34)
 $win_{,y} = -w_{,\lambda}(\lambda) \cdot dy/(r(i) \cdot dist)$, $w_{,\lambda}(\lambda)$ gemäß (2.34)
 - Bestimme die Momentenmatrix in (2.28)
 $\mathbf{M} = \mathbf{M} + \mathbf{M}_i$
gemäß Tabelle 2.
 - Bestimme die Beiträge zu den Ableitungen der Momentenmatrix in (2.44)
 $\mathbf{M}_{,x}^w = \mathbf{M}_{,x}^w + \mathbf{M}_{i,x}^w$
 $\mathbf{M}_{,y}^w = \mathbf{M}_{,y}^w + \mathbf{M}_{i,y}^w$
gemäß Tabelle 2.
3. Faktorisiere die Momentenmatrix \mathbf{M} und bestimme die Polynomkoeffizienten a_1 , a_2 und a_3 als Lösung des Gleichungssystems (2.28).
4. Berechne (2.44) und bestimme die Ableitungen der Polynomkoeffizienten $a_{1,j}$, $a_{2,j}$ und $a_{3,j}$, $j = x, y$ als Lösung der Gleichungssysteme (2.43) unter Verwendung der unter 3. faktorisierten Momentenmatrix.
5. Bestimme den Wert der Ansatzfunktionen ϕ und Ableitungen $\phi_{,x}$ und $\phi_{,y}$ in \mathbf{x} .
Für $i = 1, \dots, N$
 - $dist = \sqrt{(x(i) - x)^2 + (y(i) - y)^2}$
 - Falls $dist \geq r(i)$
setze $\phi(i) = 0$, $\phi_{,x}(i) = 0$, $\phi_{,y}(i) = 0$ und gehe zu 5.
 - Sonst berechne $\phi(i)$ gemäß (2.29) und $\phi_{,x}(i)$, $\phi_{,y}(i)$ gemäß (2.42).

Tabelle 2: Ergänzung zur Tabelle 1: Berechnung der Momentenmatrix und ihrer Ableitungen

- Momentenmatrix:

$$M(1,1) = M(1,1) + win$$

$$M(1,2) = M(1,2) + win \cdot dx$$

$$M(2,2) = M(2,2) + win \cdot dx^2$$

$$M(1,3) = M(1,3) + win \cdot dy$$

$$M(2,3) = M(2,3) + win \cdot dx \cdot dy$$

$$M(3,3) = M(3,3) + win \cdot dy^2$$

- Beiträge zu den Ableitungen der Momentenmatrix:

$$M_{,x}^w(1,1) = M_{,x}^w(1,1) + win_{,x}$$

$$M_{,x}^w(1,2) = M_{,x}^w(1,2) + win_{,x} \cdot dx$$

$$M_{,x}^w(2,2) = M_{,x}^w(2,2) + win_{,x} \cdot dx^2$$

$$M_{,x}^w(1,3) = M_{,x}^w(1,3) + win_{,x} \cdot dy$$

$$M_{,x}^w(2,3) = M_{,x}^w(2,3) + win_{,x} \cdot dx \cdot dy$$

$$M_{,x}^w(3,3) = M_{,x}^w(3,3) + win_{,x} \cdot dy^2$$

$$M_{,y}^w(1,1) = M_{,y}^w(1,1) + win_{,y}$$

$$M_{,y}^w(1,2) = M_{,y}^w(1,2) + win_{,y} \cdot dx$$

$$M_{,y}^w(2,2) = M_{,y}^w(2,2) + win_{,y} \cdot dx^2$$

$$M_{,y}^w(1,3) = M_{,y}^w(1,3) + win_{,y} \cdot dy$$

$$M_{,y}^w(2,3) = M_{,y}^w(2,3) + win_{,y} \cdot dx \cdot dy$$

$$M_{,y}^w(3,3) = M_{,y}^w(3,3) + win_{,y} \cdot dy^2$$

Grundgebietes erstrecken, tragen nur wenige Stützwerte zur Berechnung der Ansatzfunktionen bei. Es ist daher wünschenswert, die Schleifen über alle N Knoten zu ersetzen, so dass nur solche Knoten durchlaufen werden, deren Einflussbereiche den aktuellen Punkt \mathbf{x} überdecken. Solche Knoten bezeichnen wir im Folgenden als *aktiv* in \mathbf{x} .

Krysl und Belytschko (2001) bestimmen in jedem Punkt \mathbf{x} vor Berechnung der Ansatzfunktionen alle in \mathbf{x} aktiven Knoten. Inwiefern diese Strategie die Berechnung beschleunigt, hängt entscheidend vom verwendeten Algorithmus ab. Eine Möglichkeit zur effizienten Bestimmung aktiver Knoten geben Han et al. (2000) an.

Wir beschreiben einen für die aktuelle Implementierung entwickelten Algorithmus in Kapitel 2.4 und weisen dann auf notwendige Anpassungen der Routine aus Tabelle 1 hin.

2.2 Wahl einer hinreichenden Überdeckung

Die Auswertung des MLS-Funktionswertes in einem Punkt \mathbf{x} setzt die Invertierbarkeit der Momentenmatrix voraus. Für eine reguläre Momentenmatrix ist es notwendig, dass der aktuelle Punkt \mathbf{x} im Einflussgebiet von mindestens m Knoten eines nicht degenerierten Knotensatzes liegt (Liu et al., 1997). m bezeichnet hierin die Ordnung der Momentenmatrix (2.21).

Es ist grundsätzlich zwischen zwei Strategien zur Bestimmung der Größe und der Form der Einflussgebiete zu unterscheiden (Breitkopf et al., 2004). Eine Möglichkeit besteht darin, in jedem Punkt, in dem die Funktion ausgewertet werden soll, nach einer ausreichenden Anzahl nächster Nachbarknoten zu suchen. Das Einflussgebiet ω_i eines jeden Knotens \mathbf{x}_i stellt dann die Vereinigung von Voronoi-Regionen² höherer Ordnung dar, deren Bestimmung im Allgemeinen mit sehr hohem Rechenaufwand verbunden ist. Alternativ kann jedem Knoten ein Einflussgebiet vorgegebener Form und Größe zugewiesen werden, so dass die Gesamtheit aller Einflussgebiete eine hinreichende Überdeckung des vollständigen Grundgebietes garantiert. Zumeist ist in der Literatur die Verwendung der zweiten Variante zu finden. Diese soll auch in der vorliegenden Arbeit weiter verfolgt werden.

Generell eignen sich beliebige einfach zusammenhängende Gebiete (Lancaster und Salkauskas, 1981). In der überwiegenden Mehrheit der Veröffentlichungen werden jedoch aus praktischen Gründen kreisförmig bzw. rechteckig berandete Einflussgebiete verwendet, deren Größe in einfacher Weise durch die Radien r_i bzw. Kantenlängen r_{ix}, r_{iy} festgelegt wird.

Unabhängig von der gewählten Form der Einflussbereiche muss ihre Größe so vorgegeben werden, dass für das vollständige Grundgebiet eine hinreichende Überdeckung entsteht. Wir sprechen von einer hinreichenden Überdeckung, wenn in jedem Punkt \mathbf{x} des Grundgebietes Ω mindestens m Knoten aktiv sind.

Bei einer regelmäßigen Verteilung der Stützstellen (z. B. als Ecken eines quadratischen Gitters) bereitet die Bestimmung einer hinreichenden Größe der Einflussbereiche offensichtlich keine Schwierigkeiten. Sind die Stützstellen dagegen unregelmäßig verteilt, wie beispielsweise in Bild 2.2, ist die Konstruktion einer hinreichenden Überdeckung eine der Hürden, die es bei der Implementierung eines netzfreien Verfahrens zu überwinden gilt. Die naheliegende Vorstellung, die Einflussgebiete so groß zu wählen, dass sie sich jeweils über das gesamte Grundgebiet erstrecken, führt gewiss zu einer hinreichenden Überdeckung, verletzt jedoch die Forderung nach Lokalität der Ansatzfunktionen und scheidet damit aus. In diesem Zusammenhang ist zu bedenken, dass mit steigender Größe der Einflussgebiete die Anzahl der nicht verschwindenden Einträge in der Steifigkeitsmatrix zunimmt, was neben rapide wachsendem Rechenaufwand im Allgemeinen die Kondition des globalen Gleichungssystems verschlechtert. Das Ziel besteht daher darin, eine hinreichende Überdeckung zu konstruieren, ohne dabei unnötig große Einflussgebiete zu verwenden.

Dolbow und Belytschko (1998) ordnen jeder Stützstelle \mathbf{x}_i ein Einflussgebiet ω_i mit dem Radius

$$r_i = r_i^{\min} c_r \quad (2.45)$$

zu, wobei r_i^{\min} so bestimmt wird, dass mindestens m Knoten \mathbf{x}_j innerhalb von ω_i liegen. c_r ist ein Skalierungsfaktor, für den der empirisch begründete Wertebereich zwischen

²Der Begriff *Voronoi-Region* wird in Kapitel 3 erklärt.

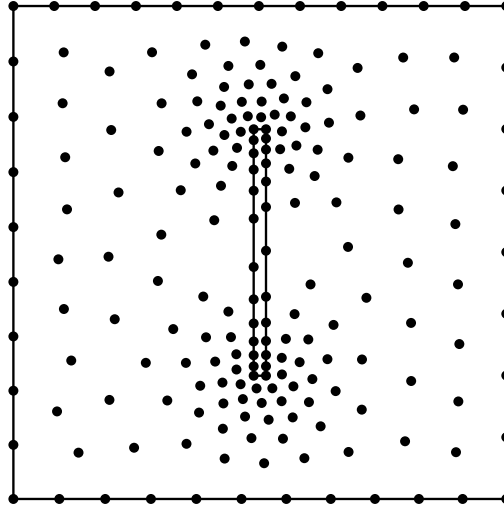


Bild 2.2: Diskretisierung eines Grundgebietes durch 200 unregelmäßig verteilte Stützstellen

2 und 4 empfohlen wird. Diese Technik stellt bei gleichmäßiger Knotenverteilung eine hinreichende Überdeckung des gesamten Grundgebietes sicher, kann jedoch bei Stützstellenverteilungen mit (stark) veränderlicher Dichte versagen. Duarte und Oden (1996) schlagen einen Algorithmus vor, in dem die ursprünglichen Stützstellen \mathbf{x}_i , $i = 1, \dots, N$ durch zusätzliche Hilfspunkte $\mathbf{y}_j \in \Omega$ erweitert werden. \mathbf{y}_j sind Punkte, in denen der Wert der MLS-Funktion während der Programmlaufzeit ausgewertet werden soll. Es kann sich dabei beispielsweise um Stützstellen zur numerischen Auswertung der Gebietsintegrale handeln. Der Algorithmus ist unten in kompakter Form eines Pseudocodes zusammengefasst. Dieser Algorithmus ermöglicht die Invertierbarkeit der Momentenmatrix in den

Tabelle 3: Pseudocode: Bestimmung der Größe der Einflussbereiche (Duarte und Oden, 1996)

1. Für $i = 1, \dots, N$ setze $r(i) = 0$.
2. Für alle Punkte $\mathbf{x}(i)$ und $\mathbf{y}(j)$
 - a) Bestimme m nächste Nachbarstützstellen des aktuellen Punktes.
 - b) Für jede dieser Nachbarstützstellen setze den Radius so, dass sie im aktuellen Punkt aktiv sind.

Punkten \mathbf{x}_i und \mathbf{y}_j , garantiert jedoch nicht eine hinreichende Überdeckung des vollständigen Grundgebietes. Das Auftreten von degenerierten Knotensätzen wird ebenfalls nicht ausgeschlossen. Eine Weiterentwicklung dieses Algorithmus geben Du et al. (2002) an. Sie erzeugen zusätzlich zu den Stützstellen eine gleichmäßige Punkteverteilung, die das Grundgebiet repräsentieren soll, und generieren lokal weitere Punkte in Abhängigkeit von

der Dichte der Stützstellen. Dadurch soll eine vollständige Gebietsüberdeckung sichergestellt sein. Griebel und Schweitzer (2002) ordnen in ihrem Algorithmus dem anfänglichen Knotensatz einen binären Baum zu und besetzen leere Zellen des so gewonnenen Gitters mit weiteren Stützstellen. Basierend auf diesem neuen Knotensatz wird eine Überdeckung erzeugt, die garantiert, dass in jedem Punkt mindestens ein Knoten aktiv ist, und erlaubt somit eine robuste Konstruktion von Ansatzfunktionen der Konsistenzordnung Null (Shepardfunktionen). Breitkopf et al. (2004) wählen die Größe eines Einflussgebietes ω_i so, dass alle Voronoi-Regionen der direkt benachbarten Stützstellen vollständig in ω_i fallen. Diese Technik kann je nach Knotenverteilung unerwünscht große Einflussgebiete konstruieren, führt allerdings zu einer Überdeckung, bei der in jedem Punkt $\mathbf{x} \in \Omega$ die Existenz einer linear-konsistenten MLS-Approximation gesichert ist.

Soweit es dem Autor bekannt ist, liegt zum aktuellen Zeitpunkt kein Algorithmus vor, der bei vertretbarem Aufwand eine hinreichende Überdeckung im gesamten Grundgebiet für den allgemeinen Fall einer beliebig unregelmäßigen Knotenverteilung zur Berechnung von Ansatzfunktionen frei wählbarer Konsistenzordnung liefert.

Die angeführten Lösungsansätze aus der Literatur zur automatischen Konstruktion einer hinreichenden Überdeckung sind in ihrer Umsetzung recht komplex. Insbesondere erfordern die meisten die Bestimmung einer vorgegebenen Anzahl nächster Nachbarstützstellen eines Punktes. Die effiziente Ermittlung nächster Nachbarn ist ein eigenständiges Problemfeld innerhalb der computergestützten Geometrie. Es existieren mehrere frei verfügbare Implementierungen entsprechender Algorithmen. Stellvertretend sei an dieser Stelle die ANN-Unterroutrinenbibliothek³ erwähnt. Der Einsatz derartiger Programme ermöglicht zwar eine effektive Umsetzung der oben angesprochenen Algorithmen, vergrößert jedoch deutlich den Umfang der gesamten Implementierung einer netzfreien Diskretisierungstechnik. Dies ist insbesondere deshalb unbefriedigend, weil die Konstruktion einer hinreichenden Überdeckung trotz des hohen Aufwands nur in Sonderfällen gelingt. Wegen dieser Schwierigkeiten wird die Wahl der Einflussgebiete in der Praxis oft „von Hand“ vorgenommen (Fries und Matties, 2004).

Wir beschränken uns im Weiteren auf die Verwendung linear-konsistenter Ansatzfunktionen. Für diesen Spezialfall beschreiben wir eine einfache Möglichkeit zur effizienten Konstruktion einer hinreichenden Überdeckung.

Wir halten zunächst fest, dass für die Auswertung der MLS-Approximierenden (2.26) bzw. (2.29) mit linearer Polynombasis eine hinreichende Überdeckung dann vorliegt, wenn in jedem Punkt $\mathbf{x} \in \Omega$ mindestens zwei Stützstellen in einer Dimension bzw. drei in zwei Dimensionen aktiv sind. Im zweidimensionalen Fall ist zu beachten, dass kollineare Stützstellen einen degenerierten Knotensatz bilden. Die Bestimmung der Koeffizienten $a_1(\mathbf{x})$, $a_2(\mathbf{x})$, $a_3(\mathbf{x})$ in (2.28) wird demnach nicht gelingen, wenn ausschließlich solche Stützstellen in einem Punkt \mathbf{x} aktiv sind.

Wenden wir uns zunächst dem eindimensionalen Fall zu. Für ein Grundgebiet $\Omega = \{x | x_1 \leq x \leq x_N\}$ mit N beliebig verteilten Stützstellen x_i , wobei $x_i < x_{i+1}$ für $i =$

³www.cs.umd.edu/~mount/ANN/

$1, \dots, N - 1$ gelten soll, lässt sich eine hinreichende Überdeckung leicht erzeugen, indem

$$r_i^{\min} = \begin{cases} x_2 - x_1 & \text{für } i = 1 \\ x_N - x_{N-1} & \text{für } i = N \\ \max(x_i - x_{i-1}, x_{i+1} - x_i) & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.46)$$

gesetzt wird. Das Einflussgebiet einer Stützstelle x_i ist dann durch

$$\omega_i = \{x \mid x_i - r_i^{\min} \leq x \leq x_i + r_i^{\min}\}$$

gegeben. Es ist unmittelbar zu erkennen, dass mit (2.46) jedes Intervall $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 1, \dots, N - 1$ vollständig im Einflussgebiet der Stützstellen x_i und x_{i+1} liegt. Folglich sind in jedem Punkt x des Grundgebietes zumindest zwei Stützstellen aktiv und der Approximationswert kann überall berechnet werden. Anzumerken ist, dass bei einer äquidistanten Verteilung der Stützstellen der MLS-Ansatz mit linearer Polynombasis und $r_i = r_i^{\min}$ gemäß (2.46) die bekannten Dach-Funktionen der Finite-Elemente-Methode ergibt. Die Koeffizienten $a_1(x)$ und $a_2(x)$ in (2.25) werden dann so bestimmt, dass für jedes x mit $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ eine Gerade ermittelt wird, die die Stützwerte in x_i und x_{i+1} genau interpoliert. (2.26) entspricht in diesem Fall der stückweisen Linearinterpolation des gesamten in den Stützstellen x_i , $i = 1, \dots, N$ bekannten Datensatzes. Soll (2.26) an den Stützstellen stetig differenzierbar sein, müssen die Einflussgebiete vergrößert werden, was die Verwendung des Parameters c_r in (2.45) motiviert.

Die Konstruktionsvorschrift (2.46) basiert auf der Unterteilung des gesamten Grundgebietes in Teilgebiete (Intervalle in einer Dimension). Eine hinreichende Überdeckung wird für jedes Teilgebiet erzeugt und damit auch für das gesamte Grundgebiet. Diese Idee unterscheidet sich also grundsätzlich von den Vorschlägen, die eine hinreichende Überdeckung nur in einzelnen Punkten des Grundgebietes garantieren.

Die Vorstellung lässt sich auf den zweidimensionalen Fall übertragen, wenn dem vorliegenden Knotensatz eine Triangulation zugeordnet wird. Bild 2.3a zeigt eine Dreiecksunterteilung des Grundgebietes aus Bild 2.2. Die folgenden Ausführungen beziehen sich auf kreisförmige Einflussgebiete

$$\omega_i = \{\mathbf{x} \mid r_i \geq |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}|\}.$$

Eine Anpassung an rechteckige Gebiete ist aber problemlos möglich.

Wir greifen gedanklich ein Dreieck mit den Eckknoten \mathbf{x}_i , \mathbf{x}_j und \mathbf{x}_k heraus. Es liegt nahe zu fordern, dass jeder Punkt innerhalb dieses Dreiecks im Einflussbereich der Eckknoten liegen soll. Mit

$$\begin{aligned} r_i^{\min} &= \max(|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i|, |\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i|), \\ r_j^{\min} &= \max(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, |\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j|), \\ r_k^{\min} &= \max(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k|, |\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k|) \end{aligned} \quad (2.47)$$

wird das betrachtete Dreieck vollständig von den Einflussgebieten der Eckknoten überdeckt (Bild 2.3b). $|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i|$ ist die Länge der Kante zwischen den Knoten \mathbf{x}_i und \mathbf{x}_j . Setzen wir den Radius r_i^{\min} des Einflussgebietes eines jeden Knotens \mathbf{x}_i gleich der Länge der

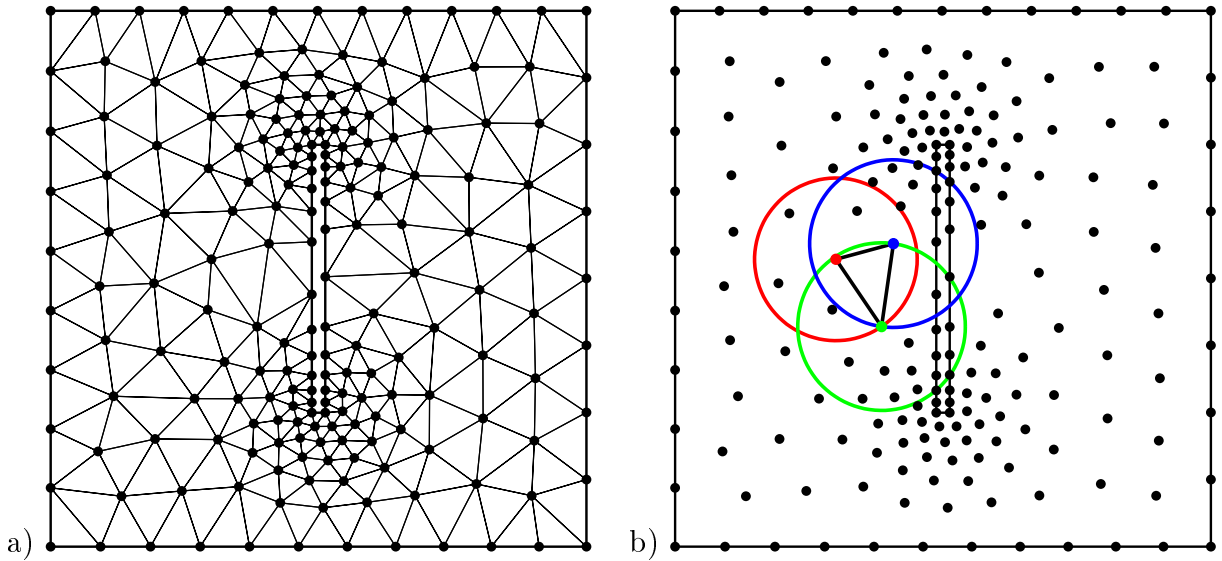


Bild 2.3: Triangulation eines durch Stützstellen diskretisierten Grundgebietes a) und hinreichende Überdeckung für ein Dreieck bei linearer Polynombasis b)

längsten mit diesem Knoten verbundenen Kante, dann sind offensichtlich in jedem Dreieck zumindest drei Knoten aktiv. Damit liegt eine einfache Vorschrift für die Wahl von r_i^{\min} vor, die eine hinreichende Überdeckung zur Berechnung der MLS-Approximation mit linearer Polynombasis unabhängig von der Geometrie des Grundgebietes und für beliebig platzierte Stützstellen erlaubt. Es sei unterstrichen, dass diese Vorschrift zugleich ausschließt, dass in irgendeinem Punkt nur Stützstellen eines degenerierten Knotensatzes aktiv sind und liefert damit eine Grundlage für eine robuste Berechnung der MLS-Ansatzfunktionen. Die Einfachheit der erläuterten Idee spiegelt sich in einem sehr kompakten Programmcode wider (Tabelle 4).

Die mit Hilfe der vorgeschlagenen Technik erzeugte Überdeckung des Grundgebietes für $c_r = 1$ zeigt Bild 2.4. Es macht deutlich, dass eine Überprüfung auf hinreichende Überdeckung durch Augenschein bei ungleichmäßiger Punkteverteilung praktisch unmöglich ist. Für die Triangulation des Knotensatzes (Bild 2.3) wurde das Programm `Triangle` (Shewchuk, 1996) benutzt, dessen Datenstruktur auch die Anzahl der Triangulationskanten und die jeder Kante zugeordneten Knoten liefert.

Es kann darüber gestritten werden, ob eine Methode, die auf die Verwendung eines Dreiecksnetzes angewiesen ist, als netzfrei bezeichnet werden kann. Die Bestimmung einer hinreichenden Überdeckung zeigt bereits, dass eine Triangulation ein nützliches Hilfsmittel sein kann. In den folgenden Abschnitten dieser Arbeit wird immer wieder von einer Triangulation Gebrauch gemacht. Aus der Sicht des Autors ist es wesentlich, dass dadurch der Charakter der im Mittelpunkt der Methode stehenden MLS-Ansatzfunktionen unverändert bleibt. Wir werden daher im Folgenden den Begriff *netzfrei* in Bezug auf die beschriebene Implementierung ohne Einschränkungen benutzen.

Tabelle 4: Pseudocode: Konstruktion einer hinreichenden Überdeckung

Sei N_E die Anzahl der Triangulationskanten. Die i -te Kante verbinde den j -ten und k -ten Knoten mit den Koordinaten $\mathbf{x}(j) = (x(j), y(j))^T$ und $\mathbf{x}(k) = (x(k), y(k))^T$

1. Für $i = 1, \dots, N$ setze $r(i) = 0$.
2. Für $i = 1, \dots, N_E$
 - $len = \sqrt{(x(j) - x(k))^2 + (y(j) - y(k))^2}$
 - falls $r(j) < len$, setze $r(j) = len$
 - falls $r(k) < len$, setze $r(k) = len$
3. Für $i = 1, \dots, N$ setze $r(i) = r(i)c_r$, mit $c_r \geq 1$

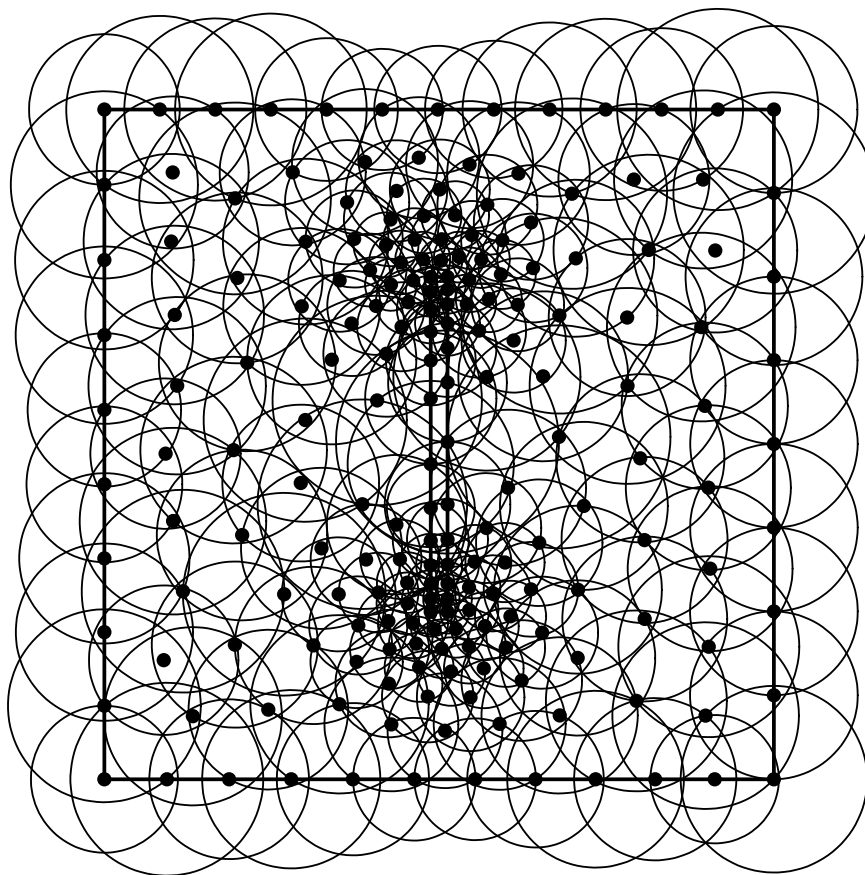


Bild 2.4: Hinreichende Überdeckung des Grundgebietes zur Berechnung von MLS-Ansatzfunktionen mit linearer Polynombasis, erzeugt durch den Einsatz des in Tabelle 4 zusammengefassten Algorithmus, $c_r = 1$

2.3 Behandlung wesentlicher Randbedingungen

Im Gegensatz zu Finite-Elemente-Ansatzfunktionen besitzen die MLS-Ansatzfunktionen in der oben beschriebenen Form nicht die Kronecker-Delta-Eigenschaft, d. h.

$$\phi_i(\mathbf{x}_j) \neq \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (2.48)$$

(vgl. Bild 2.5). Die Behandlung wesentlicher Randbedingungen kann daher nicht in der bekannten einfachen Weise der Finite-Elemente-Methode erfolgen, sondern erfordert besondere Überlegungen.

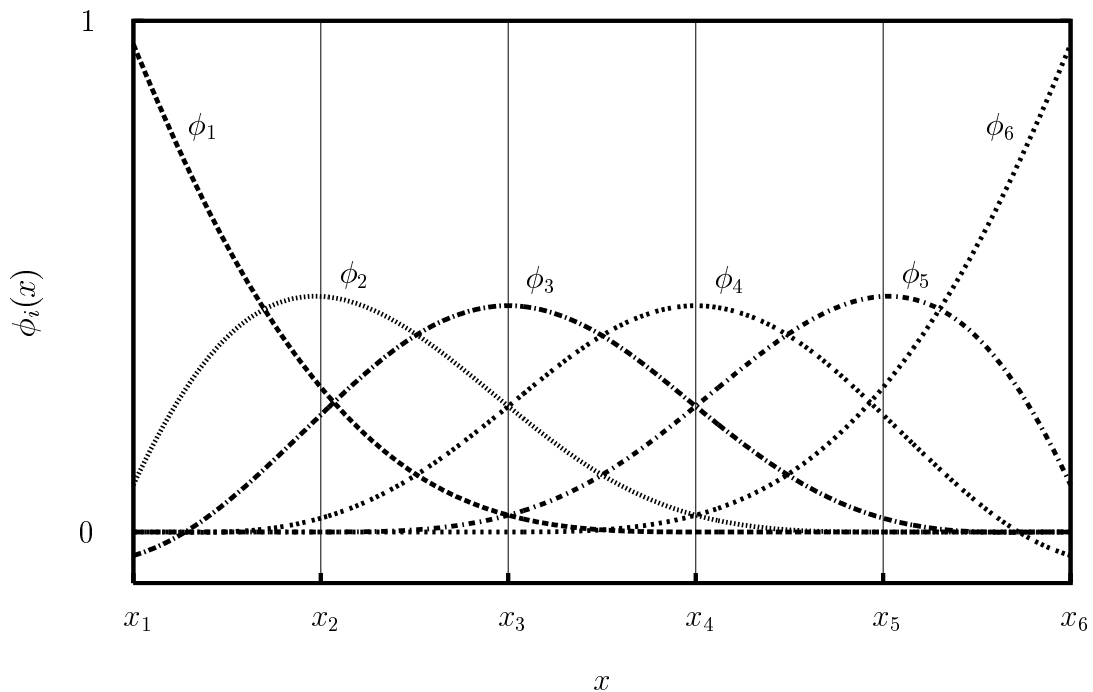


Bild 2.5: MLS-Ansatzfunktionen, sechs äquidistant verteilte Stützstellen, $c_r = 3$

Lancaster und Salkauskas (1981) erhalten eine interpolierende MLS-Approximation, indem sie singuläre Fensterfunktionen mit $w_i(\mathbf{x}_i) = \infty$ verwenden. Die so gewonnenen Ansatzfunktionen besitzen zwar die Kronecker-Delta-Eigenschaft, ihre numerische Auswertung ist jedoch problematisch (Schweitzer, 1997), so dass der Einsatz dieser Technik zur Lösung von Randwertproblemen nicht zu empfehlen ist. Neben den numerischen Schwierigkeiten lässt die Verwendung singulärer Fensterfunktionen ein weiteres Problem ungelöst. Im Allgemeinen wird der Rand des Grundgebietes von Einflussbereichen einzelner im Innern des Grundgebietes liegender Stützstellen überdeckt, womit diese zum approximierten Funktionswert auf dem Rand beitragen. Durch Festlegen der Werte an

den Randknoten können Randbedingungen punktweise erfüllt werden; die Funktionswerte auf dem Gebietsrand zwischen den Stützstellen bleiben dabei unbestimmt. Im Rahmen der Finite-Elemente-Methode tritt ein solches Problem nicht auf, da dort ausschließlich Randknoten über dem Gebietsrand aktiv sein können.

Es existiert eine Reihe weiterer Möglichkeiten, um wesentliche Randbedingungen zu berücksichtigen. Eine Übersicht verbreiteter Verfahren geben z. B. Belytschko et al. (1996b), Li und Liu (2002) und Fries und Matties (2004). Viele vorgeschlagene Verfahren erfüllen die Randbedingungen ebenfalls nur in den Randknoten. Dazu zählt beispielsweise die *Transformationsmethode*. Andere berücksichtigen die Randbedingungen im integralen Mittel. Der bekannteste Vertreter dieser Klasse ist die *Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren*. Die Verwendung von Lagrangeschen Multiplikatoren in der Implementierung des *Element-Free-Galerkin-Verfahrens* (Belytschko et al., 1994) war eine der genauigkeitssteigernden Veränderungen⁴ gegenüber der von Nayroles et al. (1992) beschriebenen *Diffuse-Element-Methode*, die keine gesonderte Behandlung von Randbedingungen enthielt. Damit ist die Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren eine der ersten und zugleich am häufigsten zitierten Techniken zur Behandlung von wesentlichen Randbedingungen im Rahmen von MLS-Diskretisierungstechniken.

Im Hinblick auf die Anwendung der zu entwickelnden Implementierung auf die Scherbandanalyse interessieren wir uns für solche Techniken, die ein Vorschreiben der Kinematik auf dem vollständigen Gebietsrand ermöglichen. Das Extremalprinzip soll dabei unverändert bleiben. Damit scheidet die Lagrangeschen Multiplikatoren für den Einsatz im Rahmen der Scherbandanalyse aus.

Wir beschreiben zwei weitere aus der Literatur bekannte Verfahren, die die MLS-Ansatzfunktionen derartig verändern, dass die neu gewonnenen Funktionen über dem Gebietsrand mit vorgegebener Kinematik exakt den Finite-Elemente-Ansatzfunktionen entsprechen.

Das Verfahren von Belytschko et al. (1995) wurde ursprünglich benutzt, um ein Grundgebiet bereichsweise durch netzfreie und vernetzungsbasierte Ansätze zu diskretisieren. Ausgehend von der Definition einer *Rampenfunktion* in der Übergangszone zwischen den verschiedenen Bereichen werden MLS- und FE-Ansatzfunktionen unter Aufrechterhaltung linearer Konsistenz gekoppelt.

Huerta und Fernández-Méndez (2000) geben eine allgemeinere Variante an, um eine gemischte Approximation aus MLS- und FE-Ansatzfunktionen zu erzeugen. Auch diese Technik basiert auf einer speziellen Konstruktion der Ansatzfunktionen in der Übergangszone zwischen dem FE-Bereich und dem netzfreien Teil des Grundgebietes. Im Mittelpunkt dieser Konstruktion steht eine *modifizierte Form der Konsistenzbedingung* (2.15). Fernández-Méndez und Huerta (2004) verwenden das Verfahren zur Behandlung von Randbedingungen und vergleichen seine Eigenschaften anhand von numerischen Untersuchungen mit drei weiteren Techniken: Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren, Straf-Verfahren und Nitsches Methode.

In der vorliegenden Arbeit werden die von Belytschko et al. (1995) und Huerta und Fernández-Méndez (2000) vorgeschlagenen Verfahren gegenübergestellt. Nach einer kurzen Beschreibung beider Verfahren in Kapiteln 2.3.1 bzw. 2.3.2 werden sie in Kapitel 4

⁴Genauigkeitssteigerungen wurden auch durch die exakte Berechnung der Ableitungen der MLS-Ansatzfunktionen und durch die Verwendung einer höheren Zahl von Integrationspunkten erzielt.

vergleichend auf Probleme der linearen Elastostatik angewendet. Die gewonnenen Ergebnisse dienen dann als Grundlage für die Entscheidung, welche der beiden Methoden für die anschließenden nichtlinearen Untersuchungen eingesetzt wird.

Beide Techniken erfordern eine Vernetzung (zumindest) des Randbereichs, was oft als Nachteil dieser Verfahren angesehen wird. Da wir in Kapitel 2.2 bereits von einer Triangulation des gesamten Grundgebietes Gebrauch gemacht haben, erfordert die Konstruktion linearer FE-Ansatzfunktionen am Gebietsrand keinen zusätzlichen Aufwand. Neben den angestrebten Eigenschaften der veränderten Ansätze, die das direkte Erfüllen von Randbedingungen erlauben, erben beide Verfahren die Stetigkeitseigenschaften von den FE-Ansatzfunktionen. Die neuen Ansatzfunktionen sind jedoch nur in Randnähe nicht mehr stetig differenzierbar, so dass der netzfreie Charakter der Approximation im Gebietsinnern erhalten bleibt. Zwecks quantitativer Analyse dieses Einflusses wird in Kapitel 4 zusätzlich die Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren als ein vollständig netzunabhängiges Referenzverfahren ebenfalls betrachtet. Die weite Verbreitung dieses Verfahrens macht eine ausführliche Beschreibung überflüssig, so dass wir uns auf eine kompakte Darstellung in Kapitel 2.4 beschränken.

2.3.1 Kopplung an Finite-Elemente mittels einer Rampenfunktion

Wir erläutern das Verfahren am eindimensionalen Beispiel aus Bild 2.5 mit $N = 6$ Stützstellen und verweisen für weitere Informationen auf die Originalarbeit (Belytschko et al., 1995). Es sei u_1 ein bekannter Funktionswert am linken Gebietsrand. Das Ziel besteht darin, die Ansatzfunktion $u^h(x)$, die die Randbedingung $u^h(x_1) = u_1$ erfüllen soll, in der Form

$$u^h(x) = \phi_1^*(x)u_1 + \sum_{i=2}^N \phi_i^*(x)q_i \quad (2.49)$$

zu schreiben. ϕ_i^* , $i = 1, \dots, N$ sind die gesuchten Ansatzfunktionen, für die im Gegensatz zu den üblichen MLS-Ansatzfunktionen ϕ_i

$$\phi_i^*(x_1) = \delta_{i1}, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.50)$$

gelten soll. q_i , $i = 2, \dots, N$ sind freie Parameter. Es sollte angemerkt werden, dass die Faktoren q_i anders als bei der Finite-Elemente-Methode nicht als Funktionswerte an den zugehörigen Stützstellen gedeutet werden können.

Um zu modifizierten Ansatzfunktionen mit der Eigenschaft (2.50) zu gelangen, wird jeder Stützstelle zunächst eine MLS-Ansatzfunktion zugewiesen (Bild 2.5) und anschließend über dem linken Randintervall (-element) eine vollständige lineare FE-Ansatzfunktion konstruiert, indem der Stützstelle x_1 die Funktion

$$N_1(x) = \begin{cases} \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} & \text{für } x_1 \leq x \leq x_2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.51)$$

und der Stützstelle x_2

$$N_2(x) = \begin{cases} \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} & \text{für } x_1 \leq x \leq x_2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.52)$$

zugeordnet wird (Bild 2.6a). Die Rampenfunktion ist als Summe der FE-Ansatzfunktionen definiert, die inneren Stützstellen zugeordnet sind. Im betrachteten Beispiel ergibt sich die Rampenfunktion zu

$$R(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < x_1 \\ 1 & \text{für } x > x_2 \\ N_2(x) & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.53)$$

Mit dieser Definition lautet die Konstruktionsvorschrift für die modifizierten Ansatzfunktionen

$$\phi_i^*(x) = \phi_i(x)R(x) + N_i(x)(1 - R(x)). \quad (2.54)$$

Bild 2.6b veranschaulicht die aus (2.54) resultierenden Ansatzfunktionen. Es ist sofort erkennbar, dass die ursprünglichen MLS-Ansatzfunktionen nur innerhalb des Randelementes modifiziert werden und ansonsten unverändert bleiben.

Die Definition der Rampenfunktion für $x < x_1$ ist nur dann notwendig, wenn das betrachtete Grundgebiet $\Omega = \{x | x_1 \leq x \leq x_2\}$ am linken Rand mit einem durch Finite-Elemente diskretisierten Gebiet gekoppelt wird. Soll das Verfahren jedoch wie hier zur Einarbeitung von Randbedingungen eingesetzt werden, so ist nur zwischen zwei Bereichen

$$R(x) = \begin{cases} N_2(x) & \text{für } x_1 \leq x \leq x_2 \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.55)$$

zu unterscheiden.

Bei der Anwendung dieses Verfahrens auf zweidimensionale Probleme werden in der vorliegenden Arbeit lineare FE-Ansatzfunktionen über Randdreiecken benutzt. Zu beachten ist, dass dann (2.55) durch

$$R(x, y) = \begin{cases} \sum_{j=1}^{NI} N_j(x, y) & \text{für } \mathbf{x} = (x, y)^T \in \triangleright_R \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.56)$$

zu ersetzen ist. \triangleright_R bezeichnet ein Randdreieck, d.h. ein Element mit mindestens einer Kante, die mit dem Gebietsrand zusammenfällt. NI ist die Anzahl der im Innern des Grundgebietes liegenden Knoten dieses Randelementes. Die benötigten Ableitungen der modifizierten Ansatzfunktionen lassen sich in trivialer Weise berechnen, so dass auf ein explizites Anschreiben dieser Ausdrücke verzichtet werden kann.

2.3.2 Kopplung an Finite-Elemente mittels modifizierter Konsistenzbedingung

Wie im vorangegangenen Kapitel wird das von Huerta und Fernández-Méndez (2000) vorgeschlagene Verfahren ausgehend vom eindimensionalen Problem in Bild 2.5 beschrieben. Im Gegensatz zur Methode von Belytschko et al. wird dem linken Randknoten x_1 nur eine FE-Ansatzfunktion N_1 (2.51) zugeordnet. Für die verbleibenden Stützstellen x_i , $i = 2, \dots, N$ werden die MLS-Ansatzfunktionen so bestimmt, dass die resultierende Approximationsfunktion

$$u^h(x) = N_1(x)u_1 + \sum_{i=2}^N \phi_i^* q_i \quad (2.57)$$

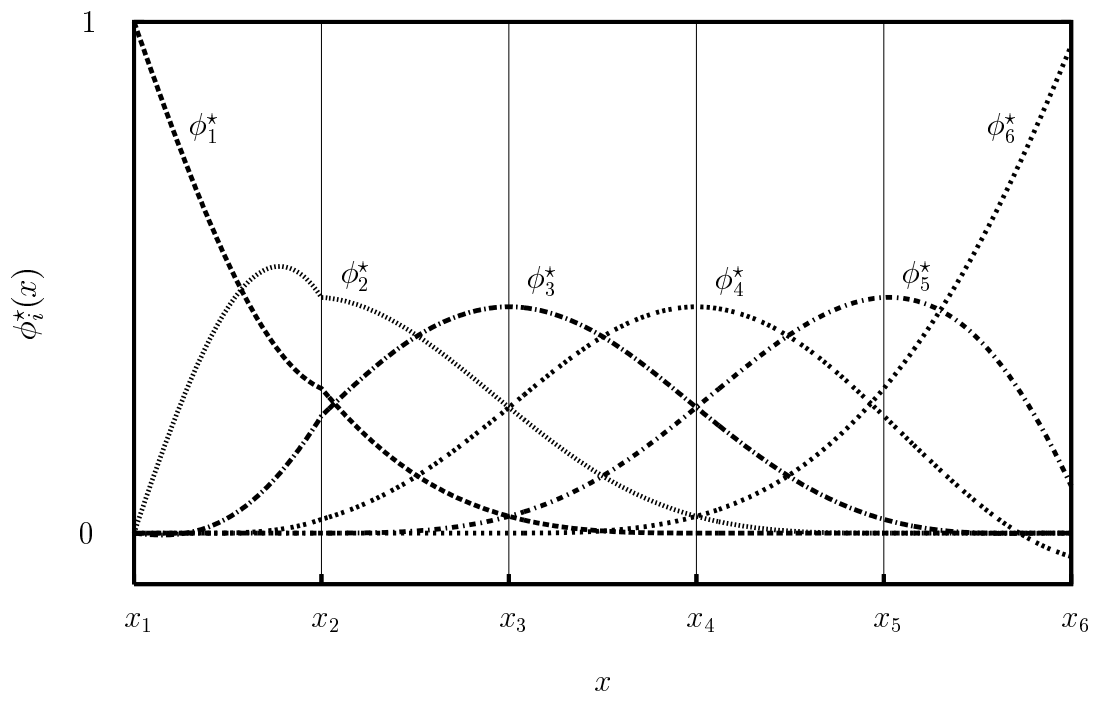
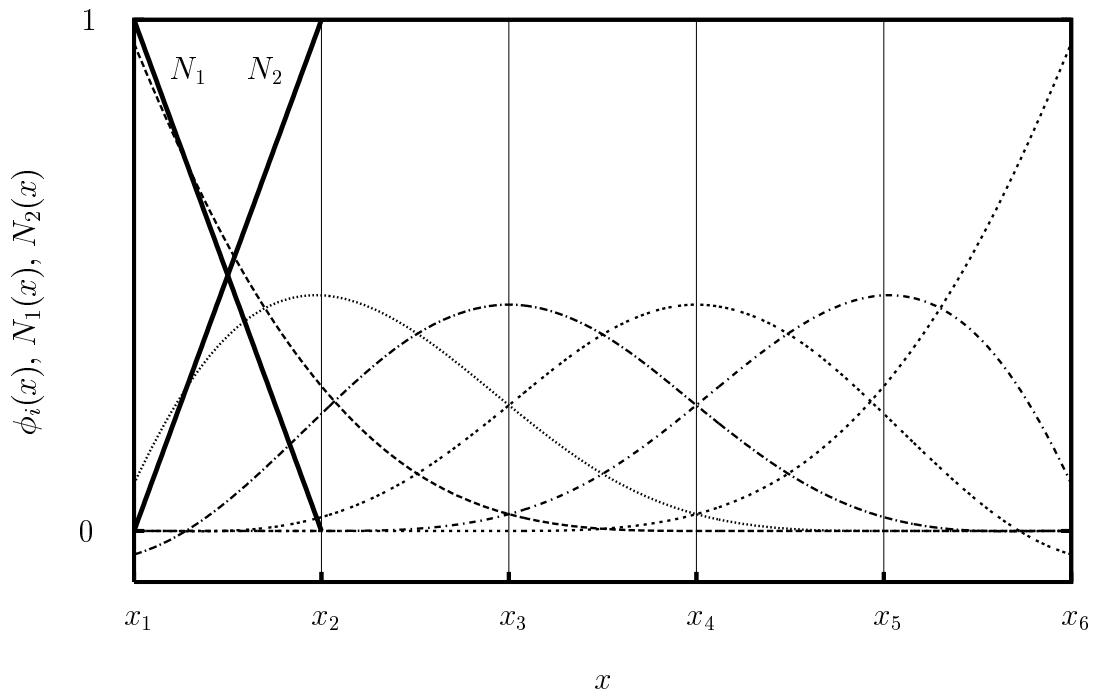


Bild 2.6: a) MLS-Ansatzfunktionen mit linearen FE-Ansatzfunktionen über dem linken Randsegment
 b) Die mittels einer Rampenfunktion modifizierten Ansatzfunktionen besitzen die Kronecker-Delta-Eigenschaft im linken Randknoten und unterscheiden sich nur auf dem linken Randelement von den ursprünglichen MLS-Ansätzen.

eine beliebige lineare Funktion exakt reproduzieren kann. Die zu (2.25) analoge Konsistenzbedingung hat dann die Form

$$\begin{pmatrix} N_1(x) \\ N_1(x)(x_i - x) \end{pmatrix} + \underbrace{\sum_{i=2}^N w_i(x) \begin{pmatrix} 1 & x_i - x \\ x_i - x & (x_i - x)^2 \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}(x)} \begin{pmatrix} a_1^*(x) \\ a_2^*(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

bzw.

$$\mathbf{M}(x) \begin{pmatrix} a_1^*(x) \\ a_2^*(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - N_1(x) \\ N_1(x)(x - x_i) \end{pmatrix}. \quad (2.59)$$

Die gesuchten Ansatzfunktionen ϕ_i^* werden also auf gleichem Wege wie die üblichen MLS-Ansatzfunktionen (Kapitel 2.1.2) ermittelt. Modifiziert wird ausschließlich die rechte Seite des Gleichungssystems (2.25) bei unveränderter Momentenmatrix \mathbf{M} .

Wie bereits in Kapitel 2.2 diskutiert, gelingt die Berechnung der Ansatzfunktionen im betrachteten Fall nur dann, wenn in jedem Punkt x des Grundgebietes mindestens zwei Stützstellen der MLS-Diskretisierung aktiv sind. Der Beitrag des linken Randknotens x_1 zur Berechnung der MLS-Funktion und insbesondere zur Assemblierung der Momentenmatrix entfällt nun verfahrensbedingt, da der linken Stützstelle nur eine FE-Ansatzfunktion zugeordnet wird. Die Bestimmung der Größe der Einflussbereiche gemäß (2.46) führt nicht mehr zu einer hinreichenden Überdeckung des linken Randintervalls, weil dann nur eine Stützstelle x_2 in diesem Intervall aktiv ist. Eine hinreichende Überdeckung kann wiederhergestellt werden, indem der Einflussbereich der Stützstelle x_3 mit dem geringsten Abstand zum Randintervall verdoppelt wird.

Bild 2.7 zeigt die aus der modifizierten Konsistenzbedingung (2.59) resultierenden Ansatzfunktionen, die nach Verwendung angepasster Einflussbereiche

$$r_i^{\min} = \begin{cases} x_3 - x_1 & \text{für } i = 3 \\ x_i - x_{i-1} & \text{für } i = 2, 4, 5, 6 \end{cases} \quad (2.60)$$

berechnet wurden. Die beschriebene Notwendigkeit der Vergrößerung der Einflussbereiche im Vergleich mit den ursprünglichen MLS-Ansatzfunktionen führt zu veränderten Ansatzfunktionen auch außerhalb des Randintervalls.

In zwei Dimensionen tritt an die Stelle von (2.59) das zu (2.28) analoge Gleichungssystem

$$\mathbf{M}(x, y) \begin{pmatrix} a_1^*(x, y) \\ a_2^*(x, y) \\ a_3^*(x, y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \sum_{j=1}^{NR} N_j(x, y) \begin{pmatrix} 1 \\ (x_j - x) \\ (y_j - y) \end{pmatrix}. \quad (2.61)$$

Die Rolle des Intervalls $[x_1, x_2]$ des eindimensionalen Beispiels übernehmen wiederum Randelemente (-dreiecke). Innerhalb eines Randdreiecks werden auf dem Gebietsrand liegenden Knoten lineare FE-Ansatzfunktionen $N_j(x, y)$, $j = 1, \dots, NR$ zugewiesen. NR gibt also die Anzahl der Randknoten eines Dreiecks an.

Die direkte Wirkung dieses Verfahrens beschränkt sich ebenfalls auf die randnahe Zone, die die Größe eines Elements besitzt. Der Einsatz des Verfahrens erfordert jedoch neue Überlegungen bezüglich der Größe der Einflussbereiche, da sich der in Tabelle 4 angegebene Algorithmus zur Bestimmung einer hinreichenden Überdeckung nicht für Randdreiecke

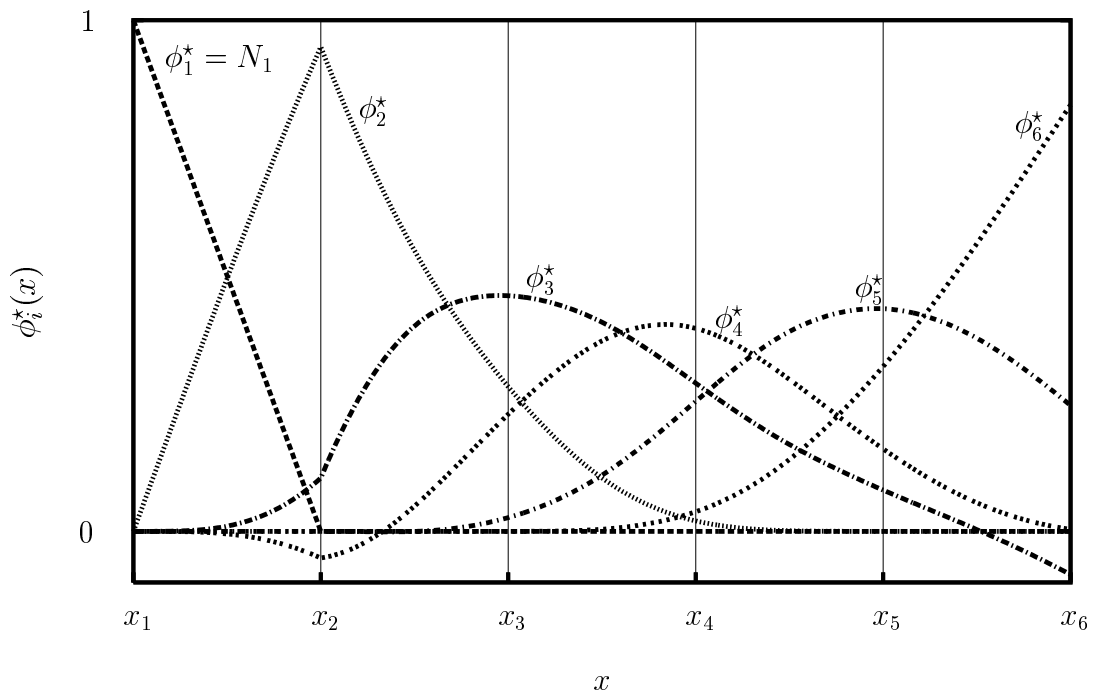


Bild 2.7: Nach der Auswertung einer modifizierten Konsistenzbedingung gewonnene Ansatzfunktionen, $c_r = 3$

eignet. Eine Anpassung der Größe der Einflussbereiche „von Hand“ analog zu (2.60) ist bei unregelmäßig verteilten Stützstellen in einem zweidimensionalen Grundgebiet nicht ohne weiteres möglich, so dass die in Kapitel 2.2 beschriebenen Probleme der Überdeckungsbestimmung wieder bedeutsam werden. Die in Kapitel 4 verwendeten Programme mit der Implementierung dieses Verfahrens enthalten als Ergänzung der in Tabelle 4 angegebenen Technik zur Bestimmung einer hinreichenden Überdeckung eine Variante des in Tabelle 3 zusammengefassten Algorithmus. Die im Rahmen dieses Algorithmus benötigte Suche nächster Stützstellen wird unter Verwendung der in Kapitel 2.2 bereits erwähnten ANN-Bibliothek durchgeführt.

Von nun an verzichten wir auf die Unterscheidung zwischen den modifizierten und ursprünglichen Funktionen ϕ^* und ϕ und bezeichnen nachfolgend die Ansatzfunktionen einheitlich mit ϕ .

2.4 Das globale System linearer Gleichungen

2.4.1 Grundgleichungen der linearen Elastostatik

Ein linear-elastischer Körper nehme im Raum das zusammenhängende Gebiet Ω ein. Auf komplementären Teilen $\partial\Omega_t$ und $\partial\Omega_u$ seiner regulären Oberfläche mit dem Normalenvektor \mathbf{n} seien flächenhaft verteilte Kräfte \mathbf{t} bzw. Verschiebungen $\bar{\mathbf{u}}$ vorgegeben. Im Innern

werde der Körper durch gegebene volumenhaft verteilte Kräfte \mathbf{b} belastet. Das gemischte Randwertproblem der Elastostatik besteht dann in der Bestimmung der Verschiebungen \mathbf{u} , der Verzerrungen $\boldsymbol{\varepsilon}$ sowie der symmetrischen Cauchy-Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ als Funktion der Ortskoordinaten. Die Unbekannten müssen dabei den folgenden Grundgleichungen genügen (vgl. z.B. Gurtin, 1972):

Verzerrungs-Verschiebungs-Beziehung	$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$	in Ω	
Elastizitätsgesetz	$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}$	in Ω	
Gleichgewichtsbedingungen	$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = 0$	in Ω	(2.62)
kinematische Randbedingungen	$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$	auf $\partial\Omega_u$	
statische Randbedingungen	$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = \mathbf{t}$	auf $\partial\Omega_t$	

Der symmetrische und positiv definite Elastizitätstensor \mathbf{C} ,

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}^T, \quad \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon} > 0 \quad \text{für alle } \boldsymbol{\varepsilon} \neq \mathbf{0}, \quad (2.63)$$

kann (bei inhomogenen Körpern) von den Ortskoordinaten abhängig sein. Aus der Symmetrieannahme folgt die Existenz einer Verzerrungsenergiedichte, so dass der Randwertaufgabe (2.62) die potentielle Energie

$$\Pi(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon} \, dV - \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{b} \, dV - \int_{\partial\Omega_t} \mathbf{u} \cdot \mathbf{t} \, dA \quad (2.64)$$

zugeordnet werden kann. Sie ermöglicht eine für numerische Zwecke vorteilhafte Formulierung des Randwertproblems (2.62) über das Prinzip vom Minimum der potentiellen Energie, aus dem das Verschwinden der ersten Variation für alle kinematisch zulässigen Verschiebungsfelder folgt. Man erhält damit als schwache Form der Feldgleichungen die Variationsformulierung

$$\delta \Pi(\mathbf{u}) = 0 \quad \text{für alle } \mathbf{u} \quad \text{mit} \quad \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{auf} \quad \partial\Omega_u. \quad (2.65)$$

Die symmetrischen Tensoren zweiter Stufe $\boldsymbol{\varepsilon}$ und $\boldsymbol{\sigma}$ lassen sich auch als Vektoren und der symmetrische Tensor vierter Stufe \mathbf{C} als Matrix interpretieren, wovon wir im Folgenden Gebrauch machen. Für *isotropes* Material im *ebenen Spannungszustand* erhalten wir damit das Elastizitätsgesetz in der häufig benutzten Form

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{E}{1-\nu^2} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{pmatrix}}_{\mathbf{C}} \underbrace{\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{\varepsilon}}, \quad (2.66)$$

während die Elastizitätsmatrix für den *ebenen Verzerrungszustand* durch

$$\mathbf{C} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{pmatrix} 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} \end{pmatrix} \quad (2.67)$$

zu ersetzen ist.

2.4.2 Die diskretisierten Grundgleichungen der linearen Elastostatik

Wir beschränken uns auf die Betrachtung der diskretisierten Grundgleichungen der ebenen Elastostatik, da die erforderlichen Modifikationen für eindimensionale Randwertprobleme offensichtlich sind. Die Forderung nach Stationarität

$$\frac{\partial \Pi(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}_i} = \mathbf{0}, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.68)$$

der durch den MLS-Ansatz

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \phi_i(\mathbf{x}) \mathbf{q}_i \quad (2.69)$$

diskretisierten potenziellen Energie (2.64) liefert das von der Finite-Elemente-Methode bekannte lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{K} \mathbf{q} = \mathbf{f}, \quad (2.70)$$

dessen Lösung $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)^T$ mit (2.69) den approximierten Gleichgewichtszustand festlegt. Der Vektor $\mathbf{q}_i = (q_{ix}, q_{iy})^T$, $i = 1, \dots, N$ fasst die dem i -ten Knoten zugewiesenen Freiheitsgrade zur Beschreibung zweidimensionaler Verschiebungsfelder zusammen. Die 2×2 -Blockmatrizen der Steifigkeitsmatrix

$$\mathbf{K}_{ij} = \int_{\Omega} \mathbf{B}_i^T \mathbf{C} \mathbf{B}_j dV, \quad i, j = 1, \dots, N \quad (2.71)$$

mit der Verschiebungs-Verzerrungs-Matrix

$$\mathbf{B}_i = \begin{pmatrix} \phi_{i,x}(\mathbf{x}) & 0 \\ 0 & \phi_{i,y}(\mathbf{x}) \\ \phi_{i,y}(\mathbf{x}) & \phi_{i,x}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.72)$$

und die Komponenten des Lastvektors

$$\mathbf{f}_i = \int_{\Omega} \phi_i(\mathbf{x}) \mathbf{b} dV + \int_{\partial\Omega_t} \phi_i(\mathbf{x}) \mathbf{t} dA, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.73)$$

lassen sich in der von der Finite-Elemente-Methode gewohnten Form schreiben. Sind die Ansatzfunktionen $\phi_i(\mathbf{x})$ in (2.73) durch die Anwendung einer der beiden in Kapiteln 2.3.1 und 2.3.2 erörterten Techniken auf dem Gebietsrand $\partial\Omega_u$ modifiziert worden, so können kinematische Randbedingungen analog zur Finite-Elemente-Methode durch „Streichen“ entsprechender Zeilen und Spalten des Gleichungssystem mit dem modifizierten Lastvektor

$$\mathbf{f}_i = \int_{\Omega} \phi_i(\mathbf{x}) \mathbf{b} dV + \int_{\partial\Omega_t} \phi_i(\mathbf{x}) \mathbf{t} dA - \int_{\Omega} \mathbf{B}_i^T \mathbf{C} \mathbf{B}_j \bar{\mathbf{u}}_j dV, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.74)$$

eingearbeitet werden. $\bar{\mathbf{u}}_j = (\bar{u}_j, \bar{v}_j)^T$ sind die am j -ten Randknoten bekannten Verschiebungen.

Handelt es sich bei $\phi_i(\mathbf{x})$ um unveränderte MLS-Ansatzfunktionen, so können kinematische Randbedingungen mit Hilfe der Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren berücksichtigt werden. Anstelle von (2.65) wird dann die Stationarität der Lagrange-Funktion

$$L(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = \Pi(\mathbf{u}) + \int_{\partial\Omega_u} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x})) dA \quad (2.75)$$

gefordert. Für die Diskretisierung der Lagrangeschen Multiplikatoren

$$\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M N_i(\mathbf{x}) \boldsymbol{\lambda}_i, \quad (2.76)$$

die sich als unbekannte Spannungsvektoren auf dem Gebietsrand $\partial\Omega_u$ mit vorgegebenen Verschiebungen deuten lassen, können die für das gesuchte Verschiebungsfeld verwendeten Ansatzfunktionen benutzt werden. In der Praxis sind jedoch unabhängig von den MLS-Ansätzen gewählte Funktionen üblich. Zu den am häufigsten verwendeten zählt die den Randknoten zugeordnete Dirac-Delta-Funktion (vgl. Fernández-Méndez und Huerta, 2004). Diese Wahl führt dazu, dass die Randbedingungen nur in den Randknoten, jedoch nicht zwischen diesen erfüllt werden. Zum Vergleich der in den Kapiteln 2.3.1 und 2.3.2 besprochenen vernetzungsabhängigen Techniken mit der Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren verwenden wir zwischen den Randknoten stückweise linear interpolierende Funktionen. Damit werden die Randbedingungen entlang des gesamten Randes mit bekannter Kinematik im schwachen Sinne erfüllt.

Dabei folgt aus der Stationaritätsbedingung für die Lagrange-Funktion (2.75)

$$\frac{\partial L(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda})}{\partial \mathbf{q}_i} = \mathbf{0}, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.77)$$

und

$$\frac{\partial L(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda})}{\partial \boldsymbol{\lambda}_j} = \mathbf{0}, \quad j = 1, \dots, M \quad (2.78)$$

das Sattelpunktproblem

$$\begin{pmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^T & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{pmatrix} \quad (2.79)$$

mit den oben präzisierten Feldern \mathbf{K} , \mathbf{q} , \mathbf{f} und neuen Einträgen $\boldsymbol{\lambda} = (\boldsymbol{\lambda}_1, \dots, \boldsymbol{\lambda}_M)$, $\boldsymbol{\lambda}_i = (\lambda_{ix}, \lambda_{iy})^T$, $i = 1, \dots, M$,

$$\mathbf{G}_{ij} = \int_{\partial\Omega_u} \begin{pmatrix} \phi_i(\mathbf{x})N_j(\mathbf{x}) & 0 \\ 0 & \phi_i(\mathbf{x})N_j(\mathbf{x}) \end{pmatrix} dA, \quad i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, M \quad (2.80)$$

und

$$\mathbf{g}_i = \int_{\partial\Omega_u} \begin{pmatrix} N_i(\mathbf{x})\bar{u}_i(\mathbf{x}) \\ N_i(\mathbf{x})\bar{v}_i(\mathbf{x}) \end{pmatrix} dA, \quad i = 1, \dots, M. \quad (2.81)$$

Die Assemblierung der linearen Gleichungssysteme (2.69) bzw. (2.79) schließt die Auswertung der oben angegebenen Gebietsintegrale ein. Im Rahmen der Finite-Elemente-Methode werden diese elementweise meist durch Anwenden der Gauß-Quadratur effizient und mit hoher Genauigkeit oder sogar exakt bestimmt.

2.4.3 Berechnung der Gebietsintegrale

Der Einsatz der MLS-Ansatzfunktionen erfordert ebenfalls eine numerische Berechnung der Integralausdrücke. Die Frage nach einem hierfür geeigneten Quadraturverfahren lässt eine vergleichbar natürliche Antwort wie bei der Finite-Elemente-Methode nicht zu.

Die Konstruktionsvorschrift für die MLS-Approximation, die ausschließlich die Koordinaten der Stützstellen berücksichtigt, jedoch keine explizite Knotenkonnektivität in Form von Netzen benötigt, legt zunächst nahe, die numerische Integration ebenfalls basierend auf den Knotenkoordinaten durchzuführen. Die resultierende Berechnungsvorschrift

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{x}) dV \approx \sum_{i=1}^N f(\mathbf{x}_i) W_i \quad (2.82)$$

mit den Knotenkoordinaten \mathbf{x}_i und Integrationsgewichten W_i lässt eine äußerst schnelle Bestimmung des gesuchten Näherungswertes zu. Die den einzelnen Knoten zugeordneten Integrationsgewichte können dabei in verschiedener Weise eingeführt werden (vgl. z.B. Beissel und Belytschko, 1996). Derartige Integrationstechniken werden in der Literatur häufig als *direkte Integration* bezeichnet. Die geringe Genauigkeit der direkten Integration reduziert im Allgemeinen die Robustheit der auf der schwachen Formulierung basierenden Diskretisierungstechniken, wodurch diese das für Kollokationsverfahren typische numerisch instabile Verhalten aufweisen (Fries und Matties, 2004). Belytschko et al. (1998) geben an, dass auch die durch Stabilisierungstechniken erweiterte direkte Integration weniger genaue Ergebnisse liefert als *netzbasierende Integrationsverfahren*. Die später von Chen et al. (2001) vorgeschlagene Methode zur direkten Integration stellt sicher, dass der Patchtest numerisch genau erfüllt wird. Bei allgemeiner Belastung und insbesondere dann, wenn der Gradient der zu approximierenden Lösung unstetig ist, kann diese Integrationstechnik zu dramatischen Fehlern führen. Wir verzichten hier sowohl auf eine Beschreibung dieser Integrationstechnik als auch auf eine Diskussion der Ursache für ihr unbefriedigendes Verhalten. Diesbezügliche Informationen liefert Unger (2003).

Es existieren zwei Arten netzbasierter Integrationsverfahren. Eine Möglichkeit besteht darin, ein einfaches Netz bzw. Gitter unabhängig von der Stützstellenverteilung zu erzeugen, das das Grundgebiet vollständig überdeckt, jedoch nicht mit den Gebietsgrenzen konform sein muss (vgl. z.B. Belytschko et al., 1994). Die Integration erfolgt dann durch das Anwenden einer Quadraturformel in den einzelnen Gitterzellen. Bei unregelmäßiger Stützstellenverteilung können in solchen Zellen, die in Bereichen höherer Stützstellendichte angeordnet sind, durch weitere Unterteilung neue Zellen erzeugt bzw. eine höhere Integrationsordnung gewählt werden.

Bei der zweiten Variante wird ein Netz basierend auf der gegebenen Knotenverteilung generiert. Die Konstruktion eines solchen Netzes ist zwar aufwändiger als im zuvor beschriebenen Fall, besitzt jedoch den Vorteil, dass die Größe der Integrationszellen lokal an

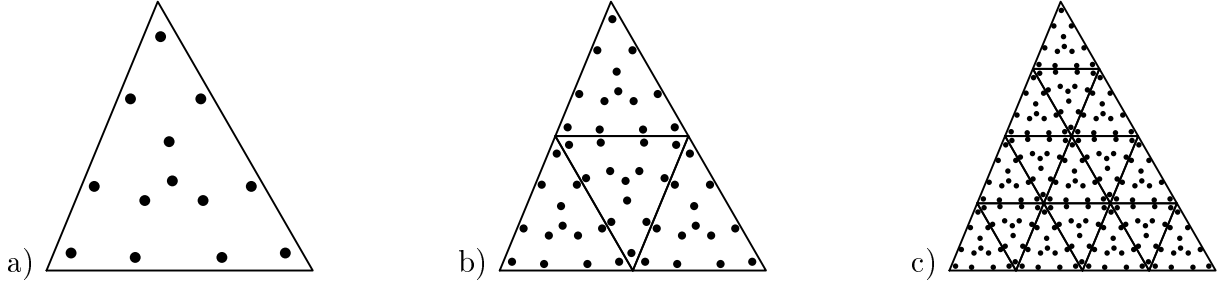


Bild 2.8: Ein Integrationsdreieck der ursprünglichen Triangulation a), Unterteilung der Integrationszellen durch einen Verfeinerungsschritt b) und zwei Verfeinerungsschritte c), 13 Integrationsstützstellen je Dreieck

die Stützstellendichte angepasst wird. In beiden Fällen ist der Einsatz der Gauß-Quadratur innerhalb einzelner Zellen am stärksten verbreitet.

In der vorliegenden Arbeit machen wir von der zuletzt beschriebenen Variante Gebrauch und nutzen die bereits in Kapitel 2.2 verwendete Triangulation des Knotensatzes. Innerhalb eines Dreiecks sollen Gauß-Quadraturregeln benutzt werden.

Der Einsatz der Gauß-Quadratur im Rahmen einer MLS-Diskretisierung kann nur dann hinreichend genaue Ergebnisse liefern, wenn für die Auswertung der Integralausdrücke, insbesondere bei der Assemblierung der Steifigkeitsmatrix (2.71), vergleichsweise viele Integrationsstützstellen (Gauß-Punkte) benutzt werden (Belytschko et al., 1994). Neben der Verwendung von Quadraturformeln höherer Ordnung (bis zu 13 Stützstellen je Dreieck) wird in der aktuellen Implementierung eine Möglichkeit vorgesehen, die Integrationsgenauigkeit beliebig zu steigern, indem ursprüngliche Dreiecke der Knotentriangulation in kleinere Integrationszellen unterteilt werden. Dabei entstehen aus einem Dreieck durch das Verbinden der Seitenmittelpunkte je Schritt vier neue Dreiecke (Bild 2.8). Im Folgenden soll unter dem Begriff Dreieck stets ein Dreieck der ursprünglichen Triangulation des Knotensatzes verstanden werden, während die durch eventuelle Verfeinerungsschritte erzeugten Dreiecke als Integrationszellen bezeichnet werden. Führt man N_Q solcher Verfeinerungsschritte aus und benutzt n_G Gauß-Punkte in jeder Integrationszelle, so beträgt die Anzahl der Integrationsstützstellen innerhalb eines Dreiecks

$$N_G = 4^{N_Q} n_G,$$

so dass im Grundgebiet insgesamt $N_T N_G$ Gauß-Punkte platziert werden, wenn die Knotentriangulation N_T Dreiecke enthält.

Ausgehend von dieser Integrationstechnik kann der Ausdruck für die approximierten Koeffizienten der Steifigkeitsmatrix (2.71) in der Form

$$\mathbf{K}_{ij} \approx \sum_{k=1}^{N_T} \sum_{l=1}^{N_G} \mathbf{B}_i^T(\mathbf{y}_l) \mathbf{C} \mathbf{B}_j(\mathbf{y}_l) W_l, \quad i, j = 1, \dots, N \quad (2.83)$$

geschrieben werden. Hierin ist \mathbf{y}_l der Ortsvektor des l -ten Gauß-Punktes im k -ten Dreieck und W_l das zugeordnete Integrationsgewicht. Tabellarisch zusammengestellte Koordinaten

der Gauß-Punkte und zugehörige Gewichte für dreiecksgestützte Quadraturregeln gibt beispielsweise Bathe (1986) an⁵.

Die Assemblierung der Steifigkeitsmatrix gemäß (2.71) erfordert also $N_T N_G$ Funktionsauswertungen, wobei diese Anzahl im Allgemeinen sehr groß ist. Die in Tabelle 1 beschriebene Routine zur Berechnung der MLS-Ansatzfunktionen und ihrer Ableitungen macht klar, dass sogar die Bestimmung der Funktions- und Ableitungswerte in einem Punkt mit einem erheblich größeren numerischen Aufwand verbunden ist als bei einer vergleichbaren Finite-Elemente-Berechnung. Es ist somit zu erwarten, dass die Assemblierung der Steifigkeitsmatrix bei Verwendung von MLS-Ansatzfunktionen einen beträchtlichen Teil der gesamten Programmlaufzeit bilden wird.

Neben der Einfachheit der Ansatzfunktionen besitzt die Finite-Elemente-Methode aus Sicht der numerischen Effizienz den Vorteil, dass die in einem Gauß-Punkt nicht verschwindenden Ansatzfunktionen von vornherein bekannt sind. Folglich müssen ausschließlich die den Knoten eines Elementes zugeordneten Koeffizienten (2.83) der Steifigkeitsmatrix aktualisiert werden, wenn der aktuelle Gauß-Punkt innerhalb dieses Elementes liegt.

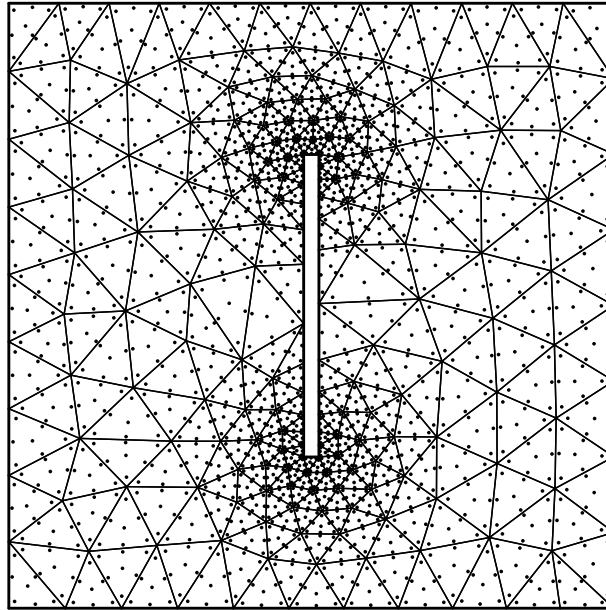
Bei Verwendung von MLS-Ansatzfunktionen ist die Situation deutlich unübersichtlicher. In Bild 2.9a ist eine mögliche Verteilung von Gauß-Punkten in einem Grundgebiet gezeigt. Bild 2.9b veranschaulicht eine hinreichende Überdeckung dieses Grundgebietes. Soll nun in irgendeinem Gauß-Punkt die Auswertung (2.83) durchgeführt werden, so ist die Bestimmung aller Knoten, die in diesem Gauß-Punkt aktiv sind, offensichtlich komplex. Damit lässt auch die Frage, welche Koeffizienten der Steifigkeitsmatrix durch den Beitrag der aktuellen Integrationsstützstelle zu aktualisieren sind, keine einfache Antwort zu. Die naheliegende Idee, alle Koeffizienten der Steifigkeitsmatrix in jedem Gauß-Punkt zu bestimmen, lässt sich zwar leicht realisieren, die Berechnung erfordert jedoch einen sehr hohen Zeitaufwand, da die Aktualisierung der Steifigkeitsmatrix $N_T N_G N^2$ -mal durchgeführt wird. Insbesondere bei Problemen mit einer großen Knotenzahl N beansprucht dieser Aufbau extrem viel Rechenzeit.

Deshalb werden die Koeffizienten \mathbf{K}_{ij} nur dann tatsächlich aktualisiert, wenn sowohl der i -te als auch der j -te Knoten im aktuellen Gauß-Punkt \mathbf{y}_l aktiv sind, also wenn $\mathbf{y}_l \in \omega_i \wedge \mathbf{y}_l \in \omega_j$ gilt. Auf Grund der geforderten Lokalität der Ansatzfunktionen ist aber die Anzahl der sich gegenseitig überlappenden Einflussbereiche ω recht gering. Für die Mehrzahl gilt $\omega_i \cap \omega_j = \emptyset$, woraus $\mathbf{K}_{ij} = \mathbf{0}$ und damit eine dünn besetzte Steifigkeitsmatrix folgt. Es ist demnach ausreichend, die Koeffizienten \mathbf{K}_{ij} nur dann auszuwerten, wenn bei Verwendung radialer Einflussbereiche die Bedingungen $|\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_l| < r_i$ und $|\mathbf{x}_j - \mathbf{y}_l| < r_j$ erfüllt sind.

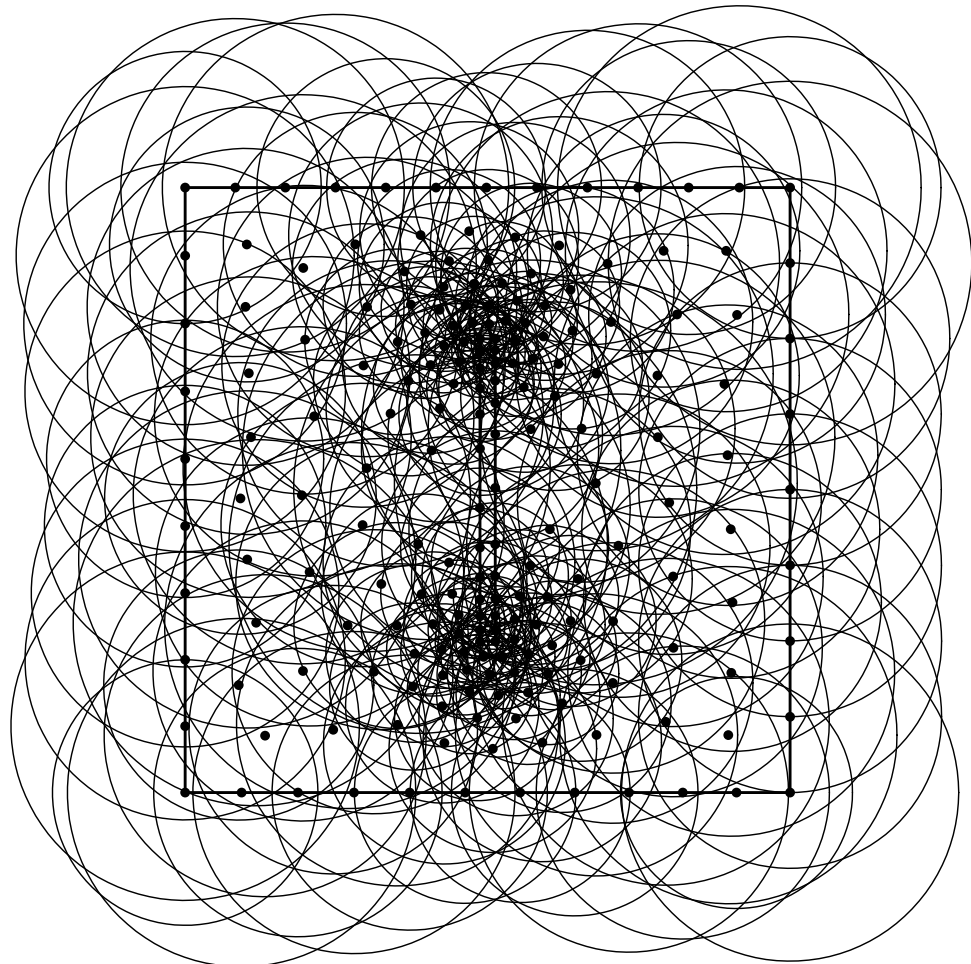
Tabelle 5 zeigt den Aufbau einer einfachen Routine zur Assemblierung der Steifigkeitsmatrix.

Der für die Assemblierung benötigte Zeitaufwand lässt sich offenbar weiter reduzieren, wenn die Schleifen $i = 1, \dots, N$ und $j = 1, \dots, N$ durch solche ersetzt werden, bei denen ausschließlich die im aktuellen Gauß-Punkt \mathbf{y}_l aktiven Knoten durchlaufen werden. Wird bei der Bestimmung der Ansatzfunktionen und ihrer Ableitungen bereits ein Algorithmus zur schnellen Suche nach aktiven Knoten verwendet (vgl. Kapitel 2.1.5), so können die Indices dieser Knoten übergeben werden und die Schleifen über alle Knoten ablösen. Wir

⁵Zu Quadraturregeln vgl. auch Taylor et al. (2007) und die dort angegebene Literatur.



a)



b)

Bild 2.9: Diskretisierung eines Grundgebietes durch $N = 200$ Knoten. a) Verteilung der Gauß-Punkte für $N_T = 334$, $N_Q = 0$, $n_G = 7$, b) eine hinreichende Überdeckung für $c_r = 2$

Tabelle 5: Pseudocode: Eine Routine zur Assemblierung der Steifigkeitsmatrix

Sei N die Anzahl der Knoten, N_T die Anzahl der Dreiecke der Knotentriangulation, N_G die Anzahl der Gauß-Punkte innerhalb eines Dreiecks.

1. Initialisiere die Steifigkeitsmatrix: $\mathbf{K} = \mathbf{0}$.
2. Für $k = 1, \dots, N_T$
Bestimme die Koordinaten der Gauß-Punkte $\mathbf{y}(1, \dots, N_G)$ und die zugehörigen Integrationsgewichte $W(1, \dots, N_G)$ für das k -te Dreieck.
 - Für $l = 1, \dots, N_G$
Berechne die Ableitungen der MLS-Ansatzfunktionen $\phi_{,x}(1, \dots, N)$, $\phi_{,y}(1, \dots, N)$ im aktuellen Gauß-Punkt gemäß Tabelle 1.
 - Für $i = 1, \dots, N$
falls $|\mathbf{x}(i) - \mathbf{y}(l)| < r(i)$
 - Für $j = 1, \dots, N$
falls $|\mathbf{x}(j) - \mathbf{y}(l)| < r(j)$

Setze $\mathbf{K}(i,j) = \mathbf{K}(i,j) + \mathbf{B}^T(i) \mathbf{C} \mathbf{B}(j) W(l)$, \mathbf{B} gemäß (2.72).

verfolgen in dieser Arbeit eine andere Strategie, wobei der oben angesprochene Grund für die Effizienz der Finite-Elemente-Methode als Ausgangspunkt für die folgenden Überlegungen dient.

Vergleichbar mit dem Aufbau entsprechender FE-Routinen werden in der äußeren Schleife des Unterprogramms in Tabelle 5 alle Dreiecke der Knotentriangulation durchlaufen. Bei der Finite-Elemente-Methode sind innerhalb einer Integrationszelle (eines Elementes) nur die Knoten des jeweiligen Elementes aktiv, die einer Konnektivitätstabelle entnommen werden können. Werden MLS-Ansatzfunktionen verwendet, dann können in einer Integrationszelle neben den Eckknoten auch andere, je nach Größe der Einflussbereiche weiter entfernte Knoten, aktiv sein.

Die Idee besteht nun darin, bereits nach der Bestimmung einer hinreichenden Überdeckung für jedes Dreieck solche Knoten zu ermitteln, deren Einflussbereiche das jeweilige Dreieck zumindest teilweise überdecken, und diese, einer Konnektivitätstabelle der Finite-Elemente-Methode entsprechende Information, in einer möglichst kompakten Konnektivitätsliste für die restlichen Programmteile verfügbar zu machen. Liegt eine solche Konnektivitätsliste vor, sind also alle innerhalb eines beliebigen Dreiecks aktiven Knoten bekannt, dann kann die Assemblierung der Steifigkeitsmatrix in Analogie zur Finite-Elemente-Methode durchgeführt werden. Eine nennenswerte Effizienzsteigerung ist allerdings nur dann zu erwarten, wenn die aktiven Knoten für jedes einzelne Dreieck schnell gefunden werden können. Wir stellen in Kapitel 2.4.4 einen Algorithmus vor, der diese Aufgabe übernimmt.

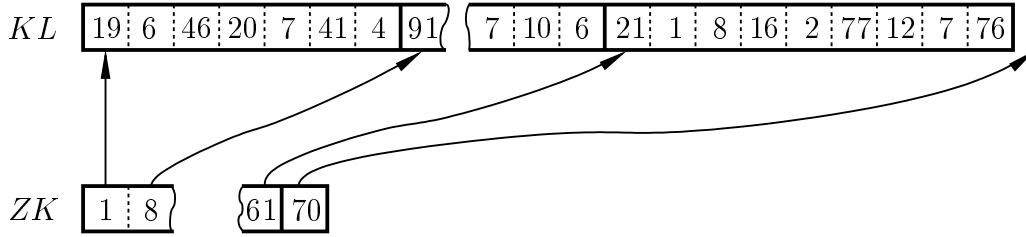


Bild 2.10: Speichertechnik für die Konnektivitätsliste KL . Der Zeiger ZK auf die Konnektivitätsliste ermöglicht die Adressierung der in einem Dreieck aktiven Knoten. Für die hier willkürlich gewählten Einträge der Konnektivitätsliste sind z. B. die Knoten mit den Indices 19, 6, 46, 20, 7, 41 und 4 innerhalb des ersten Dreiecks aktiv.

Die Speicherung der Konnektivitätsdaten erfolgt nach dem in Bild 2.10 skizzierten Prinzip. Die Datenstruktur besteht aus zwei eindimensionalen Feldern. Die mit KL abgekürzte Konnektivitätsliste enthält fortlaufend angeordnete Indices der innerhalb einzelner Dreiecke aktiven Knoten. Die Indices sind blockweise abgelegt, wobei einzelne Blöcke die für das jeweilige Dreieck relevanten Knotenindices zusammenfassen. Die Einträge des zweiten Feldes ZK (Zeiger auf die Konnektivitätsliste) legen den Beginn der einzelnen Blöcke fest. So gibt $ZK(1)$ die Position des Index an für den ersten innerhalb des ersten Dreiecks aktiven Knoten. $ZK(2)$ adressiert den Index des ersten im zweiten Dreieck aktiven Knotens. Damit befindet sich der Index des letzten innerhalb des ersten Dreiecks aktiven Knotens an der Position $ZK(2) - 1$. Allgemein erhalten wir mit

$$KL(ZK(i), \dots, ZK(i+1) - 1)$$

die Indices aller Knoten, die im i -ten Dreieck aktiv sind. Entsprechende Formate werden häufig für die kompakte Speicherung von dünn besetzten Matrizen verwendet.

Wir sind damit in der Lage, durch geringfügige Anpassungen des Pseudocodes in Tabelle 5 ein effizienteres Unterprogramm zur Assemblierung der Steifigkeitsmatrix zu generieren (Tabelle 6). An dieser Stelle sollte angemerkt werden, dass die vorgestellte Strategie dem am Anfang dieses Unterkapitels gestellten Anspruch, bei der Assemblierung der Steifigkeitsmatrix ausschließlich solche Knotenpaare $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$ zu berücksichtigen, für die $\omega_i \cap \omega_j \neq \emptyset$ gilt, nicht gerecht wird. Die Schnittmenge der Einflussbereiche zweier Knoten, die dasselbe Dreieck überdecken, kann leer sein. Die Anzahl solcher Knotenpaare wird zwar relativ gering sein, die Überprüfung der Bedingungen $|\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_l| < r_i$ und $|\mathbf{x}_j - \mathbf{y}_l| < r_j$ hat dadurch aber auch innerhalb des modifizierten Pseudocodes (Tabelle 6) ihre Berechtigung.

Eine weitere Reduzierung der benötigten Rechenzeit wird erreicht, wenn die Konnektivitätsdaten auch bei der Auswertung der MLS-Ansatzfunktionen und ihrer Ableitungen (Kapitel 2.1.5) verwendet werden. Die dazu notwendigen Anpassungen des Pseudocodes in Tabelle 1 beschränken sich dabei darauf, zusätzlich zu dem Punkt \mathbf{x} , in dem die Berechnung durchgeführt werden soll, auch den Index T des diesen Punkt enthaltenden Dreiecks als Eingabeparameter zu übergeben und die Schleifen über alle Knoten unter 2. und 5.

$$i = 1, \dots, N$$

analog zu den Veränderungen in der Tabelle 6 durch

$$i = KL(ZK(T), \dots, ZK(T+1) - 1)$$

Tabelle 6: Pseudocode: Verbesserung des in Tabelle 5 angegebenen Pseudocodes zur Assemblierung der Steifigkeitsmatrix durch die Verwendung der Konnektivitätsliste

Sei N die Anzahl der Knoten, N_T die Anzahl der Dreiecke der Knotentriangulation, N_G die Anzahl der Gauß-Punkte innerhalb eines Dreiecks. KL und ZK enthalten die durch den Einsatz des Algorithmus aus Tabelle 7 ermittelten Konnektivitätsdaten (Bild 2.10).

1. Initialisiere die Steifigkeitsmatrix: $\mathbf{K} = \mathbf{0}$.

2. Für $k = 1, \dots, N_T$

Bestimme die Koordinaten der Gauß-Punkte $\mathbf{y}(1, \dots, N_G)$ und die zugehörigen Integrationsgewichte $W(1, \dots, N_G)$ für das k -te Dreieck.

- Für $l = 1, \dots, N_G$

Berechne die Ableitungen der MLS-Ansatzfunktionen

$\phi_{,x}(1, \dots, N)$, $\phi_{,y}(1, \dots, N)$ im aktuellen Gauß-Punkt gemäß Tabelle 1.

- Für $i = KL(ZK(k), \dots, ZK(k+1) - 1)$

falls $|\mathbf{x}(i) - \mathbf{y}(l)| < r(i)$

- Für $j = KL(ZK(k), \dots, ZK(k+1) - 1)$

falls $|\mathbf{x}(j) - \mathbf{y}(l)| < r(j)$

Setze $\mathbf{K}(i,j) = \mathbf{K}(i,j) + \mathbf{B}^T(i) \mathbf{C} \mathbf{B}(j) W(l)$, \mathbf{B} gemäß (2.72).

zu ersetzen.

Die bisherigen Ausführungen konzentrierten sich auf die Assemblierung der Steifigkeitsmatrix. Zur Vervollständigung des linearen Gleichungssystems sind noch der Lastvektor und für den Fall, dass die wesentlichen Randbedingungen mit Hilfe der Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren berücksichtigt werden, die Felder (2.80) und (2.81) zu berechnen. Der Beitrag der u. U. vorhandenen volumenhaft verteilten Lasten kann leicht innerhalb der Routine zur Assemblierung der Steifigkeitsmatrix bestimmt werden. Die aus den dynamischen Randbedingungen resultierenden Anteile der rechten Seite und die für Lagrangesche Multiplikatoren spezifischen Einträge werden durch das Integrieren über den entsprechenden Gebietsrand in einer separaten Unteroutine berechnet.

In der vorliegenden Arbeit werden Gebietsränder zwischen den Randknoten linear approximiert. Über einzelnen Randsegmenten wird durchgängig die Integration basierend auf der Gauß-Formel mit vier Stützstellen verwendet. Zur Berechnung der Ansatzfunktionen in einem Randpunkt unter Verwendung der ermittelten Konnektivitätsbeziehungen wird der Index des Dreiecks, auf dessen Rand der Punkt platziert ist, benötigt. Diese Information lässt sich ohne weiteres ausgehend von den Indices der Endknoten des aktuellen Randsegmentes bzw. dem Index der entsprechenden Dreieckskante aus den Triangulationsdaten bestimmen. Kommt bei der Auswertung der Volumenintegrale die in Bild 2.8

skizzierte Verfeinerung der Integrationszellen zum Einsatz, dann werden die Randsegmente ebenfalls entsprechend unterteilt.

Fries und Matties (2004) schreiben:

„In MMs the connectivity is determined at run-time for each point at which the shape functions need to be evaluated. This important step can dominate the total CPU time for large point numbers, especially if sequential searches, which are of $O(N)$ complexity, are used for each evaluation point.“

Mit der soeben erläuterten Strategie weichen wir demnach von der für netzfreie Diskretisierungsverfahren (meshless methods, MMs) üblichen Route ab. Wir bestimmen bereits in einem frühen Stadium des Programmfortgangs auf eine vergleichsweise effektive Weise die aktiven Knoten für alle Punkte des Grundgebietes. Die Kompilation des globalen Gleichungssystems, die zahlreiche Berechnungen der Ansatzfunktionen und ihrer Ableitungen einschließt, erfordert damit keine zeitraubenden Zusatzoperationen mehr.

Für die Realisierung dieser Strategie muss die im Allgemeinen recht umfangreiche Konnektivitätsliste für die Dauer der Gesamtrechnung gespeichert werden. Der benötigte Speicherumfang ist jedoch wesentlich geringer als derjenige, der von der Steifigkeitsmatrix (auch bei kompakter Speicherung) beansprucht wird. Wir nehmen den zusätzlichen Speicherbedarf in Kauf zu Gunsten der deutlich verkürzten Rechenzeit.

Es sei nochmals betont, dass die Idee, eine Effizienzsteigerung dadurch zu erzielen, dass die Konnektivitätsinformation schon am Programmstart ermittelt wird, nicht neu ist. Vielmehr ist sie in der Natur der Finite-Elemente-Methode verankert. In der vorliegenden Arbeit wird dieses bewährte Konzept auf die Implementierung eines netzfreien Diskretisierungsverfahrens sinngemäß übertragen.

2.4.4 Bestimmung der Konnektivitätsbeziehungen

Im Sinne besserer Verständlichkeit des Pseudocodes (Tabelle 7) soll zunächst das Grundkonzept besprochen werden.

Der prinzipielle Aufbau lässt sich in wenigen Worten umschreiben: Für jeden Knoten \mathbf{x}_i mit dem zugeordneten Einflussbereich ω_i werden alle teilweise oder vollständig innerhalb des Einflussbereiches liegenden Dreiecke bestimmt, wobei für jedes dieser Dreiecke der Knoten \mathbf{x}_i als aktiv festgehalten wird. Von zentraler Bedeutung ist dabei das Vorgehen bei der Suche nach überdeckten Dreiecken, das nun genauer erläutert werden soll.

Wir greifen einen Knoten \mathbf{x}_i mit dem zugehörigen kreisförmigen⁶ Einflussbereich ω_i heraus (Bild 2.11a). Die Suche beginnt mit einem Dreieck T_0 mit \mathbf{x}_i als Eckknoten, das uns die Datenstruktur der Triangulation liefert. Dieses Dreieck liegt zumindest teilweise innerhalb des Einflussbereiches ω_i , so dass der Knoten \mathbf{x}_i in T_0 aktiv ist. Folglich ordnen wir in der Konnektivitätsliste dem Dreieck T_0 den Knoten \mathbf{x}_i zu.

Zwei Dreiecke sind benachbart, wenn sie eine gemeinsame Kante besitzen. Demnach besitzt T_0 drei benachbarte Dreiecke t_j , wenn es sich um ein inneres Dreieck handelt. Ist T_0 dagegen ein Randdreieck, dann kann es ein oder zwei benachbarte Dreiecke besitzen. Als

⁶Die nachfolgenden Ausführungen beziehen sich auf kreisförmige Einflussbereiche. Die Anwendung des Algorithmus auf rechteckige Einflussbereiche ist ebenfalls möglich.

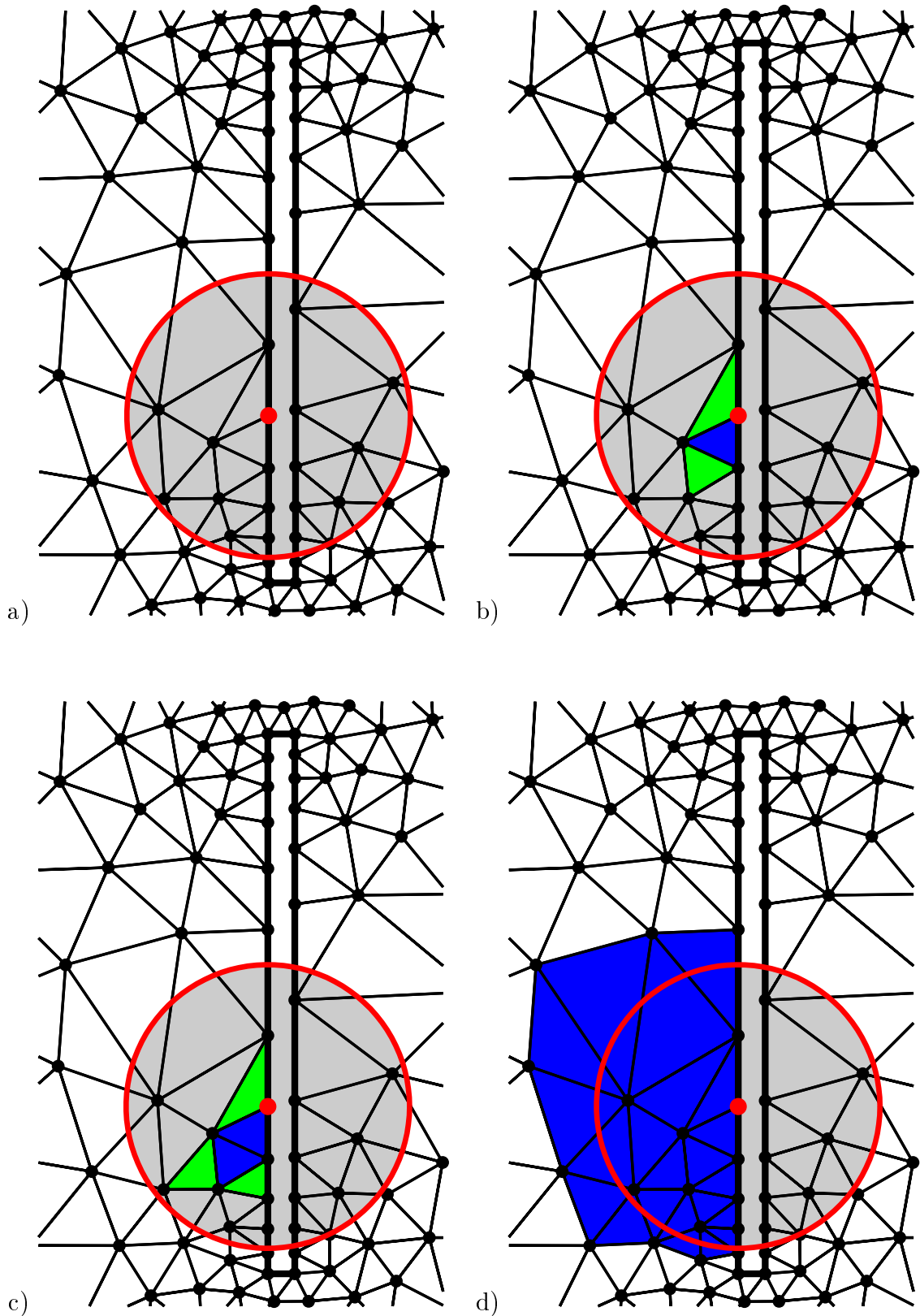


Bild 2.11: Ein Ausschnitt des Grundgebietes aus Bild 2.9 a) Ein ausgewählter Knoten mit dem zugehörigen Einflussbereich, b) und c) innerhalb des Einflussbereiches liegende Dreiecke (blau), und zwecks Überprüfung temporär gespeicherte Dreiecke (grün), d) alle im Einflussbereich des aktuellen Knotens liegenden Dreiecke

Nachbarn eines vom Einflussbereich ω_i überdeckten Dreiecks können t_j ebenfalls von ω_i überdeckt sein. Um dies zu prüfen, speichern wir die Indices dieser Dreiecke in einem ein-dimensionalen Feld *Stack* und halten mit N_{Stack} die Anzahl der gespeicherten Indices fest. In Bild 2.11b ist die Situation illustriert, wobei das blaue Dreieck T_0 bereits als überdeckt klassifiziert wurde. Für ein grünes Dreieck ist noch zu prüfen, ob es vom Einflussbereich ω_i überdeckt wird.

Anschließend berechnen wir für das Dreieck mit dem Index $Stack(N_{Stack})$ den Abstand zwischen dem Knoten \mathbf{x}_i und den Dreieckskanten. Ist der Abstand zu einer der Kanten kleiner als der Radius r_i des Einflussbereiches, wird dieses Dreieck als von ω_i überdeckt klassifiziert, wobei diesem in der Konnektivitätsliste wiederum \mathbf{x}_i zugeordnet wird. Die Indices der benachbarten Dreiecke werden anschließend in *Stack* gespeichert und N_{Stack} erhöht, wie in Bild 2.11c veranschaulicht. Liegt das Dreieck mit dem Index $Stack(N_{Stack})$ dagegen außerhalb des Einflussbereiches, wird die Überprüfung für das nächste Dreieck in *Stack* durchgeführt. Enthält *Stack* keine zu prüfenden Elemente, dann sind alle von ω_i überdeckten Dreiecke bekannt. Schließlich liefert die Anwendung dieser Technik auf alle Knoten die gesuchte Information über die in einem beliebigen Dreieck aktiven Knoten.

Die Speicherung der Knotenindices in dem in Bild 2.10 illustrierten Format kann nicht direkt erfolgen, da die Länge der Konnektivitätsliste nicht von vornherein bekannt ist. Wir verwenden daher zur Laufzeit des Algorithmus ein temporäres Feld $temp(N_T, L)$, in dem die Knotenindices gespeichert und anschließend in das besprochene Format überführt werden. N_T ist die Anzahl der Dreiecke. L muss mindestens der höchsten Anzahl der in einem Dreieck aktiven Knoten gleich sein. In der aktuellen Implementierung wird $L = 1000$ gesetzt. Nach Ablauf des Algorithmus wird der von dem Feld *temp* belegte Speicherplatz wieder freigegeben, so dass der vom Programm anschließend beanspruchte Speicherumfang recht gering gehalten werden kann.

Das in Bild 2.11d gezeigte Ergebnis der Suche macht eine interessante Eigenschaft des verwendeten Algorithmus deutlich. Die inneren Gebietsränder der betrachteten geschlitzten Scheibe begrenzen den Aktionsbereich der Dreieckssuche. Der Einfluss des hervorgehobenen Knotens beschränkt sich damit auf solche Dreiecke, die von diesem Knoten „sichtbar“ sind, was physikalisch sinnvoll zu sein scheint. Die Gültigkeit dieser Eigenschaft ist jedoch auf solche Knoten beschränkt, deren Einflussbereich von dem Gebietsrand vollständig in einen „sichtbaren“ und einen „unsichtbaren“ Teil getrennt wird. Organ et al. (1996) behandeln das Problem der Diskretisierung von nicht konvexen Grundgebieten basierend auf der MLS-Technik ausführlich. Wir beschränken uns auf die Anmerkung, dass die angesprochene Eigenschaft des vorgestellten Suchalgorithmus in diesem Zusammenhang nützlich sein kann.

Als Anregung für die Implementierung dieser Suchtechnik diene der von Sambridge et al. (1995) beschriebene Algorithmus von Lawson (1977) zur Ermittlung aller Dreiecke einer Delaunay-Triangulation⁷, deren umschreibender Kreis einen gegebenen Punkt enthält. Der in Tabelle 7 angegebene Pseudocode kann daher als eine Abwandlung des im Rahmen der *Interpolation durch natürliche Nachbarn* von Sambridge et al. verwendeten Algorithmus interpretiert werden.

Bild 2.12 zeigt die gewonnene Konnektivitätsinformation für ein frei gewähltes Dreieck

⁷Der Begriff *Delaunay-Triangulation* wird in Kapitel 3 erläutert.

Tabelle 7: Pseudocode: Bestimmung der Konnektivätsinformation

Sei N die Anzahl der Knoten, N_T die Anzahl der Dreiecke. Ein Dreieck T besitze die Nachbardreiecke t_1 , t_2 und t_3 . T bzw. t bezeichne sowohl ein Dreieck selbst als auch seinen Index. Ist T ein Randdreieck, gelte $t_j = 0$, falls das Nachbardreieck t_j nicht existiert.

I. Setze $ZK(1, \dots, NT + 1) = 0$.

II. Für $i = 1, \dots, N$

1. Setze $N_{Stack} = 0$, $in_\omega(1, \dots, N_T) = false$, $in_{Stack}(1, \dots, N_T) = false$.

2. Beginne mit einem Dreieck T_0 , wobei $\mathbf{x}(i)$ eine Ecke von T_0 sein soll.

3. Setze $in_\omega(T_0) = true$.

4. Setze $ZK(T_0 + 1) = ZK(T_0 + 1) + 1$.
Setze $temp(T_0, ZK(T_0 + 1)) = i$

5. Für $j = 1, \dots, 3$

a) Falls $t_j = 0$, gehe zu 5.

b) Setze $N_{Stack} = N_{Stack} + 1$.

c) Setze $Stack(N_{Stack}) = t_j$.

d) Setze $in_{Stack}(t_j) = true$.

6. Falls $N_{Stack} = 0$, gehe zu II.

a) Setze $T_0 = Stack(N_{Stack})$.

b) Setze $N_{Stack} = N_{Stack} - 1$.

c) Berechne den Abstand zwischen $\mathbf{x}(i)$ und den Kanten von T_0 .
Falls $T_0 \cap \omega_i = \emptyset$, gehe zu 6.

d) Setze $in_\omega(T_0) = true$.

e) Setze $ZK(T_0 + 1) = ZK(T_0 + 1) + 1$.
Setze $temp(T_0, ZK(T_0 + 1)) = i$.

f) Für $j = 1, \dots, 3$

i. Falls $t_j = 0$, gehe zu 6f.

ii. Falls $in_\omega(t_j) = true$, gehe zu 6f.

iii. Falls $in_{Stack}(t_j) = true$, gehe zu 6f.

iv. Setze $N_{Stack} = N_{Stack} + 1$.

v. Setze $Stack(N_{Stack}) = t_j$.

vi. Setze $in_{Stack}(t_j) = true$.

g) Gehe zu 6.

III. Überföhre die Konnektivätsinformation aus $temp$ und ZK in das in Bild 2.10 illustrierte Format und gebe den von $temp$ beanspruchten Speicherplatz frei.

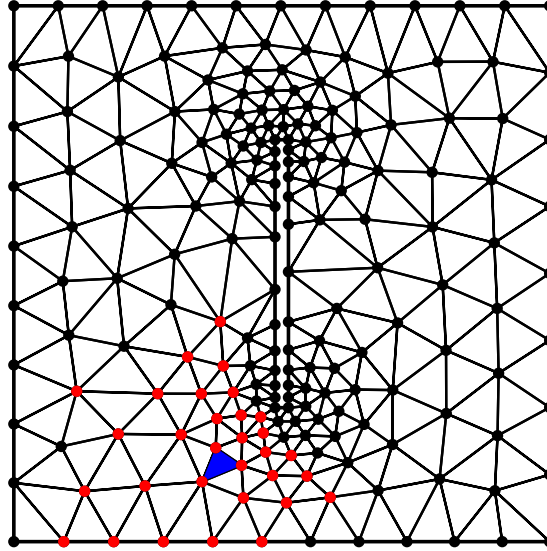


Bild 2.12: Ein gegebenes Dreieck (blau) und die innerhalb dieses Dreiecks aktiven Knoten (rot). Die Bestimmung der Einflussgebiete erfolgte für $c_r = 2$, vgl. Bild 2.9b.

(blau). Die hohe Anzahl der innerhalb dieses Dreiecks aktiven Knoten ist nicht außergewöhnlich. Sie ist der Grund dafür, dass die Anzahl der von Null verschiedenen Koeffizienten der Steifigkeitsmatrix im Allgemeinen deutlich höher ist als bei einer vergleichbaren Finite-Elemente-Diskretisierung. Nichtsdestotrotz ist die Steifigkeitsmatrix einer MLS-Diskretisierung dünn besetzt. Im Sinne einer effizienten Nutzung des Speichers ist es wünschenswert, die Steifigkeitsmatrix in einer kompakten Form abzulegen, indem die Anzahl der gespeicherten Null-Elemente verringert wird bzw. diese ganz fortgelassen werden. Die einschlägigen Speichertechniken, die im Rahmen der Finite-Elemente-Methode verstärkt genutzt werden, wie z.B. das *Skyline-* oder *Harwell-Boeing-Format*, reduzieren nicht nur den Speicherbedarf, sondern ermöglichen den Einsatz effizienter Algorithmen zum direkten bzw. iterativen Lösen von linearen Gleichungssystemen. Eine derartige Speichertechnik erfordert jedoch eine Vorabinformation über die von Null verschiedenen Koeffizienten der Steifigkeitsmatrix. Im Rahmen der Finite-Elemente-Methode kann diese Information auf Grund der an den einzelnen Elementen beteiligten Knotennummern ohne weiteres durch ein Rechenprogramm vor Beginn der Assemblierung der Steifigkeitsmatrix beschafft werden (Schwarz, 1980).

Die Konnektivätsinformation, die der vorgestellte Algorithmus bereitstellt, erlaubt eine Bestimmung der relevanten Koeffizienten der Steifigkeitsmatrix auch für eine MLS-Diskretisierung in Analogie zur Finite-Elemente-Methode, da nun die an jedem Dreieck beteiligten Knoten bekannt sind. Der Einsatz von Algorithmen zur effizienten Knotennummerierung ist mit der vorliegenden Konnektivätsinformation ebenfalls problemlos möglich.

In der zu entwickelnden Implementierung machen wir von der Möglichkeit einer kompakten Speicherung der Steifigkeitsmatrix unter Ausnutzung ihrer Symmetrie Gebrauch und verwenden darüber hinaus eine Implementierung des *reverse Cuthill McKee Algorithmus* (Cuthill und McKee, 1969) von George und Liu (1981). Wir gehen nicht weiter auf

den Aufbau des zugehörigen Unterprogramms zur Assemblierung der Steifigkeitsmatrix ein. Es ist einerseits wenig übersichtlich und andererseits sind die notwendigen Anpassungen des Codes nicht für eine netzfreie Diskretisierungstechnik spezifisch, sondern haben genauso innerhalb einer Finite-Elemente-Implementierung zu erfolgen.

3 Stützstellenverteilung auf der Grundlage der Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme

Im vorangegangenen Kapitel gingen wir stets von einem gegebenen Knotensatz aus. Soll ein konkretes Problem behandelt werden, so besteht der erste Schritt gerade darin, im vorliegenden Grundgebiet Stützstellen zu platzieren.

In den letzten Jahren sind einige unmittelbar in Verbindung mit netzfreien Methoden entwickelte Algorithmen zur Stützstellenverteilung beschrieben worden. Herault et al. (2000) verbessern einen vorläufigen Knotensatz ausgehend von der Annahme, dass einzelne Stützstellen untereinander wechselwirken. Die Wechselwirkungskräfte werden durch die Wahl eines physikalischen Modells, z. B. Elektrostatik oder Molekulardynamik, vorgeschrieben. Die resultierende Punkteverteilung wird schließlich als eine Gleichgewichtskonfiguration des gewählten physikalischen Modells ermittelt. Griebel und Schweitzer (2000) verwenden in ihrer Implementierung eines netzfreien Verfahrens Halton-Folgen quasizufällig verteilter Knoten. Wie in den beiden genannten Beispielen vermeiden auch andere Autoren ganz bewusst die Verwendung von Netzen beim Generieren des Knotensatzes, um eine „wirklich netzfreie“ Implementierung des Diskretisierungsverfahrens zu erhalten.

Du et al. (2002) verwenden zur Optimierung eines bereits vorliegenden Knotensatzes, Strategien zur Erzeugung von *Schwerpunkt-Voronoi-Diagrammen*. Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme sind spezielle *Voronoi-Diagramme*, bei denen die Knotenkoordinaten mit den Koordinaten der Schwerpunkte jeweiliger Voronoi-Regionen zusammenfallen. Dieses Konzept macht es möglich, auch in Grundgebieten komplexer Geometrie hochwertige Stützstellenverteilungen zu erzeugen, wobei die Knotendichte lokal durch Vorgeben einer Dichtefunktion gesteuert werden kann. Du et al. (1999) diskutieren theoretische Zusammenhänge, Möglichkeiten zur Erzeugung und einige Anwendungsfelder von Schwerpunkt-Voronoi-Diagrammen.

Wir beschreiben in diesem Teil der Arbeit einen neuen Algorithmus zur Stützstellenverteilung auf der Grundlage von Schwerpunkt-Voronoi-Diagrammen. In Kapitel 3.1 werden mit dem Voronoi-Diagramm und der Delaunay-Triangulation zwei wesentliche Begriffe der algorithmischen Geometrie erläutert, bevor in Kapitel 3.2 die Spezialisierung auf Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme vorgenommen wird. Kapitel 3.3 beschreibt einen verbreiteten Algorithmus zur Erzeugung von Schwerpunkt-Voronoi-Diagrammen. Diese von Lloyd (1982) angegebene Iteration führt zu einer Schwerpunkt-Voronoi-Verteilung von Knoten ausschließlich innerhalb eines Grundgebietes. Der in Kapitel 3.4 vorgestellte, neu entwickelte Algorithmus fußt auf dem oben genannten, sieht jedoch neben anderen Erweiterungen eine Möglichkeit vor, auch Gebietsränder mit Stützstellen zu besetzen. In Kapitel 3.5 werden schließlich einige Beispiele der mit dem neuen Algorithmus erzeugten Stützstellenverteilungen präsentiert.

3.1 Voronoi-Diagramm und Delaunay-Triangulation

Eine umfangreiche Übersicht zu Voronoi-Diagrammen und ihren vielfältigen Anwendungen gibt z. B. Aurenhammer (1991). Wir beschränken uns auf eine Darstellung der wesentlichen Eigenschaften.

Gegeben sei ein Knotensatz $\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, N$ in einem offenen Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^m$. Gebiete $V_i, i = 1, \dots, N$ mit den Eigenschaften

1. $V_i \cap V_j = \emptyset, \quad i, j = 1, \dots, N, \quad i \neq j$
2. $\bigcup_{i=1}^N \overline{V}_i = \overline{\Omega}$
3. $V_i = \{\mathbf{y} \in \Omega \mid |\mathbf{y} - \mathbf{x}_i| < |\mathbf{y} - \mathbf{x}_j|, \quad i, j = 1, \dots, N, \quad i \neq j\}$

sind die *Voronoi-Regionen* der Voronoi-Knoten $\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, N$ bezüglich der Euklidischen Norm⁸. Die ersten beiden Eigenschaften charakterisieren eine Gebietsunterteilung. Die dritte ist eine Spezialisierung auf solche Gebiete V_i , die ausschließlich diejenigen Punkte \mathbf{y} enthalten, deren Abstand zu der dem jeweiligen Gebiet zugeordneten Stützstelle \mathbf{x}_i geringer ist als zu jeder anderen Stützstelle $\mathbf{x}_j, j \neq i$.

Die Gesamtheit der Ränder der Voronoi-Regionen

$$\mathcal{V} = \bigcup_{i=1}^N \partial \overline{V}_i$$

wird als Voronoi-Diagramm des gegebenen Knotensatzes bezeichnet.

Wir betrachten im Folgenden ausschließlich den Fall \mathbb{R}^2 . Bild 3.1a zeigt das Voronoi-

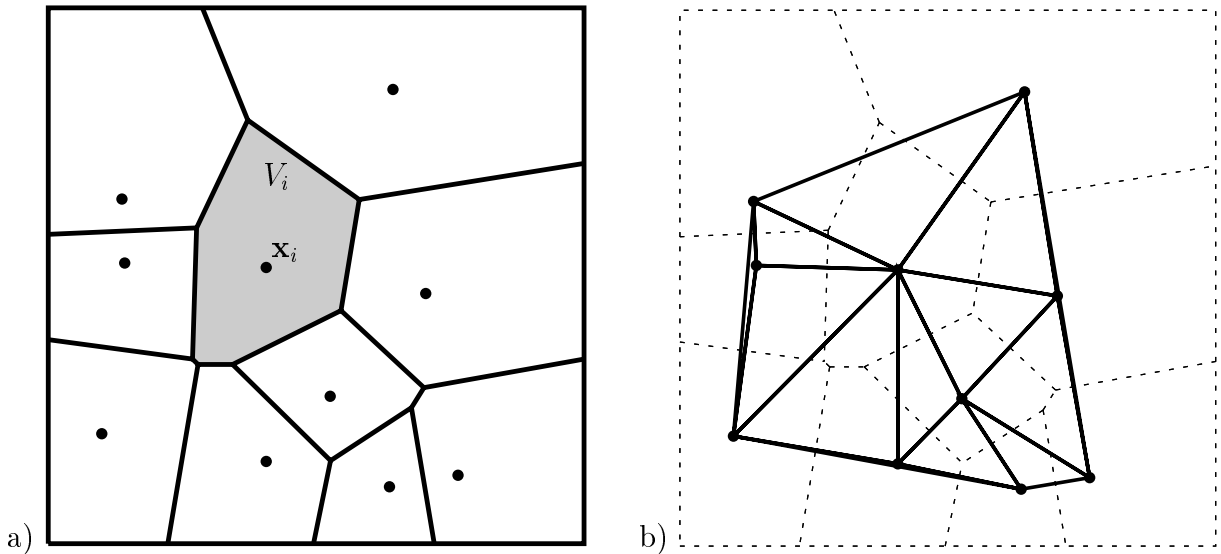


Bild 3.1: a) das Voronoi-Diagramm eines Knotensatzes aus 10 zufällig in einem quadratischen Grundgebiet verteilten Knoten und b) die zugehörige Delaunay-Triangulation

Diagramm eines Knotensatzes aus 10 zufällig in einem quadratischen Grundgebiet verteilten Knoten. Die zu einem herausgegriffenen Knoten \mathbf{x}_i gehörende Voronoi-Region ist grau hinterlegt.

⁸Die Voronoi-Regionen lassen sich grundsätzlich bezüglich beliebiger Normen definieren. Dies ist jedoch nicht von Interesse in der vorliegenden Arbeit.

Werden alle Knoten, deren Voronoi-Regionen unmittelbar aneinander grenzen, durch Kanten verbunden, so entsteht die *Delaunay-Triangulation* (Bild 3.1b). Es ist unmittelbar zu erkennen, dass der Mittelpunkt des umschreibenden Kreises eines jeden Dreiecks jeweils eine Ecke des Voronoi-Diagramms bildet. Damit verbunden ist das für die Konstruktion von Delaunay-Triangulationen entscheidende Delaunay-Kriterium, das nur solche Dreiecke zulässt, deren umschreibende Kreise keine Stützstellen einschließen. Die äußeren Kanten einer Delaunay-Triangulation bilden die konvexe Hülle des gegebenen Knotensatzes.

Delaunay-Triangulationen zeichnen sich insbesondere dadurch aus, dass sie unter allen möglichen Triangulationen eines Knotensatzes den größten auftretenden Winkel minimieren (vgl. Shewchuk, 2002). Auf Grund dieser Eigenschaft ist die Delaunay-Triangulation eine der etabliertesten Techniken zur Konstruktion von Netzen für Finite-Elemente-Berechnungen.

3.2 Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme

Bestimmen wir für jede Voronoi-Region V_i , $i = 1, \dots, N$ den zugehörigen Massenmittelpunkt

$$\mathbf{x}_i^* = \frac{\int_{V_i} \mathbf{y} \rho(\mathbf{y}) dA}{\int_{V_i} \rho(\mathbf{y}) dA}, \quad i = 1, \dots, N \quad (3.1)$$

bezüglich einer auf dem Grundgebiet geltenden Dichtefunktion $\rho(\mathbf{y}) \geq 0$, so gilt im Allgemeinen $\mathbf{x}_i^* \neq \mathbf{x}_i$. Dies trifft auch auf die in Bild 3.1 dargestellte Knotenverteilung zu, wenn von einer konstanten Dichtefunktion $\rho(\mathbf{y}) = \text{const}$ ausgegangen wird (Bild 3.2a).

Liegt dagegen der Sonderfall $\mathbf{x}_i^* = \mathbf{x}_i$ vor, so handelt es sich um ein Schwerpunkt-Voronoi-Diagramm (Bild 3.2b).

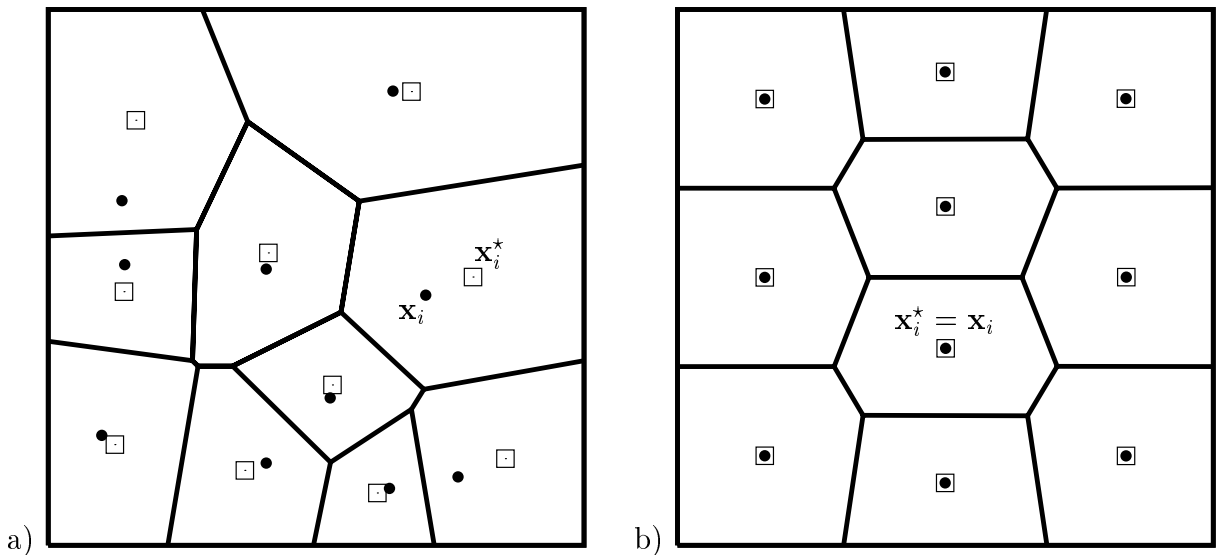


Bild 3.2: a) ein Voronoi-Diagramm zu den Voronoi-Knoten \mathbf{x}_i (\bullet) mit den Massenmittelpunkten einzelner Voronoi-Regionen \mathbf{x}_i^* (\square), b) ein Schwerpunkt-Voronoi-Diagramm

Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme sind Lösungen der folgenden Optimierungsaufgabe: Es seien in einem Grundgebiet Ω ein Knotensatz \mathbf{x}_i , $i = 1, \dots, N$, eine Dichtefunktion $\rho(\mathbf{y})$ und eine Gebietsunterteilung V_i , $i = 1, \dots, N$ gegeben. Es lässt sich zeigen, dass der Ausdruck

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, V_1, \dots, V_n) = \sum_{i=1}^N \int_{V_i} |\mathbf{y} - \mathbf{x}_i|^2 \rho(\mathbf{y}) dA \quad (3.2)$$

nur dann ein Minimum annimmt, wenn die Gebietsunterteilung V_i , $i = 1, \dots, N$ aus Voronoi-Regionen besteht und die zugehörigen Voronoi-Knoten \mathbf{x}_i mit den Massenmittelpunkten der zugehörigen Voronoi-Regionen bezüglich $\rho(\mathbf{y})$ zusammenfallen (Steinhaus 1956, Du et al., 1999).

Die Verbreitung der Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme ist wohl in dieser Optimalitätseigenschaft begründet. Insbesondere in der Signalverarbeitung sind Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme als Werkzeug zur Datenkompression von großem Interesse. Aus diesem Bereich stammen zahlreiche Arbeiten zur Theorie und algorithmischen Behandlung der Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme (Gray und Neuhoff, 1998). Einen wichtigen Beitrag lieferte Gersho (1979), indem er voraussagte, dass für $N \rightarrow \infty$ alle optimalen Regionen zu einer nur von der Dimension des Gebietes abhängigen Basiszelle kongruent sind. In der Ebene ist die Basiszelle ein regelmäßiges Hexagon (Fejes Tóth, 1959, Newman, 1964, 1982). Für höher dimensionale Räume liegen bisher nur Teilergebnisse vor.

Als besonders nützlich erweist sich die Konsequenz aus Gershos Vermutung, dass sich der Wert des Zielfunktional einer (3.2) minimierenden Knotenverteilung⁹ gleichmäßig auf alle Regionen verteilt. Der daraus ableitbare Zusammenhang zwischen der vorgeschriebenen Dichtefunktion $\rho(\mathbf{y})$ und der Dichte der resultierenden Stützstellenverteilung lässt sich für den uns interessierenden zweidimensionalen Fall in der Form

$$\frac{h_{V_i}}{h_{V_j}} \approx \left(\frac{\rho(\mathbf{x}_j)}{\rho(\mathbf{x}_i)} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (3.3)$$

schreiben, wobei h_{V_i} den Durchmesser der Voronoi-Region V_i angibt (vgl. Du und Wang, 2003, Ju, 2007). Die fehlende Gleichheit in (3.2) unterstreicht, dass die Aussage für $N \rightarrow \infty$ gilt und nur näherungsweise auf praktische Anwendungen mit einer endlichen Knotenzahl N übertragbar ist.

Unser Ziel ist es, in einem gegebenen Gebiet Ω eine gewünschte Anzahl von Stützstellen so zu verteilen, dass sie (näherungsweise) ein Schwerpunkt-Voronoi-Diagramm erzeugen und damit im Sinne der Minimierung von (3.2) das vorliegende Grundgebiet optimal repräsentieren. Der Zusammenhang (3.3) ermöglicht es uns dabei die Stützstellendichte bei Bedarf kontrolliert anzupassen.

Zur Bestimmung eines Voronoi-Diagramms basierend auf einem gegebenem Knotensatz existiert eine Reihe von Algorithmen. Eine Möglichkeit besteht darin, für je zwei verschiedene Knoten den Bisektor zu konstruieren, um dann die so erzeugten Geraden zum Voronoi-Diagramm zu „verschmelzen“. Eine andere Klasse von Algorithmen nutzt

⁹Je nach Anwendung werden für die Vektoren \mathbf{x}_i verschiedene Bezeichnungen gebraucht. Wir betrachten Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme im Zusammenhang mit der räumlichen Diskretisierung im Rahmen einer netzfreien Methode und sprechen daher von Knoten bzw. Stützstellen.

die Dualität von Voronoi-Diagrammen und Delaunay-Triangulationen aus. Liegt einmal eine Delaunay-Triangulation vor, dann lässt sich das zugehörige Voronoi-Diagramm leicht erzeugen. Shewchuk (1997) beschreibt und vergleicht drei Algorithmen zur Konstruktion von Delaunay-Triangulationen. In zahlreichen z. T. frei verfügbaren Programmen sind solche Algorithmen effizient umgesetzt worden, so dass die Erzeugung von Delaunay-Triangulationen bzw. Voronoi-Diagrammen auch für sehr große Knotenzahlen ohne nennenswerten Zeitaufwand erfolgen kann. Wie bereits in Kapitel 2.2 angesprochen, verwenden wir zu diesem Zwecke Shewchuks frei verfügbares Programm `Triangle`¹⁰.

Besteht die Aufgabe darin, in einem gegebenen Gebiet ein Schwerpunkt-Voronoi-Diagramm basierend auf einem Satz aus N Knoten zu generieren, so lässt sich diese im Allgemeinen nicht mehr direkt bewerkstelligen.

Du et al. (1999) beschreiben mehrere Algorithmen, die iterativ zu einem Schwerpunkt-Voronoi-Diagramm führen. Es werden dabei zwei Klassen unterschieden. Probabilistische Algorithmen zeichnen sich durch ihren geringen numerischen Aufwand aus, weisen jedoch relativ schlechte Konvergenzeigenschaften auf. Deterministische Verfahren besitzen höhere Konvergenzgeschwindigkeiten, sind dabei aber je Iterationsschritt berechnungsintensiver.

In vielen Anwendungen setzte sich der von Lloyd (1982) angegebene Algorithmus durch. Der in dieser Arbeit entwickelte Algorithmus enthält die Lloyd-Iteration als einen wesentlichen Baustein. Wir erläutern sie daher im anschließenden Unterkapitel.

3.3 Die Lloyd-Iteration und ihre Erweiterungen

Die entscheidende Schwierigkeit bei der Bestimmung von Schwerpunkt-Voronoi-Diagrammen im Vergleich zu einem gewöhnlichen Voronoi-Diagramm besteht darin, dass zu Beginn weder die Koordinaten der Stützstellen, die optimale Voronoi-Regionen bilden, noch das Voronoi-Diagramm, das die Bestimmung der Knotenkoordinaten erlauben würde, bekannt sind.

Sie können jedoch in einer Folge von Iterationsschritten durch Bestimmen der Voronoi-Regionen zu einem nicht optimalen Knotensatz und anschließendes „Verschieben“ der Stützstellen in die Schwerpunkte der zugeordneten Voronoi-Regionen ermittelt werden (Tabelle 8).

Der Vorteil der Lloyd-Iteration besteht in ihrer monotonen Konvergenz. In jedem Iterationsschritt wird der Wert des Zielfunktional (3.2) reduziert (Lloyd, 1982). Nachteilig ist der relativ hohe Zeitaufwand für die Bestimmung der Schwerpunkte einzelner Voronoi-Regionen je Iterationsschritt. Die Anzahl der Iterationsschritte hängt von dem gewählten Abbruchkriterium ab, das anwendungsspezifisch formuliert werden kann (Du et al., 1999). Die Bilder 3.3a-d zeigen beispielhaft die Entwicklung einer Knotenverteilung während der Lloyd-Iteration. Bereits bei einer geringen Knotenzahl von $N = 40$ werden deutlich über 100 Iterationsschritte benötigt, um ausgehend von einer zufälligen Verteilung (Bild 3.3a) zu einer Stützstellenkonfiguration zu gelangen, die sich infolge weiterer Iterationen (optisch) nicht mehr verändert. Es ist offensichtlich, dass bei hohen Knotenzahlen der Berechnungsaufwand für die Bestimmung optimal platzierter Stützstellen beträchtlich sein kann.

¹⁰<http://www.cs.cmu.edu/~quake/triangle.html>

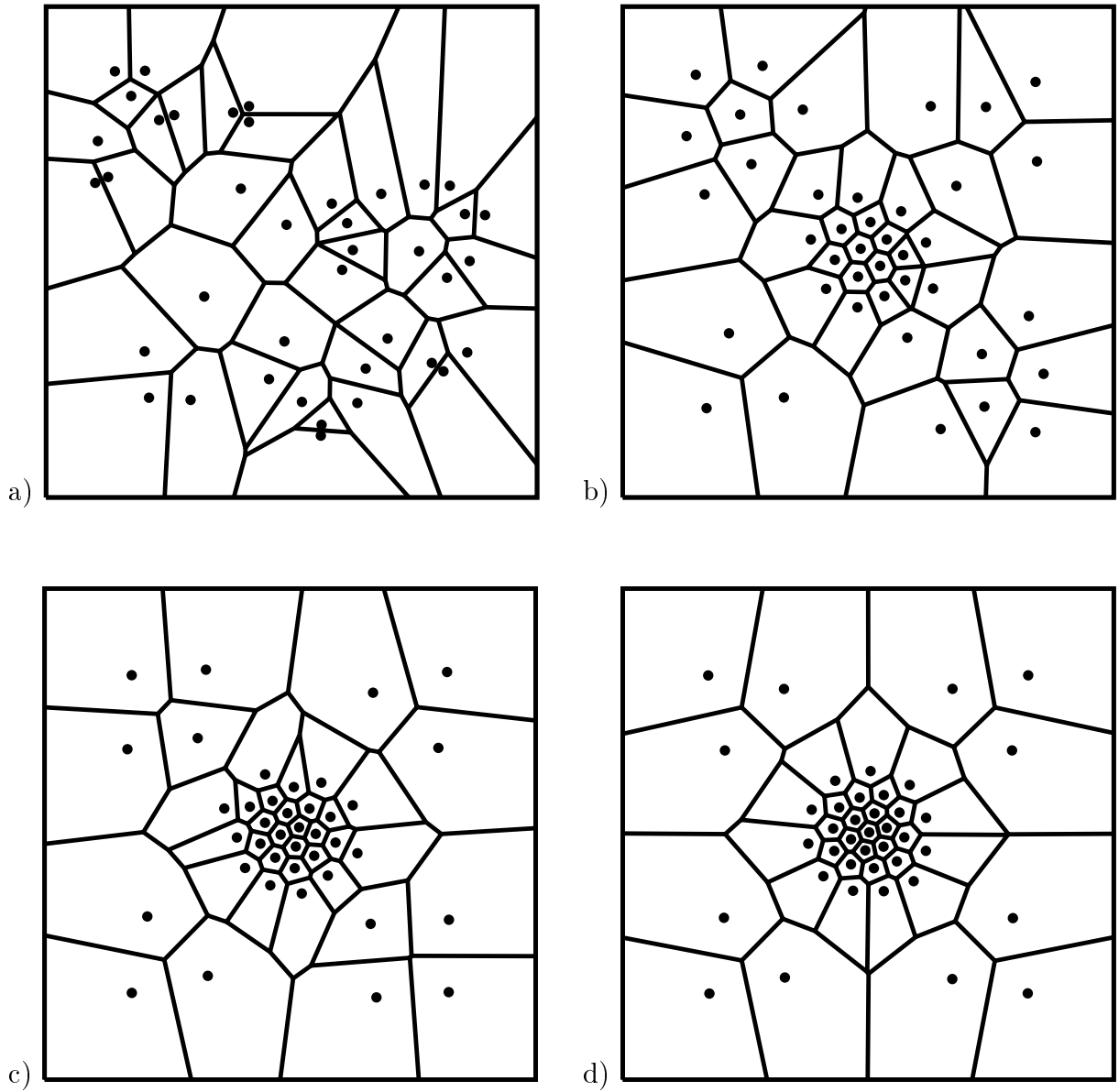


Bild 3.3: Entwicklung der Stützstellenverteilung während der Lloyd-Iteration in einem quadratischen Gebiet $\Omega = [-1, 1]^2$ zur Dichtefunktion $\rho(x, y) = e^{-40(x^2+y^2)} + 10^{-3} \sin^2(\pi x) \sin^2(\pi y)$. a) 40 zufällig verteilte Stützstellen (0 Iterationsschritte), Stützstellenverteilung nach b) 10, c) 50 und d) 160 Iterationsschritten

Tabelle 8: Pseudocode: Die Lloyd-Iteration zur Erzeugung von Schwerpunkt-Voronoi-Diagrammen

0. Starte mit einer zufälligen Stützstellenverteilung $\mathbf{x}_i \in \Omega$, $i = 1, \dots, N$.
1. Berechne die Voronoi-Regionen V_i , $i = 1, \dots, N$ auf Ω .
2. Bestimme die Schwerpunkte \mathbf{x}_i^* , $i = 1, \dots, N$ der Voronoi-Regionen und setze $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_i^*$, $i = 1, \dots, N$.
3. Gehe zu 1., falls das formulierte Abbruchkriterium nicht erfüllt ist

In der Literatur lassen sich verschiedene Techniken zur Effizienzsteigerung der Iteration finden. Du und Emelianenko (2006) diskutieren Kombinationsmöglichkeiten der Lloyd-Iteration und des Newton-Verfahrens. Koren und Yavneh (2006) machen von dem bekannten Zusammenhang (3.3) zwischen der Dichtefunktion $\rho(\mathbf{y})$ und der Dichte der optimalen Stützstellen Gebrauch, um einen guten Startvektor für die Lloyd-Iteration zu erhalten. Eine Variante des in der Datenverarbeitung weit verbreiteten LBG-Algorithmus (Linde, Buzo und Gray, 1980) basiert auf einer anderen Idee zur Verbesserung des Startvektors. Beginnend mit einer Stützstelle $M = 1$ wird nach einer Folge der Lloyd-Iterationen die Anzahl der Stützstellen jeweils verdoppelt $M \leftarrow 2M$, indem jede Stützstelle durch zwei neue ersetzt wird. Dieser Prozess wird fortgeführt, bis die gewünschte Anzahl der Stützstellen $M = N$ erreicht ist.

Während Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme schon seit mehreren Jahrzehnten in der Informationstechnik intensiv eingesetzt werden, ist das Interesse an diesem Konzept auch in Verbindung mit der räumlichen Diskretisierung von Grundgebieten beim Lösen von partiellen Differentialgleichungen erst in den letzten Jahren stark gestiegen. Wie bereits angesprochen, schlagen Du et al. (2002) vor, das Schwerpunkt-Voronoi-Konzept zur Verteilung von Stützstellen im Rahmen netzfreier Diskretisierungsmethoden zu verwenden. Die Dualität des Voronoi-Diagramms und der Delaunay-Triangulation dient in einer Reihe weiterer Arbeiten als Grundlage zur Konstruktion hochwertiger Dreiecksnetze, die im Rahmen der Finite-Elemente-Methode genutzt werden können (vgl. z. B. Qiang und Gunzburger, 2002, Ju, 2007, Nguyen et al., 2009). Dieser aktuelle Anwendungsbereich der Schwerpunkt-Voronoi-Strategie nimmt insofern eine Sonderstellung ein, als die räumliche Diskretisierung eines Grundgebietes im Hinblick auf die Lösung von partiellen Differentialgleichungen das Besetzen der Gebietsränder mit Stützstellen erfordert. Das ist bei den meisten anderen Anwendungen nicht der Fall, so dass die früheren Algorithmen — wie die Lloyd-Iteration — auf eine optimale Stützstellenverteilung ausschließlich im Innern eines Gebietes zugeschnitten sind. Zudem hat die Optimierung bei traditionellen Anwendungen, wie etwa der Komprimierung von Bildern, innerhalb von mehrdimensionalen Würfeln bzw. Quadern zu erfolgen. In dem uns interessierenden Fall besitzen die Grundgebiete im Allgemeinen eine komplexe Geometrie. Einige Möglichkeiten zur Bewältigung dieser zu-

Tabelle 9: Pseudocode: Prinzipieller Aufbau bekannter Algorithmen zur Stützstellenverteilung basierend auf Schwerpunkt-Voronoi-Diagrammen

Gegeben sei ein Grundgebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, eine Dichtefunktion $\rho(\mathbf{x}) \geq 0$ auf Ω , eine anfängliche Stützstellenverteilung $\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, N$, wobei N die geforderte Anzahl der Stützstellen ist.

1. Für die aktuelle Stützstellenverteilung $\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, N$ konstruiere das Voronoi-Diagramm und die zugeordnete Delaunay-Triangulation.
2. Bestimme die Schwerpunkte $\mathbf{x}_i^*, i = 1, \dots, N$ der (approximierten) Voronoi-Regionen und setze $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_i^*, i = 1, \dots, N$. Ist \mathbf{x}_i eine randnahe Stützstelle, dann projiziere \mathbf{x}_i auf den Gebietsrand.
3. Falls das formulierte Abbruchkriterium nicht erfüllt ist, gehe zu 1.

sätzlichen Schwierigkeiten werden in den erwähnten Arbeiten diskutiert.

Die Beschreibung der Geometrie des Grundgebietes kann durch das Einführen von vorzeichenbehafteten Distanzfunktionen erfolgen (vgl. Ju, 2007, Nguyen et al., 2009). Alternativ können die Ränder des Grundgebietes durch den sogenannten *Planar Straight Line Graph* (PSLG) näherungsweise dargestellt werden. Diese Variante wird in der vorliegenden Arbeit genutzt.

Alle Algorithmen, die in den oben angegebenen Veröffentlichungen beschrieben werden, besitzen den in Tabelle 9 gezeigten prinzipiellen Aufbau. Einzelne Algorithmen unterscheiden sich beispielsweise in der Definition randnaher Knoten. Die am stärksten verbreitete Variante besteht darin, solche Stützstellen, deren Voronoi-Regionen (teilweise) durch den Gebietsrand begrenzt werden, als randnah zu klassifizieren. Mit dieser Definition hätte man z. B. in Bild 3.3a 16 und in Bild 3.3d 12 randnahe Knoten.

Ju (2007) betrachtet die Triangulation der Stützstellen und projiziert eine Stützstelle dann auf den Gebietsrand, wenn diese Stützstelle an einem Randdreieck beteiligt ist und der dem Randsegment gegenüberliegende Winkel einen bestimmten Wert überschreitet. Ein weiterer Unterschied zu den meisten anderen Algorithmen besteht darin, dass Ju (2007) mit Schwerpunkten approximierter Voronoi-Regionen rechnet.

3.4 Ein neuer Algorithmus zur Stützstellenverteilung

Wir greifen den grundsätzlichen Aufbau bekannter Algorithmen auf und modifizieren diesen basierend auf einigen neuen Ideen.

3.4.1 Beschreibung des Grundgebietes

Zur Beschreibung der Geometrie des Grundgebietes verwenden wir den Planar Straight Line Graph (PSLG). Ein PSLG besteht aus Stützstellen und Segmenten, wobei (1) die Endpunkte eines Segments in der Stützstellenmenge enthalten sind und (2) Segmente nur in ihren Endpunkten andere Segmente oder Stützstellen schneiden. Ausgehend von einem PSLG lässt sich im Allgemeinen nur noch eine eingeschränkte (constrained) Delaunay-Triangulation erzeugen, da bei der Triangulation der Stützstellen als Nebenbedingung eingehalten werden muss, dass die vorgegebenen Segmente des PSLG durch Dreiecksseiten abgebildet werden. Hieraus können Randdreiecke¹¹ resultieren, deren umschreibenden Kreise andere Stützstellen einschließen. Sie sind damit keine Delaunay-Dreiecke. Weitere diesbezügliche Zusammenhänge diskutiert Shewchuk (2002).

Wir nutzen den Programmumfang von `Triangle`, um zu einem vorgegebenen PSLG eine eingeschränkte Delaunay-Triangulation effizient zu generieren. Außerdem übernehmen wir auch weitestgehend den Aufbau der Eingabedateien von `Triangle`, sehen jedoch zusätzlich eine Möglichkeit vor, den PSLG durch Kreisbogensegmente zu erweitern. Bei der Beschreibung der Funktionsweise des neuen Algorithmus lassen wir Kreisbogensegmente zunächst außer Acht.

3.4.2 Klassifizierung der Stützstellen

In den folgenden Erläuterungen wird zwischen inneren, randnahen und Randstützstellen unterschieden. Bild 3.4 veranschaulicht diese Klassifizierung anhand eines quadratischen Grundgebietes mit einer ausgewählten Stützstellenverteilung.

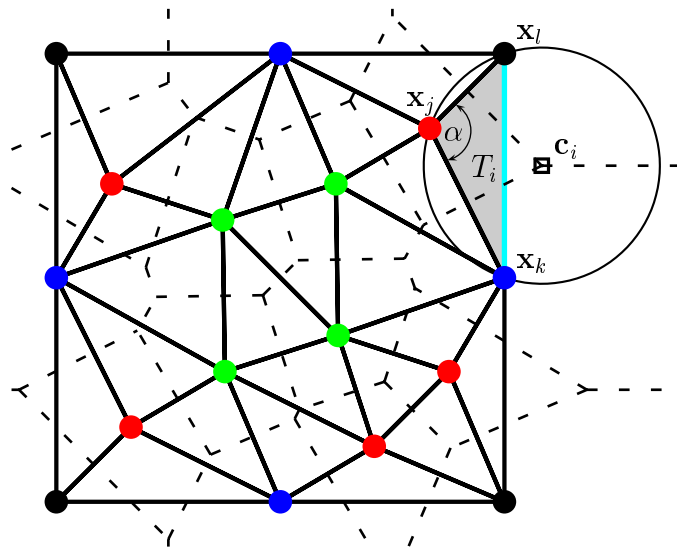


Bild 3.4: Einteilung der Stützstellen in innere (grün), randnahe (rot) und Randstützstellen (schwarz und blau)

¹¹Als Randdreiecke bezeichnen wir solche Dreiecke, die zumindest eine auf dem Rand des Grundgebietes liegende Kante besitzen.

Zu Randstützstellen zählen die Ecken des ursprünglichen PSLG (schwarz) und die im Verlaufe der Iteration auf den Segmenten des PSLG platzierten Stützstellen (blau). Die Koordinaten der ursprünglichen Ecken dürfen von dem Algorithmus nicht verändert werden. Die anderen Randstützstellen können entlang des jeweiligen Segmentes bewegt werden.

Randnahe Stützstellen sind in Bild 3.4 rot markiert und wie folgt definiert. Es sei T_i ein Randdreieck mit den Ecken \mathbf{x}_j , \mathbf{x}_k und \mathbf{x}_l , wobei $\mathbf{x}_k \in \partial\Omega$, $\mathbf{x}_l \in \partial\Omega$ Randknoten sind und $\mathbf{x}_j \in \Omega$ im Gebietsinnern liegt. \mathbf{c}_i sei der Mittelpunkt des umschreibenden Kreises von T_i , $|\mathbf{x}_j - \mathbf{c}_i| = |\mathbf{x}_k - \mathbf{c}_i| = |\mathbf{x}_l - \mathbf{c}_i|$. Wir bezeichnen die Ecke $\mathbf{x}_j \in \Omega$ von T_i dann als randnahe Stützstelle, wenn \mathbf{x}_j und \mathbf{c}_i auf verschiedenen Seiten der Randkante $\overline{\mathbf{x}_k \mathbf{x}_l}$ liegen, vgl. Bild 3.4. Randnahe Stützstellen werden auf die gegenüberliegende Dreiecksseite verschoben, d. h. auf dem Rand des Grundgebietes platziert.

Alle anderen (in Bild 3.4 grün markierten) Stützstellen werden als innere Stützstellen bezeichnet. Ihre Koordinaten werden durch den Einsatz der Lloyd-Iteration optimiert.

Wie in Kapitel 3.3 bereits angesprochen, ist es eine verbreitete Technik, Stützstellen $\mathbf{x}_j \in \Omega$ dann auf den Rand zu projizieren, wenn die zugehörigen Voronoi-Regionen durch den Gebietsrand begrenzt werden, $\overline{V}_j \cap \partial\Omega \neq \emptyset$. Offensichtlich erfüllen die oben als randnah definierten Stützstellen ebenfalls dieses Kriterium. Im Allgemeinen können jedoch weitere Stützstellen $\mathbf{x}_j \in \Omega$ existieren, für die zwar $\overline{V}_j \cap \partial\Omega \neq \emptyset$ gilt, die aber nicht der oberen Definition der randnahen Stützstellen genügen. Folglich unterscheidet sich unser Kriterium von dem bereits bekannten, und macht es insbesondere beim Besetzen des Gebietsrandes unnötig, alle Voronoi-Regionen mit $\overline{V}_j \cap \partial\Omega \neq \emptyset$ zu bestimmen. Es ist nun ausreichend, ausschließlich Randdreiecke zu betrachten.

Ju (2007) platziert ebenfalls nur solche Stützstellen auf dem Gebietsrand, die an einem Randdreieck beteiligt sind. Entscheidend ist dabei die Größe des gegenüber der Randkante liegenden Winkels (in Bild 3.4 mit α bezeichnet). Für $\alpha \geq 5\pi/9$ empfiehlt Ju, die Stützstelle \mathbf{x}_j auf die Kante $\overline{\mathbf{x}_k \mathbf{x}_l}$ zu projizieren. Das in unserem Algorithmus verwendete Kriterium für eine randnahe Stützstelle \mathbf{x}_j ist zu der Bedingung $\alpha > \pi/2$ äquivalent und ist erfüllt, wenn

$$(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l) \cdot (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j) > 0 \quad (3.4)$$

gilt. (3.4) lässt sich leicht numerisch auswerten, so dass die Bestimmung randnaher Stützstellen effizient erfolgen kann.

Die Unterscheidung der Stützstellen gemäß der besprochenen Klassifizierung erfolgt im Programmcode durch die Vergabe von Zahlenwerten. Die Datenstruktur des Programms `Triangle` sieht ein Markerfeld für die Stützstellen vom Typ Integer der Länge N vor, wobei N die gesamte Stützstellenzahl bezeichnet. Wir nutzen dies, indem wir den inneren Knoten den Wert 0 zuweisen, Randknoten, die auf dem jeweiligen Randsegment „gleiten dürfen“, ordnen wir den Wert 1 zu. Die Ecken des ursprünglichen PSLG erhalten den Marker 2. Mit Hilfe dieser Marker sind wir außerdem in der Lage, auch eine von den Ecken des PSLG verschiedene, insbesondere im Gebietsinnern liegende Stützstelle \mathbf{x}_i „festzuhalten“, indem ihr der Marker mit dem Wert 2 zugewiesen wird.

3.4.3 Struktur des Algorithmus

Wir fassen den neuen Algorithmus in Tabelle 10 in Form eines Pseudocodes zusammen. Der Algorithmus startet mit der Triangulation des PSLG und der Konstruktion des zugeordneten Voronoi-Diagramms durch einen Aufruf der Unteroutine `triangulate` des Programms `Triangle`

Dies ist der entscheidende Unterschied gegenüber den bekannten, im vorangegangenen Unterkapitel skizzierten Algorithmen, die die Iteration mit dem vollständigen Stützstellensatz beginnen. In unserem Algorithmus wird die Stützstellenzahl analog zu dem bereits angesprochenen LBG-Algorithmus (Linde, Buzo und Gray, 1980) schrittweise erhöht, wobei nach jeder Einfügephase die aktuelle Stützstellenverteilung basierend auf der Lloyd-Iteration verbessert wird. Werden neue Stützstellen jeweils so in die bestehende Knoten-

Tabelle 10: Pseudocode: Aufbau des neuen Algorithmus zur Stützstellenverteilung

Gegeben sei ein PSLG des Grundgebietes $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ mit N_{vert} Stützstellen, eine Dichtefunktion $\rho(\mathbf{x}) \geq 0$ auf Ω und eine Zahl $N_{iter} > 0$. Die geforderte Anzahl der Stützstellen sei N .

0. Setze $n = N_{vert}$.
1. Konstruiere die beschränkte Delaunay-Triangulation für die aktuelle Stützstellenverteilung $\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, n$. Die Anzahl der resultierenden Dreiecke sei N_T .
2. Falls $n = N$, STOP (Abbruchkriterium).
3. Für $i = 1, \dots, N_T$ (Einfügen neuer Stützstellen)
 - b) Füge eine neue Stützstelle \mathbf{x}_n in den Flächenmittelpunkt des Dreiecks T_i ein und inkrementiere n .
 - c) Falls $n = N$, gehe zu 4.
4. Für $i = 1, \dots, N_{iter}$ (Verbesserung der Stützstellenverteilung)
 - a) Konstruiere die beschränkte Delaunay-Triangulation und das Voronoi-Diagramm für die aktuelle Stützstellenverteilung.
 - b) Falls randnahe Stützstellen existieren, verschiebe diese auf den Gebietsrand und setze $randnah = true$. Sonst setze $randnah = false$.
 - c) Führe einen Schritt der Lloyd-Iteration für Randstützstellen durch.
 - d) Falls $randnah = true$, gehe zu 4.
 - e) Führe einen Schritt der Lloyd-Iteration für innere Stützstellen durch.
5. Gehe zu 1.

konfiguration eingefügt, dass die Abweichungen zwischen den Koordinaten der einzelnen Stützstellen und der Schwerpunkte der resultierenden Voronoi-Regionen möglichst klein sind, dann kann schon bei einer vergleichbar kleinen Gesamtzahl der Lloyd-Iterationen eine gute Stützstellenverteilung im Sinne der Minimierung von (3.2) erreicht werden.

Mehrfaches Durchlaufen der Schritte 1 bis 4 des Algorithmus führt zu einer raschen Zunahme der Stützstellenzahl (vgl. Bild 3.5). Es ist möglich und im Hinblick auf die Effizienzsteigerung sicherlich sinnvoll, die Anzahl der Lloyd-Iterationen N_{iter} mit steigender Knotenzahl zu reduzieren, da infolge vorangegangener Optimierungsschritte basierend auf einer geringeren Knotenzahl bereits eine gute Stützstellenverteilung vorliegen sollte. Im Pseudocode der Tabelle 10 wurde diese Möglichkeit nicht zum Ausdruck gebracht.

Gilt nach der Triangulation (Unterpunkt 1) in der Endphase des Algorithmus $N_T \geq N - n$, wobei N_T die Anzahl der Dreiecke der aktuellen Triangulation, n die aktuell vorliegende Stützstellenzahl und N die geforderte Anzahl der Stützstellen ist, so wird beim folgenden Einfügen neuer Stützstellen in die einzelnen Dreiecke (Unterpunkt 3) die vorgegebene Knotenzahl N erreicht. Im Allgemeinen wird $N_T > N - n$ gelten, so dass die Einfügeschleife nicht vollständig durchlaufen wird und neue Stützstellen nur in einen Teil der Dreiecke eingefügt werden. Um eine der vorgegebenen Dichtefunktion möglichst gut entsprechende Stützstellenverteilung zu erreichen, hat es sich als vorteilhaft herausgestellt, die verbleibenden $N - n < N_T$ Stützstellen in die Dreiecke mit der größten Masse einzufügen. Insbesondere bei Vorgabe einer konstanten Dichtefunktion kann aber diese Technik zu einer auffällig ungleichmäßigen Endverteilung der Stützstellen führen. Es ist daher sinnvoll und empfehlenswert, bei der abschließenden Verbesserung des Stützstellensatzes (Unterpunkt 4) die Anzahl der Iterationsschritte N_{iter} zu erhöhen.

Kommt es — wie bei den meisten praktischen Anwendungen — auf eine genaue Stützstellenzahl nicht an, so können sehr gute Verteilungen mit einer kleinen Anzahl der Lloyd-Iterationsschritte N_{iter} und somit geringem Rechenaufwand erreicht werden, wenn die Abbruchbedingung (Unterpunkt 2) durch $N_T \geq N - n$ ersetzt wird. Nun wird mit N nur die Größenordnung für die Knotenzahl vorgegeben. Die grundlegende Idee des Algorithmus, die darin besteht, bei geringen Stützstellenzahlen die Knotenverteilung für das Einfügen weiterer Stützstellen sinnvoll vorzubereiten, damit bei hohen Stützstellenzahlen die Anzahl der rechenaufwändigen Lloyd-Iterationen reduziert werden kann, wird jedoch gerade mit dieser Variante konsequent umgesetzt.

3.4.4 Algorithmische Details

Strategie zum Einfügen neuer Punkte. Bei der Wahl der Koordinaten für die neuen Stützstellen stellen wir uns vor, es liege bereits eine Stützstellenverteilung vor, die ein Schwerpunkt-Voronoi-Diagramm formt. Das Voronoi-Diagramm besteht dann laut Gershos Vermutung aus regelmäßigen Hexagonen und die zugeordnete Delaunay-Triangulation aus gleichseitigen Dreiecken. Fügen wir nun in jedes Dreieck eine neue Stützstelle gemäß

$$\mathbf{x}_n = \frac{\mathbf{x}_j + \mathbf{x}_k + \mathbf{x}_l}{3} \quad (3.5)$$

ein, wobei \mathbf{x}_j , \mathbf{x}_k und \mathbf{x}_l die Eckknoten eines Dreiecks bezeichnen, so besteht die resultierende Delaunay-Triangulation wiederum aus gleichseitigen Dreiecken und die neue Stützstellenverteilung bleibt optimal.

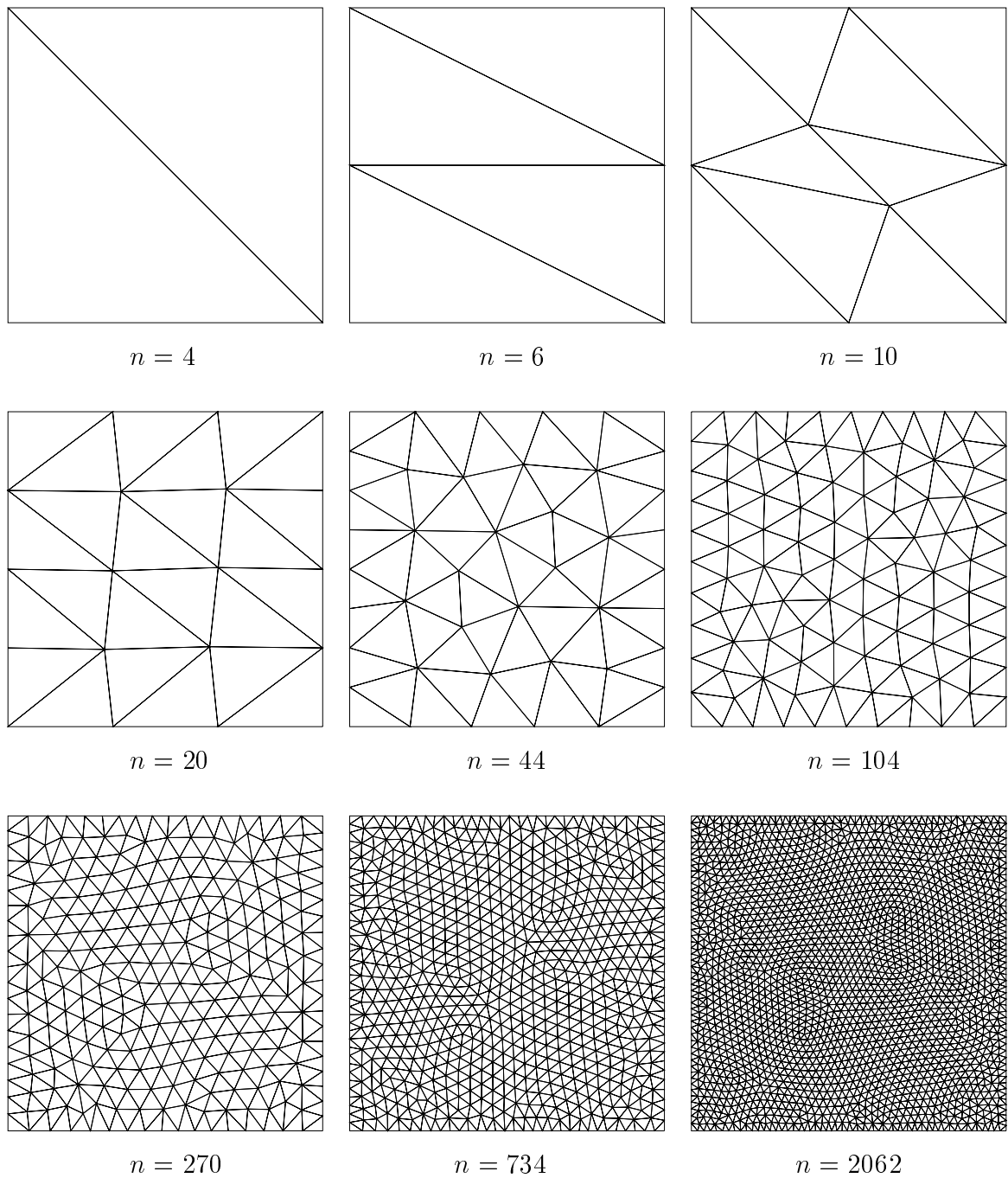


Bild 3.5: Zur Funktionsweise des neuen Algorithmus: Durch Einfügen neuer Punkte in die Flächenmittelpunkte der Dreiecke mit nachfolgender Triangulation und Lloyd-Verbesserung wächst die Anzahl der verteilten Stützstellen n rasch an. Für größere n bleibt die Qualität der Triangulation erhalten, so dass innerhalb eines Zyklus nur wenige Verbesserungsschritte erforderlich sind. Die Abbildung zeigt die Folge der Triangulationen für ein quadratisches Grundgebiet (jeweils nach Unterpunkt 1 des Pseudocodes in Tabelle 10, $N_{iter} = 20$).

Weichen einzelne Dreiecke einer beschränkten Delaunay-Triangulation (stark) von gleichseitigen Dreiecken ab, dann lässt sich die Frage nach einer optimalen Platzierung neuer Stützstellen nicht mehr auf einfache Weise beantworten.

Im Rahmen von Delaunay-Verfeinerungs-Algorithmen werden neue Knoten zwecks Verbesserung der Triangulationsqualität in die Mittelpunkte der umschreibenden Kreise solcher Dreiecke gesetzt, die ein bestimmtes Qualitätskriterium verletzen. Die Koordinaten einzelner Stützstellen bleiben dabei während der gesamten Dauer des Algorithmus unverändert. Eine ausführliche Beschreibung der weit verbreiteten Triangulationsalgorithmen dieser Klasse gibt Shewchuk (2002) an.

Die Mittelpunkte der umschreibenden Kreise, die die Ecken der Voronoi-Regionen festlegen, werden i. d. R. bei der Konstruktion der Delaunay-Triangulation bestimmt und müssen nicht zum Festlegen der Koordinaten neuer Knoten berechnet werden. Dadurch kann der Knotensatz effizient erweitert werden. Es ist allerdings zu beachten, dass der Mittelpunkt eines umschreibenden Kreises außerhalb des jeweiligen Dreiecks und damit grundsätzlich auch außerhalb des vorliegenden Grundgebietes liegen kann. Im Rahmen von Delaunay-Verfeinerungs-Algorithmen werden aus diesem Grund neue Knoten — sogenannte Steiner-Punkte — zunächst auf dem Gebietsrand so platziert, dass alle Voronoi-Regionen innerer Knoten vollständig im Gebietsinnern liegen. Anschließend wird die Knotenzahl durch Einfügen von Steiner-Punkten im Gebietsinnern erhöht.

Wir entscheiden uns für eine andere Möglichkeit und fügen neue Stützstellen jeweils als Flächenmittelpunkte einzelner Dreiecke ein. Dies erfordert zwar die Berechnung neuer Koordinaten gemäß (3.5), der Berechnungsaufwand ist jedoch gering.

Vergleichsrechnungen haben gezeigt, dass die Verwendung dieser unterschiedlichen Techniken innerhalb des hier beschriebenen Algorithmus nur zu geringen Abweichungen in der resultierenden Stützstellenverteilung führt. Die implementierte Variante garantiert offensichtlich ohne Zusatzoperationen, dass alle neuen Stützstellen innerhalb des Grundgebietes liegen. Die unwesentlichen Unterschiede im Endergebnis lassen sich damit begründen, dass durch den Einsatz der Lloyd-Iteration die Stützstellenverteilung optimiert wird, so dass mit steigender Stützstellenzahl immer mehr Dreiecke nahezu gleichseitig sind. Für gleichseitige Dreiecke gibt (3.5) sowohl die Koordinaten der Mittelpunkte der umschreibenden Kreise einzelner Dreiecke als auch ihre Flächenmittelpunkte an, so dass beide Varianten des Einfügens neuer Stützstellen übereinstimmen.

Strategie zur Verbesserung der Punkteverteilung. Im Unterpunkt 4 des Algorithmus wird die aktuelle Stützstellenverteilung durch Lloyd-Iteration und das Verschieben randnaher Stützstellen auf den Rand des Grundgebietes verbessert. Die Anzahl N_{iter} der Iterationsschritte, die nach jeder Erweiterung des Stützstellensatzes erfolgen, ist frei wählbar. Sie beeinflusst jedoch maßgeblich sowohl die Güte der resultierenden Stützstellenverteilung als auch den benötigten Berechnungsaufwand. Unsere Experimente zeigen, dass für $10 \leq N_{iter} \leq 30$ gute Stützstellenverteilungen bei vergleichbar geringer CPU-Zeit auch in Grundgebieten mit komplexer Geometrie generiert werden können.

Die Auswertung des Kriteriums für randnahe Stützstellen erfordert die Delaunay-Triangulation des aktuellen Stützstellensatzes. Für die Aktualisierung der Knotenkoordinaten nach Lloyd wird das zugeordnete Voronoi-Diagramm benötigt. Sie werden im Unterpunkt 4a durch Aufrufen des Unterprogramms `triangulate` erzeugt.

Anschließend wird für jedes Randdreieck mit den Randknoten \mathbf{x}_l und \mathbf{x}_k und dem im Gebietsinnern liegenden Knoten \mathbf{x}_j die Bedingung (3.4) ausgewertet. Ist sie erfüllt, dann werden die Koordinaten der randnahen Stützstelle \mathbf{x}_j gemäß

$$\mathbf{x}_j \leftarrow \frac{\mathbf{x}_k + \mathbf{x}_l}{2} \quad (3.6)$$

aktualisiert. Es ist nicht zwingend, die neuen Koordinaten einer randnahen Stützstelle in der Form (3.6) vorzuschreiben. Sie können allgemeiner durch

$$\mathbf{x}_j \leftarrow (1 - \lambda)\mathbf{x}_k + \lambda\mathbf{x}_l, \quad 0 < \lambda < 1 \quad (3.7)$$

vorgegeben werden. Zahlreiche Experimente (die jedoch nicht systematisch durchgeführt wurden) lieferten keinen Grund, von der einfachen Variante (3.6) abzuweichen.

Das Platzieren einer neuen Stützstelle auf dem Gebietsrand erfordert eine Aktualisierung des PSLG, indem das alte Segment $\overline{\mathbf{x}_k \mathbf{x}_l}$ durch die neuen $\overline{\mathbf{x}_k \mathbf{x}_j}$ und $\overline{\mathbf{x}_l \mathbf{x}_j}$ ersetzt und die Anzahl der Segmente $N_{seg} \leftarrow N_{seg} + 1$ erhöht wird. Der Marker der randnahen Stützstelle erhält den Wert 1 und damit die Möglichkeit, entlang des Randsegmentes infolge der Lloyd-Iteration bewegt zu werden.

Die Lloyd-Iteration für die Randknoten mit dem Marker 1 erfolgt entlang des jeweiligen Segmentes. Dabei bleiben alle inneren Knoten unberücksichtigt. Ist \mathbf{x}_i eine Randstützstelle und sind \mathbf{x}_j und \mathbf{x}_k die beiden Nachbarstützstellen auf dem Segment zu beiden Seiten, dann bestimmen wir die neuen Koordinaten der Stützstelle \mathbf{x}_i als Schwerpunkt der Strecke mit den Endpunkten $\bar{\mathbf{c}}_{i1} = (\mathbf{x}_i + \mathbf{x}_j)/2$ und $\bar{\mathbf{c}}_{i2} = (\mathbf{x}_i + \mathbf{x}_k)/2$. Bild 3.6a zeigt die vollständige Voronoi-Region einer Randstützstelle \mathbf{x}_i und die für die Voronoi-Iteration wesentlichen Voronoi-Punkte auf dem Gebietsrand $\bar{\mathbf{c}}_{i1}$ und $\bar{\mathbf{c}}_{i2}$.

Für $\rho = \text{const}$ ergeben sich die neuen Koordinaten der Randstützstelle zu

$$\mathbf{x}_i \leftarrow \frac{\mathbf{x}_i}{2} + \frac{\mathbf{x}_j + \mathbf{x}_k}{4}. \quad (3.8)$$

Ist die Dichtefunktion nicht konstant, dann wird der Schwerpunkt der Strecke $\overline{\bar{\mathbf{c}}_{ij} \bar{\mathbf{c}}_{ik}}$ durch Gauß-Integration dritter Ordnung

$$\mathbf{x}_i \leftarrow \frac{\rho(\mathbf{g}_1) \mathbf{g}_1 + \rho(\mathbf{g}_2) \mathbf{g}_2}{\rho(\mathbf{g}_1) + \rho(\mathbf{g}_2)} \quad (3.9)$$

mit

$$\mathbf{g}_2 = \frac{\mathbf{x}_i}{2} + \frac{\mathbf{x}_j + \mathbf{x}_k}{4} \pm \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k}{4\sqrt{3}} \quad (3.10)$$

bestimmt.

Die Lloyd-Iterationen für die inneren Stützstellen (Unterpunkt 4e) werden erst dann durchgeführt, wenn keine randnahen Stützstellen mehr vorliegen. In diesem Fall befinden sich alle Voronoi-Regionen der inneren Stützstellen und damit auch ihre Schwerpunkte vollständig im Grundgebiet. Damit ist es ausgeschlossen, dass einzelne Stützstellen infolge der Lloyd-Iteration außerhalb der Gebietsgrenzen platziert werden.

Zur Berechnung des Schwerpunktes einer Voronoi-Region V_i ordnen wir zunächst ihre Ecken \mathbf{c}_{ij} , $j = 1, \dots, N_c$ gegen den Uhrzeigersinn an (Bild 3.6b). Dies ist unter Verwendung der Datenstruktur des Programms `Triangle` leicht möglich. Anschließend wird

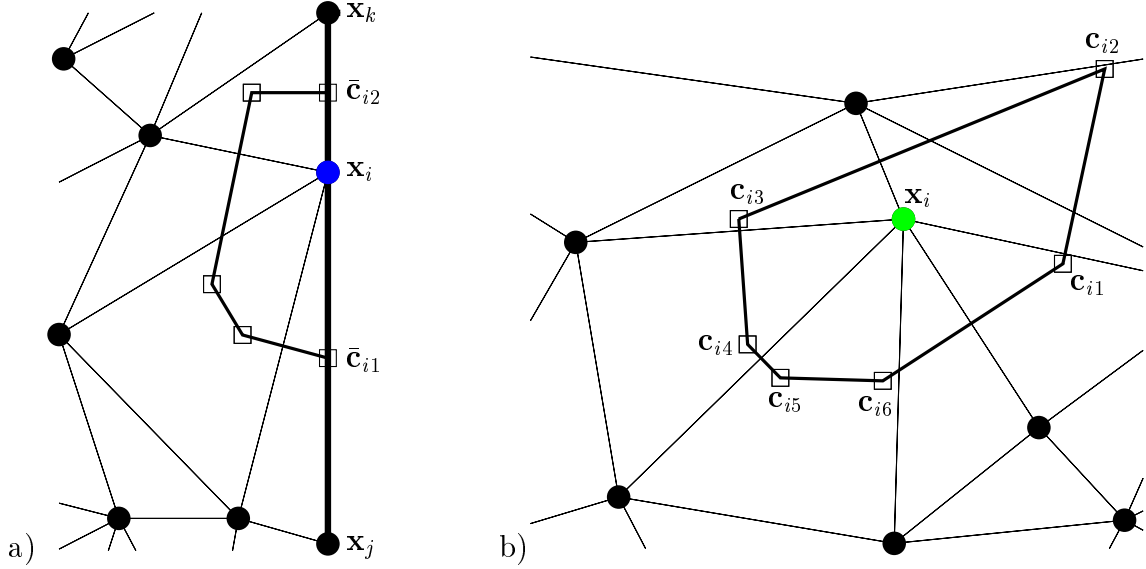


Bild 3.6: Voronoi-Region einer Randstützstelle a) und einer inneren Stützstelle b)

die Voronoi-Region bei veränderlicher Dichte in N_c Dreiecke mit den Eckknoten $\mathbf{c}_{i0}, \mathbf{c}_{ij}, \mathbf{c}_{i(j+1)}, j = 1, \dots, N_c$ unterteilt, wobei

$$\mathbf{c}_{i0} = \frac{1}{N_c} \sum_{j=1}^{N_c} \mathbf{c}_{ij} \quad (3.11)$$

und $\mathbf{c}_{i(N_c+1)} \equiv \mathbf{c}_{i1}$ gelten soll. Durch Anwenden der Gauß-Integration zweiter Ordnung (drei Stützstellen je Dreieck) ermitteln wir die Schwerpunkte $\mathbf{x}_j^{*\triangleright}$ und Massen M_j^{\triangleright} einzelner Dreiecke näherungsweise und erhalten dann mit

$$\mathbf{x}_i^* = \frac{\sum_{j=1}^{N_c} M_j^{\triangleright} \mathbf{x}_j^{*\triangleright}}{\sum_{j=1}^{N_c} M_j^{\triangleright}} \quad (3.12)$$

den approximierten Schwerpunkt der Voronoi-Region V_i . Die dabei benötigten Koordinaten der Gauß-Punkte und die zugeordneten Gewichte werden z. B. von Bathe (1986) angegeben. Numerische Experimente haben gezeigt, dass die naheliegende Idee, anstelle von (3.11) die Stützstelle \mathbf{x}_i zu verwenden, schlechtere Ergebnisse liefert. Gilt $\rho = \text{const}$, so berechnen wir den Schwerpunkt der Voronoi-Region exakt (vgl. z. B. Kessel und Fröhling, 1998).

Nach der Berechnung der Schwerpunkte einzelner Voronoi-Regionen werden die Koordinaten innerer Stützstellen durch $\mathbf{x}_i \leftarrow \mathbf{x}_i^*$ aktualisiert.

3.4.5 Erweiterung des PSLG durch Kreisbogensegmente

Die Erweiterung eines PSLG durch Kreisbogensegmente bedarf einiger zusätzlicher Erläuterungen. Hierzu betrachten wir ein einfaches Grundgebiet, das durch einen Halbkreis

beschrieben werden soll. Bild 3.7 zeigt den Inhalt der zugehörigen Eingabedatei. #-Zeichen leiten Kommentarzeilen ein.

```

# 1. Block: Stützstelleninformationen
# Anzahl Dimension des Grundgebietes Marker
   3           2           0 1
# Indices Knotenkoordinaten: x y Knotenmarker
   1           1 0 2
   2           0 1 1
   3          -1 0 2

# 2. Block: Segmentinformationen
# Anzahl Marker
   3 1
# Indices Stützstellenindices: 1. 2. Segmentmarker
   1 1 2 1
   2 2 3 2
   3 3 1 3

# 3. Block: Information über Löcher im Grundgebiet
# Anzahl
   0

# 4. Block: Erweiterung durch Kreisbogensegmente
# Anzahl
   1
# Indices Stützstellenindices: 1. 2. 3.
   1 1 2 3

```

Bild 3.7: Eingabedatei für ein durch ein Kreisbogensegment begrenztes Grundgebiet

Die Blöcke 1-3 stimmen vollständig mit dem Eingabe-Format des Programms **Triangle** überein. Insbesondere enthält der erste Block die Koordinaten der Stützstellen. Im zweiten Block werden die Randsegmente festgelegt. Der dritte sieht die Möglichkeit vor, Grundgebiete mit Löchern zu erzeugen, was im vorliegenden Beispiel nicht von Interesse ist.

Der zusätzliche vierte Block enthält die Information über Kreisbogensegmente. In dem betrachteten Beispiel liegt ein Kreisbogensegment vor, das durch die Knoten mit den Indices 1, 2 und 3 festgelegt ist. Der erste und der dritte Index geben die festliegenden Randknoten des Kreisbogensegments (Knotenmarker 2) an, der zweite eine weitere auf dem Kreisbogensegment bewegliche Stützstelle (Knotenmarker 1). Bild 3.8a veranschaulicht die in der Eingabedatei beschriebene Konfiguration geometrisch.

Um die Lage eines Punktes auf dem Kreisbogensegment festzulegen, ermitteln wir

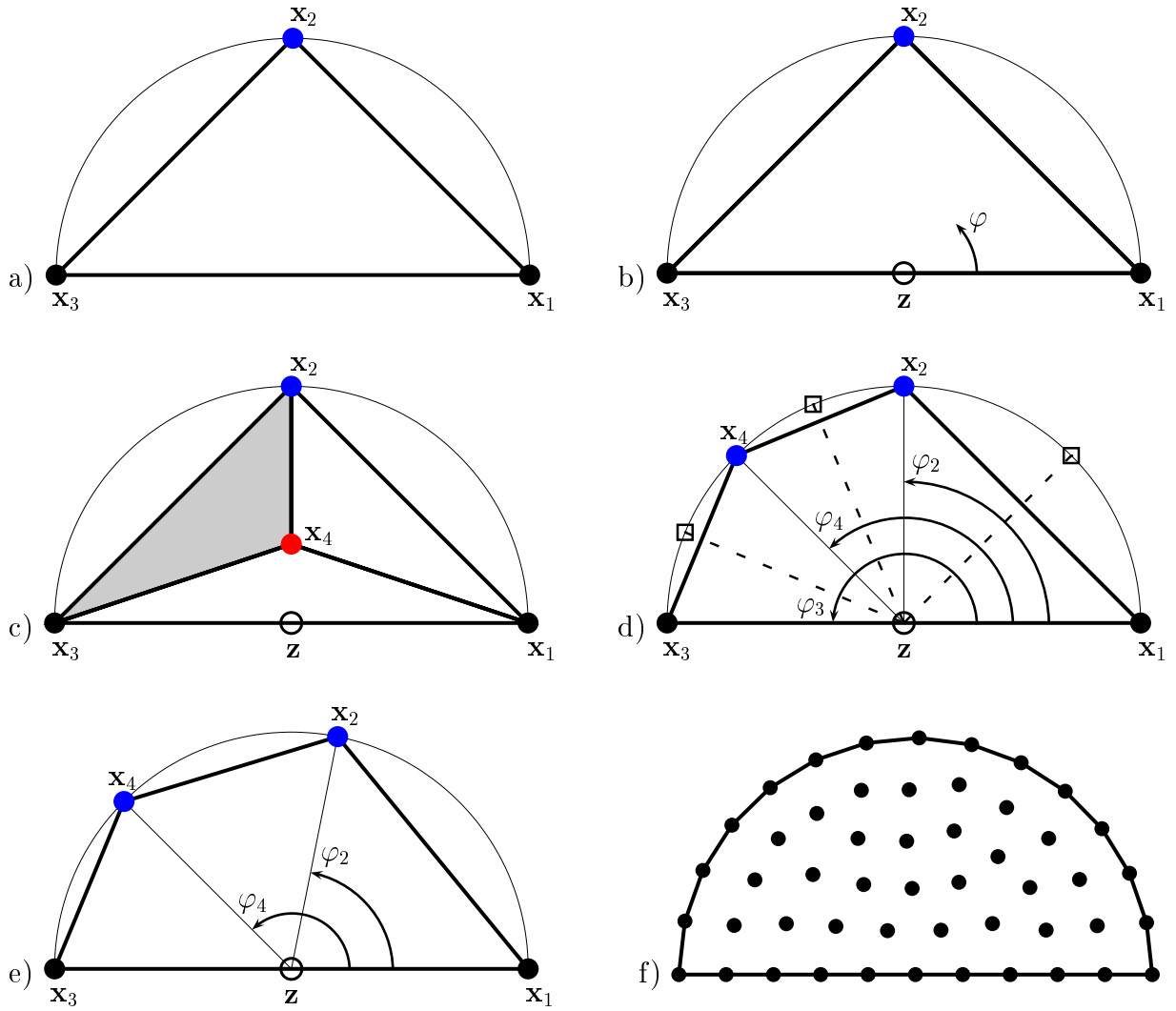


Bild 3.8: Zur Behandlung von kreisförmig berandeten Grundgebieten

zunächst den Mittelpunkt \mathbf{z} des Kreises durch \mathbf{x}_1 , \mathbf{x}_2 und \mathbf{x}_3 (Bild 3.8b) und führen sodann die Koordinate φ so ein, dass sie den Winkel ausgehend von der Geraden durch \mathbf{z} und \mathbf{x}_1 gegen den Uhrzeigersinn misst. Dann sind die Koordinaten eines beliebigen Punktes auf dem Kreisbogensegment durch die umkehrbar eindeutige Funktion

$$\mathbf{x}(\varphi) = \mathbf{z} + \mathbf{R}(\varphi)(\mathbf{x}_1 - \mathbf{z}), \quad 0 \leq \varphi \leq \varphi_3 \quad (3.13)$$

mit

$$\mathbf{R}(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) \end{pmatrix}$$

und $\varphi_3 = \angle \mathbf{x}_1 \mathbf{z} \mathbf{x}_3$ (vgl. Bild 3.8d) gegeben.

Der Aufbau des Algorithmus in Tabelle 10 bleibt unverändert. Es ist jedoch zu beachten, dass eine randnahe Stützstelle \mathbf{x}_i nun auf dem Kreisbogensegment zu platzieren ist, wenn sie an einem Randdreieck beteiligt ist, dessen Randknoten \mathbf{x}_j und \mathbf{x}_k auf dem Kreisbogensegment liegen, vgl. Bild 3.8c. Als Kriterium für randnahe Stützstellen dient

dabei weiterhin (3.4). Die neuen Koordinaten der Stützstelle erhalten wir aus der zu (3.6) analogen Beziehung für die Winkelkoordinate und nachfolgende Transformation gemäß (3.13):

$$\varphi_i = \frac{\varphi_j + \varphi_k}{2}, \quad \mathbf{x}_i = \mathbf{x}(\varphi_i).$$

Ein Schritt der Lloyd-Iteration entlang eines Kreisbogensegments erfolgt bei konstanter Dichtefunktion in Übereinstimmung mit (3.8). Für eine Stützstelle \mathbf{x}_i und ihre Nachbarn \mathbf{x}_j und \mathbf{x}_k auf dem Kreisbogensegment ist die Voronoi-Region durch die Winkelkoordinaten $(\varphi_i + \varphi_j)/2$ und $(\varphi_i + \varphi_k)/2$ begrenzt. Die neuen Koordinaten der Stützstelle \mathbf{x}_i folgen aus der Winkelkoordinate des Bogenschwerpunkts und (3.13) zu

$$\varphi_i \leftarrow \frac{\varphi_i}{2} + \frac{\varphi_j + \varphi_k}{4}, \quad \mathbf{x}_i = \mathbf{x}(\varphi_i).$$

Die nach einem Iterationsschritt vorliegende Stützstellenverteilung illustriert Bild 3.8e. Die Position der Stützstelle \mathbf{x}_4 bleibt gegenüber Bild 3.8d unverändert, da sie sich bereits im Schwerpunkt ihrer Voronoi-Zelle befand. Bild 3.8f zeigt schließlich eine mit Hilfe des vorgeschlagenen Algorithmus und ausgehend von der Eingabedatei aus Bild 3.7 erzeugte Verteilung von 50 Stützstellen.

Bei veränderlicher Dichte gehen wir analog zu (3.9) vor und benutzen die Gauß-Integration dritter Ordnung auf dem Kreisbogensegment. Für eine auf dem Kreisbogensegment liegende Stützstelle \mathbf{x}_i , deren Position auf dem Kreisbogensegment durch den Winkel φ_i angegeben wird, erfolgt die Aktualisierung durch

$$\varphi_i \leftarrow \frac{\rho(\mathbf{g}_1)\gamma_1 + \rho(\mathbf{g}_2)\gamma_2}{\rho(\mathbf{g}_1) + \rho(\mathbf{g}_2)}, \quad \mathbf{x}_i = \mathbf{x}(\varphi_i).$$

Die Winkel γ_1 und γ_2

$$\gamma_1 = \frac{\varphi_i}{2} + \frac{\varphi_j + \varphi_k}{4} \pm \frac{\varphi_j - \varphi_k}{4\sqrt{3}}$$

bestimmen die Lage der Integrationsstützstellen $\mathbf{g}_1 = \mathbf{x}(\gamma_1)$ und $\mathbf{g}_2 = \mathbf{x}(\gamma_2)$ auf dem Kreisbogensegment, wobei φ_j und φ_k die Positionen der beiden Nachbarstützstellen von \mathbf{x}_i auf dem Kreisbogensegment beschreiben.

Es sei angemerkt, dass die Vorgehensweise prinzipiell geeignet ist, auch nicht kreisförmig gekrümmte Segmente als Teile der Randkontur zu behandeln. Wir gehen darauf nicht weiter ein, da die vorliegende Beschreibung des Grundgebietes durch polygonale Ränder und kreisförmige Übergangsbögen für die meisten technischen Anwendungen ausreichend sein dürfte.

3.5 Ausgewählte Beispiele der Stützstellenverteilung

Die im Folgenden betrachteten Testbeispiele stammen aus Persson und Strang (2004). Ju (2007) verwendet sie ebenfalls zur Konstruktion von Dreiecksnetzen mit einem auf dem Schwerpunkt-Voronoi-Konzept basierenden Algorithmus. Explizite Angaben zur Geometrie der Grundgebiete und der zugehörigen Dichtefunktionen können den zitierten Arbeiten entnommen werden.

Eines der Hauptmerkmale des vorgestellten Algorithmus ist die schrittweise Erweiterung des Knotensatzes beginnend mit den Eckknoten des Grundgebietes bis zur geforderten Stützstellenzahl N . Wir vergleichen diese Strategie mit dem üblichen Vorgehen, die Optimierung des Stützstellensatzes mit der endgültigen Stützstellenzahl zu beginnen.

Zu diesem Zwecke erzeugen wir im jeweiligen Grundgebiet eine regelmäßige und eine zufällige Stützstellenverteilung, wie Bild 3.9b und 3.9c beispielhaft zeigen. Derartige Stützstellenkonfigurationen dienen in der Literatur oft als Startvektoren für die anschließende Iteration. Zur Optimierung dieser Anfangsverteilungen nutzen wir ausschließlich die Iterationsschleife im Unterpunkt 4 des Algorithmus, so dass die Knotenzahl konstant bleibt. Die Anzahl der Iterationsschritte wird bei diesen beiden Varianten so festgelegt, dass die Gesamtzahl der Schwerpunktsberechnungen während der Lloyd-Iterationen und die benötigte CPU-Zeit bei allen drei Varianten in etwa übereinstimmen.

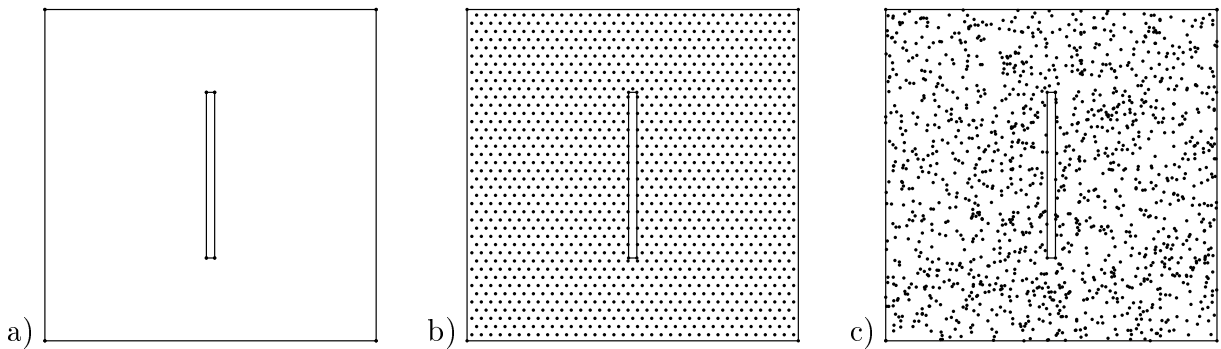


Bild 3.9: Unterschiedliche Anfangsverteilungen der Stützstellen: a) nur die Stützstellen des PSLG, b) PSLG mit einer regelmäßigen und c) einer zufälligen Verteilung der endgültigen Anzahl von Stützstellen.

Die regelmäßige Stützstellenverteilung wird so gewählt, dass die zugehörige Delaunay-Triangulation aus gleichseitigen Dreiecken besteht. Ein solcher Knotensatz ist bei Vorgabe einer konstanten Dichtefunktion (abgesehen von Randeffekten) bereits optimal. Die Anzahl der regelmäßig verteilten Stützstellen legt sowohl die Anzahl der zufällig verteilten Punkte (Bild 3.9b) als auch die Sollzahl N für den Algorithmus gemäß Tabelle 10 fest.

Einen optischen Eindruck der resultierenden Stützstellenverteilungen vermittelt Bild 3.10. Dabei enthält die linke Spalte (Bilder a1-a4) die mit Hilfe des in dieser Arbeit vorgestellten Algorithmus erzielten Ergebnisse. Die Knotensätze in der mittleren Spalte (Bilder b1-b4) wurden ausgehend von anfänglich regelmäßig und in der rechten Spalte (Bilder c1-c4) zufällig verteilten Stützstellen erzeugt. In diesen Abbildungen verzichten wir im Interesse der Übersichtlichkeit auf die Darstellung der Triangulierung.

Zur quantitativen Bewertung der Güte der erzeugten Stützstellenverteilungen bzw. der zugeordneten beschränkten Delaunay-Triangulationen benutzen wir das für die Beurteilung der Qualität von Dreieckselementen verbreitete und insbesondere auch in den oben genannten Veröffentlichungen eingesetzte Maß

$$q = \frac{(b + c - a)(c + a - b)(a + b - c)}{abc}. \quad (3.14)$$

Hierin bezeichnen a , b und c die Seitenlängen eines Dreiecks. (3.14) gibt das doppelte Verhältnis zwischen den Radien des einbeschriebenen und des umschreibenden Kreises

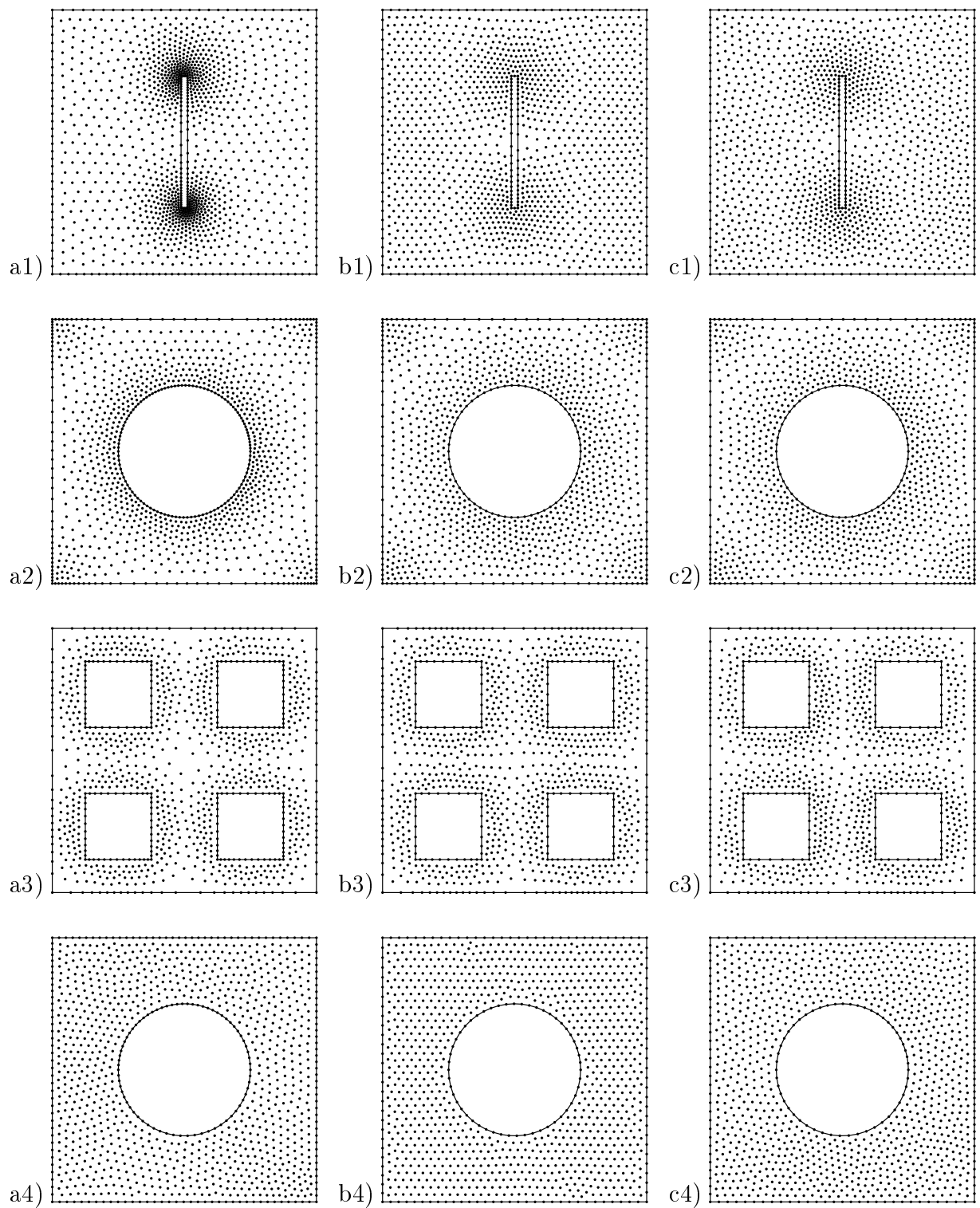


Bild 3.10: Ausgehend von verschiedenen anfänglichen Stützstellenverteilungen, vgl. Bild 3.9, erzeugte Knotensätze

eines Dreiecks an und kann demnach Werte zwischen $q = 1$ für ein gleichseitiges und $q = 0$ für ein degeneriertes Dreieck annehmen. Zur Beurteilung einer Stützstellenverteilung geben wir nachfolgend mit q_{min} den Wert (3.14) für das schlechteste Dreieck und mit \bar{q} den Mittelwert aller Dreiecke der jeweiligen Triangulation an. Die Verwendung dieses triangulationsbezogenen Maßes ermöglicht einerseits Vergleiche mit Ergebnissen anderer Autoren und ist andererseits auch innerhalb der vorliegenden Arbeit von Interesse, da die Auswertung der Gebietsintegrale (Kapitel 2.4.3) auf der Knotentriangulation basiert.

Die Attraktivität des Schwerpunkt-Voronoi-Konzepts für unsere Anwendung besteht u. a. darin, dass durch die Vorgabe einer Dichtefunktion die resultierende Stützstellendichte entsprechend (3.3) gesteuert werden kann. Neben der Qualität einzelner Dreiecke der Knotentriangulation kann ein Algorithmus zur Stützstellenverteilung auch danach beurteilt werden, inwiefern der erzeugte Stützstellensatz durch die vorgegebene Dichtefunktion repräsentiert wird. Der Zusammenhang (3.3) basiert auf gleichen Beiträgen

$$\mathcal{J}_i = \int_{V_i} |\mathbf{y} - \mathbf{x}_i|^2 \rho(\mathbf{y}) dA = \text{const}, \quad i = 1, \dots, N \quad (3.15)$$

aller optimierten Voronoi-Regionen V_i für $N \rightarrow \infty$. Zur quantitativen Bewertung dieser Eigenschaft ordnen wir dem Voronoi-Diagramm den Variationskoeffizienten

$$s_r = \frac{s}{\bar{\mathcal{J}}}$$

zu, der aus dem Mittelwert

$$\bar{\mathcal{J}} = \frac{1}{N_I} \sum_{i=1}^{N_I} \mathcal{J}_i$$

und der Standardabweichung

$$s = \sqrt{\frac{1}{N_I - 1} \sum_{i=1}^{N_I} (\mathcal{J}_i - \bar{\mathcal{J}})^2}$$

berechnet wird. N_I bezeichnet die Anzahl der inneren Stützstellen. Folglich lassen wir die auf dem Gebietsrand liegenden Knoten bei der Bestimmung des Variationskoeffizienten unberücksichtigt, um den Randeinfluss zu verringern. Die Auswertung des Integrals in (3.15) erfolgt analog zur Berechnung des Schwerpunktes einer Voronoi-Region, allerdings wenden wir hier die Gauß-Integration siebter Ordnung (13 Integrationspunkte je Dreieck) an. Von einer hochwertigen Stützstellenverteilung erwarten wir eine möglichst gute Einhaltung des Postulats (3.15), was durch einen kleinen Wert des Variationskoeffizienten s_r zum Ausdruck gebracht wird.

Zusätzlich zu den Qualitätsmaßen geben wir als Grundlage zur Bewertung des erforderlichen Berechnungsaufwandes die Gesamtzahl der Schwerpunktsberechnungen N_{LI} für innere und N_{LR} für Randstützstellen an. Die oben angegebenen Qualitätsmaße sowie die Anzahl der Schwerpunktsberechnungen für die Berechnungsbeispiele aus Bild 3.10 sind in Tabelle 11 aufgelistet.

Tabelle 11: Qualitätsmaße und der erforderliche Aufwand für die in Bild 3.10 präsentierten Stützstellenverteilungen. Prozessor: Intel(R) Core(TM)2 T7600, Taktrate 2.33 GHz, Betriebssystem: Linux Kernel 2.6.18

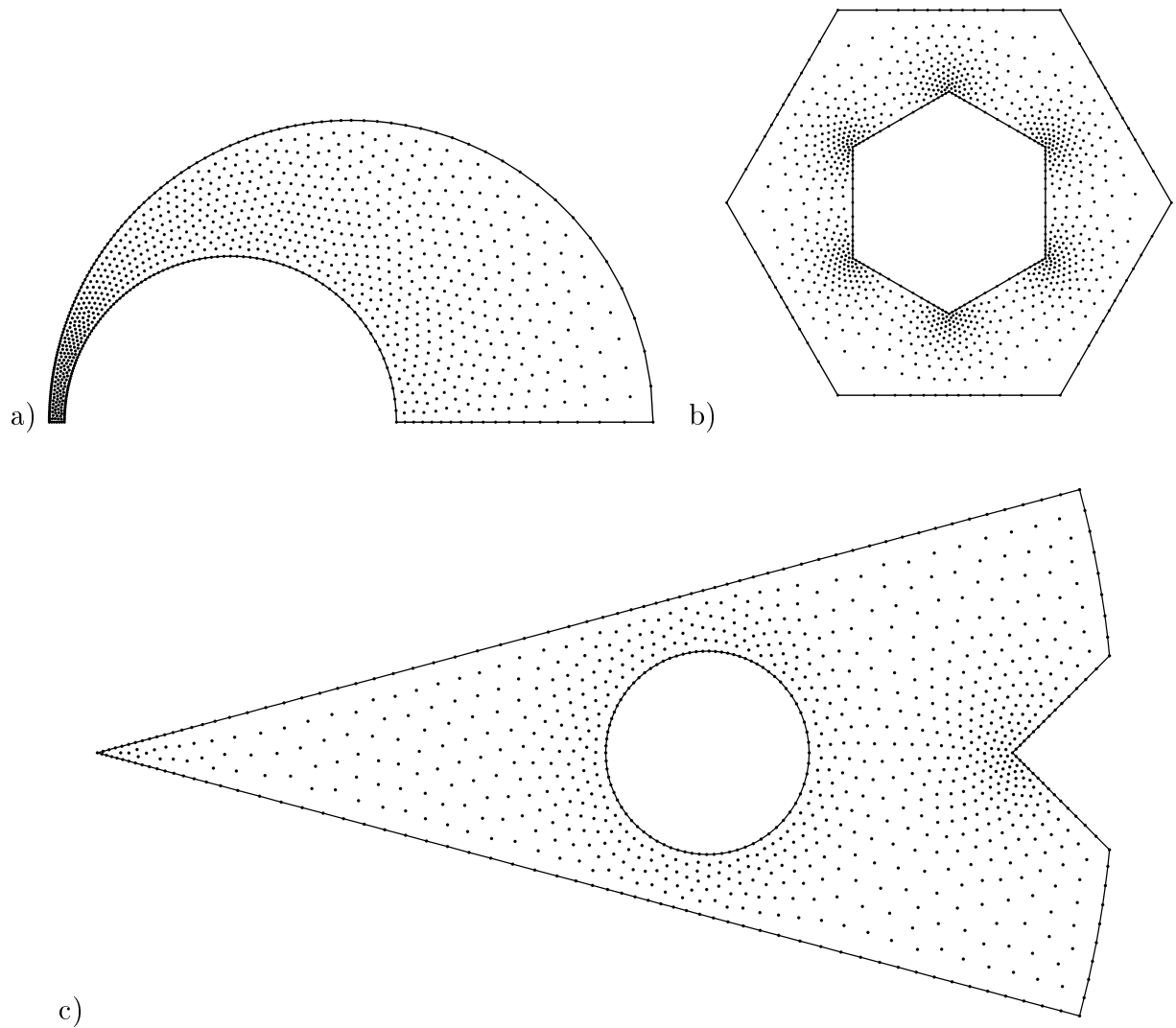
Beispiel	N	q_{\min}	\bar{q}	$10^6 \bar{J}$	s_r	N_{LI}	N_{LR}	CPU/s
Bild 3.10a1	1378	0.6204	0.9591	7.87	0.41	73361	15929	1.1
Bild 3.10b1		0.5645	0.9590	12.4	1.72	82561	13504	1.3
Bild 3.10c1		0.6557	0.9551	12.3	1.68	78658	13908	1.3
Bild 3.10a2	1110	0.6098	0.9452	148	0.24	51231	19989	1.0
Bild 3.10b2		0.6923	0.9587	161	0.73	55976	13087	1.2
Bild 3.10c2		0.7168	0.9543	164	0.76	55538	13623	1.2
Bild 3.10a3	1040	0.6050	0.9326	315	0.31	34148	18560	0.5
Bild 3.10b3		0.5505	0.9324	321	0.44	41019	14628	0.6
Bild 3.10c3		0.5512	0.9329	328	0.53	36267	14557	0.6
Bild 3.10a4	1110	0.6221	0.9585	1710	0.21	61413	17913	0.6
Bild 3.10b4		0.7458	0.9809	1630	0.09	62807	11988	0.7
Bild 3.10c4		0.6801	0.9629	1670	0.21	61356	13505	0.6

Die kleinen Werte des Variationskoeffizienten s_r bei Stützstellenverteilungen, die durch die schrittweise Erweiterung des Stützstellensatzes erzielt wurden (Variante a der Anfangsverteilung), belegen die Vorteile der vorgeschlagenen Technik. Bereits mit einer relativ geringen Anzahl der Lloyd-Iterationen liefert der vorgeschlagene Algorithmus eine Stützstellenverteilung in guter Übereinstimmung mit der vorgeschriebenen Dichtefunktion. Ausgehend von der endgültigen Stützstellenzahl (Varianten b und c der Anfangsverteilung) ist es ebenfalls möglich, vergleichbar kleine Werte des Variationskoeffizienten zu erreichen. Hierfür sind jedoch z. T. deutlich mehr Iterationsschritte und damit höhere Rechenzeiten erforderlich. So lässt sich der Variationskoeffizient für das Beispiel aus Bild 3.10b1 auf den Wert $s_r = 0.84$ reduzieren, wenn die Anzahl der Lloyd-Iterationen auf $N_{LI} = 665712$ und $N_{LR} = 102798$ erhöht wird, wodurch die Rechenzeit auf 9.7 Sekunden ansteigt.

Das Beispiel der unteren Zeile in Bild 3.10 wurde im Gegensatz zu allen anderen mit einer konstanten Dichtefunktion berechnet. Die quasi optimale regelmäßige Anfangsverteilung mit einer Delaunay-Triangulation aus gleichseitigen Dreiecken erklärt das bessere Abschneiden der Variante Bild 3.10b4.

Ein weiterer Vorteil unserer Technik besteht darin, dass die Erzeugung der anfänglichen Stützstellenverteilung, die zusätzlichen Berechnungsaufwand erfordert, entfällt. Bild 3.11 illustriert weitere Stützstellenverteilungen in Grundgebieten mit komplexerer Geometrie und unterstreicht damit die Leistungsfähigkeit des in der vorliegenden Arbeit vorgestellten Algorithmus.

Alle berechneten Stützstellenverteilungen zeichnen sich durch eine hohe Qualität der zugeordneten Triangulation aus. Persson und Strang (2004) geben als Untergrenze für ein gutes Dreieck den Wert von $q = 0.5$ an. In allen Testbeispielen sind danach die Dreiecke mit der niedrigsten Qualität noch als gut einzuordnen.



Beispiel	N	q_{\min}	\bar{q}	$10^6 \bar{J}$	s_r	N_{LI}	N_{LR}	CPU/s
Bild a	1000	0.6296	0.9479	0.982	0.65	27638	13015	0.4
Bild b	1000	0.7122	0.9434	8.51	0.2	37774	10884	0.7
Bild c	1000	0.6058	0.9444	0.139	0.35	33385	15462	0.6

Bild 3.11: Weitere Beispiele der mit Hilfe des neuen Algorithmus erzeugten Stützstellenverteilungen

In einigen Beispielen führt der Einsatz des vorgestellten Algorithmus zu einer höheren Stützstellendichte auf dem Gebietsrand im Vergleich zum Gebietsinnern. Sicherlich lässt sich die Güte der Stützstellenverteilung insbesondere in Bezug auf die Qualität der zugeordneten Triangulation durch Erweiterungen bzw. Modifikationen steigern. Im Hinblick auf die Behandlung von Randwertproblemen kann die Tendenz zu einer feineren Diskretisierung des Randes als sinnvoll gewertet werden, da damit eine genauere Erfüllung von Randbedingungen möglich wird.

4 Numerische Untersuchungen im Rahmen der linearen Elastostatik

Im vorliegenden Kapitel wenden wir die beschriebene Implementierung des netzfreien Diskretisierungsverfahrens auf eindimensionale und ebene Probleme der linearen Elastostatik an. Der Vergleich der Ergebnisse mit exakten Lösungen und bekannten Resultaten aus der Literatur erfolgt mit dem Ziel, die Implementierung zu validieren. Neben der Überprüfung des Programmcodes bilden die hier präsentierten Ergebnisse auch eine Grundlage für die Beurteilung der in Kapitel 2.3 diskutierten Methoden zur Behandlung wesentlicher Randbedingungen sowie des Einflusses der numerischen Quadratur auf die Ergebnisgenauigkeit.

Die Struktur der entwickelten Programme kann in einfacher Weise dazu genutzt werden, Finite-Elemente-Rechnungen durchzuführen. Die hierfür notwendigen Anpassungen beschränken sich im Wesentlichen auf den Austausch der Unterrouinen zur Berechnung der Ansatzfunktionen und ihrer Ableitungen. Wir geben deshalb im Folgenden auch die für lineare FE-Ansatzfunktionen erzielten Ergebnisse an und haben damit eine zusätzliche Möglichkeit zur Qualitätsbewertung der im Mittelpunkt der Untersuchungen stehenden MLS-Lösungen.

In diesem Kapitel setzen wir durchgängig linear-elastisches Materialverhalten homogener und isotroper Werkstoffe unter der Annahme kleiner Verschiebungen und Verzerrungen (physikalische und geometrische Linearität) voraus. Ferner benutzen wir stets normierte Größen ohne dies in den Bezeichnungen gesondert zum Ausdruck zu bringen. Allen ebenen Problemen liegt eine Querkontraktionszahl von $\nu = 0.3$ zu Grunde.

Zur quantitativen Beurteilung der Güte der gewonnenen Näherungslösungen berechnen wir für jedes Testbeispiel den Wert des relativen Fehlers in den Verschiebungen

$$\sqrt{\frac{\int_{\Omega} (\mathbf{u}^h - \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{u}^h - \mathbf{u}) dV}{\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} dV}} \quad (4.1)$$

und des relativen Fehlers in der Energie

$$\sqrt{\frac{\int_{\Omega} (\boldsymbol{\varepsilon}^h - \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \mathbf{C} (\boldsymbol{\varepsilon}^h - \boldsymbol{\varepsilon}) dV}{\int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon} dV}} \quad (4.2)$$

bezüglich der jeweiligen analytischen Lösung. Mit der Angabe dieser in der Literatur häufig verwendeten Fehlernormen (vgl. z. B. Belytschko et al., 1995), wird ein Vergleich mit den in anderen Arbeiten präsentierten Resultaten möglich.

Zur Lösung der globalen Systeme linearer Gleichungen verwenden wir bei allen in diesem Kapitel besprochenen Beispielproblemen das frei verfügbare Unterprogramm MA27 aus dem HSL ARCHIVE¹². An das Unterprogramm werden neben der vollständigen rechten Seite ausschließlich die von Null verschiedenen Koeffizienten der unteren bzw. oberen Dreiecksmatrix in der Form i, j, K_{ij} übergeben. i und j bezeichnen hierbei den Zeilen-

¹²<http://hsl.rl.ac.uk/archive>

bzw. Spalten-Index des Koeffizienten K_{ij} der Steifigkeitsmatrix. Die Speicherung der Steifigkeitsmatrix in dieser kompakten Form wird ermöglicht durch den Einsatz des in Kapitel 2.4.4 vorgeschlagenen Algorithmus zur Bestimmung der Konnektivitätsbeziehungen bei MLS-Diskretisierungen. Damit werden die schwache Besetzung und die Symmetrie der Steifigkeitsmatrix ausgenutzt, so dass die Behandlung von Problemen mit einer vergleichsweise großen Anzahl von Freiheitsgraden bei geringem Speicherbedarf recht effizient erfolgen kann.

Die Anforderungen an die Genauigkeit der Näherungslösungen wurden aus zwei Gründen bewusst strenger gewählt als dies für viele technische Anwendungen erforderlich ist. Einerseits ist ja gerade das Ziel der Konvergenzuntersuchung, das Lösungsverhalten für den Diskretisierungsparameter $h \rightarrow 0$ zu studieren, und andererseits sind die bei feiner Diskretisierung erwarteten hohen Genauigkeitswerte besonders geeignet, Mängel der Implementierung aufzudecken.

4.1 Vergleich der Techniken zur Behandlung kinematischer Randbedingungen

Zur Kennzeichnung der in diesem Unterkapitel eingesetzten Berechnungsmethoden verwenden wir folgende abkürzende Bezeichnungen:

MLSrf	MLS-Ansatzfunktionen mit einer Rampenfunktion nach Belytschko et al. (1995)
MLSmk	MLS-Ansatzfunktionen unter Verwendung der modifizierten Konsistenzbedingung nach Huerta und Fernández-Méndez (2000)
MLSIm	MLS-Ansatzfunktionen in Verbindung mit der Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren
FEM	Finite-Element-Methode mit linearen Verschiebungsansätzen

Ein eindimensionales Problem

Wir betrachten das eindimensionale Randwertproblem

$$u_{,xx}(x) + x = 0 \quad \text{in } \Omega = \{x \mid 0 \leq x \leq 1\}, \quad u(0) = 0, \quad u_x(1) = 0, \quad (4.3)$$

das man z. B. für den Zugstab unter linear veränderlicher Streckenlängsbelastung in dimensionsloser Darstellung erhält. Die räumliche Diskretisierung erfolgt ausgehend von $N = 11$ äquidistant verteilten Knoten mit den Koordinaten x_i , $i = 1, \dots, N$, wobei hier und im Folgenden $x_i < x_{i+1}$, $i = 1, \dots, N - 1$ gelten soll. Durch Einfügen neuer Stützstellen in die Mittelpunkte der bestehenden Intervalle erhöhen wir die Stützstellendichte schrittweise. Die verwendeten Stützstellenzahlen sind

$$N = 2^i \cdot 10 + 1, \quad i = 0, \dots, 7 \quad (4.4)$$

und der Diskretisierungsparameter ist

$$h = 1/(N - 1). \quad (4.5)$$

Die Gebietsintegrale werden durch Gauß-Quadratur mit 5 Integrationsstützstellen je Intervall $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 1, \dots, N - 1$ bestimmt. Den Skalierungsparameter für die Größe der Einflussbereiche setzen wir $c_r = 2$. Die Größe der Einflussbereiche ω_i ergibt sich dann zu $r_i = 2h$, $i = 1, \dots, N$, wenn die hinreichende Überdeckung gemäß (2.46) bestimmt wird.

Bild 4.1 illustriert die mit Hilfe der Implementierung gemäß Kapitel 2 berechneten Ergebnisse. Die dem Diskretisierungsparameter zugeordneten Werte der relativen Fehler (4.1) und (4.2) sind als Punkte im jeweiligen Diagramm dargestellt. Die Konvergenzrate wird als Steigung der Geraden bestimmt, die die berechneten Fehlerwerte bei doppelt logarithmischer Skalierung der Achsen optisch hinreichend genau wiedergibt. Die Geradenverläufe, die die in Klammern angegebene Konvergenzrate festlegen, werden zusätzlich zu den Fehlerwerten in der entsprechenden Farbe dargestellt. Die Auswertung der Integrale zur Bestimmung der Fehlernormen erfolgt unter Verwendung der Gauß-Integration mit 6 Stützstellen je Intervall.

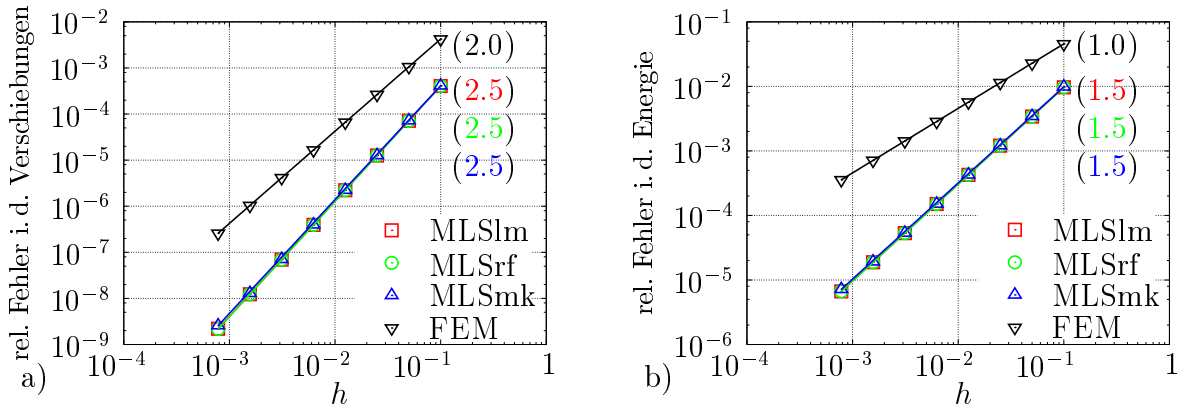


Bild 4.1: Konvergenzstudie für das Randwertproblem (4.3): äquidistante Stützstellenverteilung, $c_r = 2$, $n_G = 5$

Die Finite-Elemente-Methode konvergiert mit den bekannten Raten 2 und 1 bezüglich des Fehlers in den Verschiebungen bzw. der Energie (linearer Ansatz, Randwertproblem zweiter Ordnung). Die MLS-Diskretisierung weist höhere Konvergenzraten auf und liefert dabei geringere Abweichungen von den exakten Lösungen als die entsprechenden FE-Rechnungen. Dieses Verhalten ist aus der Literatur bekannt. Insbesondere reproduzieren unsere Ergebnisse die von Dolbow und Belytschko (1999) für die MLSrf-Variante mitgeteilten Resultate exakt. Die Ergebnisse für die drei Techniken der MLS-Methode zur Behandlung der kinematischen Randbedingungen stimmen nahezu überein.

Die in Bild 4.1 illustrierten Ergebnisse stellen in zweifacher Hinsicht einen Sonderfall dar. Erstens gilt für den inneren Bereich des Grundgebietes $x_2 \leq x \leq x_{N-1}$ bei Verwendung des kubischen Splines (2.30) als Fensterfunktion in Verbindung mit einer

äquidistanten Stützstellenverteilung und der Größe der Einflussbereiche von $2h$

$$\sum_{i=1}^N w_i(x) = K \quad (4.6)$$

$$\sum_{i=1}^N w_i(x)x_i = Kx, \quad (4.7)$$

wobei K eine von der Skalierung der Fensterfunktion abhängige Konstante ist. Demnach stimmen die MLS-Ansatzfunktionen im Gebietsinnern bis auf eine Konstante mit den Fensterfunktionen überein (vgl. auch Dolbow und Belytschko, 1999). Im vorliegenden Beispiel sind somit die bei der Bestimmung der Steifigkeitsmatrix und der rechten Seite auftretenden Integranden Polynome vom Grad 4, wenn die Beiträge der Integrale im Gebietsinnern ausgewertet werden, und können durch 3-Punkt Gauß-Quadratur mit Maschinengenauigkeit berechnet werden. Fehler auf Grund der numerischen Integration können also nur infolge der Integralberechnung in den Randsegmenten $[x_1, x_2]$ und $[x_{N-1}, x_N]$ auftreten¹³. Wir merken an, dass vergleichbare Sonderfälle bei jedem geradzahigen Überdeckungsparameter $c_r = 4, 6, \dots$ vorliegen können.

Um die zweite Besonderheit des betrachteten Beispiels herauszuarbeiten, betrachten wir die MLS-Ansatzfunktionen in ihrer unveränderten Form. Die Stützstelle $x_1 = 0$, an der die Kinematik vorgegeben werden soll, liegt im Einflussbereich von genau zwei Knoten, x_1 und x_2 . Somit können nur die beiden Ansatzfunktionen ϕ_1 und ϕ_2 von Null verschiedene Werte an der Stelle x_1 aufweisen. Die Werte $\phi_1(x_1)$ und $\phi_2(x_1)$ lassen sich in einfacher Weise berechnen. Hierzu gehen wir von (2.26) aus und bestimmen die gesuchten Koeffizienten $a_1(x_1)$ und $a_2(x_1)$ als Lösung des linearen Gleichungssystems (2.25), das im vorliegenden Fall die Form

$$\left(w_1(x_1) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + w_2(x_1) \begin{pmatrix} 1 & x_2 - x_1 \\ x_2 - x_1 & (x_2 - x_1)^2 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} a_1(x_1) \\ a_2(x_1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

besitzt. Setzen wir nun die Lösung von (4.8)

$$a_1(x_1) = \frac{1}{w_1(x_1)}, \quad a_2(x_1) = -\frac{1}{w_1(x_1)(x_2 - x_1)} \quad (4.9)$$

in (2.26) ein, so erhalten wir für die Werte der Ansatzfunktionen

$$\phi_1(x_1) = 1 \quad \text{und} \quad \phi_2(x_1) = 0. \quad (4.10)$$

Da für alle anderen Ansatzfunktionen ebenfalls $\phi_i(x_1) = 0$, $i = 3, \dots, N$ gilt, ist die Kronecker-Delta-Eigenschaft

$$\phi_i(\mathbf{x}_1) = \delta_{i1} \quad (4.11)$$

am linken Randknoten erfüllt und die kinematische Randbedingung kann ohne Modifikationen der MLS-Ansatzfunktionen analog zur Finite-Elemente-Methode berücksichtigt werden. Die Verwendung der modifizierten Konsistenzbedingung nach Huerta und

¹³Diese Aussage gilt bei Verwendung der modifizierten Konsistenzbedingung nur in einer abgewandelten Form, da der Einsatz dieser Technik eine Vergrößerung des Einflussbereiches der Stützstelle \mathbf{x}_3 erforderlich macht, wie in Kapitel 2.3 bereits besprochen.

Fernández-Méndez (2000) bzw. der Rampenfunktion nach Belytschko et al. (1995) mit dem Ziel, (4.11) zu erzwingen, bewirkt keine entscheidenden Veränderungen der Ansatzfunktionen, was die Übereinstimmung der Ergebnisse in Bild 4.1 für die verschiedenen Techniken begründet.

Um die Wirkung der unterschiedlichen Methoden sichtbar zu machen, vergrößern wir die den einzelnen Stützstellen zugeordneten Einflussbereiche, indem wir $c_r = 3$ wählen, also mit einer Überdeckung von $3h$ rechnen. Beide Besonderheiten entfallen jetzt. Die nach dieser Änderung für das Randwertproblem (4.3) ermittelten Ergebnisse zeigt Bild 4.2.

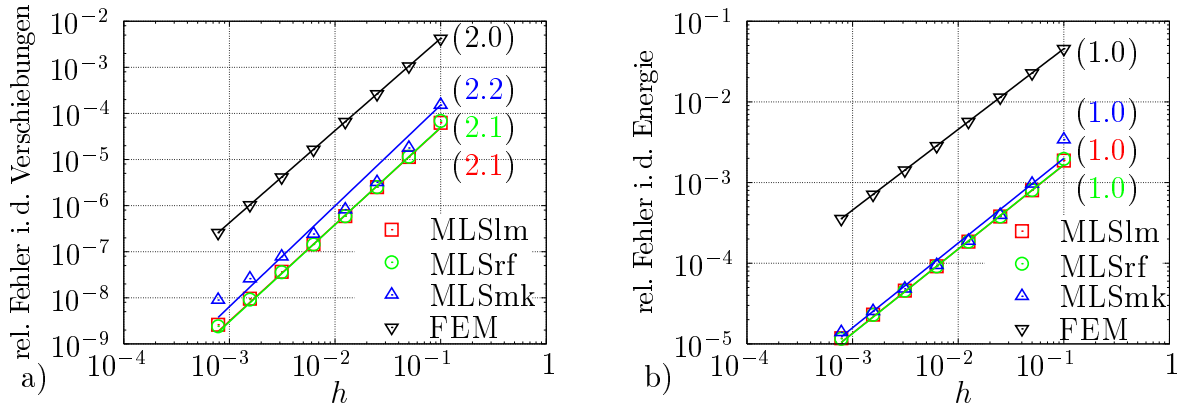


Bild 4.2: Konvergenzstudie für das Randwertproblem (4.3): äquidistante Stützstellenverteilung, $c_r = 3$, $n_G = 5$

Alle drei MLS-Varianten konvergieren jetzt nur noch mit der Rate der Finite-Elemente-Methode. Es werden jedoch bei geringen Stützstellenzahlen genauere Ergebnisse erzielt als bei der vorangegangenen Rechnung mit kleineren Einflussbereichen. Dass die Vergrößerung der Einflussbereiche zu einer Steigerung der Ergebnisgenauigkeit führen kann, ist eine aus der Literatur bekannte Eigenschaft der MLS-Diskretisierung.

Die Ergebnisse in Bild 4.2 liefern neben der Bestätigung des erwarteten Verhaltens der Implementierung einen ersten Hinweis auf die unterschiedlichen Wirkungen der hier zum Vergleich stehenden Techniken zur Erfüllung der kinematischen Randbedingungen. Während die von Belytschko et al. (1995) vorgeschlagene Methode weiterhin mit der Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren übereinstimmende Ergebnisse liefert, werden mit Hilfe der von Huerta und Fernández-Méndez (2000) vorgeschlagenen Technik geringfügig schlechtere Resultate erzielt.

Wir überprüfen nun die Gültigkeit dieser Tendenz für Problemstellungen aus der ebenen Elastostatik. Auf Grund eines stärkeren Randeinflusses verglichen mit eindimensionalen Problemen erwarten wir von zweidimensionalen Rechnungen eine höhere Aussagekraft bezüglich der Techniken zur Erfüllung der Randbedingungen.

Kurzer Kragbalken

Ein quadratisches Grundgebiet $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$ sei am rechten Ende $x = 1$ durch eine zu $y(y - 1)$ proportionale Verteilung der Schubspannungskomponente σ_{xy} beansprucht.

Die Längsränder $y = 0$ und $y = 1$ seien spannungsfrei. Am linken Rand $x = 0$ seien die Verschiebungen der analytischen Lösung für den ebenen Verzerrungszustand vorgegeben. Das Spannungs- und Verschiebungsfeld für dieses Standardproblem der linearen Elastostatik kann der Literatur, z. B. Hegen (1997), entnommen werden.

Wir berechnen Näherungslösungen für quadratische Punktgitter, deren Maschenweiten von $h = 0.2$ auf $h = 0.2/16 = 0.0125$ verkleinert werden, so dass die Stützstellenzahlen von $N = 36$ auf $N = 6561$ anwachsen.

Jeder Stützstelle wird ein kreisförmiger Einflussbereich mit dem Radius $2h$ zugeordnet. Die Integration erfolgt basierend auf der dem Knotensatz zugeordneten Delaunay-Triangulation mit 13 Gauß-Punkten in jedem Dreieck. Zur näherungsweise Berechnung der Fehlernormen benutzen wir ebenfalls die Gauß-Quadratur mit 13 Stützstellen in jedem Dreieck.

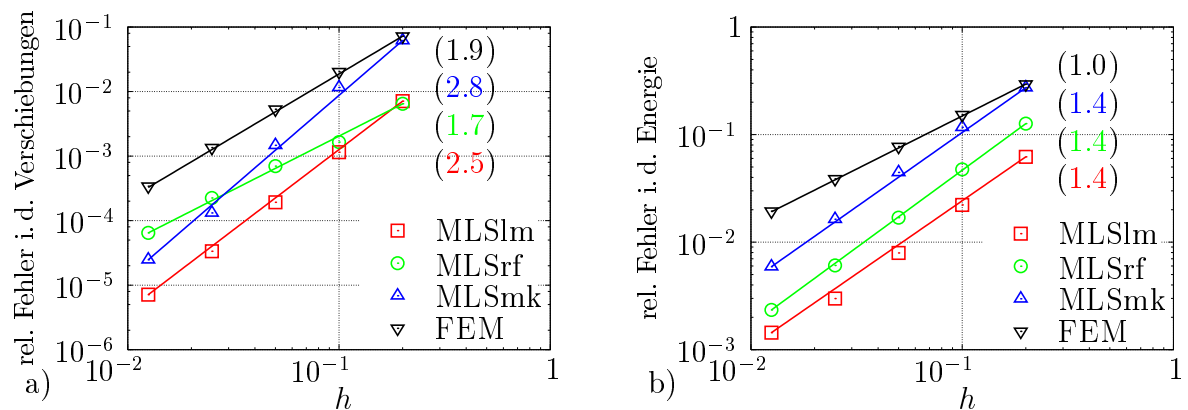


Bild 4.3: Konvergenzstudie: Kragbalken, regelmäßige Stützstellenverteilung, kreisförmige Einflussbereiche, $c_r = 2$, $n_G = 13$

Das Konvergenzverhalten der untersuchten Verfahren ist in Bild 4.3 illustriert. Die Anwendung der Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren liefert die höchste Genauigkeit. Die Ergebnisse stimmen mit den von Hegen (1997) präsentierten Resultaten für ein analoges Problem ($\nu = 0.25$) in dem von Hegen untersuchten Bereich bis zu 1681 Stützstellen überein. Die mit der Technik der Rampenfunktion und der modifizierten Konsistenzbedingung erzielten Genauigkeiten sind geringer. Beide Techniken führen dennoch zu deutlich besseren Näherungslösungen verglichen mit den Finite-Elemente-Ergebnissen. Dabei kommen die im vorangegangenen eindimensionalen Testbeispiel festgestellten Vorteile der Methode von Belytschko et al. (1995) gegenüber der Technik von Huerta und Fernández-Méndez (2000) nun deutlicher zum Ausdruck, jedenfalls wenn man die Fehler in der Energienorm betrachtet.

Scheibe mit Loch

Eine Scheibe mit kreisförmigem Loch im Koordinatenursprung sei so belastet, dass für $x^2 + y^2 \rightarrow \infty$ ein einachsiger Spannungszustand $\sigma_{xx} = 1$, $\sigma_{yy} = 0$, und $\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$ vorliegt. Der Lochrand $x^2 + y^2 = 1$ sei spannungsfrei. Der Spannungszustand und das

Verschiebungsfeld sollen in der Umgebung des Loches unter der Annahme des ebenen Spannungszustandes approximiert werden.

Wir nutzen die Symmetrieeigenschaften dieses Systems und bestimmen die gesuchten Funktionen nur im ersten Quadranten. Entlang der Gebietsränder $x = 5$ und $y = 5$ geben wir den bekannten Spannungszustand der analytischen Lösung vor¹⁴. Auf den Rändern $x = 0$ und $y = 0$ schreiben wir mit Hilfe der jeweiligen Technik zur Erfüllung der kinematischen Randbedingungen die Verschiebungswerte der analytischen Lösung vor.

Die geometrische Diskretisierung des Grundgebietes erfolgt durch Stützstellenverteilungen veränderlicher Dichte mit Stützstellenzahlen $N = 50, 100, 200, 500, 800, 2000, 3200, 5000$, und 10000 . Den Diskretisierungsparameter h berechnen wir als die mittlere Kantenlänge der dem jeweiligen Stützstellensatz zugeordneten eingeschränkten Delaunay-Triangulation. Bild 4.4 illustriert beispielhaft die durch den Einsatz des in Kapitel 3.4 präsentierten Algorithmus erzeugten Stützstellenverteilungen.

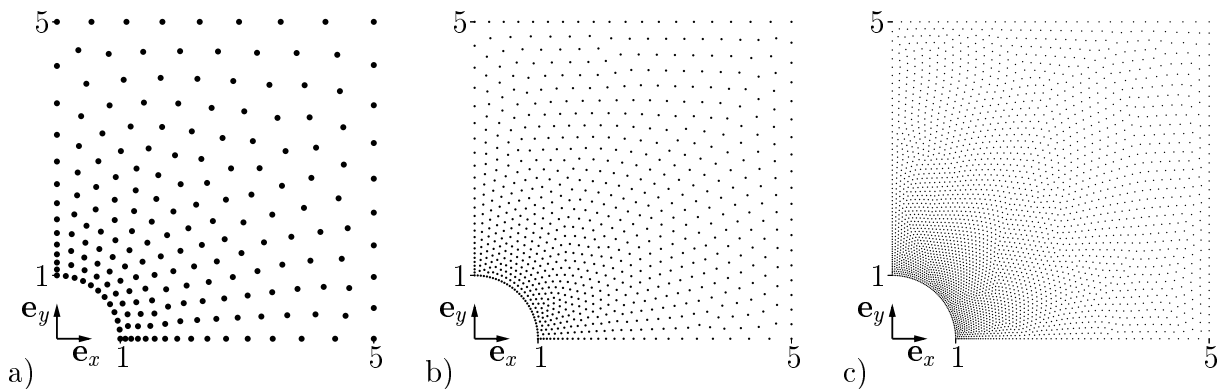


Bild 4.4: Geometrische Diskretisierung der Scheibe mit Loch durch a) 200 Stützstellen ($h = 0.39$), b) 800 Stützstellen ($h = 0.18$), c) 3200 Stützstellen ($h = 0.09$)

Die Größe der kreisförmigen Einflussbereiche bestimmen wir durch den Einsatz der in Kapitel 2.2 vorgestellten Strategie, wobei $c_r = 2$ gesetzt wird. Auch bei diesem Beispiel verwenden wir die Gauß-Integration mit 13 Stützstellen in jedem Dreieck der Stützstellen-triangulation zur Berechnung der Koeffizienten der Steifigkeitsmatrix und der Fehlernormen. Zur Berechnung der Koeffizienten der rechten Seite des linearen Gleichungssystems infolge von Randspannungen benutzen wir durchgängig die Gauß-Integration mit vier Stützstellen innerhalb des jeweiligen Randsegmentes bzw. der jeweiligen Integrationszelle.

Die Ergebnisse der Konvergenzstudie bestätigen den an den vorangegangenen Beispielen erkannten Trend (Bild 4.5). Der Einsatz der Lagrangeschen Multiplikatoren liefert die beste Approximation der exakten Lösung. Die Ergebnisse stehen bei Berücksichtigung der Unterschiede in der geometrischen Diskretisierung in guter Übereinstimmung mit den Resultaten von Hegen (1997) in dem von Hegen untersuchten Bereich bis zu 441 Stützstellen.

Das Verfahren von Huerta und Fernández-Méndez (2000) weist auch bei diesem Vergleich schlechtere Ergebnisse auf als die Technik von Belytschko et al. (1995). Insbesondere erhält man damit bei kleinen Stützstellenzahlen ($N = 50$ und $N = 100$) Resultate, die nur

¹⁴vgl. z. B. Hegen (1997)

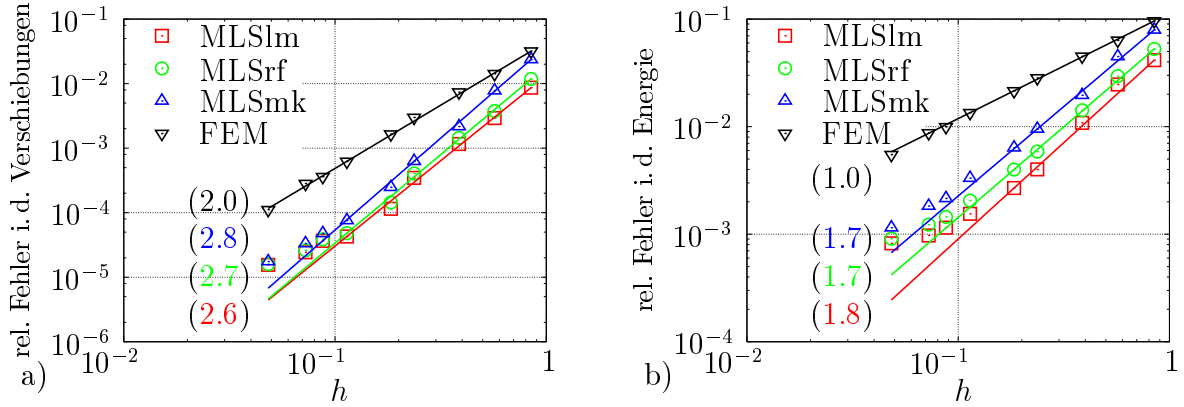


Bild 4.5: Konvergenzstudie: Scheibe mit Loch, kreisförmige Einflussbereiche, $c_r = 2$, $n_G = 13$

geringfügig von denen der Finite-Elemente-Methode abweichen. Die anderen beiden Techniken liefern bereits bei grober Diskretisierung eine nennenswerte Verbesserung gegenüber den FE-Lösungen.

Eine Erklärung für dieses Verhalten liefert schon der optische Vergleich der modifizierten MLS-Ansatzfunktionen in Bild 2.6b und 2.7. Die Verwendung der Rampenfunktion erzeugt modifizierte MLS-Ansatzfunktionen am Gebietsrand, wohingegen bei dem von Huerta und Fernández-Méndez vorgeschlagenen Verfahren die ursprünglichen MLS-Ansatzfunktionen an den Randknoten mit bekannter Kinematik vollständig durch FE-Ansatzfunktionen ersetzt werden. Bei geringen Stützstellenzahlen und folglich deutlichem Randeinfluss dominiert dann der FE-Charakter der Ansatzfunktionen am Gebietsrand das Gesamtergebnis.

Weiterhin machen die Ergebnisse in Bild 4.5 deutlich, dass die Konvergenzrate der MLS-Diskretisierungen bei hohen Stützstellenzahlen merklich abnimmt. Fries und Matties (2004) weisen ebenfalls auf dieses Phänomen hin und begründen es mit dem zunehmendem Einfluss des Fehlers infolge der numerischen Integration. Belytschko et al. (1996b) merken an, dass die Komplexität der mit Hilfe der Rampenfunktion konstruierten Ansatzfunktionen den Einsatz numerischer Integrationsverfahren höherer Ordnung erforderlich macht. Wir untersuchen den Einfluss der Integrationsgenauigkeit systematisch im anschließenden Unterkapitel. Der folgende zweidimensionale Patchtest leitet zu dieser Thematik über und soll zunächst klären, ob die drei unterschiedlichen Techniken zur Behandlung kinematischer Randbedingungen bei gleichem Quadratschema signifikanten Einfluss auf die erzielbare Genauigkeit der MLS-Näherungslösungen haben.

Ein zweidimensionaler Patchtest

In einer quadratischen Scheibe herrsche ein konstanter Spannungszustand

$$\sigma_{xx} = 1, \quad \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0, \quad \sigma_{yy} = 0. \quad (4.12)$$

Das zugeordnete lineare Verschiebungsfeld des ebenen Spannungszustandes

$$\mathbf{u}(x, y) = (u(x, y), v(x, y))^T = \left(x \frac{1}{E}, -y \frac{\nu}{E}\right)^T \quad (4.13)$$

kann durch die hier verwendeten MLS-Ansatzfunktionen linearer Konsistenz exakt reproduziert werden. Mit Hilfe der MLSrf- und der MLSmk-Technik lassen sich die kinematischen Randbedingungen

$$u(0, y) = 0, \quad v(0, 0) = 0$$

exakt erfüllen, während die Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren die Randbedingung $u(0, y) = 0$ nur im integralen Mittel befriedigt. Auf den verbleibenden Rändern geben wir die Randspannungen entsprechend (4.12) vor.

Bei den beiden erstgenannten Varianten können die Abweichungen zwischen der diskreten und der exakten Lösung ausschließlich durch Quadraturfehler bewirkt werden. Die Größenordnung dieser Fehler in Abhängigkeit von der Art der Gauß-Integration soll anhand der unregelmäßigen Verteilung in Bild 4.6 mit 36 Stützstellen untersucht werden.

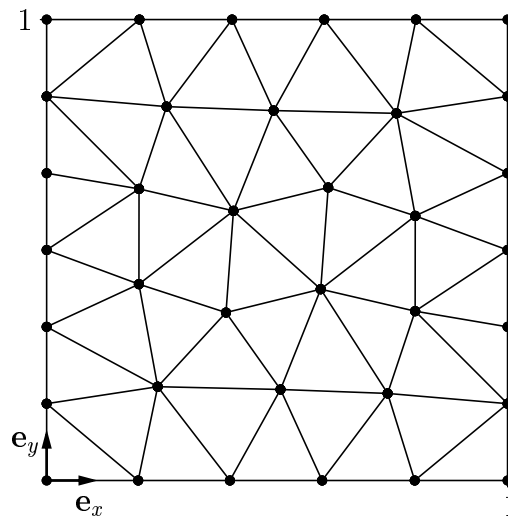


Bild 4.6: Patchtest: Geometrische Diskretisierung eines quadratischen Grundgebietes durch 36 unregelmäßig verteilte Stützstellen. Die Dreiecke der zugeordneten Delaunay-Triangulation dienen als Zellen für die Auswertung der Gebietsintegrale.

Beginnend mit 3 Integrationsstützstellen in jedem Dreieck erhöhen wir die Integrationsgenauigkeit durch den Einsatz der Quadraturregeln mit 7 und dann 13 Gauß-Punkten je Dreieck. Anschließend wenden wir die in Bild 2.8 veranschaulichte Technik zur Unterteilung der ursprünglichen Dreiecke in kleinere Integrationszellen an und benutzen innerhalb dieser Subdreiecke die Quadraturformel mit 13 Stützstellen. Zur Berechnung der Fehlernormen verwenden wir jeweils die Quadraturformel mit 13 Stützstellen innerhalb der ursprünglichen Dreiecke. In dem vorliegenden Grundgebiet mit 48 Dreiecken erhöhen wir damit die Gesamtzahl der Gauß-Punkte von 144 auf 2 555 904. Die Größe der kreisförmigen Einflussbereiche wird durch die in Kapitel 2.2 beschriebene Technik mit $c_r = 2$ festgelegt.

Die Ergebnisse dieser Untersuchung sind in Bild 4.7 zusammengefasst. Die mit den drei betrachteten Techniken erzielten Genauigkeiten stimmen praktisch überein. Offensichtlich wirkt sich die Modifikation der MLS-Ansatzfunktionen in Randnähe auf die numerische

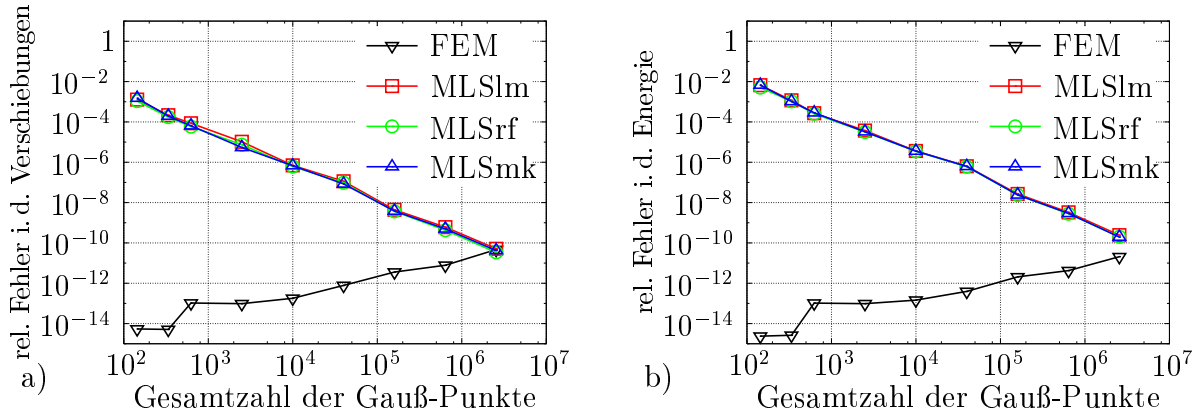


Bild 4.7: Patchtest: 36 unregelmäßig verteilte Stützstellen, $c_r = 2$, kreisförmige Einflussbereiche. Die Integration erfolgt mit $n_G = 3, 7, 13$ Gauß-Punkten je Delaunay-Dreieck mit anschließender Unterteilung der ursprünglichen Dreiecke in kleinere Integrationszellen mit $n_Q = 1, \dots, 6$ und 13 Gauß-Punkten je Integrationszelle.

Auswertung der Integrale bei Verwendung der Gauß-Quadratur innerhalb einzelner Dreiecke der dem Stützstellensatz zugeordneten Triangulation nicht negativ aus.

Die monotone Konvergenz und das Erreichen der Maschinengenauigkeit sprechen für eine korrekte Implementierung der untersuchten Verfahren. Für die benutzten finiten Elemente reicht bekanntlich die Quadratur mit einem Gauß-Punkt zur genauen Integration. Die Erhöhung der Integrationspunkte ist dann natürlich sinnlos und führt nur zu einem Genauigkeitsverlust durch Rundungsfehler. Das Ergebnis der FE-Rechnungen ist in Bild 4.7 mit aufgenommen worden, um den drastisch höheren Quadraturaufwand der MLS-Verfahren zu unterstreichen.

Folgerungen

Die in diesem Unterkapitel durchgeführten numerischen Untersuchungen zeigen leichte Vorteile der von Belytschko et al. (1995) vorgeschlagenen Technik der Rampenfunktion gegenüber dem Verfahren von Huerta und Fernández-Méndez (2000) im Hinblick auf die erreichbaren Genauigkeiten der approximierten Lösungen. Die Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren liefert für die betrachteten Probleme die besten Ergebnisse. Auf Grund ihrer Sattelpunkteigenschaft ist sie jedoch nicht für die im letzten Teil dieser Arbeit durchgeführten Stabilitätsuntersuchungen geeignet.

Basierend auf diesen Ergebnissen und unter Beachtung der in Kapitel 2.3 besprochenen zusätzlichen Schwierigkeiten bei der Bestimmung einer hinreichenden Überdeckung für das Verfahren von Huerta und Fernández-Méndez entscheiden wir uns für die Verwendung der Rampenfunktion in allen weiteren Untersuchungen. Es sollte allerdings angemerkt werden, dass die Technik von Huerta und Fernández-Méndez es ermöglicht, beispielsweise lineare FE-Ansätze durch quadratische Anteile oder grundsätzlich Anteile höherer Ordnung anzureichern. Die Einsatzmöglichkeiten der Methode von Belytschko et al. (1995) beschränken sich dagegen auf die Erfüllung kinematischer Randbedingungen bzw. das Koppeln eines durch finite Elemente diskretisierten Bereichs mit netzfreien Regionen.

4.2 Fehler infolge der numerischen Integration

Der negative Einfluss der fehlerbehafteten numerischen Integration auf das Konvergenzverhalten einer MLS-Diskretisierung ist bereits am Beispiel der gelochten Scheibe (Bild 4.5) in Form abnehmender Konvergenzraten sichtbar geworden. Der Patchtest aus Bild 4.7 unterstreicht, dass extrem viele Gauß-Punkte benötigt werden, wenn die Integration mit nahezu numerischer Genauigkeit durchgeführt werden soll. In den nachfolgenden Studien soll der Einfluss der Integrationstechnik auf die Qualität der Näherungslösungen genauer untersucht werden. Wir beginnen mit dem in Kapitel 2.4.3 beschriebenen und implementierten Standardverfahren und gehen sodann auf andere Techniken ein. Von nun an werden die wesentlichen Randbedingungen mit Hilfe der von Belytschko et al. (1995) vorgeschlagenen Rampenfunktion berücksichtigt, wenn nicht explizit auf den Einsatz einer anderen Technik hingewiesen wird.

4.2.1 Simplexbasierte Gauß-Quadratur mit Zerlegung

Das Grundgebiet der implementierten Gauß-Quadratur ist jeweils ein Simplex des betrachteten Raumes, also eine Strecke zwischen zwei Knoten in einer Dimension und ein Dreieck der Knotentriangulation in zwei Dimensionen. Falls die Integrationsgenauigkeit mit der Maximalzahl der implementierten Gauß-Regeln nicht ausreicht, kann eine Strecke fortlaufend in zwei Teilstrecken und ein Dreieck in vier Teildreiecke weiter zerlegt werden. Wir merken an, dass diese Technik auf drei Raumdimensionen erweiterbar ist und auf die Zerlegung eines Tetraeders in acht Teiltetraeder führt (vgl. Liu und Joe, 1996).

Eindimensionale Randwertprobleme

Wir betrachten wieder den Zugstab (4.3), verwenden aber nun unregelmäßige Stützstellenverteilungen, die durch Störung äquidistanter Knotensätze mit Knotenzahlen gemäß (4.4) erzeugt werden. Hierzu werden die Koordinaten der inneren Knoten der regelmäßigen Verteilung mit dem Knotenabstand h durch

$$x_i \leftarrow x_i + 0.2h(-1)^i z_i, \quad i = 2, \dots, N - 1 \quad (4.14)$$

abwechselnd nach rechts und links verschoben. Der Betrag der Verschiebung ist auf 20% des äquidistanten Knotenabstands begrenzt und wird durch gleichverteilte Zufallszahlen $z_i \in [0,1]$ festgelegt.

Basierend auf derartigen räumlichen Diskretisierungen wiederholen wir die Rechnungen des vorigen Unterkapitels, d. h. wir bestimmen die Größe der Einflussgebiete gemäß (2.46) mit $c_r = 2$ und führen die Integration mit 5 Gauß-Punkten in jedem Intervall durch. Der Diskretisierungsparameter h ist nun als mittlerer Abstand zwischen zwei direkt benachbarten Stützstellen zu interpretieren. Die in Bild 4.8 dargestellten FE-Lösungen erfahren nach dieser Modifikation erwartungsgemäß keine nennenswerten Veränderungen. Die MLS-Ergebnisse weichen dagegen stark von den bei äquidistanten Stützstellenverteilungen erzielten Resultaten ab (vgl. Bild 4.1) und fallen fast mit den FE-Ergebnissen zusammen. Für kleine h -Werte wird mit 5 Gauß-Punkten keine Konvergenz mehr erzielt, die im betrachteten Bereich des Diskretisierungsparameters erst mit 20 Gauß-Punkten

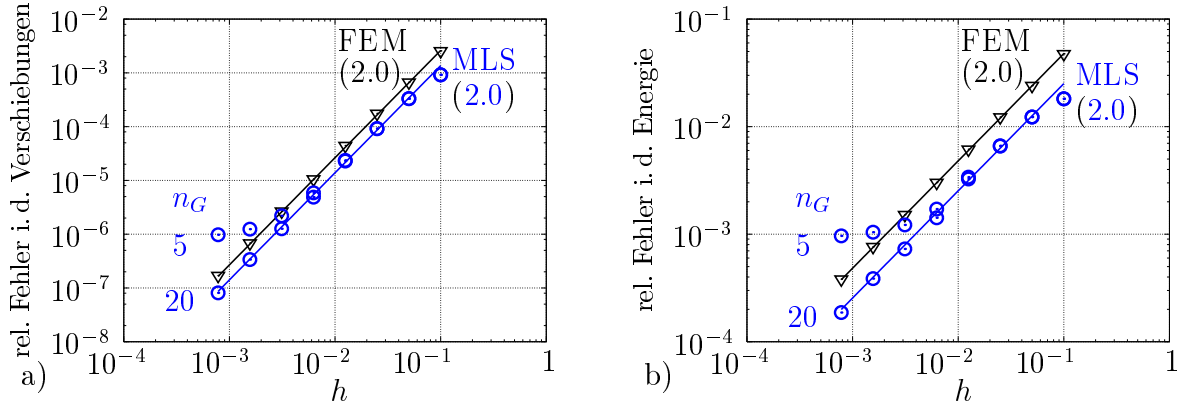


Bild 4.8: Konvergenzstudie für das Randwertproblem (4.3): unregelmäßige Stützstellenverteilung gemäß (4.14), Überdeckungsparameter $c_r = 2$, Quadratur mit 5 und 20 Gauß-Punkten

wiederhergestellt wird. Offensichtlich besitzen die in Bild 4.1 gezeigten Ergebnisse für äquidistante Knotenabstände nicht die gewünschte Allgemeingültigkeit.

Steigert man den Überdeckungsparameter auf $c_r = 4$, so lassen sich die Fehler der MLS-Rechnungen um etwa eine Zehnerpotenz verringern (Bild 4.9), wenn man durch Integration mit hinreichend vielen Gauß-Punkten dafür sorgt, dass die Quadraturfehler nicht durchschlagen. Bei einem Diskretisierungsparameter von 10^{-3} sind dann aber etwa 50 Gauß-Punkte in jedem der 1000 Segmente des unregelmäßig diskretisierten Grundgebietes erforderlich. Dieses Ergebnis ist zwar unerfreulich, spiegelt aber den Stand der Technik wider, wie der Vergleich mit einer aktuellen Untersuchung von Babuska et al. (2008) zeigt.

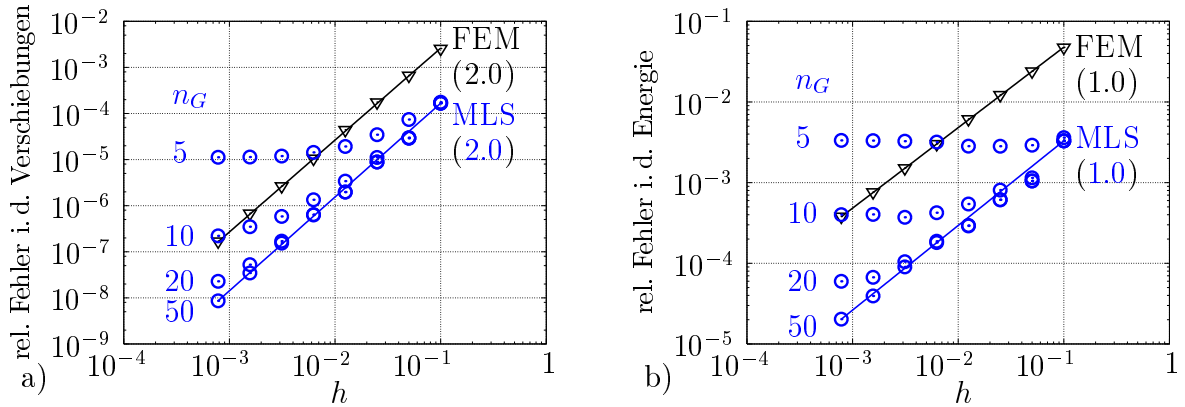


Bild 4.9: Konvergenzstudie für das Randwertproblem (4.3): unregelmäßige Stützstellenverteilung gemäß (4.14), Überdeckungsparameter $c_r = 4$, Quadratur mit 5, 10, 20 und 50 Gauß-Punkten

Tatsächlich ist nicht die Ordnung der Gauß-Regel entscheidend, sondern vielmehr die Anzahl der zur Integration verwendeten Stützstellen, was der folgende eindimensionale Patchtest

$$u_{,xx}(x) = 0 \quad \text{in } \Omega = \{x \mid 0 \leq x \leq 1\}, \quad u(0) = 0, \quad u_{,x}(1) = 1 \quad (4.15)$$

mit 101 gemäß (4.14) unregelmäßig verteilten Stützstellen untermauert. Theoretisch müsste der MLS-Ansatz die exakte Lösung reproduzieren, so dass die praktisch berechneten Abweichungen von der Maschinengenauigkeit auf den Quadraturfehler zurückzuführen sind. Wir nutzen die beiden implementierten Möglichkeiten zur Steigerung der Integrationsgenauigkeit, indem wir in einer Rechnung die Anzahl der Gauß-Punkte pro Intervall von 1 auf 100 steigern und in einer zweiten jedes Intervall fortlaufend halbieren und in den Subintervallen jeweils mit 3 Gauß-Punkten auswerten. Beide Varianten stimmen sowohl im relativen Fehler in den Verschiebungen als auch der Energie praktisch überein (Bild 4.10). Das Ergebnis ist plausibel, da für die vorliegenden nicht polynomialen Integranden die Stärken der Gauß-Quadratur nicht zum Tragen kommen können.

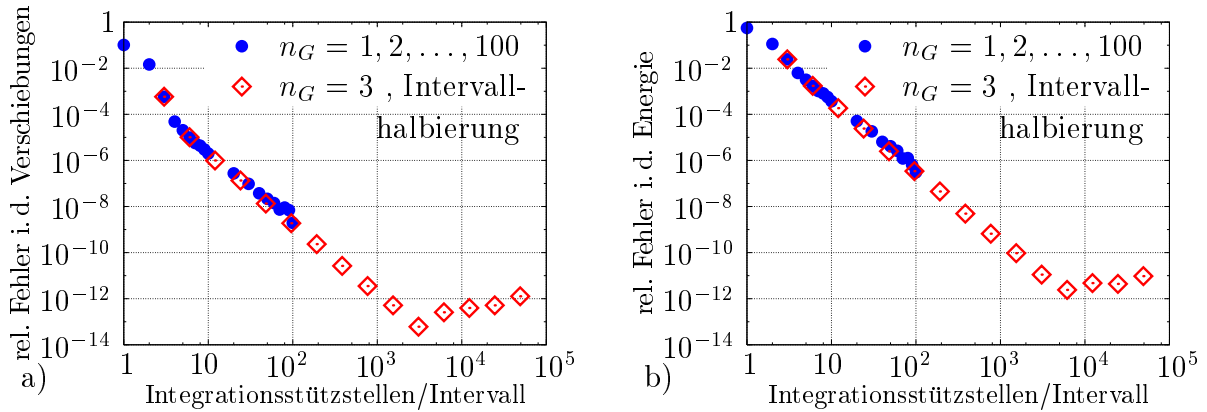


Bild 4.10: Quadraturfehler: eindimensionaler Patchtest (4.15), unregelmäßige Stützstellenverteilung gemäß (4.14) mit 101 Stützstellen, Überdeckungsparameter $c_r = 4$

Der Patchtest bestätigt das in der Konvergenzstudie Bild 4.9 beobachtete Verhalten. Bei Integration mit 5 Gauß-Punkten kann die erzielbare Genauigkeit des MLS-Verfahrens nicht erreicht werden, da z.B. für die Energienorm und die Diskretisierung $h = 0.01$ mit einem Quadraturfehler von $3 \cdot 10^{-2}$ gerechnet werden muss. Erst die Verwendung von 50 Integrationsstützstellen pro Intervall drückt diesen Fehler auf Werte $< 10^{-5}$, die das Konvergenzverhalten im betrachteten Diskretisierungsbereich nicht mehr stören.

Wir beschließen die eindimensionalen Untersuchungen zur Integrationsgenauigkeit mit dem Hinweis, dass Knotenverteilungen mit lokal stark schwankenden Stützstellendichten bei der Anwendung des MLS-Verfahren vermieden werden sollten. Ein Beispiel einer solchen Verteilung zeigt Bild 4.11a mit äquidistanten Knotenabständen h_1 im Intervall $[0.4, 0.6]$ und $h_2 = 10h_1$ in dem übrigen Bereich des Grundgebietes. Dolbow und Belytschko (1999) haben hierfür das Randwertproblem

$$u_{,xx}(x) + n(x) = 0 \quad \text{in } \Omega = \{x \mid 0 \leq x \leq 1\}, \quad u(0) = 0, \quad u_{,x}(1) = -3 \quad (4.16)$$

mit

$$n(x) = 6x + 800(1 - 200(1 - 2x)^2) \exp(-400(x - 0.5)^2)$$

gelöst. Die zehnfach höhere Stützstellendichte im Mittelbereich ist durch das Ziel motiviert, die sich durch die Belastung ergebende Spannungs- und Verschiebungskonzentration

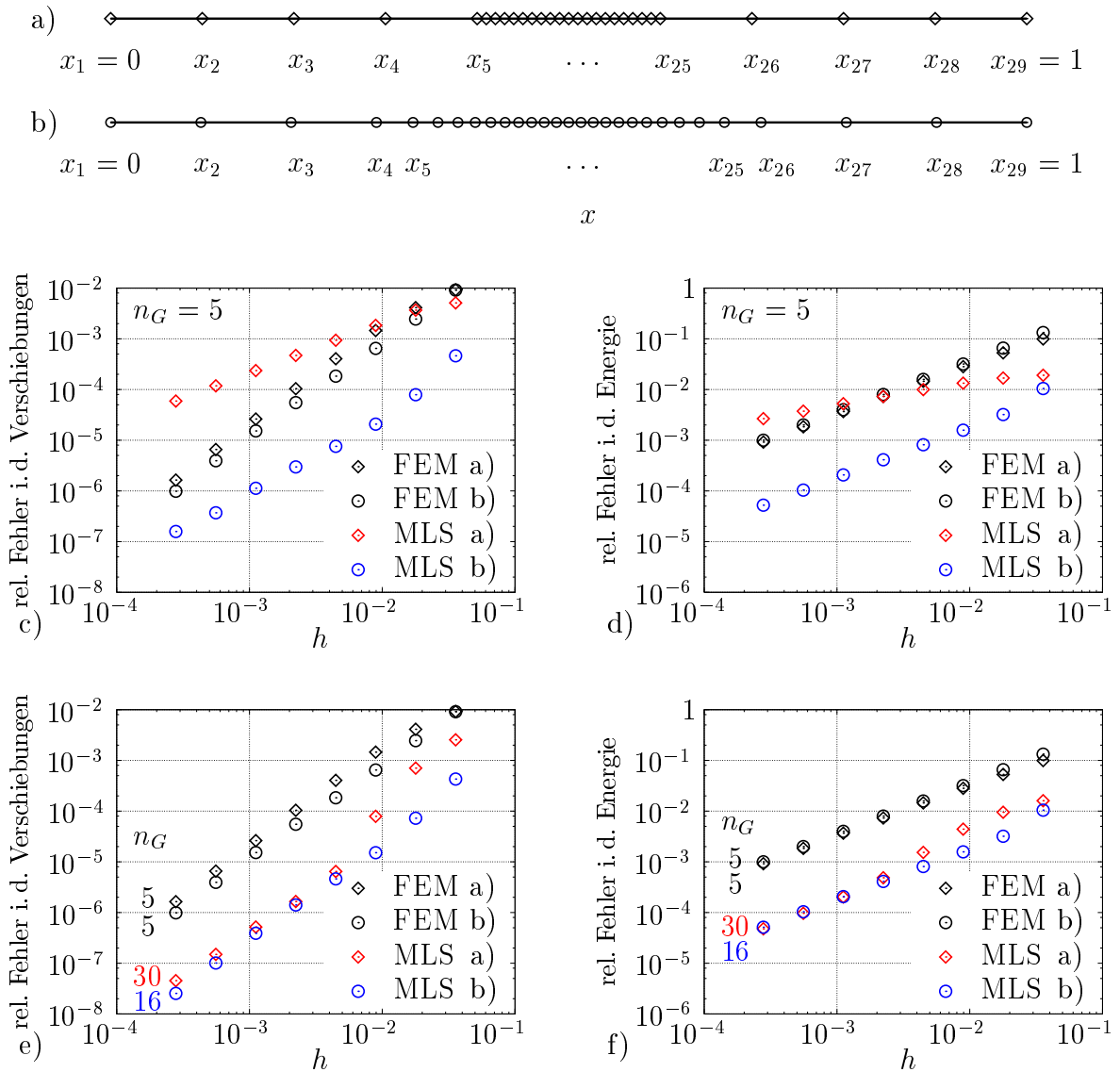


Bild 4.11: Einfluss der Stützstellenverteilung: a) sprunghafte, b) allmähliche Veränderung des Knotenabstands, c) und d) Fehler bei Rechnung mit 5 Gauß-Punkten, e) und f) Fehler bei hinreichend genauer Quadratur, h = mittlerer Knotenabstand, Überdeckungsparameter $c_r = 3.5$

in dieser Zone zu erfassen. Bei Anwendung der FE-Methode entspricht dies einer gängigen Adaptionstechnik. Als Alternative betrachten wir die Verteilung in Bild 4.11b, die auf der Grundlage der Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme generiert wurde. Der Übergang von kleinen zu großen Knotenabständen erfolgt hier bei gleicher Stützstellenzahl allmählich. Für eine Rechnung mit 5 Gauß-Punkten vergleicht Bild 4.11c,d die relativen Fehler der Näherungslösungen für die Verteilungen a) und b). Die Knotenverteilung a) führt im Rahmen der MLS-Diskretisierung zu großen Quadraturfehlern und liefert schlechtere Ergebnisse als die FE-Approximation. Demgegenüber ermöglicht die Variante b) mit reduzierten Schwankungen in der Stützstellendichte eine deutlich genauere MLS-Näherung

bei unveränderter Integrationsordnung. Auf die FE-Resultate haben die Unterschiede in der Art der Stützstellenverteilung erwartungsgemäß vernachlässigbar kleine Auswirkungen. Die mit 5 Gauß-Punkten berechneten MLS-Näherungen konvergieren zu den in Bild 4.11e,f dargestellten Werten. Bei Stützstellenverteilungen entsprechend a) hat der Integrationsfehler erst ab etwa 30 Gauß-Punkten keinen Einfluss mehr, während man bei Verteilung b) mit 16 Gauß-Punkten auskommt.

Das MLS-Verfahren liefert bereits für die größte Diskretisierung und 5-Punkt Gauß-Quadratur je Intervall eine für praktische Zwecke ausgezeichnete Approximation der exakten Verschiebungs- und Spannungsverteilung (Bild 4.12). Im Darstellungsmaßstab der linken Bildhälfte sind Abweichungen der MLS-Näherungen von der exakten Lösung nicht zu erkennen. In den Ausschnittsvergrößerungen (rechte Bildhälfte) werden die Fehler der für die Knotenverteilung aus Bild 4.11a berechneten Näherung sichtbar, während die auf der Verteilung in Bild 4.11b basierende MLS-Näherung sich allenfalls andeutungsweise von der exakten Lösung unterscheidet. Es sei angemerkt, dass die von Dolbow und Belytschko (1999) festgestellten signifikanten Fehler der MLS-Näherung bei sprunghafter Änderung des bereichsweise konstanten Knotenabstands im Wesentlichen durch eine unzulängliche Konstruktion der Mindestüberdeckung in der zitierten Arbeit bedingt sind.

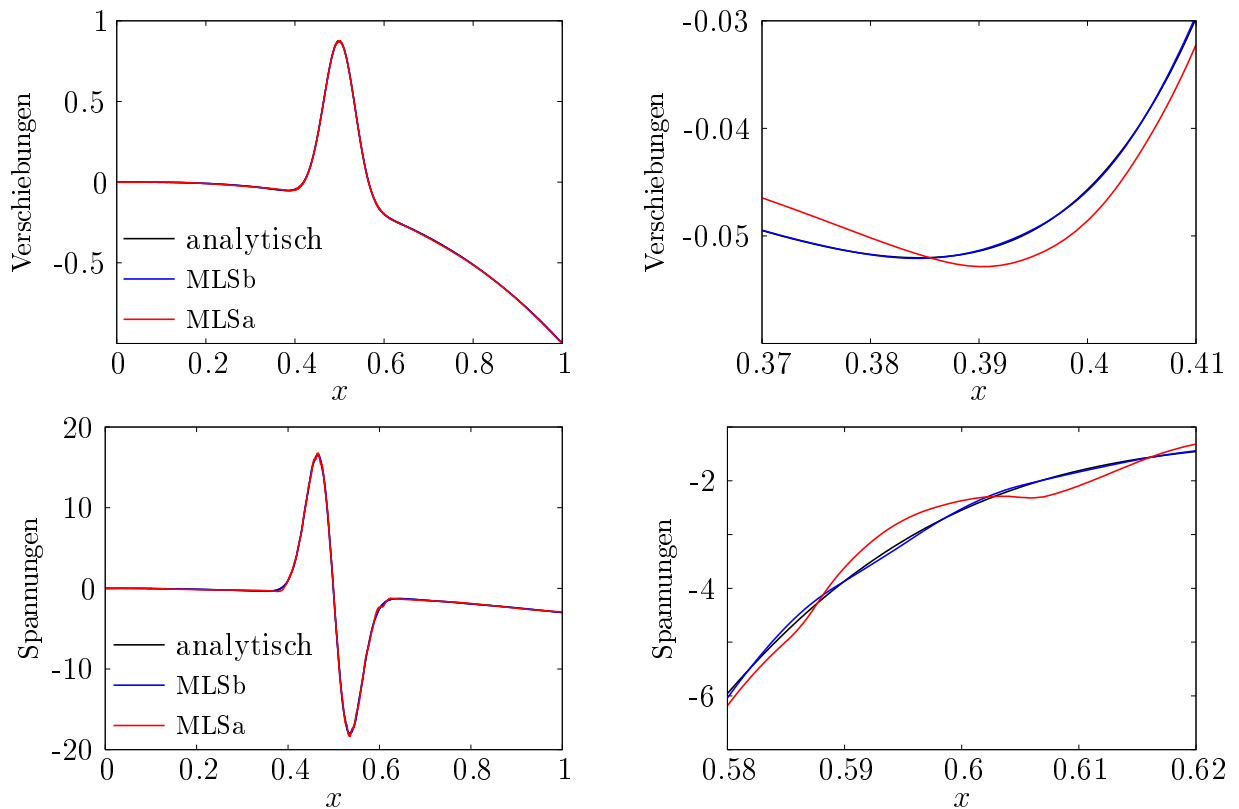


Bild 4.12: Verschiebungs- und Spannungsverläufe für das Randwertproblem (4.16): MLSa,b kennzeichnen die Näherungslösungen für die Stützstellenverteilung gemäß Bild 4.11a,b, $N = 29$, $n_G = 6$, $c_r = 3.5$

Zweidimensionale Randwertprobleme

Anhaltspunkte über die Größenordnung der zu erwartenden Quadraturfehler für ebene Probleme haben bereits die Untersuchungen zur Beurteilung der verschiedenen Techniken zur Behandlung kinematischer Randbedingungen geliefert, so dass wir uns hier kurz fassen können. Offen geblieben ist bisher die Frage nach dem Aufbau der Fensterfunktionen, die in zwei Dimensionen üblicherweise auf kreisförmigen oder rechteckigen Einflussgebieten gemäß (2.32) bzw. (2.33) definiert werden. Wir greifen deshalb den Patchtest aus dem vorangegangenen Unterkapitel auf und ermitteln die Quadraturfehler für beide Varianten, (aber nur noch für die Rampenfunktion zur Berücksichtigung der wesentlichen Randbedingungen), wobei die Integrationsgenauigkeit in der dort beschriebenen Weise erhöht wird.

Für ein quadratisches Punktgitter mit 36 Punkten sind die Quadraturfehler für rechteckige Einflussgebiete signifikant kleiner, wenn man den Überdeckungsparameter für beide Varianten mit $c_r = 2$ festlegt (Bild 4.13). Allerdings geht dieser Vorteil sofort verloren,

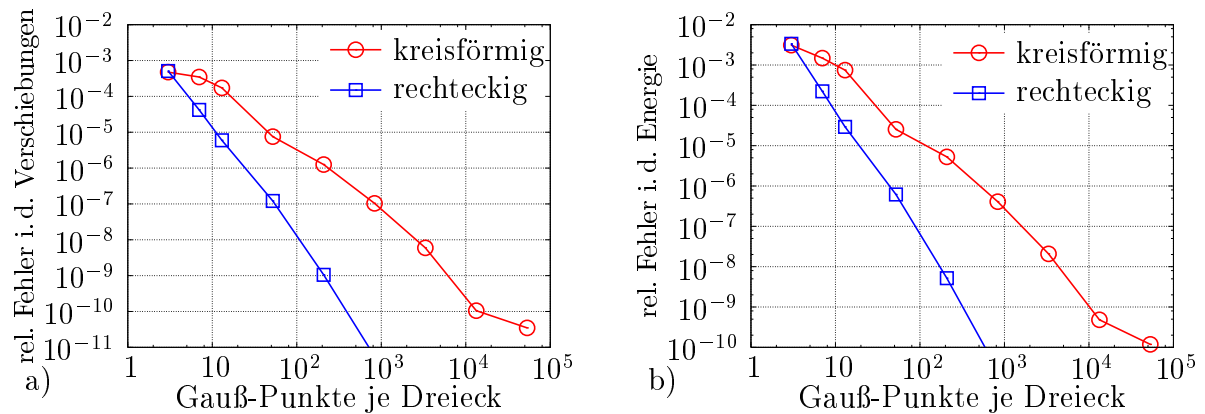


Bild 4.13: Quadraturfehler für einen zweidimensionalen Patchtest mit 6×6 regelmäßig verteilten Stützstellen: 50 Delaunay-Dreiecke, Überdeckungsparameter $c_r = 2$

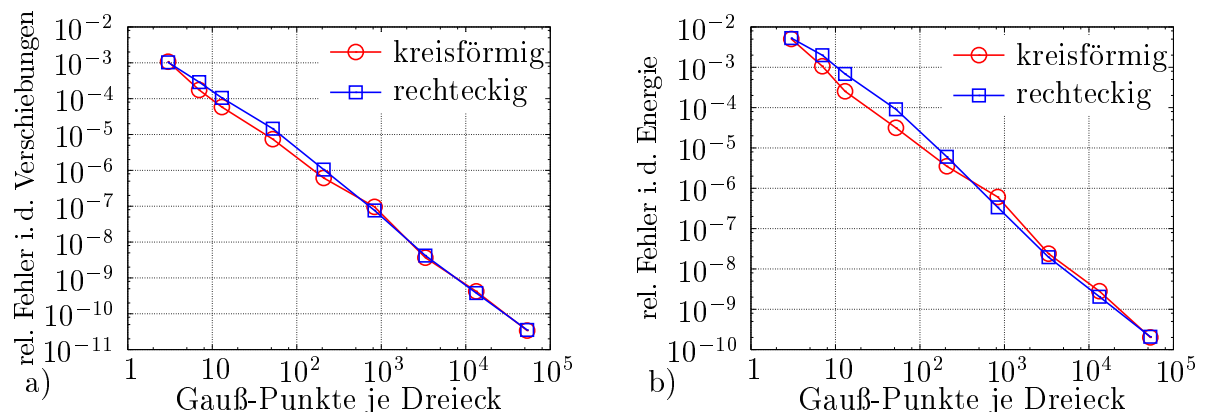


Bild 4.14: Quadraturfehler für einen zweidimensionalen Patchtest mit 36 schwach unregelmäßig verteilten Stützstellen (Bild 4.6): 48 Delaunay-Dreiecke, Überdeckungsparameter $c_r = 2$

wenn man für den Vergleich den nur schwach unregelmäßigen Patch aus Bild 4.6 mit ebenfalls 36 Knoten zu Grunde legt (Bild 4.14).

Das bessere Abschneiden rechteckiger Einflussgebiete bei einem quadratischen Punktgitter ist durch die besonderen Verhältnisse bedingt, die bei Wahl einer zweifachen Überdeckung im Anschluss an Bild 4.1 für das eindimensionale Problem bereits diskutiert wurden. Der Polynomcharakter der Ansatzfunktionen bleibt bei Multiplikation der Fensterfunktionen in x - und y -Richtung auch in zwei Dimensionen weitestgehend erhalten, so dass die Integranden der Steifigkeitsmatrix viel einfacher zu integrieren sind.

Im Allgemeinen wird man eher mit den in Bild 4.14 dokumentierten größeren Quadraturfehlern rechnen müssen. Ob man kreisförmige oder rechteckige Einflussgebiete zu Grunde legt, ist dann belanglos, so dass wir in den weiteren Untersuchungen bei radialen Ansätzen bleiben.

Als Beispiel einer umfangreicheren zweidimensionalen Anwendung mit bis zu 10000 Knoten kehren wir noch einmal zu der gelochten Scheibe aus Bild 4.6 zurück. Die Rechnung bei Verwendung der Rampenfunktion und Quadratur mit 13 Gauß-Punkten in jedem Dreieck hatte hierfür eine Konvergenzrate von etwa 1.7 in der Energienorm ergeben. Die dabei beobachteten Abweichungen von der Konvergenzgeraden lassen sich weiter reduzieren, wenn die Integrationsgenauigkeit durch Zerlegen der Dreiecke der Knotentriangulation in Subdreiecke weiter gesteigert wird. Bild 4.15 zeigt den relativen Fehler in der Energienorm. Die Abkürzungen g13 und g3 kennzeichnen die Quadratur mit 13 bzw. 3 Gauß-Punkten pro Subdreieck, q0, q2, und q3 die dabei benutzte Zerlegungsstufe eines Ausgangsdreiecks in 4^0 , 4^1 bzw. 4^2 Subdreiecke.

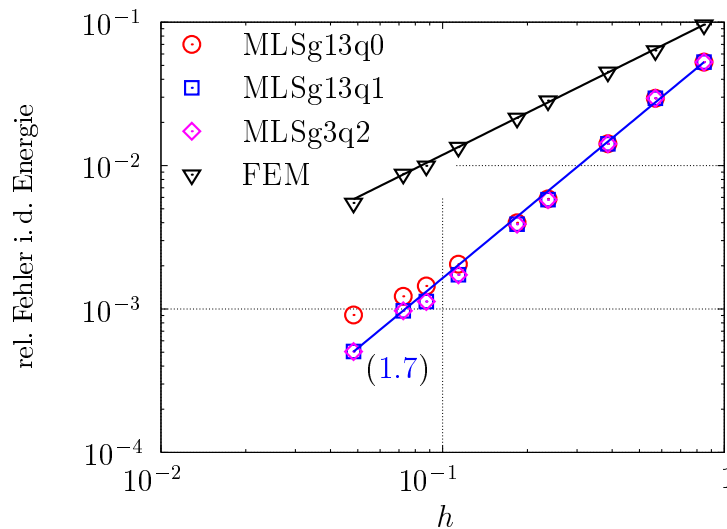


Bild 4.15: Konvergenzstudie: Scheibe mit Loch, kreisförmige Einflussbereiche, Überdeckungsparameter $c_r = 2$, Quadratur mit $n_G = 3$ bzw. 13 Gauß-Punkten und Zerlegung in Subdreiecke (siehe Text)

Die berechneten Fehlernormen der g13q1- und g3q2-Variante mit 52 bzw. 48 Integrationsstützstellen pro Ausgangsdreieck stimmen im Rahmen der Darstellungsgenauigkeit überein. Dies unterstützt die aus den eindimensionalen Rechnungen abgeleitete These, dass nicht die Gauß-Ordnung, sondern die Anzahl der Integrationsstützstellen maßge-

bend ist. Die Quadratur mit einer zusätzlichen Zerlegungsstufe (g3q3) und damit 164 Integrationsstützstellen pro Dreieck ändert das Ergebnis nicht mehr.

In der feinsten Diskretisierung hat die ungleichförmige Stützstellenverteilung 10000 Knoten und die Triangulation 19571 Dreiecke. Bei 164 Integrationsstützstellen pro Dreieck übersteigt die Gesamtanzahl der Integrationspunkte im Millionenbereich für praktische Anwendungen jedes vernünftige Maß. Es sei deshalb noch einmal betont, dass diese Rechnungen hier lediglich der Überprüfung der Implementierung dienen.

Alle Testrechnungen im Rahmen der linearen Elastostatik stimmen entweder mit bekannten Resultaten aus der Literatur überein oder weisen plausibles Verhalten auf, so dass die korrekte Implementierung des MLS-Verfahrens als gesichert gelten kann.

4.2.2 Andere Integrationstechniken

Als Hauptschwäche der netzfreien Methoden wird heute das unbefriedigend gelöste Quadraturproblem angesehen. Es hat in den letzten Jahren nicht an Versuchen gefehlt, hier Abhilfe zu schaffen. Wir stellen deshalb noch die Frage, ob andere Integrationstechniken im Rahmen der hier vorgenommenen MLS-Implementierung genutzt werden könnten und Vorteile gegenüber der von uns benutzten simplexbasierten Gauß-Quadratur erwarten lassen.

Dolbow und Belytschko (1999) nennen zwei Gründe für das unerfreuliche Quadraturverhalten. Einerseits ist es der rationale Charakter der MLS-Ansatzfunktionen, der die Effizienz der für die Integration von Polynomen entwickelten Gauß-Quadratur im Rahmen von MLS-Diskretisierungsverfahren erheblich herabsenkt. Der zweite und nach Dolbow und Belytschko wichtigere Grund für die vergleichbar großen Integrationsfehler ist das in der englischsprachigen Literatur *misalignment* genannte Problem. Es bezeichnet die im Allgemeinen fehlende Übereinstimmung zwischen den Grenzen der Einflussbereiche und den Grenzen der zur Quadratur benutzten Integrationszellen. So wird bei unserer simplexbasierten Integrationstechnik über die Grenzen der Einflussbereiche ω_i , $i = 1, \dots, N$ einzelner Stützstellen hinweg bis zum Rand des jeweiligen Simplex integriert. Es liegt also Fehlanpassung vor. Dolbow und Belytschko schlagen daher vor, die Integration in den durch die Ränder der Einflussbereiche begrenzten Zellen — den sogenannten Bounding-Boxen — durchzuführen. Diese Technik lässt sich für eindimensionale Probleme leicht implementieren. Die Bestimmung der Bounding-Boxen für ebene Probleme ist jedoch bedeutend komplizierter und nur in Verbindung mit rechteckigen Einflussbereichen umsetzbar. Insbesondere erschwert eine komplexere, vom Rechteck abweichende Geometrie der Ränder des Grundgebietes die Festlegung solcher Integrationszellen.

Breitkopf et al. (2004) reduzieren die im Allgemeinen sehr hohe Anzahl der Bounding-Boxen, indem sie die rechteckigen Einflussbereiche einzelner Stützstellen an den Ecken des zugeordneten Voronoi-Diagramms „ausrichten“. Diese in Kapitel 2.2 bereits angesprochene Idee führt in der Regel dazu, dass sich einzelne Stützstellen nicht im Mittelpunkt des zugehörigen Einflussbereiches befinden, so dass der maximale Wert der Fensterfunktionen nicht über der jeweiligen Stützstelle liegt. Diese scheinbare Anomalie beseitigen Breitkopf et al. durch nichtlineare Transformationen der Fensterfunktionen. Unter Verwendung der modifizierten Integrationsgewichte sind die Autoren dann in der Lage, mit relativ geringer Anzahl der Integrationsstützstellen ein lineares Verschiebungsfeld exakt

wiederzugeben. Zur Berechnung der modifizierten Integrationsgewichte muss jedoch für jede Integrationszelle ein lineares Gleichungssystem gelöst werden, so dass der gesamte Berechnungsaufwand sehr hoch ist.

De und Bathe (2000) bestimmen die Koeffizienten der Steifigkeitsmatrix K_{ij} , indem sie die Integration innerhalb des Einflussbereiches ω_i durchführen. Durch das Auswerten der Integrale in den Gebieten $\omega_i \cap \omega_j$ bestimmen De und Bathe (2001) direkt einzelne Koeffizienten K_{ij} der Steifigkeitsmatrix. Dabei gehen sie stets von kreisförmigen Einflussbereichen aus und geben für die dann entstehenden kreis- bzw. linsenförmigen Integrationsgebiete spezielle Quadraturformeln an. Die Anzahl der benötigten Integrationspunkte innerhalb des jeweiligen Gebietes $\omega_i \cap \omega_j$ ist dabei recht hoch. Die Konstruktion eines Gitters bzw. Netzes ist bei dieser Integrationstechnik offensichtlich nicht mehr nötig. Daher werden auf solchen Integrationstechniken basierende Diskretisierungsverfahren oft als *wirklich netzfrei* bezeichnet. Das Problem des *misalignment* wird mit dieser Technik vermieden. Die Ermittlung einzelner Integrationsgebiete $\omega_i \cap \omega_j$ erfordert jedoch zusätzlichen Berechnungsaufwand.

Auch Babuska et al. (2008) untersuchen die Eigenschaften der Integration auf Schnittmengen $\omega_i \cap \omega_j$ der Einflussgebiete und stellen heraus, dass damit berechnete Lösungen nicht konvergieren, wenn in den Schnittmengen immer das gleiche Quadratschema mit einer festen Anzahl von Integrationsstützstellen benutzt wird. Vielmehr kann der Fehler in der Energienorm mit steigender Knotenzahl sogar stark anwachsen. Als Grund für dieses „katastrophale“ Verhalten identifizieren Babuska et al. die nicht verschwindende Zeilensumme der Steifigkeitsmatrix. Sie schlagen daher vor, die Hauptdiagonalelemente so zu modifizieren, dass

$$\sum_{j=1}^N K_{ij} = 0, \quad i = 1, \dots, N \quad (4.17)$$

gilt. Es sei betont, dass bei unserer simplexbasierten Integrationstechnik (und anderen Verfahren, die zur Berechnung aller Elemente der Steifigkeitsmatrix auf die gleichen Integrationspunkte im Grundgebiet zurückgreifen), die Bedingung (4.17) immer sichergestellt ist.

Die Möglichkeit der netzfreien Integration soll in dieser Arbeit auf Grund der damit verbundenen Schwierigkeiten nicht weiter verfolgt werden. Am Beispiel eindimensionaler Probleme betrachten wir den Einfluss des *misalignment* und die Quadratur über Schnittmengen genauer.

Auswirkungen des *misalignment*

Für den Zugstab unter linear anwachsender Längsbelastung und unregelmäßiger Knotenverteilung (4.14) führen wir eine Vergleichsrechnung mit der Bounding-Box-Technik durch. Wir folgen dabei Dolbow und Belytschko (1999) und verwenden anstelle von Stützstellen x_i die Ränder einzelner Einflussgebiete $x_i \pm r_i$ als Grenzen für die Integrationszellen. Bild 4.16 illustriert die Verteilung von elf Stützstellen ($h = 0.1$) und kennzeichnet die neuen Integrationszellen — die Bounding-Boxen — durch vertikale Linien. Die Größe der Einflussbereiche wurde mit (2.46) und $c_r = 4$ vorgeschrieben. Es ist zu beachten, dass an der Stelle $x = x_2$ eine zusätzliche Grenze für die Integrationszellen eingefügt wurde, da die

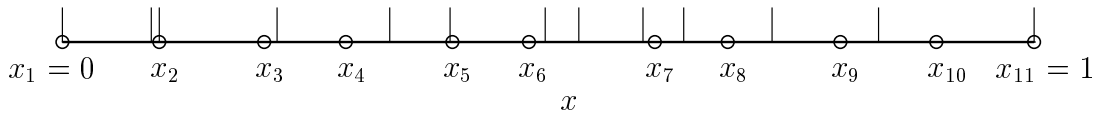


Bild 4.16: Eine unregelmäßige Verteilung von elf Stützstellen mit den Integrationszellen der Bounding-Box-Technik für den Überdeckungsparameter $c_r = 4$

modifizierten MLS-Ansatzfunktionen an dieser Stelle nicht stetig differenzierbar sind, vgl. Bild 2.6b.

Die unter Verwendung der Bounding-Box-Technik mit $n_G = 5$ Gauß-Punkten in jeder Bounding-Box gewonnenen Ergebnisse (Bild 4.17) zeigen keine wesentliche Verbesserung gegenüber den früheren Resultaten in Bild 4.9, obwohl die Gesamtzahl der Gauß-Punkte infolge einer höheren Anzahl der Integrationszellen (für große Stützstellenzahlen) nahezu verdoppelt wurde. Wir führen nun die Integration wieder mit der simplexbasierten Technik in den Intervallen $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 1, \dots, N - 1$ durch, erhöhen jedoch die Anzahl der Gauß-Punkte n_G je Intervall so, dass die Gesamtzahl N_G der Integrationsstützstellen für beide Varianten möglichst gut übereinstimmt. Die Missachtung der Ränder der Einflussbereiche führt bei der gewählten Art der geometrischen Diskretisierung *nicht* zu einem Genauigkeitsverlust (Bild 4.17), im Gegenteil, es werden bei vergleichbarem Aufwand deutlich bessere Ergebnisse als mit Hilfe der Bounding-Box-Technik erzielt.

An diesem Befund ändert sich nichts, wenn man höhere Genauigkeitsanforderungen stellt und konvergierende Näherungslösungen betrachtet (Bild 4.18). Hierzu haben wir bei der simplexbasierten Integration die Anzahl der Gauß-Punkte n_G je Intervall so bestimmt,

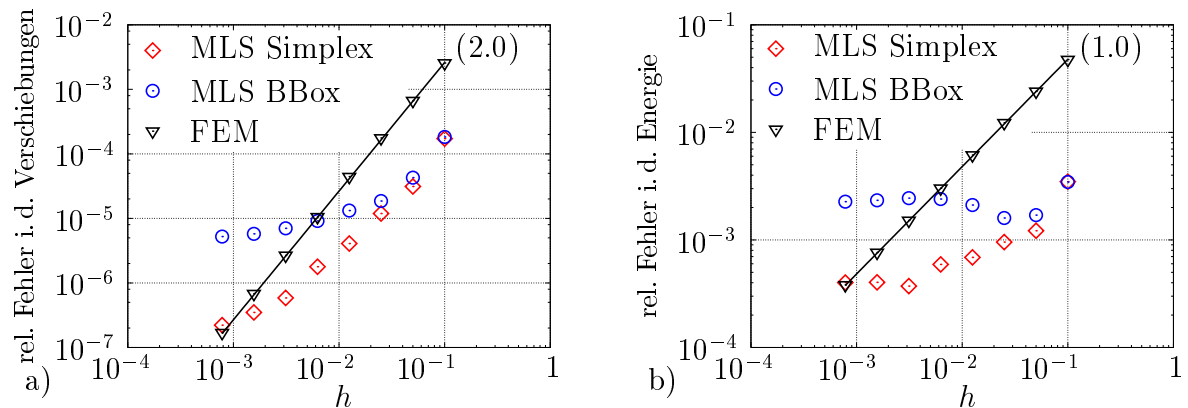


Bild 4.17: Vergleich der Bounding-Box-Technik mit der simplexbasierten Quadratur bei vergleichbarer Anzahl von Integrationspunkten (siehe Tabelle): Zugstab (4.3) mit unregelmäßiger Stützstellenverteilung gemäß (4.14), Überdeckungsparameter $c_r = 4$

	N	11	21	41	81	161	321	641	1281
Bounding-Box	n_G	5	5	5	5	5	5	5	5
	N_G	60	165	365	765	1565	3165	6365	12760
Intervalle	N_G	60	160	360	720	1440	3200	6400	12800
	n_G	6	8	9	9	9	10	10	10

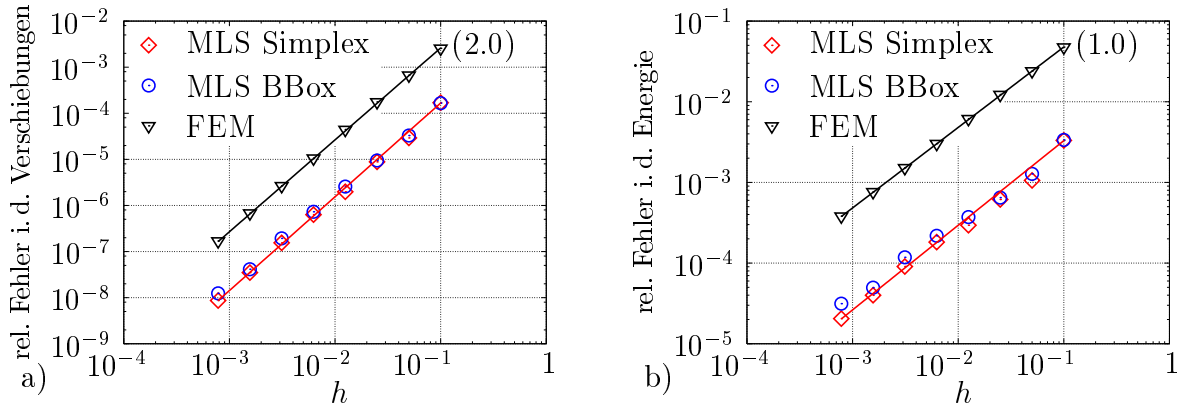


Bild 4.18: Konvergenzstudie für den Zugstab (4.3) mit unregelmäßiger Stützstellenverteilung gemäß (4.14), $c_r = 4$

	N	11	21	41	81	161	321	641	1281
Intervalle	n_G	8	12	19	20	27	33	40	46
	N_G	80	240	760	1600	4320	10560	25600	58880
Bounding-Box	N_G	84	264	803	1683	4382	10761	26733	61248
	n_G	7	8	11	11	14	17	21	24

dass ihre weitere Steigerung die Werte der Fehlernormen bis auf die zweite signifikante Stelle unverändert belässt. Die Anzahl der Gauß-Punkte je Bounding-Box wird dann so festgelegt, dass die Gesamtzahl N_G bei beiden Techniken wieder möglichst gleich groß ist.

Bei der Wahl der Integrationsgrenzen nach der Bounding-Box-Technik weichen die Ergebnisse leicht von der konvergenten Lösung ab. Offensichtlich werden weitere Integrationsstützstellen benötigt, um auch hier Konvergenz zu erreichen. Somit kann die geforderte Genauigkeit für unregelmäßig verteilte Stützstellen nur bei höherem Rechenaufwand erzielt werden, wenn die Bounding-Box-Technik eingesetzt wird.

In Sonderfällen kann die Verwendung der Bounding-Box-Technik zu einer deutlichen Reduzierung der Integrationsfehler führen. Dies trifft insbesondere dann zu, wenn stückweise äquidistant verteilte Stützstellen mit starken Unterschieden in der Knotendichte zu Grunde gelegt werden, was die Untersuchungen von Dolbow und Belytschko (1999) belegen. Eine solche Stützstellenverteilung zeigt Bild 4.11a. An den Grenzen der Einflussgebiete in Bereichen sprunghaft veränderlicher Knotendichte weisen die MLS-Ableitungen (und damit auch die Integranden) nahezu unstetige Funktionsverläufe auf. Es ist dann natürlich sinnvoll, diese Stellen als Integrationsgrenzen zu verwenden.

Integration über Schnittmengen der Einflussbereiche

Bevor wir einen numerischen Vergleich der simplexbasierten Quadratur und der Integration über die Schnittmengen der Einflussbereiche durchführen, sollen die Grundzüge der zuletzt genannten Variante vorab noch etwas genauer besprochen und kritisch gewürdigt werden.

Wir gehen dazu von einer eindimensionalen, äquidistanten Stützstellenverteilung mit dem Knotenabstand h aus und betrachten einen Knoten i , der hinreichend weit im Innern

des Grundgebietes liegt, so dass Randeinflüsse unbeachtet bleiben können. Der Überdeckungsparameter sei z.B. $c_r = 2$. Die Länge der Intervalle $|\omega_i \cap \omega_j|$, über die zur Ermittlung der Elemente $K_{ij} \neq 0$ in Zeile i der Steifigkeitsmatrix zu integrieren ist, folgt dann dem Schema:

$$\begin{array}{c|cccccccc} \text{Spalte } j & i-3 & i-2 & i-1 & i & i+1 & i+2 & i+3 \\ \hline \text{Zeile } i & h & 2h & 3h & 4h & 3h & 2h & h \end{array}$$

Nehmen wir die von Babuska et al. (2008) analysierte Quadraturvorschrift mit einer unveränderlichen Anzahl von Integrationsstützstellen n_G in allen nicht leeren Schnittmengen $\omega_i \cap \omega_j$ an, so hat das die fragwürdige Konsequenz, dass die Dichte der Integrationsstützstellen um den Faktor 4 anwächst, wenn man vom Hauptdiagonalelement zu dem am weitesten entfernten Nebendiagonalelement einer Zeile fortschreitet. Da bei den üblichen MLS-Ansatzfunktionen die Ableitungen an den Rändern ihrer Einflussgebiete verschwinden, wird also bei der im Allgemeinen fehlerbehafteten Quadratur das unbedeutendste Nebendiagonalelement, dessen Integrand aus dem Produkt zweier kleiner Funktionen besteht, am genauesten berechnet. Demgegenüber werden die Hauptdiagonalelemente „benachteiligt“ (umso stärker, je größer die Überdeckung ist). Um überhaupt zu einem konvergenten Verfahren zu gelangen, werden die unterintegrierten Hauptdiagonalelemente schließlich ganz verworfen und durch die negative Summe der Nebendiagonalelemente in der zugehörigen Zeile ersetzt. Auch dieser Korrekturschritt ist hinterfragbar; er sichert aber (unter bestimmten Voraussetzungen) die aus der Reproduzierbarkeit von Starrkörperverschiebungen folgende Minimalforderung (4.17), wie Babuska et al. (2008) in ihrer die Quadraturproblematik erhellenden Studie auch mathematisch begründet haben.

Für den Vergleich mit der simplexbasierten Quadratur übernehmen wir für die folgende Konvergenzstudie das von Babuska et al. untersuchte eindimensionale Problem

$$u_{,xx}(x) + \cos(x) = 0 \quad \text{in } \Omega = \{x \mid 0 \leq x \leq \pi\}, \quad u(0) = 1, \quad u_{,x}(\pi) = 0 \quad (4.18)$$

und die Diskretisierung durch äquidistant verteilte Stützstellen. Die Stützstellenzahlen wählen wir gemäß (4.4) und den Diskretisierungsparameter h als Abstand zwischen zwei direkt benachbarten Knoten. Im Sinne einer möglichst guten Vergleichbarkeit unserer Ergebnisse mit den Resultaten von Babuska et al. rechnen wir hier mit der exponentiellen Fensterfunktion

$$w(\lambda) = \begin{cases} \exp\left(\frac{1}{\lambda^2 - 1}\right) & \text{für } \lambda < 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

mit der in (2.31) definierten Variablen λ . Die Größe der Einflussbereiche ist mit $r_i = 2h$, $i = 1, \dots, N$ festgelegt. Mit der Verwendung der Lagrangeschen Multiplikatoren zur Erfüllung der Randbedingung vermeiden wir die durch die Rampenfunktion bedingten Unstetigkeiten in den Ableitungen der MLS-Ansatzfunktionen. Dadurch wird die Integration über die Schnittmengen $\omega_i \cap \omega_j$ ohne zusätzliche Integrationszellen möglich. Die Quadratur in den jeweiligen Integrationszellen wird mit $n_G = 3, 10$ und 100 Gauß-Punkten durchgeführt.

Die mit der Integration über die Schnittmengen $\omega_i \cap \omega_j$ berechneten Ergebnisse fallen durch das nicht konvergente Verhalten auf, vgl. Bild 4.19a, b. Mit steigender Stützstellenzahl nehmen die Fehler sogar zu, was den theoretischen Untersuchungen (für Neumannsche Randbedingungen) und den numerischen Ergebnissen von Babuska et al. (2008) entspricht.

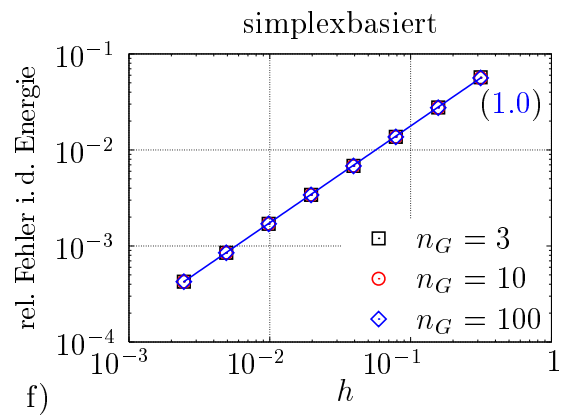
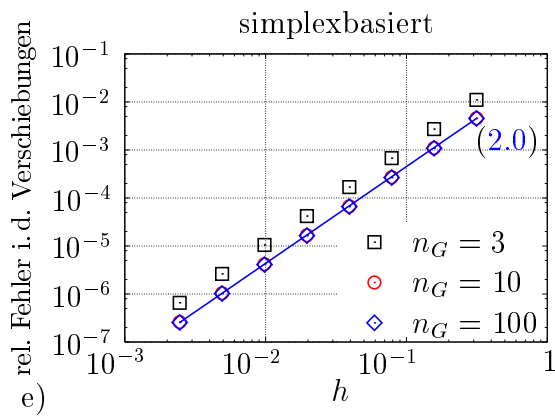
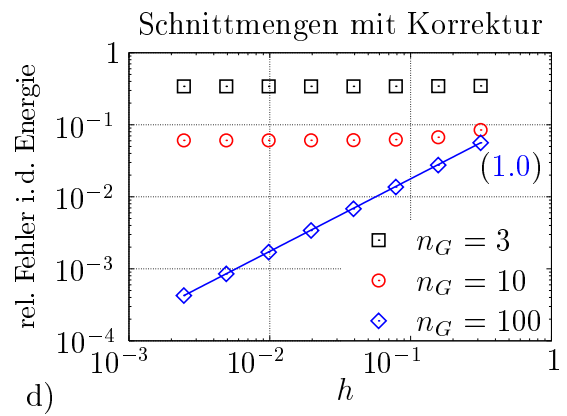
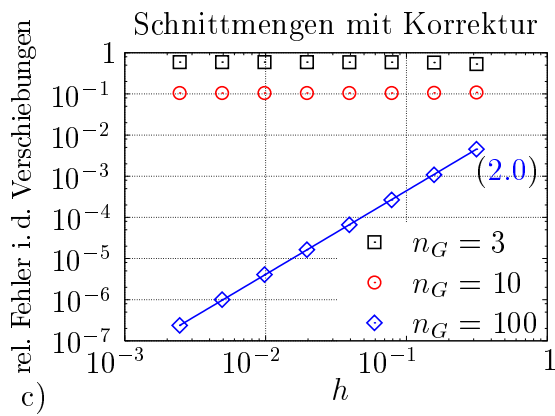
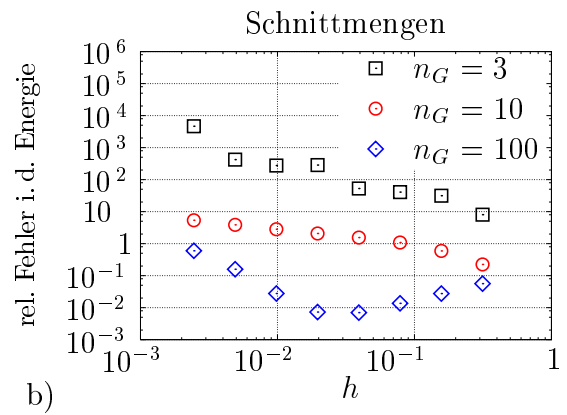
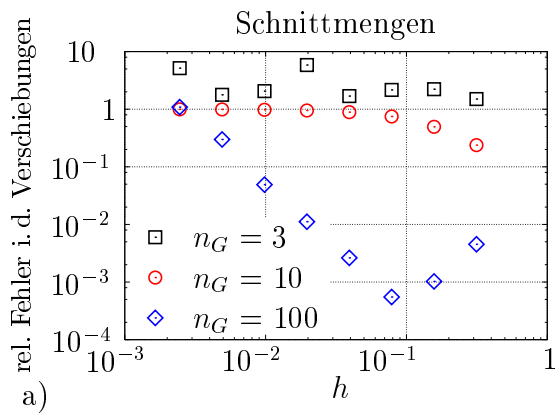


Bild 4.19: Ein numerischer Vergleich der Integration über Schnittmengen der Einflussbereiche ohne und mit Korrektur (siehe Text) sowie der simplexbasierten Integration. Konvergenzstudie für das Randwertproblem (4.18) bei äquidistanter Stützstellenverteilung und dem Überdeckungsparameter $c_r = 2$

Die von diesen Autoren vorgeschlagene Korrektur der Zeilensummen der Steifigkeitsmatrix

$$K_{ii} = - \sum_{j=1, j \neq i}^N K_{ij}, \quad i = 1, \dots, N \quad (4.19)$$

stellt die Konvergenz der MLS-Diskretisierung wieder her. Eine konvergente Lösung wird jedoch erst mit $n_G = 100$ Gauß-Punkten je Integrationszelle $\omega_i \cap \omega_j$ erreicht, vgl. Bild 4.19c, d. Auch das stimmt mit den von Babuska et al. (2008) angegebenen Resultaten überein.

Zum Vergleich der Quadraturtechniken zeigt Bild 4.19e, f die Ergebnisse der simplexbasierten Quadratur. Für die Konvergenz in der Energienorm reichen nun bereits $n_G = 3$ Gauß-Punkte. Die Verschiebungsnorm lässt allerdings noch Integrationsfehler erkennen. Schon mit 10 Gauß-Punkten je Intervall $[x_i, x_{i+1}]$ unterschreitet der Integrationsfehler den Approximationsfehler bei der feinsten Diskretisierung ($h = 0.002454, N = 1281$), so dass genaueres Integrieren die Ergebnisse nicht mehr verändert. Dies belegt die Rechnung mit 100 Gauß-Punkten.

Basierend auf den präsentierten Ergebnissen kann die direkte Integration über Schnittmengen nicht mit der simplexbasierten Quadratur konkurrieren. Auch mit der Korrektur der Hauptdiagonalelemente lässt sich die Genauigkeit der simplexbasierten Quadratur nur mit erheblich gesteigertem Rechenaufwand erreichen. Die höhere numerische Effizienz der simplexbasierten Integration wird deutlich, wenn die Gesamtanzahl der jeweils verwendeten Gauß-Punkte gegenübergestellt wird. Dieser Wert entspricht der Anzahl der für die Assemblierung der Steifigkeitsmatrix erforderlichen Funktionsaufrufe zur Auswertung der MLS-Ableitungen. Er ist damit ein sinnvolles Maß zur Beurteilung der Effizienz eines Quadraturverfahrens. Bei feinsten Diskretisierung mit $N = 1281$ ist die Anzahl der Integrationszellen bei der simplexbasierten Integration 1280. Die Anzahl der Schnittmengen $\omega_i \cap \omega_j \neq \emptyset$ ist in diesem Fall 5961. Wird bei beiden Varianten mit derselben Anzahl der Gauß-Punkte je Quadraturzelle integriert, so ist der bei der simplexbasierten Integration für die Assemblierung der Steifigkeitsmatrix aufzubringende Aufwand um den Faktor 4 geringer. Bedenken wir nun noch, dass bei der Integration über die Schnittmengen im betrachteten Beispiel das Zehnfache an Gauß-Punkten je Integrationszelle benötigt wurde, um den Integrationsfehler zu unterdrücken, so ist bei der Integration über die Schnittmengen mit einem etwa 40-fachen Aufwand zu rechnen. Auch die Beachtung der Tatsache, dass die Korrektur der Zeilensummen gemäß (4.19) die Auswertung von N Integralen zur Bestimmung der Hauptdiagonalelemente überflüssig macht, lässt diese Verhältnisse weiterhin gelten.

Ein weiterer wichtiger Unterschied dieser beiden Verfahren besteht darin, dass bei der Integration über die Schnittmengen die Anzahl der Integrationszellen (und damit die Anzahl der Integrationsstützstellen) mit wachsendem Überdeckungsparameter c_r zunimmt. Bei der simplexbasierten Integration ist dies offensichtlich nicht der Fall. Damit ist im Allgemeinen ein noch deutlicherer Effizienzvorteil der simplexbasierten Quadratur zu erwarten.

Anpassung der Einflussbereiche an die Integrationszellen

Die oben diskutierten Probleme bei der Auswertung der Gebietsintegrale im Rahmen eines MLS-basierten Diskretisierungsverfahrens und die diesbezüglichen Lösungsvorschläge bildeten die Grundlage für eine weitere im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Idee, die wir hier nur kurz umreißen.

Diese besteht im Wesentlichen darin, anstatt die Integrationszellen in Abhängigkeit von der Geometrie der Einflussbereiche bzw. ihrer Schnittmengen zu konstruieren, weiterhin von der simplexbasierten Integration auszugehen, dabei jedoch die Einflussbereiche an die Integrationszellen anzupassen.

Die Umsetzung dieser Vorstellung lässt sich leicht ausgehend von der Finite-Elemente-Methode erläutern. Wir betrachten einen Stützstellensatz x_i, i, \dots, N in einem eindimensionalen Grundgebiet $\Omega = \{x | x_i \leq x \leq x_N\}$. Die Koordinaten der Stützstellen können beliebig gewählt werden, es soll jedoch weiterhin $x_i < x_{i+1}, i, \dots, N - 1$ gelten. Im Falle der linearen Ansatzfunktionen der Finite-Elemente-Methode können die Einflussbereiche der einzelnen Knoten in der Form

$$\omega_i = \begin{cases} \{x | x \leq x_2\} & \text{für } i = 1 \\ \{x | x \geq x_{N-1}\} & \text{für } i = N \\ \{x | x_{i-1} \leq x \leq x_{i+1}\} & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.20)$$

angegeben werden. Die basierend auf den so definierten Einflussbereichen berechneten MLS-Ansatzfunktionen stimmen mit den linearen FE-Ansatzfunktionen überein, unabhängig davon, welche Fensterfunktionen verwendet werden. Von den Fensterfunktionen ist lediglich zu fordern, dass sie keine Nullstellen innerhalb des jeweiligen Einflussbereiches besitzen und alle mit demselben Vorzeichen behaftet sind.

Um die Genauigkeitsvorteile der MLS-Approximation zu erhalten, die im Wesentlichen durch die höhere Überdeckung des Grundgebietes erzielt werden, sollen die Einflussbereiche nun vergrößert werden. Dabei verlangen wir, dass ihre Grenzen weiterhin mit den Stützstellen x_i zusammenfallen. Die Größe der Einflussbereiche kann unter dieser Bedingung nicht „stufenlos“ geändert werden, wie es bei einem gewöhnlichen MLS-Verfahren der Fall ist, sondern ist z. B. durch

$$\omega_i = \begin{cases} \{x | x \leq x_3\} & \text{für } i = 1 \\ \{x | x \leq x_4\} & \text{für } i = 2 \\ \{x | x \geq x_{N-3}\} & \text{für } i = N - 1 \\ \{x | x \geq x_{N-2}\} & \text{für } i = N \\ \{x | x_{i-2} \leq x \leq x_{i+2}\} & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.21)$$

vorzugeben.

Geeignete Fensterfunktionen $w_i(x)$ können in unterschiedlicher Form eingeführt wer-

den. Wir geben hier nur eine Möglichkeit des grundsätzlichen Aufbaus an.

$$w_i(x) = \begin{cases} (x_3 - x)^k & \text{für } i = 1 \\ (x_4 - x)^k & \text{für } i = 2 \\ (x - x_{N-3})^k & \text{für } i = N - 1 \\ (x - x_{N-2})^k & \text{für } i = N \\ ((x - x_{i-2})(x_{i+2} - x))^k & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.22)$$

Außerhalb des jeweiligen Einflussbereiches soll $w_i(x) = 0$ gelten. Mit dem ganzzahligen Exponenten $k > 0$ erhalten wir $(k - 1)$ -mal stetig differenzierbare Fensterfunktionen. Da die Maximalwerte der Fensterfunktionen stark variieren können, ist es sinnvoll, sie z. B. in der Form

$$w_i(x) \leftarrow w_i(x)/w_i(x_i) \quad (4.23)$$

zu normieren. Basierend auf dieser Definition der Fensterfunktionen kann die Berechnung der MLS-Ansatzfunktionen in bekannter Weise erfolgen, vgl. Kapitel 2.1.

Für die Verwendung solcher Fensterfunktionen sprechen folgende Gründe:

1. Die Ränder der Einflussbereiche fallen mit den Integrationsgrenzen zusammen.
2. Die kinematischen Randbedingungen lassen sich ohne zusätzliche Techniken erfüllen, da an beiden Randknoten der zu (4.8)-(4.11) analoge Sonderfall vorliegt.
3. Es liegen übersichtliche Konnektivitätsbeziehungen vor. Die Bestimmung der in irgendeinem Punkt des Grundgebietes aktiven Knoten erfordert keinen nennenswerten Aufwand.
4. Die Anzahl der von Null verschiedenen Elemente der Steifigkeitsmatrix ist von vornherein bekannt. Die Bandbreite der Steifigkeitsmatrix ist konstant.

Die soeben für den eindimensionalen Fall geschilderte Idee lässt sich auch für ebene Probleme realisieren, wenn wir — wie bisher — von einer vorhandenen Triangulation des Knotensatzes ausgehen. Der Einflussbereich eines Knotens hat dann die in Bild 4.20d beispielhaft illustrierte Geometrie. Die Konstruktion geeigneter Fensterfunktionen ist auf der

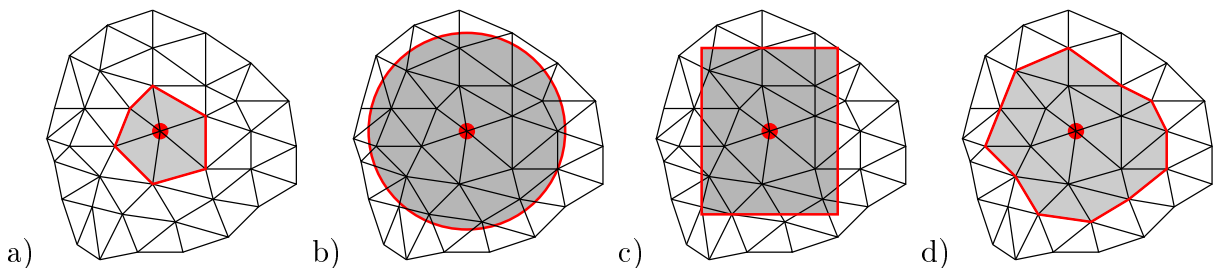


Bild 4.20: Verschiedene Formen der Einflussbereiche ω_i im \mathbb{R}^2 : a) linearer FE-Ansatz, b) und c) gewöhnliche MLS-Technik, d) ein an die Integrationszellen angepasster Einflussbereich

Grundlage von R-Funktionen (Rvachev, 1982, Shapiro, 1991) möglich. Das resultierende Diskretisierungsverfahren kann als eine Verbindung zwischen der üblichen MLS-Technik und der Finite-Elemente-Methode angesehen werden.

Dieses Verfahren und die mit der Umsetzung verbundenen Implementierungsaspekte sowie seine numerischen Eigenschaften untersucht Palnau (2007) eingehender. Die numerischen Experimente am eindimensionalen Patchtest zeigen vielversprechende Resultate. Insbesondere wird eine deutlich geringere Anzahl der Gauß-Punkte benötigt als bei einer gewöhnlichen MLS-Diskretisierung, um den eindimensionalen Patchtest numerisch genau zu erfüllen. Bei zweidimensionalen Rechnungen werden dagegen Integrationsfehler dokumentiert, deren Größenordnung mit den bei gewöhnlichen MLS-Verfahren auftretenden Fehlern übereinstimmt. Das Ergebnis überrascht insofern nicht, als das *misalignment* bei den vorangegangenen Untersuchungen nicht als die dominierende Quelle für die Integrationsfehler bestätigt werden konnte. Durch die Anpassung der Einflussgebiete an die Integrationsgrenzen wird zwar das *misalignment* vollständig beseitigt, die basierend auf polygonal begrenzten Fensterfunktionen berechneten MLS-Ansatzfunktionen bzw. ihre Ableitungen können jedoch komplexer sein als die üblichen MLS-Ansätze.

Die Güte der approximierten Lösungen stimmt in etwa mit den Ergebnissen entsprechender MLS-Rechnungen mit üblichen Fensterfunktionen überein. Palnau unterstreicht aber, dass der zur Auswertung der Ansatzfunktionen und ihrer Ableitungen benötigte Rechenaufwand sehr hoch ist, was durch die Komplexität der durch Polygone begrenzten Fensterfunktionen bedingt ist. Die positiven Eigenschaften, wie die recht einfache Bestimmung der Konnektivitätsbeziehungen, können diesen Nachteil nicht aufwiegen.

Es sei angemerkt, dass die gemäß (4.22) eingeführten Fensterfunktionen ihr Maximum im Allgemeinen nicht über der jeweiligen Stützstelle besitzen. Dies lässt sich z.B. durch die Multiplikation der Fensterfunktionen $w_i(x)$ mit Exponentialfunktionen $\exp(a_i x)$ mit den aus der Bedingung

$$w_{i,x}(x_i) = 0$$

bestimmten Parametern a_i beheben. Diese Modifikation scheint jedoch unnötig zu sein. Die damit erzielten Approximationsergebnisse zeichnen sich nicht durch nennenswert höhere Genauigkeiten aus. Das trifft auch auf zweidimensionale Rechnungen zu.

Inwiefern die Idee für zukünftige Untersuchungen nützlich sein kann, ist zum jetzigen Zeitpunkt nicht klar. In der vorliegenden Arbeit werden wir sie nicht weiter verfolgen.

4.3 Zur Effizienz der entwickelten Programme

Wir schließen die numerischen Studien im Rahmen der linearen Elastostatik mit einer Betrachtung der benötigten CPU-Zeiten ab. Hierfür greifen wir exemplarisch die Randwertaufgabe für die gelochte Scheibe auf und messen neben der Gesamtlaufzeit eines Programms auch die von einzelnen Programmteilen beanspruchten CPU-Zeiten. Dabei beschränken wir uns auf die Untersuchung der MLS-Technik unter Verwendung der Rampenfunktion zur Erfüllung kinematischer Randbedingungen. Der für andere implementierte MLS-Varianten erforderliche Aufwand ist von gleicher Größenordnung.

Außerdem nutzen wir dieses Unterkapitel, um einen quantitativen Effizienzvergleich zwischen der MLS- und der FE-Methode durchzuführen. Es wurde bereits erwähnt, dass die hier benutzte FE-Implementierung durch Anpassungen des entwickelten MLS-Codes

entstand. Die Unterschiede in der Programmstruktur bestehen im Wesentlichen in der Verwendung verschiedener Unterprogramme zur Berechnung der Ansatzfunktionen und ihrer Ableitungen. Des weiteren enthält das FE-Programm keine MLS-spezifischen Routinen wie die Unterprogramme zur Bestimmung der Größe der Einflussbereiche und zur Ermittlung der Konnektivitätsbeziehungen. Der ansonsten gleiche Aufbau beider Programme ermöglicht eine sinnvolle Gegenüberstellung der beiden Diskretisierungstechniken bezüglich ihrer Effizienz.

Wir verwenden für alle MLS-Rechnungen den Überdeckungsparameter $c_r = 2$. Die Assemblierung der Steifigkeitsmatrix basiert auf der Gauß-Quadratur mit 13 Stützstellen in jedem Dreieck der Knotentriangulation. Zur Berechnung der Koeffizienten der FEM-Steifigkeitsmatrix ist ein Gauß-Punkt je Dreieck bei linearem Verschiebungsansatz ausreichend. In beiden Programmen wird der Beitrag der Randspannungen zum Lastvektor durch Quadratur mit vier Gauß-Punkten je Randsegment erfasst. Die Auswertung der Fehlernormen (4.1) und (4.2) geschieht in beiden Fällen durch die Integration mit 13 Gauß-Punkten je Dreieck.

Wir gehen stets von einer bereits vorhandenen Stützstellenverteilung und der zugeordneten Triangulation aus. Die angegebenen Gesamtrechnenzeiten enthalten folglich nicht die für die Erzeugung dieser räumlichen Diskretisierung benötigten CPU-Zeiten. Alle Berechnungen werden auf einem Notebook mit einem Intel(R) Core(TM)2 T7600-Prozessor, Taktrate 2.33 GHz und 1 GB Hauptspeicher durchgeführt. Die in *Fortran90* geschriebenen und mit dem *gfortran*-Compiler übersetzten Programme laufen sequenziell ab, so dass immer nur „eine der beiden Prozessorhälften“ belastet wird.

Tabelle 12: Die für die Berechnung des approximierten Gleichgewichtszustandes der Scheibe mit Loch benötigten Rechenzeiten in Sekunden. Prozessor: Intel(R) Core(TM)2 T7600, Taktrate 2.33 GHz, Betriebssystem: Linux Kernel 2.6.18

	CPU-Zeit/Sekunde			
	$N = 5000$		$N = 20000$	
	MLS	FEM	MLS	FEM
Konstruktion der Überdeckung	0.00	—	0.00	—
Bestimmung der Konnektivität	0.22	—	3.82	—
Assemblierung der Steifigkeitsmatrix	9.28	0.03	104.35	0.11
Assemblierung des Lastvektors	0.01	0.00	0.07	0.00
Lösung des linearen Gleichungssystems	6.80	0.12	153.67	0.85
Berechnung der Fehler	6.52	0.23	94.69	0.93
Gesamtzeit	22.85	0.38	356.60	1.89

Tabelle 12 fasst die für Rechnungen mit $N = 5000$ und $N = 20000$ Knoten benötigten CPU-Zeiten in Sekunden zusammen. Der Einsatz der in Kapitel 2.2 vorgeschlagenen Strategie zur Bestimmung einer hinreichenden Überdeckung führt erst bei Diskretisierungen mit mehr als 10000 Knoten zu messbaren CPU-Zeiten. Bei 20000 Stützstellen wird eine hinreichende Überdeckung bei unregelmäßiger Stützstellenverteilung, vgl. Bild 4.4, in 0.004 Sekunden erzeugt. Die Konnektivitätsbeziehungen (Kapitel 2.4.4) werden bei 5000

Knoten in ca. 0.2 Sekunden und bei 20000 in ca. 4 Sekunden ermittelt. Der Zeitbedarf steigt also überproportional mit wachsender Stützstellenzahl an. Diese CPU-Zeiten sind dennoch im Hinblick auf die Gesamtrechnenzeiten nicht nennenswert.

Erwartungsgemäß stellt die Assemblierung der Steifigkeitsmatrix einen der zeitraubenden Teile der MLS-Rechnung dar. Während die FE-Steifigkeitsmatrix auch bei 20000 Stützstellen in deutlich unter einer Sekunde assembliert wird, benötigt das MLS-Programm für diese Aufgabe bei gleicher Stützstellenzahl trotz vorher ermittelter Konnektivität fast 2 Minuten.

Um die Bedeutung der in dieser Arbeit vorgeschlagenen Ermittlung der Konnektivität bei einer MLS-Diskretisierung zu quantifizieren, wurde eine Vergleichsrechnung mit 5000 Knoten ohne vorherige Bestimmung der Konnektivität durchgeführt. Bei der Berechnung der MLS-Ansatzfunktionen und ihrer Ableitungen (Tabelle 1) und bei der Assemblierung der Steifigkeitsmatrix (Tabelle 5) liefen die entsprechenden Schleifen jeweils über alle Stützstellen. Für die Assemblierung der Steifigkeitsmatrix wurden in diesem Fall ca. 86 Sekunden benötigt. Unter Verwendung des in Kapitel 2.4.4 vorgeschlagenen Algorithmus und der dort beschriebenen Anpassungen der Unterprogramme zur Bestimmung der Ansatzfunktionen und der Steifigkeitsmatrix wird der Zeitaufwand auf ca. 9 Sekunden — also fast um den Faktor 10 reduziert, vgl. Tabelle 12. Der Effizienzvorteil wird mit steigender Stützstellenzahl noch deutlich größer.

Zur Lösung linearer Gleichungssysteme wird das externe Unterprogramm MA27 verwendet. Die sehr unterschiedlichen Zeiten bei der Lösung des FE-Gleichungssystems und des MLS-Gleichungssystems bei derselben Stützstellenzahl kommen durch eine stärkere Überdeckung des Grundgebietes und damit eine höhere Anzahl der von Null verschiedenen Koeffizienten in der Steifigkeitsmatrix der MLS-Rechnung zu Stande. So enthält die FE-Steifigkeitsmatrix bei der Rechnung mit 5000 Knoten 72330 von Null verschiedene Koeffizienten. Bei entsprechender MLS-Rechnung sind es 598108.

Einen direkten Vergleich des für die numerische Auswertung der MLS- und FE-Ansatzfunktionen und ihrer Ableitungen benötigten Zeitaufwandes bieten die bei der Berechnung der Fehlernormen gemessenen CPU-Zeiten. Da wir in beiden Fällen zur Approximation der Gebietsintegrale mit 13 Gauß-Punkten je Dreieck rechnen, ist die Anzahl der Funktionsauswertungen für beide Programme bei derselben räumlichen Diskretisierung gleich. Bei 20000 Stützstellen beansprucht das MLS-Programm für die Fehlerberechnung das 100-fache des entsprechenden FE-Aufwandes.

Die resultierenden Gesamtrechnenzeiten machen klar, dass bei Verwendung der MLS-Diskretisierung von einem über 100-fachen Aufwand verglichen mit einer entsprechenden FE-Rechnung auszugehen ist (jedenfalls bei der hier betrachteten Größenordnung der Stützstellen). Vorangegangene Untersuchungen haben jedoch die auch aus der Literatur bekannten Genauigkeitsvorteile des MLS-Verfahrens gegenüber der FE-Methode bei Verwendung derselben Knotenverteilung belegt. Wir stellen uns nun die Frage, ob diese Genauigkeitsvorteile eine effizientere Behandlung von Problemen der linearen Elastostatik als mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode möglich machen.

Hierfür tragen wir die aus mehreren FE- und MLS-Rechnungen gewonnenen Ergebnisse (Fehlernormen) über der für die jeweilige Rechnung benötigten CPU-Zeit auf (Bild 4.21).

Bei gleicher Programmlaufzeit liefert die FE-Diskretisierung stets den kleineren Fehler in der Verschiebungsnorm. Die höhere Konvergenzrate des MLS-Verfahrens führt zu-

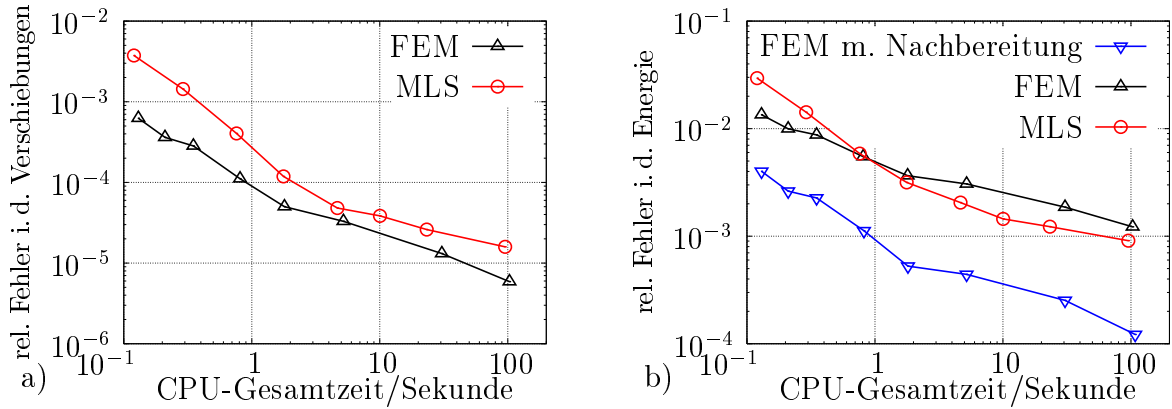


Bild 4.21: Ein Effizienzvergleich der FE-Methode und des MLS-Verfahrens. Die bei einzelnen Rechnungen verwendeten Stützstellenzahlen enthält die unten stehende Tabelle.

	verwendete Stützstellenzahlen							
FEM	$2 \cdot 10^3$	$3.2 \cdot 10^3$	$5 \cdot 10^3$	10^4	$2 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^4$	10^5	$2 \cdot 10^5$
MLS	10^2	$2 \cdot 10^2$	$5 \cdot 10^2$	10^3	$2 \cdot 10^3$	$3.2 \cdot 10^3$	$5 \cdot 10^3$	10^4

nächst dazu, dass bei einer Rechenzeit von etwa 5 Sekunden mit beiden Methoden gleiche Genauigkeiten in den Verschiebungen erreicht werden. Der zunehmende Einfluss des Integrationsfehlers bei MLS-Rechnungen lässt die Vorteile der FE-Methode wieder deutlicher werden. Auf Grund seiner höheren Konvergenzrate erzielt das MLS-Verfahren mit steigender Rechenzeit genauere Ergebnisse in der Energienorm. Doch auch hier macht sich der Integrationsfehler in Form einer abflachenden MLS-Kurve bemerkbar. Natürlich könnte der Integrationsfehler durch eine höhere Zahl der Integrationsstützstellen unterdrückt werden. Mit steigender Anzahl der Integrationsstützstellen wird jedoch auch die Rechenzeit deutlich zunehmen, so dass das Abflachen der MLS-Kurven in Bild 4.21 unvermeidlich zu sein scheint.

Gehen wir bei der Berechnung des FE-Fehlers in der Energienorm an Stelle von konstanten Spannungszuständen in jedem Dreieck von linear interpolierten Spannungen aus, so erweist sich die FE-Approximation als deutlich effizienter. Zur Interpolation der Spannungen wurden die Ansatzfunktionen für die Verschiebungen verwendet, nachdem für jeden Knoten ein Spannungszustand als Mittelwert der Spannungszustände der angrenzenden Dreiecke ermittelt wurde. Diese Nachbereitung der FE-Ergebnisse macht sich in den Gesamtrechnungen nicht bemerkbar.

Die hier exemplarisch ermittelten Rechenzeiten dienen in erster Linie der Orientierung, legen aber den Schluss nahe, dass der Einsatz des MLS-Verfahrens in seinem derzeitigen Entwicklungsstand für Probleme der ebenen, linearen Elastostatik keine konkurrenzfähige Alternative zur Finite-Elemente-Methode darstellt. Diese Aussage ist allerdings zu relativieren, wenn wir bedenken, dass für die FE-Rechnungen wesentlich feinere Stützstellenverteilungen verwendet wurden. Das Einbeziehen der zur Erzeugung der Stützstellenverteilung erforderlichen Rechenzeiten in die Gesamtrechnungen würde sich positiv auf die Beurteilung der Effizienz der MLS-Diskretisierung auswirken.

Wir beenden dieses Kapitel mit der Bemerkung, dass die Verwendung einer Triangulation innerhalb einer „netzfreien“ Diskretisierungstechnik die Effizienz des Verfahrens nicht beeinträchtigt. So benötigt das hier verwendete Programm `Triangle` für die Konstruktion der Delaunay-Triangulation von 20000 Knoten etwa 0.1 Sekunden. Das Unterprogramm, das das in *C* geschriebene Programm `Triangle` in die *Fortran90*-Implementierung einbettet, stellt nach ca. 0.4 Sekunden die Triangulationsstruktur zur Verfügung. Unter Berücksichtigung der Gesamtrechenzeit von deutlich über 300 Sekunden, vgl. Tabelle 12, kann der Triangulationsaufwand gänzlich außer Acht gelassen werden. Damit scheint die Entwicklung „wirklich netzfreier“ Verfahren jedenfalls für zweidimensionale Berechnungen unnötig zu sein. Inwiefern diese Aussage auch für dreidimensionale Rechnungen gültig ist, können wir auf Grund fehlender Erfahrung nicht beurteilen.

5 Scherbandanalyse inkrementell nichtlinearer Continua

Wir wenden uns in diesem Kapitel der Frage zu, ob MLS-Ansätze ein geeignetes Mittel zur numerischen Analyse materieller Instabilitäten in elasto-plastischen Körpern bei endlichen Verzerrungen darstellen.

In Unterabschnitt 5.1 stellen wir die benötigten theoretischen Grundlagen referierend zusammen, wobei wir im Wesentlichen den Übersichtsarbeiten Petryk (1999, 1997) und Thermann (1999) folgen. Als Materialmodell wählen wir die J_2 *corner theory* von Christoffersen und Hutchinson (1979), da sich dafür eine Reihe analytischer Aussagen, die für die Beurteilung der numerischen Ergebnisse nützlich sind, herleiten lassen. Die Arbeiten von H. Petryk, auf denen sowohl die Theorie als auch das numerische Verfahren beruhen, sind hier nur stark verkürzt und in dem Umfang zitiert, wie es zum Verständnis der numerischen Analysen erforderlich schien. Insbesondere sind alle thermodynamischen Aspekte und allgemeinere konfigurationsabhängige Belastungen in Petryks Methodik in unserer Darstellung unberücksichtigt geblieben.

Kapitel 5.2 enthält die Ergebnisse der Simulationsrechnungen. Zur Validierung des an die neuen Fragestellungen angepassten Programmcodes der linearen Elastostatik werden zunächst Stärken und Schwächen der FE-Diskretisierung bestätigt. Alle weiteren numerischen Untersuchungen beziehen sich auf das MLS-Verfahren, für das die Auswirkungen der Integrationsgenauigkeit, der Größe der Einflussgebiete und der Knotenverteilungen auf den Bifurkationszeitpunkt und die zugehörigen Felder studiert werden.

5.1 Theoretische Grundlagen

Konstitutive Annahmen

Wir betrachten quasistatische, isotherme Deformationsprozesse und zeitunabhängiges Werkstoffverhalten. Die konstitutiven Ratengleichungen haben dann die Form

$$\dot{\mathbf{S}}(\dot{\mathbf{F}}, \mathcal{G}) = \mathbf{C}(\dot{\mathbf{F}}, \mathcal{G}) \dot{\mathbf{F}}, \quad \mathbf{C} \equiv \frac{\partial \dot{\mathbf{S}}}{\partial \dot{\mathbf{F}}} \quad (5.1)$$

mit \mathbf{F} als Deformationsgradient und \mathbf{S} als 1. Piola-Kirchhoff Spannungstensor, der mit der Cauchy-Spannung $\boldsymbol{\sigma}$ und der Kirchhoff-Spannung $\boldsymbol{\tau}$ gemäß

$$\mathbf{S}\mathbf{F}^T = \det(\mathbf{F})\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau} \quad (5.2)$$

verknüpft ist. Ein übergesetzter Punkt kennzeichnet die Ableitung nach einem mit der Zeit monoton anwachsenden Parameter t (materielle Zeitableitung) und \mathcal{G} symbolisiert die Abhängigkeit der Spannungsrate vom materiellen Zustand, d. h. der aktuellen Verzerrung und der vorangegangenen inelastischen Deformationsgeschichte. Der Modultensor \mathbf{C} ist eine positiv homogene Funktion vom Grade Null in $\dot{\mathbf{F}}$, so dass die inkrementelle Steifigkeit \mathbf{C} zwar nicht von der Größe, jedoch von der Richtung der Ratenvariablen $\dot{\mathbf{F}}$ abhängig sein kann.

Abgesehen davon, dass $\mathbf{C}(\dot{\mathbf{F}})$ als stückweise stetige Funktion vorausgesetzt wird, ist diese Abhängigkeit keinen weiteren Einschränkungen unterworfen und kann insbesondere auch nichtlinear sein. Dies begründet die Kennzeichnung der betrachteten Werkstoffe als *inkrementell nichtlinear*. Die über die Bilinearität des klassischen elasto-plastischen Körpers (mit zwei konstitutiven Bereichen für elastische Entlastung und plastisches Fließen) hinausgehende inkrementelle Nichtlinearität erweist sich für die zu behandelnden Stabilitätsprobleme als bedeutsam.

Eine zweite wesentliche Annahme betrifft die postulierte Hauptsymmetrie des Modultensors

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}^T \iff C_{ijkl} = C_{klij}, \quad (5.3)$$

d. h. es wird die Existenz eines konstitutiven Potentials $U(\dot{\mathbf{F}})$ angenommen, aus dem

$$\dot{\mathbf{S}} = \frac{\partial U}{\partial \dot{\mathbf{F}}}, \quad \mathbf{C} = \frac{\partial^2 U}{\partial \dot{\mathbf{F}} \partial \dot{\mathbf{F}}}, \quad U = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{S}} \cdot \dot{\mathbf{F}} \quad (5.4)$$

folgt (Hill, 1959, 1978).

Während der bisher beschriebene konstitutive Rahmen für theoretische Erörterungen ausreicht, bedarf es für numerische Anwendungen noch einer Spezifizierung des Materialgesetzes. Wir verwenden in dieser Arbeit eine Version für endliche Verzerrungen der *J₂ corner theory* von Christoffersen und Hutchinson (1979) in einer Implementierung von H. Petryk und K. Thermann, die bereits in früheren Untersuchungen (Petryk und Thermann, 1992, 1996, 2002) eingesetzt wurde. In dieser Theorie wird zunächst ein konstitutives Potential $\Psi(\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}, \mathcal{G})$ als Funktion der Jaumann Ableitung $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}$ der Kirchhoff-Spannung formuliert. Die Eulersche Verzerrungsgeschwindigkeit \mathbf{D} ergibt sich daraus gemäß

$$\mathbf{D} = \frac{\partial \Psi(\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}})}{\partial \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}}, \quad \Psi(\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}) = \frac{1}{2} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \cdot (\mathbf{M}^e + f(\theta) \mathbf{M}^p) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}, \quad \cos(\theta) = \frac{\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{M}^p \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}}{\sqrt{(\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{M}^p \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}) (\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{M}^p \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}})}}, \quad (5.5)$$

wobei \mathbf{M}^e und \mathbf{M}^p symmetrische, positiv definite Tensoren vierter Stufe sind. \mathbf{M}^e ist die isotrope, elastische und \mathbf{M}^p die plastische Nachgiebigkeit. \mathbf{M}^p wird so gewählt, dass $\mathbf{M}^e + \mathbf{M}^p$ der Nachgiebigkeitstensor der hyperelastischen *J₂* Deformationstheorie ist. $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}$ ist der Deviator der Kirchhoff Spannung und $f(\theta)$ eine Übergangsfunktion, die von 1 im Kegelmäßig vollständer Belastung ($0 \leq \theta \leq \theta_0$) stetig differenzierbar auf 0 im Bereich der elastischen Entlastung $\theta_c \leq \theta \leq \pi$ abfällt (Bild 5.1). Für $f(\theta)$ verwenden wir die Übergangsfunktion gemäß Formel (2.46) mit $m = 3$ aus der Arbeit von Christoffersen und Hutchinson (1979). Ihr Verlauf ist in Bild 5.1b dargestellt. Neben der Anfangsfließspannung τ_0 , dem Elastizitätsmodul E und der Querkontraktionszahl ν legen der Öffnungswinkel β_c^{max} der Fließecke im Spannungsraum und der Verfestigungsexponent N eines Potenzverfestigungsgesetzes¹⁵ das Materialverhalten vollständig fest. Die Kegelmäßig θ_c und θ_0 in Bild 5.1 wählen wir zu

$$\begin{aligned} \tan(\theta_c) &= \sqrt{N} \tan(\beta_c^{max}) \\ \theta_0 &= 0.5 \cdot (\theta_c - \pi/2). \end{aligned}$$

¹⁵Wir bleiben bei der Bezeichnung N für den Verfestigungsexponenten, die auch in allen früheren Arbeiten benutzt wurde, da Verwechslungen mit der ebenso bezeichneten Knotenzahl einer Diskretisierung nicht zu befürchten sind.

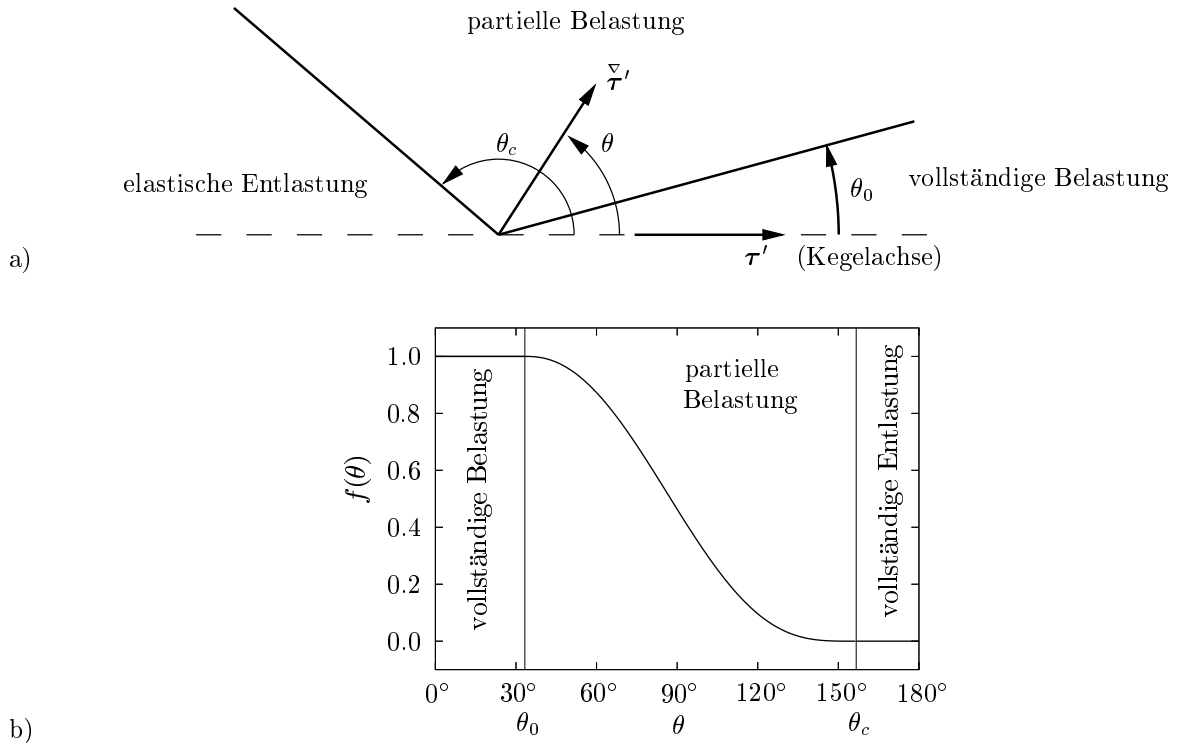


Bild 5.1: a) Belastungs- und Entlastungskegel im deviatorischen Raum der Spannungsraten für die J_2 corner theory von Christoffersen und Hutchinson (1979) und b) der Verlauf der Übergangsfunktion $f(\theta)$

Bezüglich weiterer Einzelheiten sei auf die zitierte Originalarbeit und Tvergaard et al. (1981) verwiesen. Eine ausführliche Darstellung der erforderlichen Umformungen von (5.5) in die Form (5.4) mit Hilfe von Hills (1978) Transformationsregeln findet man bei Lulla (2002).

Ratenform der Feldgleichungen und Variationsformulierung

Für die jetzt betrachteten endlichen Deformationen ist die Unterscheidung zwischen der Referenzkonfiguration und der aktuellen Konfiguration, auf die wir im Rahmen der linearen Elastizitätstheorie infinitesimal kleiner Verschiebungen verzichten konnten, wesentlich. Wie üblich verwenden wir $\mathbf{X} = X_i \mathbf{e}_i$ zur Identifizierung der Körperpunkte in der Referenzkonfiguration Ω und $\mathbf{x}(\mathbf{X}, t) = x_i(\mathbf{X}, t) \mathbf{e}_i$ zur Kennzeichnung ihrer Position in der aktuellen Lage. $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ ist die kartesische Basis. In der Referenzkonfiguration sei der Körper durch nominelle Volumenkräfte $\mathbf{b}(\mathbf{X}, t)$ und auf dem Teil $\partial\Omega_t$ der Oberfläche durch nominelle Spannungen $\mathbf{t}(\mathbf{X}, t)$ belastet. Auf dem komplementären Teil der Oberfläche $\partial\Omega_u$ seien die Verschiebungen $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, t)$ vorgegeben. \mathbf{N} bezeichnet den Normalenvektor auf $\partial\Omega$.

Die materialunabhängigen Feldgleichungen lauten dann (vgl. z.B. Gurtin (1972), S. 55)

$$\begin{aligned}
 \text{Div } \mathbf{S} + \mathbf{b} &= \mathbf{0} && \text{in } \Omega \\
 \mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} && \text{auf } \partial\Omega_u \\
 \mathbf{S} \mathbf{N} &= \mathbf{t} && \text{auf } \partial\Omega_t.
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

Nach materieller Zeitableitung und Ergänzung durch die konstitutive Gleichung (5.4) folgen die Feldgleichungen in Ratenform

$$\begin{aligned}
\dot{\mathbf{F}} &= \nabla \mathbf{v} && \text{in } \Omega \\
\dot{\mathbf{S}} &= \mathbf{C}(\dot{\mathbf{F}})\dot{\mathbf{F}} && \text{in } \Omega \\
\text{Div } \dot{\mathbf{S}} + \dot{\mathbf{b}} &= \mathbf{0} && \text{in } \Omega \\
\mathbf{v} &= \bar{\mathbf{v}} && \text{auf } \partial\Omega_u \\
\dot{\mathbf{S}} \mathbf{N} &= \dot{\mathbf{t}} && \text{auf } \partial\Omega_t,
\end{aligned} \tag{5.7}$$

wobei \mathbf{v} das Geschwindigkeitsfeld bezeichnet und Gradient und Divergenz jetzt bezüglich der Koordinaten in der Referenzkonfiguration zu bilden sind:

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}, t) = \dot{\mathbf{x}}(\mathbf{X}, t), \quad (\nabla \mathbf{v})_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial X_j}, \quad (\text{Div } \mathbf{S})_j = \frac{\partial S_{ij}}{\partial X_i}.$$

Vergleicht man (5.7) mit (2.62), so ist es auf Grund der strukturellen Ähnlichkeit der Feldgleichungen und der postulierten Symmetrie des Modultensors $\mathbf{C} = \mathbf{C}^T$ nicht überraschend, dass auch für (5.7) eine Variationsformulierung existiert. Mit dem Geschwindigkeitsfunktional

$$J(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} U(\nabla \mathbf{v}) dV - \int_{\Omega} \dot{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{v} dV - \int_{\partial\Omega_t} \dot{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{v} dS \tag{5.8}$$

erhält man Hills (1959) Variationsprinzip

$$\delta J(\mathbf{v}) = 0 \quad \text{für alle } \mathbf{v} \quad \text{mit} \quad \mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} \text{ auf } \partial\Omega_u. \tag{5.9}$$

Der entscheidende Unterschied zur linearen Elastizitätstheorie besteht darin, dass das konstitutive Potential (5.4)

$$U(\nabla \mathbf{v}) = \frac{1}{2} \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{C}(\nabla \mathbf{v}) \nabla \mathbf{v} \tag{5.10}$$

jetzt nicht mehr eine quadratische Funktion des Geschwindigkeitsgradienten darstellt, sondern wegen der expliziten Abhängigkeit des Modultensors von $\nabla \mathbf{v}$ eine im Allgemeinen nicht konvexe Funktion ist. Damit ist auch die Eindeutigkeit der Lösung des Randwertproblems (5.7) oder des Variationsproblems (5.9) nicht mehr automatisch sichergestellt und es stellt sich die Frage, mit welchem Geschwindigkeitsfeld der Deformationsprozess fortzusetzen ist, wenn es mehrere mathematisch korrekte und gleichberechtigte Alternativlösungen der Feldgleichungen gibt.

Petryks Energiekriterium für die Stabilität eines Deformationspfades

Einen Ausweg in dieser Situation bietet das Energiekriterium für die Stabilität eines Deformationsprozesses. Es präzisiert die intuitive ingenieurmäßige Hypothese, dass ein realer Deformationsprozess eine Tendenz zeigen wird, den Energiebedarf zu minimieren (Petryk, 1982, 1985):

In einem stabilen quasi-statischen Deformationsprozess des zeitunabhängigen Werkstoffs (5.4) wird das mit einer Genauigkeit von zweiter Ordnung berechnete Energieinkrement auf der Menge der kinematisch zulässigen Deformationsinkremente minimiert, d. h.

$$\Delta E^0 \leq \Delta E. \quad (5.11)$$

Die Berechnung der Energieinkremente führt auf die äquivalente Bedingung

$$J(\nabla \mathbf{v}^0) \leq J(\nabla \mathbf{v}) \quad \text{für alle } \mathbf{v} \text{ mit } \mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} \text{ auf } \partial\Omega_u, \quad (5.12)$$

die die Beziehung zu dem oben eingeführten Geschwindigkeitsfunktional und Hills Bifurkationstheorie herstellt (Petryk, 1985). Dass (5.12) eine notwendige Bedingung für einen stabilen Deformationsprozess \mathbf{v}^0 darstellt, hat Petryk (1991) begründet. Dieses Minimalprinzip ist auch die Basis der numerischen Methode, die wir gleich besprechen. Zuvor zitieren wir wichtige theoretische Folgerungen aus dem Energiekriterium für homogene Deformationsprozesse.

Stabilität eines homogenen Deformationsprozesses

Für einen homogenen Deformationsprozess \mathbf{F}^0 mit $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, $\partial\Omega_u = \partial\Omega$ impliziert das Energiekriterium (5.12) als lokale Bedingungen (Petryk, 1992) für die Stabilität der Gleichgewichtslage

$$U(\mathbf{g} \otimes \mathbf{n}) \geq 0 \quad \text{für alle } \mathbf{g}, \mathbf{n} \quad (5.13)$$

und für die Stabilität des Deformationsprozesses (Legendre-Hadamard Bedingung)

$$(\mathbf{g} \otimes \mathbf{n}) \cdot \mathbf{C}(\nabla \mathbf{v}^0) (\mathbf{g} \otimes \mathbf{n}) \geq 0 \quad \text{für alle } \mathbf{g}, \mathbf{n}. \quad (5.14)$$

Wird (5.13) verletzt, so ist die Minimierungsaufgabe (5.12) nicht mehr lösbar, da das Geschwindigkeitsfunktional unbeschränkt abnimmt. Ist die Legendre-Hadamard oder semi-starke Elliptizitätsbedingung nicht mehr erfüllt, so ist eine Verzweigung des Prozesses und Lokalisierung der Deformation in Form von Bändern möglich. Wir verwenden hierfür die Bezeichnung Scherbänder, auch wenn von einer Scherrichtung \mathbf{g} orthogonal zur Banderichtung \mathbf{n} streng genommen nur bei inkompressiblen Werkstoffen gesprochen werden kann.

Wegen

$$U(\mathbf{g} \otimes \mathbf{n}) = (\mathbf{g} \otimes \mathbf{n}) \cdot \mathbf{C}(\mathbf{g} \otimes \mathbf{n}) (\mathbf{g} \otimes \mathbf{n})$$

unterscheiden sich die beiden notwendigen Stabilitätsbedingungen nur im Argument des Modultensors \mathbf{C} . Für den klassischen elasto-plastischen Werkstoff, bei dem der Belastungskegel in einen Halbraum entartet, sind sie identisch, so dass der Elliptizitätsverlust mit dem Verlust der Stabilität der Gleichgewichtslage einhergeht. Bei den hier betrachteten allgemeineren, inkrementell nichtlinearen Werkstoffen muss das nicht der Fall sein. Wir betrachten im Folgenden Parameter der J_2 corner theory, für die zum kritischen Zeitpunkt t^* des Elliptizitätsverlusts die Stabilitätsbedingung (5.13) noch erfüllt ist.

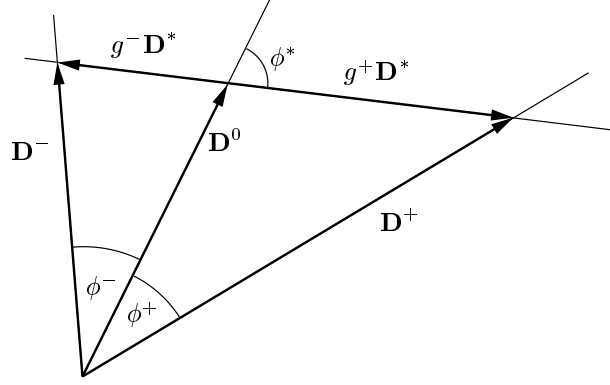


Bild 5.2: Schematische Darstellung der Verzerrungsgeschwindigkeiten zum Bifurkationszeitpunkt t^*

Petryk (1997) hat gezeigt, dass sich zu diesem Zeitpunkt t^* in einem unendlich ausgedehnten Kontinuum eine beliebig fein geschichtete Bandstruktur ausbildet. In jedem Band nimmt die Eulersche Verzerrungsgeschwindigkeit abwechselnd den konstanten Wert

$$\mathbf{D}^+ = \mathbf{D}^0 + g^+\mathbf{D}^* \quad \text{oder} \quad \mathbf{D}^- = \mathbf{D}^0 + g^-\mathbf{D}^*$$

an. \mathbf{D}^0 ist die Eulersche Verzerrungsgeschwindigkeit der homogenen Verzerrung, $(\cdot)^*$ kennzeichnet Größen zum Zeitpunkt t^* und

$$\mathbf{D}^* = \frac{1}{2} (\mathbf{g}^* \otimes \mathbf{n}^* + \mathbf{n}^* \otimes \mathbf{g}^*).$$

Die Skalare g^+ und g^- werden so gewählt, dass \mathbf{D}^+ und \mathbf{D}^- auf dem Rand des Kegels der vollständigen Belastung liegen (Bild 5.2). Obwohl Breite, Anzahl und räumliche Anordnung der Bänder unbestimmt bleiben, hat der Volumenanteil η^* der Lokalisierungszone \mathbf{D}^+ den eindeutig bestimmten Wert

$$\eta^* = \frac{\cot \phi^+ - \cot \phi^*}{\cot \phi^+ + \cot \phi^-}, \quad (5.15)$$

der von der Wahl eines inneren Produktes im \mathbf{D} -Raum unabhängig ist.

Minimierung der inkrementellen Energie für das diskretisierte Ratenproblem

Grundlage der numerischen Methode zur Lösung des diskretisierten Ratenproblems ist das Minimalprinzip (5.12) für das Geschwindigkeitsfunktional (5.8) (Petryk und Thermann, 1992). Es seien $\Phi_\alpha(\mathbf{X})$ wahlweise modifizierte Ansatzfunktionen des MLS-Verfahrens oder der FE-Methode, die auf dem Rand $\partial\Omega_u$ verschwinden, und $\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{X})$ eine beliebige, den kinematischen Randbedingungen genügende Funktion:

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{X}) &= \mathbf{0} & \text{für } \mathbf{X} \in \partial\Omega_u \\ \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{X}) &= \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{X}) & \text{für } \mathbf{X} \in \partial\Omega_u. \end{aligned}$$

Das Geschwindigkeitsfeld approximieren wir mit M freien Parametern q_1, \dots, q_M durch den Ansatz

$$\mathbf{v}^h(\mathbf{X}) = \sum_{\alpha=1}^M \Phi_\alpha(\mathbf{X}) q_\alpha + \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{X}), \quad (5.16)$$

so dass das diskretisierte Ratenproblem in der Bestimmung der zunächst unbekanntenen Freiwerte q_α , $\alpha = 1, \dots, M$ besteht. Da das Ratenproblem bei bekanntem Zustand zu einem festen Zeitpunkt gelöst wird, haben wir die Abhängigkeit von dem zeitähnlichen Parameter t in den obigen Gleichungen unterdrückt.

Das Geschwindigkeitsfunktional (5.8)

$$J(\mathbf{q}) = \int_{\Omega} U(\nabla \mathbf{v}^h(\mathbf{q})) dV - \int_{\Omega} \dot{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{v}^h(\mathbf{q}) dV - \int_{\partial\Omega_t} \dot{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{v}^h(\mathbf{q}) dS \quad (5.17)$$

wird damit zu einer nichtlinearen Funktion der Variablen q_1, \dots, q_M , die wir symbolisch in \mathbf{q} zusammenfassen. Auf Grund der Homogenität des konstitutiven Potentials folgen Gradient und Hesse-Matrix im Punkte \mathbf{q} zu

$$\begin{aligned} k_\alpha(\mathbf{q}) &= \frac{\partial J(\mathbf{q})}{\partial q_\alpha} = \int_{\Omega} \dot{\mathbf{S}}(\nabla \mathbf{v}^h(\mathbf{q})) \cdot \nabla \Phi_\alpha dV - \int_{\Omega} \dot{\mathbf{b}} \cdot \Phi_\alpha dV - \int_{\partial\Omega_t} \dot{\mathbf{t}} \cdot \Phi_\alpha dS \\ K_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) &= \frac{\partial^2 J(\mathbf{q})}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} = \int_{\Omega} \nabla \Phi_\alpha \cdot \mathbf{C}(\nabla \mathbf{v}^h(\mathbf{q})) \nabla \Phi_\beta dV, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, M. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Zur Bestimmung des Minimums von $J(\mathbf{q})$ benutzen wir eine *trust region* Methode, die die Vorteile der quadratischen Konvergenz des Newton-Verfahrens in der Nähe des Minimums erhält und global konvergent ist. Die Grundidee besteht dabei darin, die nichtlineare Funktion $J(\mathbf{q})$ auf einer Kugel vom Radius r_k um den aktuellen Punkt \mathbf{q}_k , das Vertrauensgebiet, durch eine nach dem zweiten Glied abgebrochene Taylor-Reihe zu approximieren:

$$J(\mathbf{q}_k + \boldsymbol{\delta}) \approx f_k(\boldsymbol{\delta}) = J(\mathbf{q}_k) + \mathbf{k}(\mathbf{q}_k) \cdot \boldsymbol{\delta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\delta} \cdot \mathbf{K}(\mathbf{q}_k) \boldsymbol{\delta}, \quad |\boldsymbol{\delta}| \leq r_k.$$

Die Kugel „atmet“, d. h. ihr Radius wächst oder schrumpft mit dem Grad der Übereinstimmung zwischen der aktuellen Reduktion des Funktionswertes $J(\mathbf{q}_k) - J(\mathbf{q}_k + \boldsymbol{\delta}_k)$ und der für das quadratische Modell vorhergesagten Reduktion $f_k(\boldsymbol{\delta}_k)$, wobei $\boldsymbol{\delta}_k$ die Lösung des Teilproblems

$$\min f_k(\boldsymbol{\delta}) \quad \text{unter der Nebenbedingung} \quad |\boldsymbol{\delta}| \leq r_k$$

ist. Wir benutzen eine Implementierung von Gay (1983), dessen Programmcode von K. Thermann an große, schwach besetzte Hesse-Matrizen angepasst wurde. Bezüglich weiterer Einzelheiten sei auf Fletcher (1987), Gay (1981) und Moré und Sorensen (1983) sowie die dort angegebene Literatur verwiesen.

5.2 Numerische Ergebnisse

5.2.1 Problemstellung, räumliche Diskretisierung, algorithmische Details

Problemstellung. Den folgenden Rechnungen liegen die konstitutiven Gleichungen (5.4), spezialisiert auf die *J₂ corner theory* mit den Materialparametern

$$E = 500 \tau_0, \quad \nu = 0.3, \quad N = 0.1, \quad \beta_c^{\max} = 126.2^\circ, \quad (5.19)$$

zu Grunde. Ausgehend vom natürlichen (spannungsfreien) Zustand zum Zeitpunkt $t = 0$ soll der betrachtete Körper unter der Annahme des ebenen Verzerrungszustandes eine isotherme, quasi-statisch voranschreitende Deformation erfahren. Als Spezialfall einer solchen Deformation wählen wir den isochoren Stauchprozess mit

$$t = \frac{L - l}{L} = 1 - l/L$$

als zeitähnlichem Parameter. Hierbei sind L und l Längen der gleichen materiellen Faser parallel zur Stauchrichtung in der spannungsfreien bzw. aktuellen Konfiguration. Der Deformationsgradient der homogenen, quasi-statischen Bewegung, dessen Stabilität in Frage steht, ist dann

$$\bar{\mathbf{F}} = \begin{bmatrix} 1 - t & 0 & 0 \\ 0 & (1 - t)^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (5.20)$$

wenn die Stauchrichtung parallel zur \mathbf{e}_1 -Achse (horizontal in den nachfolgenden Bildern) einer kartesischen Basis verläuft. Wir beschränken uns auf kinematisch kontrollierte Prozesse, so dass die Verschiebung der materiellen Punkte auf dem gesamten Rand der Probe durch

$$\bar{\mathbf{u}} = (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \mathbf{X}, \quad \mathbf{X} \in \partial\Omega \quad (5.21)$$

vorgeschrieben ist.

Die kritischen Größen ergeben sich für diese Materialdaten und den betrachteten Deformationsprozess durch Auswerten von (5.14) und (5.15) zu

$$\begin{aligned} \text{Zeitpunkt des Elliptizitätsverlusts} & \quad t^* = 0.2744 \\ \text{Winkel zwischen Band und Zugachse} & \quad \varphi_n^* = 36.00^\circ \\ \text{Volumenanteil der Lokalisierungszone} & \quad \eta^* = 0.2000 \end{aligned} \quad (5.22)$$

Räumliche Diskretisierung. Die Form des Grundgebietes in der spannungsfreien Konfiguration ist für den kritischen Zeitpunkt t^* , zu dem der Prozess (5.20) instabil wird, für das Kontinuum belanglos, nicht aber für das diskretisierte Problem. Wegen der endlichen Anzahl von Freiheitsgraden spielt der Randeinfluss dann auch eine Rolle. Um diesen Einfluss zu minimieren, wählen wir das Grundgebiet so, dass es zum Bifurkationszeitpunkt des Kontinuums kreisförmig ist. Beschreibt $\mathbf{x}(t^*)$ die Koordinaten eines Punktes, der sich in der spannungsfreien Ausgangslage an der Position \mathbf{X} befand, so erhalten wir bei einer homogenen Deformation aus

$$\mathbf{X} = \bar{\mathbf{F}}^{-1}(t^*)\mathbf{x}(t^*)$$

die Koordinaten $\mathbf{x}(t)$ zu einem beliebigen Zeitpunkt t

$$\mathbf{x}(t) = \bar{\mathbf{F}}(t)\mathbf{X} = \bar{\mathbf{F}}(t)\bar{\mathbf{F}}^{-1}(t^*)\mathbf{x}(t^*). \quad (5.23)$$

Im Spezialfall der isochoren Stauchung (5.20) ergibt dies

$$x_1(t) = \frac{1 - t}{1 - t^*}x_1(t^*), \quad x_2(t) = \frac{1 - t^*}{1 - t}x_2(t^*), \quad x_3(t) = x_3(t^*).$$

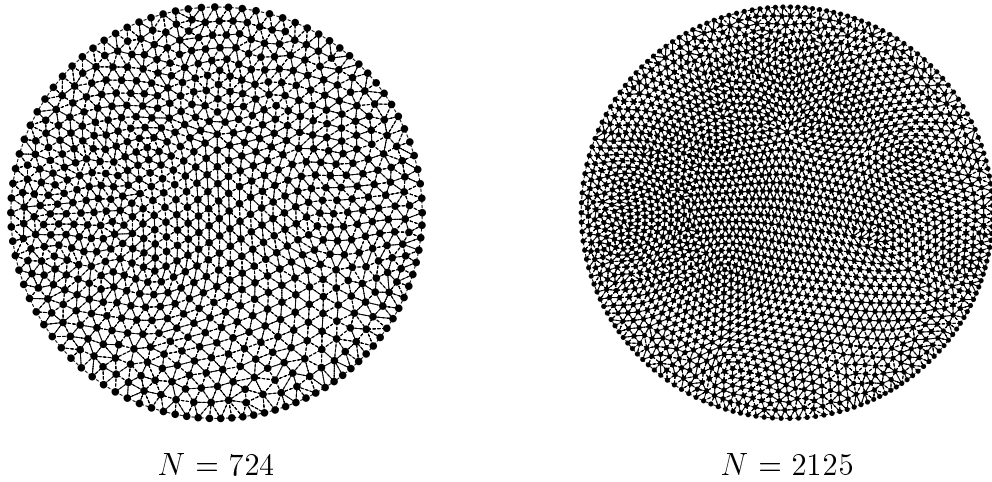


Bild 5.3: Diskretisierung eines zum theoretischen Bifurkationszeitpunkt t^* kreisförmigen Grundgebietes durch 724 bzw. 2125 Knoten und zugehörige Triangulationen

Die geometrische Diskretisierung erfolgt mit Hilfe des in Kapitel 3 vorgestellten Algorithmus und einer geringen Zahl von Lloyd-Iterationen, um möglichst unstrukturierte Netze mit gleichmäßiger Punkteverteilung zu erzeugen. Die in Bild 5.3 für eine grobe und eine mittlere Diskretisierung gezeigten Netze wurden mit 3 Lloyd-Iterationen in der Einfüge- und 20 Lloyd-Iterationen in der Endphase generiert. t^* stellt eine untere Schranke für den numerisch ermittelten Bifurkationszeitpunkt t_{num}^* dar. Bei stärkeren Abweichungen $t_{\text{num}}^* \gg t^*$ leidet natürlich die Qualität der Triangulation, aber dann sind auch die Näherung t_{num}^* und das numerische Verfahren selbst nicht mehr akzeptabel.

Algorithmische Details. Als Implementierungen des Materialmodells und des Minimierers standen bewährte F77-Unterprogramme, die wir hier als `J2CornerTheory` bzw. `TrustRegionMethod` bezeichnen, zur Verfügung. Diese Pakete wurden in den im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Fortran90 Programmcode integriert.

Das Unterprogramm `J2CornerTheory` erwartet als Eingabeparameter

die Materialdaten	$E, \nu, \tau_0, N, \beta_c^{max}$
den aktuellen Cauchy-Spannungszustand	$\boldsymbol{\sigma}$
und den Geschwindigkeitsgradienten	$\nabla \mathbf{v}$

und gibt unter anderem wahlweise

die Rate des ersten Piola-Kirchhoff Tensors	$\dot{\mathbf{S}}$
und den Modultensor	\mathbf{C}

zurück. Es wird die aktuelle Lage des Körpers als Referenzkonfiguration benutzt, so dass $\nabla \mathbf{v} = \dot{\mathbf{F}} \bar{\mathbf{F}}^{-1}$ für die homogene Deformation gilt. Wegen der Koaxialität des Stauchprozesses (5.20) lässt sich die Cauchy-Spannung für das in der *J₂ corner theory* dann maßgebende hyperelastische Verhalten zu jedem Zeitpunkt t elementar berechnen (vgl. z. B. Lulla (2002)).

Das Unterprogramm `TrustRegionMethod` verwendet umgekehrte Kommunikation (reverse communication) und erwartet einen Vektor \mathbf{q} als Startnäherung. Es gibt dann entweder die Lösung der Minimierungsaufgabe in \mathbf{q} mit positiv definiter Hesse-Matrix zurück oder verlangt vom aufrufenden Programm zu dem Rückgabvektor \mathbf{q} einen erneuten `TrustRegionMethod`-Aufruf mit dem Gradientenvektor (5.18₁) oder der Hesse-Matrix (5.18₂) als Eingabedaten (und einem entsprechend gesetzten Flag). $\hat{\mathbf{v}}$ im Ansatz (5.16) wird als Geschwindigkeitsfeld der homogenen Deformation gewählt, so dass die in der Regel benutzte Startnäherung $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ genau dieses Geschwindigkeitsfeld repräsentiert.

Die Technik der umgekehrten Kommunikation ermöglicht es, den zunächst für die lineare Elastizitätstheorie entwickelten, ausführlich beschriebenen und getesteten Programmcode für das MLS-Verfahren nahezu unverändert zu übernehmen (bei gedanklich angepasster neuer Interpretation der Variablen). Die Erfüllung wesentlicher Randbedingungen wird durchgängig durch Koppeln der MLS-Ansatzfunktionen an finite Elemente mit linearen Formfunktionen am Gebietsrand (Belytschko et al., 1995) garantiert, vgl. Kapitel 2. Zur Konstruktion der MLS-Ansatzfunktionen wird stets der kubische Spline (2.30) als Fensterfunktion in Verbindung mit kreisförmigen Einflussgebieten verwendet. Da das Unterprogramm `TrustRegionMethod` eine andere Speichertechnik als der in Kapitel 4 eingesetzte Gleichungslöser `MA27` benutzt, sind allerdings an dieser Stelle Anpassungen erforderlich, die aber keine besonderen Probleme aufwerfen und mit entsprechender Sorgfalt leicht zu erledigen sind.

Es sei darauf hingewiesen, dass die auf dem Energiekriterium für die Stabilität eines Deformationsprozesses beruhende numerische Methode keinerlei Imperfektionen zum Auslösen einer Verzweigung benötigt. Diese Möglichkeit wird hier numerisch vorteilhaft genutzt, da so der aktuelle materielle Zustand ohne Zeitintegration für die perfekte Probe zu einem beliebigen Zeitpunkt exakt vorgegeben werden kann.

Die Analyse beginnt zum Zeitpunkt $t = t^*$. Ist die tangentielle Steifigkeitsmatrix (Hesse-Matrix) positiv definit, wird t so lange um $\Delta t = 10^{-4}$ inkrementiert, bis das Unterprogramm `TrustRegionMethod` eine Verzweigung feststellt und einen Parametervektor $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ zurückgibt. Für die anschließende Nachbereitung der Ergebnisse wird die Eulersche Verzerrungsgeschwindigkeit \mathbf{D}^* des der homogenen Deformation überlagerten Geschwindigkeitsfeldes herangezogen. Als Bifurkationsmuster ist stets der betragsgrößte Hauptwert von \mathbf{D}^*

$$|\mathbf{D}^*| = \frac{1}{2} \left\{ |D_{11}^* + D_{22}^*| + \sqrt{(D_{11}^* - D_{22}^*)^2 + 4(D_{12}^*)^2} \right\}$$

dargestellt. Die graphische Aufbereitung dieser skalaren Größe über dem aktuellen Gebiet erfolgt mit Hilfe des Programms `gmsh`¹⁶ von Geuzaine und Remacle (2009).

5.2.2 Ergebnisse für die Finite-Elemente-Methode

Zur Validierung des Programmcodes zur Analyse materieller Instabilitäten greifen wir noch einmal auf die auch in der linearen Elastizitätstheorie als Referenzverfahren benutzte Finite-Elemente-Methode zurück. FE-Rechnungen mit speziell angepassten Netzen und

¹⁶<http://geuz.org/gmsh/>

periodischen Randbedingungen müssen die analytischen Resultate für ein Kontinuum reproduzieren. Dass dies für unsere Implementierung der Fall ist, illustriert Bild 5.4.

Den Berechnungen liegen FE-Dreiecksnetze mit der in Bild 5.4a eingezeichneten Struktur zu Grunde. Die Netze sind so konstruiert, dass die Diagonalen parallel zu den Scherbandrichtungen des Kontinuums zum Bifurkationszeitpunkt verlaufen, also für die Materialdaten (5.19) zum Zeitpunkt $t^* = 0.2744$ unter dem Winkel $\varphi_n = 35.9954^\circ$ zur Vertikalen (vgl. Kapitel 5). Die Lokalisierungszonen bilden je nach Maschenweite des Netzes mehr oder weniger schmale Bänder, die zufällig angeordnet sind. Ihr Volumenanteil η ist jedoch unabhängig von der Maschenweite des Netzes stets gleich ($\eta = 0.2$). Die Ergebnisse stehen damit in vollständiger Übereinstimmung mit früheren numerischen Untersuchungen und theoretischen Vorhersagen und müssen hier nicht weiter kommentiert werden.

In Lullas (2002) Dissertation wurden aber auch gravierende Schwächen der FE-Diskretisierung mit linearen Ansatzfunktionen aufgezeigt, wenn diese auf die Simulation der Scherbandausbildung mit nicht angepassten Netzen angewendet wird. Lulla gibt eine extreme Verzögerung des ersten numerisch gefundenen Bifurkationszeitpunktes gegenüber dem theoretisch prognostizierten Wert t^* an. Die erwartete Lokalisierung der Deformation in Form von Scherbändern kann beim Einsatz einer von Vorzugsrichtungen freien Triangulation nicht nachgebildet werden. Die mit unserer Implementierung berechneten Ergebnisse bestätigen dieses Verhalten (Bild 5.5). Diesen Rechnungen liegen kreisförmige Grundgebiete und Triangulationen zu Grunde, wie sie Bild 5.3 für $N = 724$ und $N = 2125$ beispielhaft zeigt.

Wir halten an dieser Stelle fest, dass FE-Rechnungen mit unstrukturierten Knotenverteilungen erst bei einer recht hohen Knotenzahl (hier $N = 4900$) die Scherbandentstehung vermuten lassen. Der Bifurkationszeitpunkt wird jedoch auch bei feiner Diskretisierung sehr deutlich verzögert. Rechnungen mit geringerer Knotenzahl (hier $N = 742$ bzw. $N = 2125$) erweisen sich als gänzlich unbrauchbar.

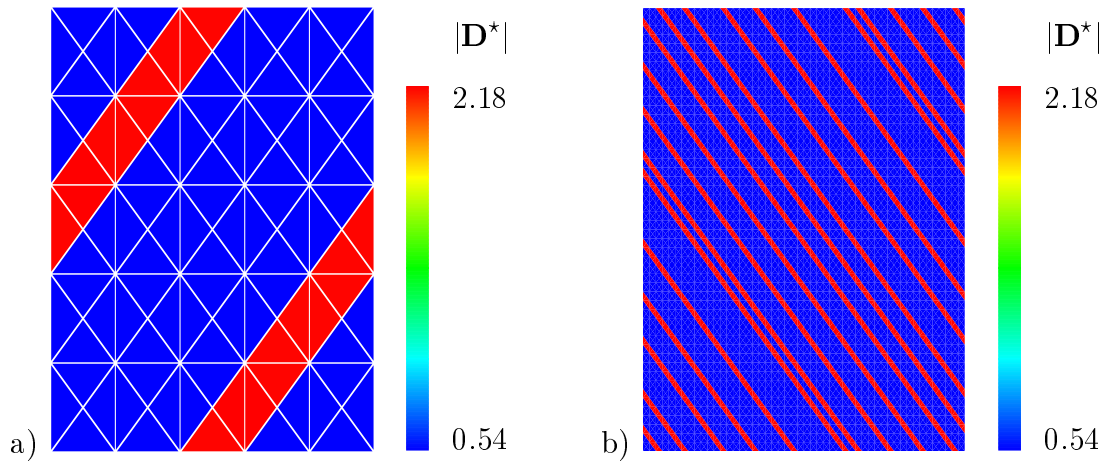


Bild 5.4: Mit der FE-Methode berechnete Lokalisierungszonen auf speziell angepassten Netzen mit $4 \times n \times n$ Dreieckselementen zum Bifurkationszeitpunkt $t^* = t_{\text{FE}}^* = 0.2744$ für a) $n = 5$ und b) $n = 50$.

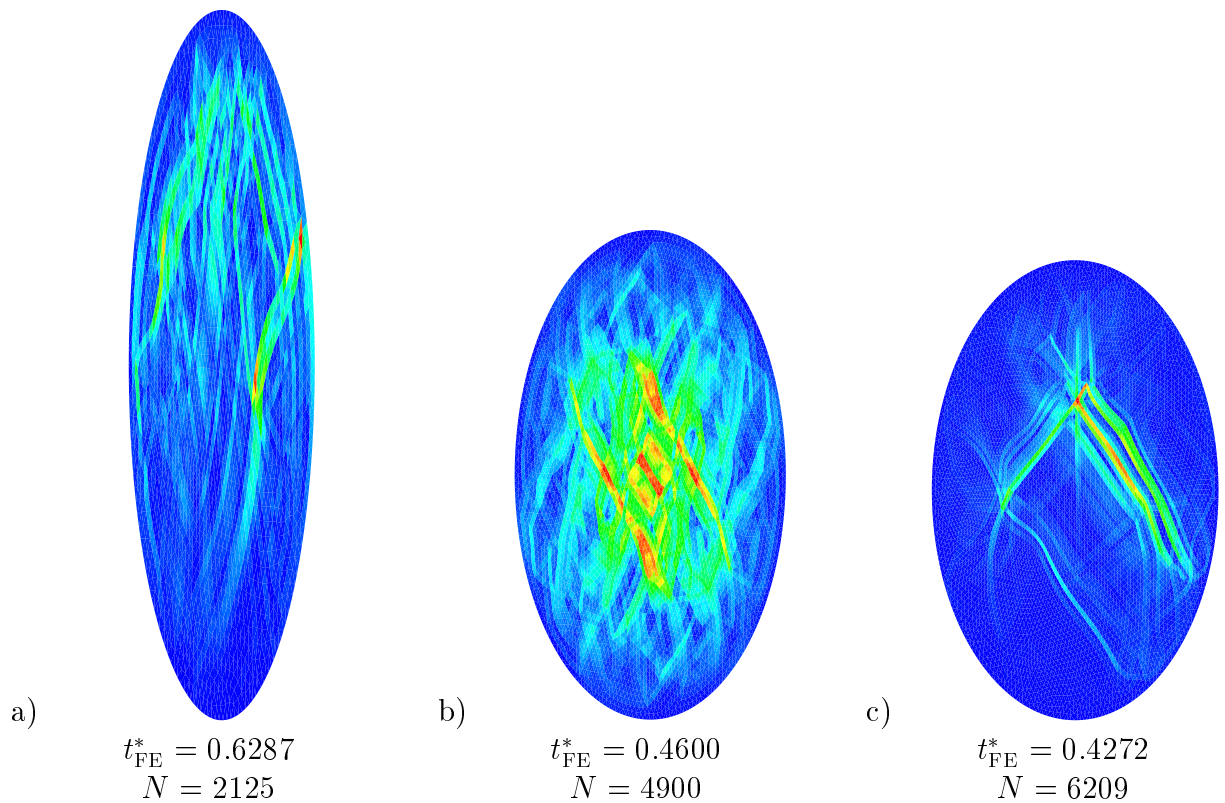


Bild 5.5: FE-Deformationsmuster zum ersten Bifurkationszeitpunkt t_{FE}^* für eine unstrukturierte Triangulation. a) 2125 Knoten, 4084 Elemente, 3922 Freiheitsgrade, b) 4900 Knoten, 9536 Elemente, 9276 Freiheitsgrade c) 6209 Knoten, 12140 Elemente, 11866 Freiheitsgrade

5.2.3 Exemplarische Ergebnisse für das MLS-Verfahren

Im Vergleich mit den soeben besprochenen FE-Resultaten führt die MLS-Methode bei gleicher Punkteverteilung zu signifikant besseren Ergebnissen (Bild 5.6) mit Bifurkationszeitpunkten t_{MLS}^* in der Nähe von t^* .

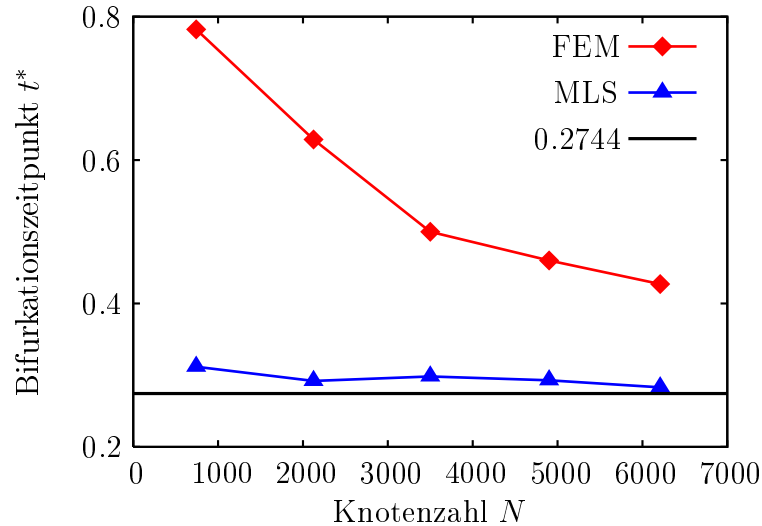


Bild 5.6: Numerisch ermittelte Bifurkationszeitpunkte t_{FE}^* und t_{MLS}^* für unstrukturierte Diskretisierungen gemäß Bild 5.3 als Funktion der Knotenzahl N

Besonders hervorzuheben ist aber, dass mit dem MLS-Verfahren die zu erwartenden Bifurkationsmuster auch bei unstrukturierter Diskretisierung qualitativ richtig wiedergegeben werden. Bei Gauß-Quadratur mit 3 oder mehr Stützstellen liefert die numerische Analyse Lokalisierungszonen in Form von gleich gerichteten Bändern in exakter Übereinstimmung mit theoretischen Vorhersagen.

Bild 5.7 zeigt die Verteilung des betragsgrößten Hauptwertes $|\mathbf{D}^*|$ der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit für eine feine, unstrukturierte Diskretisierung mit $N = 6209$ Knoten. Die Orientierung der Scherbänder entspricht im Rahmen der Messgenauigkeit dem analytisch vorhergesagten Winkel von $\varphi_n = 35.9954^\circ$ in der aktuellen Konfiguration. Der Zeitpunkt, zu dem die Bifurkation numerisch festgestellt wurde, ist mit $t_{\text{MLS}}^* = 0.2834$ nur um 3% größer als der theoretische Wert für das Kontinuum. Der Bifurkationszeitpunkt $t_{\text{FE}}^* = 0.4272$ der FE-Rechnung (Bild 5.5c) für die gleiche Punkteverteilung und Triangulation hat demgegenüber einen Fehler von 56% (vgl. auch Bild 5.6).

Selbst bei einer groben Diskretisierung mit $N = 742$ Knoten stellt die an Bild 5.8 gemessene Bandorientierung mit 35° einen guten Wert dar. Der Bifurkationszeitpunkt $t_{\text{MLS}}^* = 0.3116$ ist für diese gröbere Diskretisierung aber bereits um 14% zu groß, was zu der sichtbaren Abweichung des Grundgebietes von der Kreisform führt. Die FE-Rechnung überschätzt den Bifurkationszeitpunkt jedoch um 185% und ist unbrauchbar, so dass die Verteilung von $|\mathbf{D}^*|$ auf der zu diesem Zeitpunkt entstandenen langgestreckten Ellipse in Bild 5.5 nicht aufgenommen wurde.

Die MLS-Diskretisierung spiegelt mit der akzeptablen Näherung für den Bifurkationszeitpunkt und der sehr guten Wiedergabe der Orientierung des Bandmusters grundlegen-

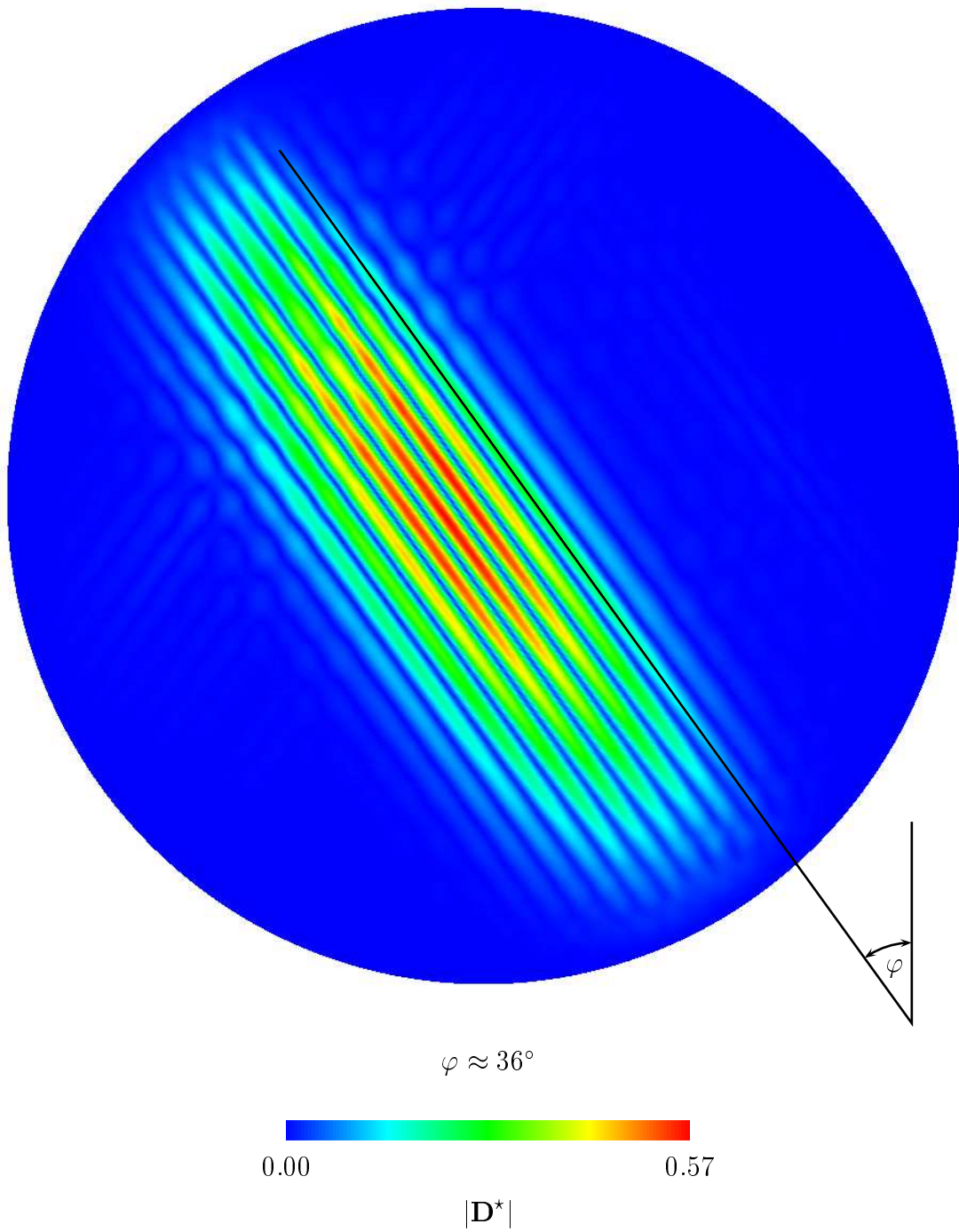


Bild 5.7: Orientierung der Scherbänder zum ersten Bifurkationszeitpunkt $t_{\text{MLS}}^* = 0.2834$ für eine unstrukturierte Diskretisierung mit $N = 6209$ Stützstellen. MLS-Verfahrensparameter: Gauß-Quadratur $n_G = 13$, Überdeckungsparameter $c_r = 2$

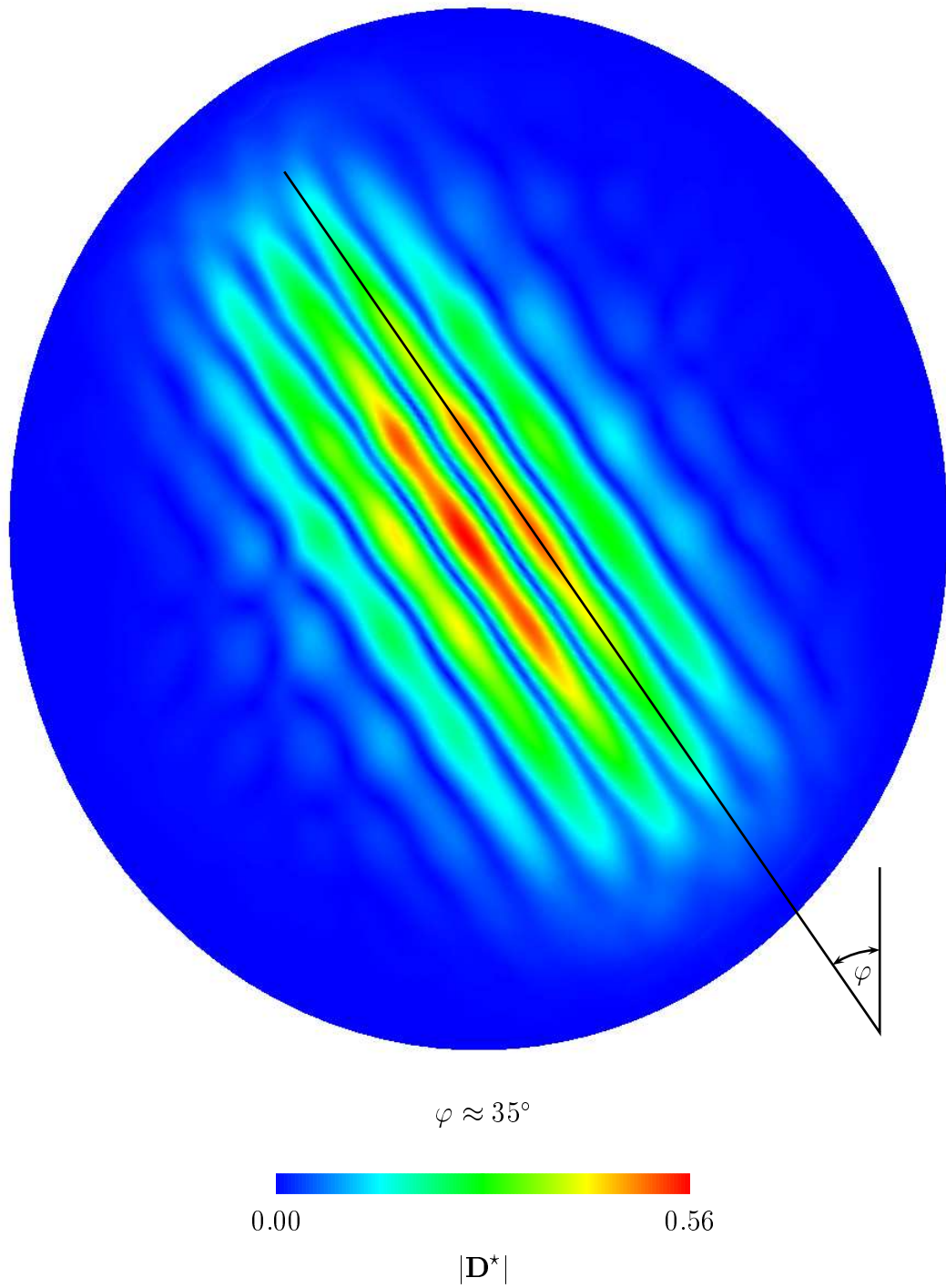


Bild 5.8: Orientierung der Scherbänder zum ersten Bifurkationszeitpunkt $t_{\text{MLS}}^* = 0.3116$ für eine grobe Diskretisierung mit $N = 742$ Stützstellen. MLS-Verfahrensparameter: Gauß-Quadratur $n_G = 7$, Überdeckungsparameter $c_r = 2$

de Eigenschaften der Theorie für ein unendlich ausgedehntes Kontinuum wider. Sie hat aber auch Nachteile. Da die MLS-Ansätze stetig differenzierbare Funktionen sind, können Unstetigkeiten im Geschwindigkeitsgradienten nicht abgebildet werden. Das hat zur Folge, dass der Volumenanteil η der Lokalisierungszone nicht mehr wie in Petryks Theorie oder bei Anwendung der FE-Methode auf angepassten Netzen definiert werden kann, da Grenzen mit sprunghafter Veränderung des Geschwindigkeitsgradienten gar nicht existieren. Unabhängig davon wie ein geeigneter Näherungsausdruck η_{MLS} definiert und aus dem Feld \mathbf{D}^* des überlagerten Geschwindigkeitsgradienten berechnet wird, lässt sich an Hand der Deformationsmuster für die Komponenten von \mathbf{D} bereits abschätzen, dass der Volumenanteil der Lokalisierungszone eher bei 0.5 als dem theoretischen Wert von 0.2 liegen wird (Bild 5.9). Es ist bemerkenswert, dass für die FE-Methode bei einem an der theoretischen Bandorientierung ausgerichteten Netz und kinematischen Randbedingungen ähnliche Schwierigkeiten auftreten. So berichten Petryk und Thermann (2000):

„At primary bifurcation ($t=0.2755$), in the central region a localization zone of volume fraction 0.5 is formed, which rapidly spreads out to the boundary. A fourth bifurcation shortly later ($t=0.2770$) changes this pattern so that subsequently the volume fraction of the localization zone is obtained as 0.25. ... The theoretical volume fraction 0.2 is not obtained.“

Da auch für das MLS-Verfahren zu erwarten ist, dass sich das Deformationsmuster im nachkritischen Bereich weiter verändern wird, ist es sinnvoll, die Frage nach einer adäquaten Definition des Volumenanteils der Lokalisierungszone hier offen zu lassen und erst im Zusammenhang mit nachkritischen Berechnungen weiter zu verfolgen. Die folgenden Parameterstudien zeigen, dass Verfahrensparameter und die Verteilung der Stützstellen keine grundsätzlichen Veränderungen bewirken. Wir gehen dort auch kurz auf die Rechenzeiten ein.

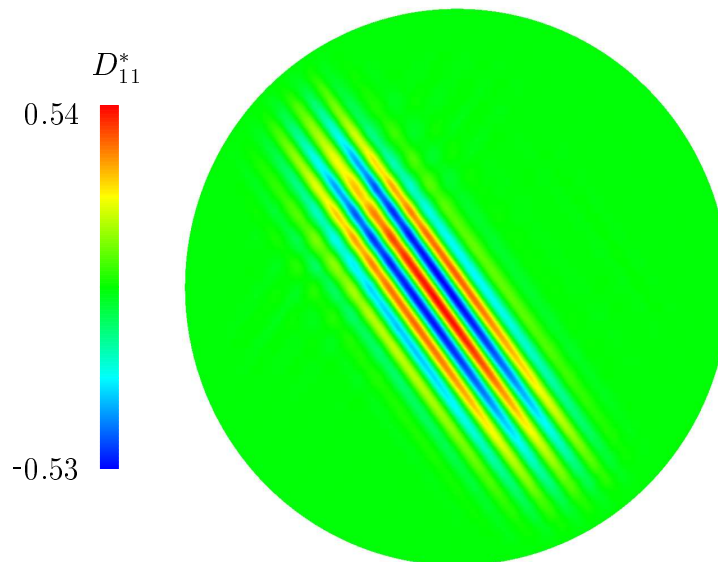


Bild 5.9: Verteilung der Komponente D_{11}^* der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit zu Bild 5.7

5.2.4 Robustheit des MLS-Verfahrens

Einfluss der Integrationsgenauigkeit

In Kapitel 4 ist die Bedeutung der Quadraturordnung ausgehend vom linearen Patchtest diskutiert worden. Die Tatsache, dass die Komplexität der MLS-Ansatzfunktionen bzw. ihrer Gradienten die Auswertung der benötigten Integrale mit Maschinengenauigkeit praktisch unmöglich macht, wirft die Frage nach einer wirtschaftlichen Lösung auf, wobei ein Kompromiss zwischen der erzielten Genauigkeit und dem benötigten Zeitaufwand zu finden ist. Um in Zukunft Simulationen im postkritischen Bereich möglichst effizient gestalten zu können, wenden wir uns an dieser Stelle der Frage zu, welcher Zusammenhang zwischen der verwendeten Quadraturordnung und der Güte der Simulationsergebnisse zum ersten Bifurkationszeitpunkt besteht.

Innerhalb des zum Bifurkationszeitpunkt kreisförmigen, durch 742, 2125 bzw. 6209 Knoten diskretisierten Grundgebietes wenden wir Gauß-Quadratur mit 1, 3, 7 und 13 Stützstellen je Dreieck an. Die gewonnenen Ergebnisse illustriert Bild 5.10.

Die Integration mit einer Stützstelle je Dreieck verursacht deutlich sichtbare Störungen der Lokalisierungszone. Die Quadratur mit 3 Gauß-Punkten liefert insbesondere bei grober und mittlerer Diskretisierung gute Ergebnisse. Bei feiner Diskretisierung macht sich allerdings der Integrationsfehler dadurch bemerkbar, dass beim Übergang zur Integration mit 7 Stützstellen eine geringfügige Veränderung der Lokalisierungszone festgestellt werden kann. Die Integration mit 7 Gauß-Punkten liefert Deformationsmuster, die bei weiterer Steigerung der Integrationsgenauigkeit unverändert bleiben, was durch die Ergebnisse der Quadratur mit 13 Punkten belegt wird. Der Zeitpunkt der ersten Bifurkation bleibt ebenfalls praktisch gleich.

Weitere Rechnung haben gezeigt, dass bei zusätzlicher Steigerung der Integrationsgenauigkeit durch Unterteilen der Dreiecke in kleinere Integrationszellen die Deformationsmuster und Bifurkationszeitpunkte unverändert bleiben. Eine Erklärung hierfür liefert der oben angesprochene Patchtest. Der relative Fehler in der Energienorm infolge des Integrationsfehlers liegt zwischen ca. 1% beim Anwenden der Quadratur mit 3 Stützstellen und ca. 0.1% bei 13 Gauß-Punkten je Dreieck, vgl. Bild 4.7. Die relative Abweichung zwischen den approximierten Zeitwerten und dem exakten Bifurkationszeitpunkt variiert bei den in Bild 5.10 zusammengefassten Ergebnissen zwischen ca. 3% und 15% und ist somit höher als der Integrationsfehler. Es ist fraglich, ob der Integrationsfehler Abweichungen des Bifurkationszeitpunktes in der gleichen Größenordnung hervorruft, doch legt diese Fehlerbetrachtung die Vermutung nahe, dass der Einfluss des Integrationsfehlers von untergeordneter Bedeutung ist, wenn mit 7 Gauß-Punkten oder genauer integriert wird.

Die Integrationsregel mit 7 Stützstellen stellt sich somit als ausreichend genau heraus. Es bleibt zu bedenken, dass bei feinerer Diskretisierung des Grundgebietes als in den hier betrachteten Fällen der Integrationsfehler die dominierende Fehlerquelle werden kann, so dass auf die Integration mit 13 Gauß-Punkten oder noch genauere Quadratur zurückgegriffen werden sollte.

Eine bedeutendere Rolle für den numerisch bestimmten Bifurkationszeitpunkt spielt die verwendete Knotenzahl der räumlichen Diskretisierung (Bild 5.6). Die mittlere Abweichung vom Bifurkationszeitpunkt des Kontinuums beträgt etwa 13% bei 742, 6% bei 2125 und 3% bei 6209 Knoten.

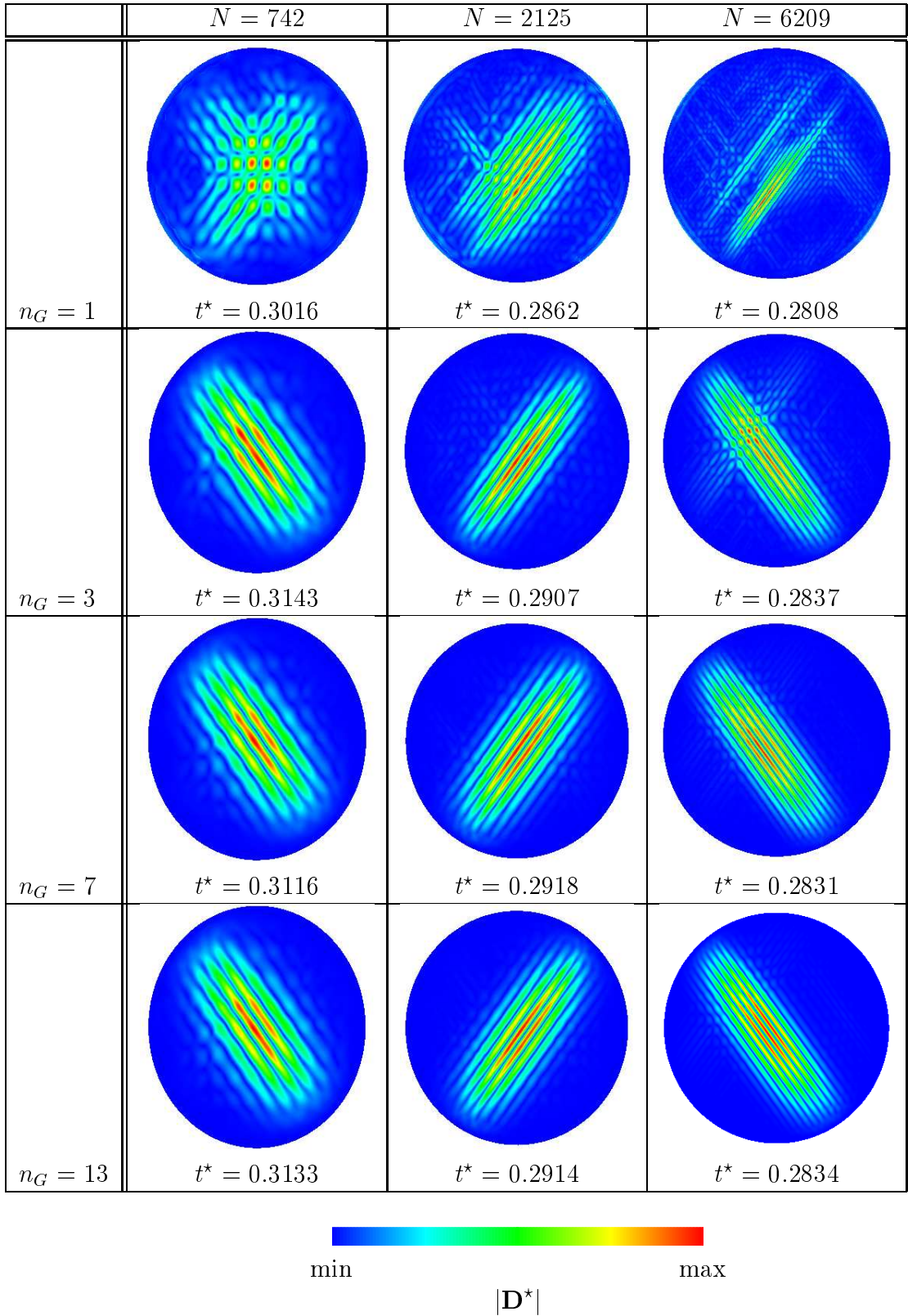


Bild 5.10: Einfluss der Anzahl der Gauß-Punkte n_G und der Knotenzahl N auf Bifurkationsmuster und -zeitpunkt. MLS-Diskretisierung mit dem Überdeckungsparameter $c_r = 2$

Die Verbesserungen der Simulationsergebnisse bezüglich des Bifurkationszeitpunktes und des Deformationsmusters durch die netzfreie Diskretisierung werden nur unter Inkaufnahme beträchtlich höherer Rechenzeiten gegenüber den Finite-Elemente-Studien erzielt, was auf Grund des Effizienzvergleichs im Rahmen der linearen Elastostatik zu erwarten ist. Tabelle 13 enthält Rechenzeiten in Sekunden, die zum Minimieren des diskretisierten Geschwindigkeitsfunktionals (5.8) benötigt werden. Die Zeitmessung beginnt zum Zeitpunkt der numerisch festgestellten Bifurkation.

Tabelle 13: CPU-Zeiten in Sekunden für den Minimierungsalgorithmus `TrustRegionMethod` in Abhängigkeit von der Knotenzahl N und der Anzahl der Integrationsstützstellen n_G . Prozessor: Intel(R) Core(TM)2 T7600, Taktrate: 2.33 GHz, Betriebssystem: Linux Kernel 2.6.18

	FEM	MLS			
	$n_G = 1$	$n_G = 1$	$n_G = 3$	$n_G = 7$	$n_G = 13$
$N = 742$	0.8	4.4	10.5	19.9	25.2
$N = 2125$	2.3	23.9	40.1	72.6	123.6
$N = 6209$	37.3	176.4	193.0	369.0	689.8

Der Geschwindigkeitsnachteil kann toleriert werden und wird vermutlich in Zukunft dank technischer Weiterentwicklung (Leistungsfähigkeit der Prozessoren, Parallelisierung) an Bedeutung verlieren. Bemerkenswert ist auch, dass die Nachteile des MLS-Verfahrens hinsichtlich der Rechenzeiten jetzt deutlich weniger gravierend ausfallen als für den Vergleich mit der Finite-Element Methode bei linear elastischen Rechnungen. Dies hängt damit zusammen, dass bei der Diskretisierung durch finite Elemente die Anzahl der Iterationsschritte bis zum Auffinden eines lokalen Minimums des nichtlinearen Geschwindigkeitsfunktionals stark schwanken und merklich größer als für die MLS-Diskretisierung sein kann.

Abhängigkeit von der Größe der Einflussgebiete

Neben der Anzahl der Integrationsstützstellen ist die Größe der Einflussgebiete einzelner Stützstellen ein weiterer Parameter, dessen Wahl signifikante Auswirkungen auf die MLS-Approximation haben kann. So liegt die Vermutung nahe, dass die Lokalisierungszone mit steigender Größe der Einflussgebiete und damit geringerer Lokalität der Ansatzfunktionen „verschmiert“ wird oder überhaupt nicht reproduziert werden kann, so dass auch der Zeitpunkt der ersten Bifurkation nicht brauchbar abgeschätzt wird.

Wir untersuchen die Bedeutung der Größe der Einflussgebiete am Beispiel des mit 2125 Knoten diskretisierten kreisförmigen Gebietes. Die minimale Größe der Einflussgebiete, die eine hinreichende Überdeckung des Grundgebietes garantiert, wird zunächst durch den Einsatz der in Unterkapitel 2.2 beschriebenen Strategie festgelegt und sodann mit dem Überdeckungsparameter $c_r = 1.0, 1.2, \dots, 4.2$ skaliert. Werte aus dem Bereich zwischen 2 und 4 werden häufig in der Literatur für MLS-Berechnungen verwendet (Dolbow und Belytschko, 1998). Das Intervall zwischen 1 und 2 ist ebenfalls von Interesse, da es als Übergang von der Finite-Elemente-Methode zur MLS-Diskretisierung interpretiert werden kann.

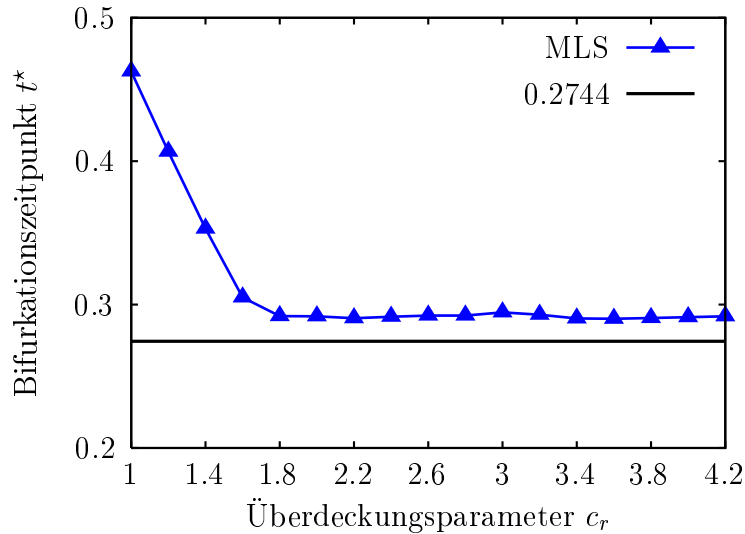


Bild 5.11: Zeitpunkt der ersten Bifurkation t_{MLS}^* in Abhängigkeit von der Größe der Einflussgebiete. 2125 Knoten, 7 Gauß-Punkte

Bild 5.11 veranschaulicht die Abhängigkeit des approximierten Bifurkationszeitpunktes t_{MLS}^* von dem Überdeckungsparameter c_r . Erwartungsgemäß tritt die erste Bifurkation für kleine Werte c_r stark verzögert auf. Für $c_r = 1$ wird das Ergebnis der FE-Rechnung bei gleicher Knotenzahl nur unwesentlich verbessert, vgl. Bild 5.6. Mit wachsendem Überdeckungsparameter wird die Abweichung des numerisch ermittelten Bifurkationszeitpunktes vom theoretischen Wert $t^* = 0.2744$ schnell reduziert, so dass für Werte $c_r \geq 1.8$ eine gute Näherung bestimmt wird, deren Wert dann praktisch konstant bleibt.

Die in Bild 5.12 zusammengetragenen zugehörigen¹⁷ Deformationsmuster heben noch deutlicher die Robustheit des MLS-Verfahrens hervor. Bereits für $c_r = 1.0$ sind Lokalisierungszonen in Form von Bändern gut erkennbar. Das Ergebnis ist jedoch auf Grund der starken Verzögerung des Bifurkationszeitpunktes als unbrauchbar einzustufen. Für $c_r \geq 1.8$ liegen klar erkennbare bandförmige Lokalisierungszonen vor in bemerkenswerter Übereinstimmung mit theoretischen Erwartungen. Die Bänder verlaufen z. T. gespiegelt — der Winkel zwischen der Bandrichtung und der Vertikalen bleibt dabei unverändert. Auch das stimmt mit theoretischen Vorhersagen überein. Auffällig sind die sich für $c_r = 3.0$, 3.8 , und 4.2 andeutenden gekreuzten Bänder. Solche Deformationsmuster dokumentiert auch Lulla (2002) für FE-Simulationen. Sie treten dann auf, wenn der vom Optimierungsalgorithmus gefundene Wert des Minimums des Geschwindigkeitsfunktionals nicht das globale Minimum ist und sie verschwinden bei fortgesetzter Rechnung im nachkritischen Bereich bei geringer weiterer Stauchung ($\Delta \approx 0.005$). Ob das für das MLS-Verfahren genauso ist, muss an dieser Stelle offen bleiben.

¹⁷Aus Platzgründen ist auf die Darstellung aller Deformationsmuster verzichtet worden.

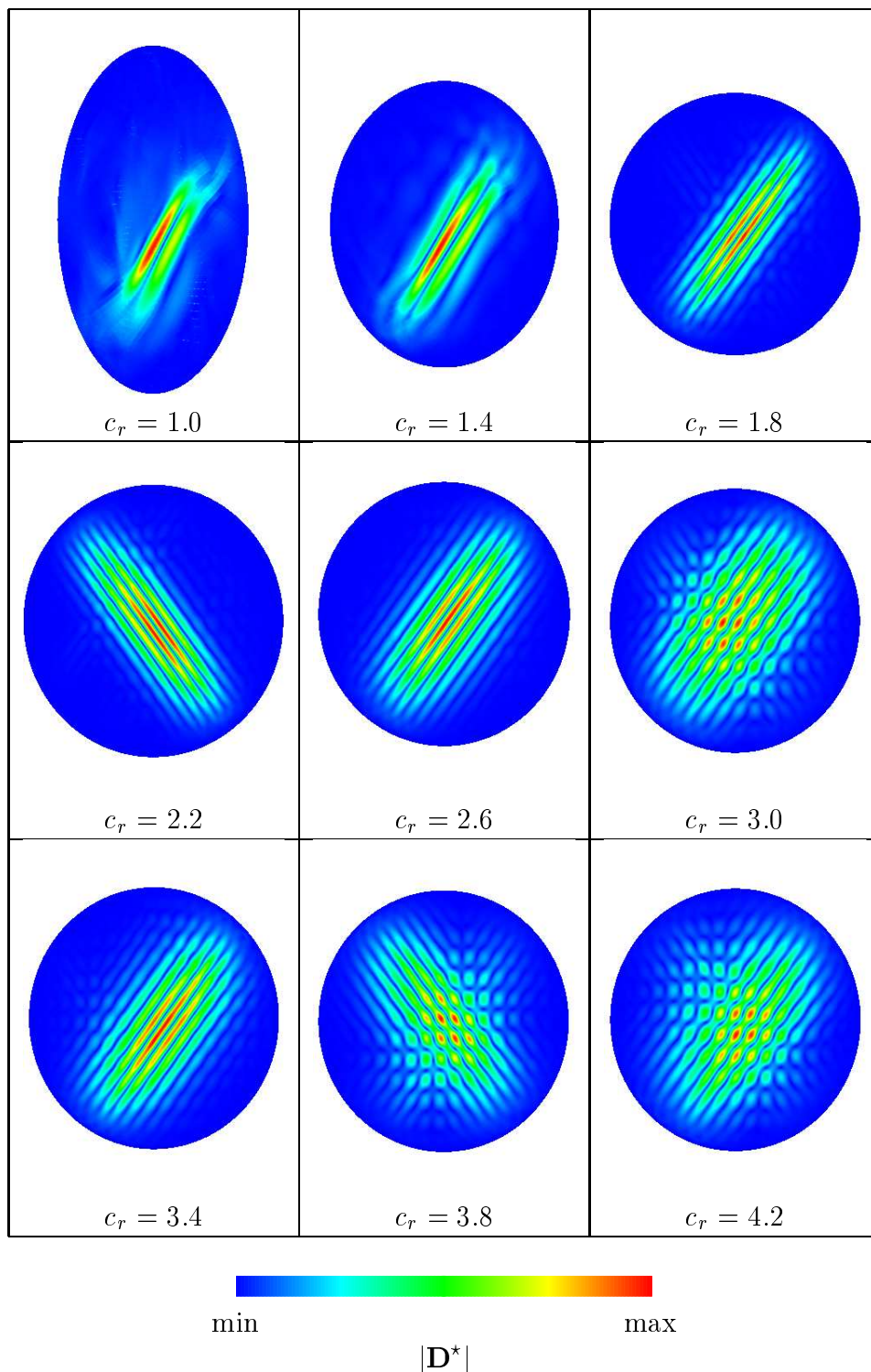


Bild 5.12: Bifurkationsmuster in Abhängigkeit von der Größe der Einflussgebiete. MLS-Diskretisierung mit $n_G = 7$ Gauß-Punkten und $N = 2125$ Knoten

Veränderung der Knotenverteilung

Die grundsätzliche Eignung des implementierten MLS-Verfahrens zur Analyse materieller Instabilitäten inkrementell nichtlinearer Werkstoffe belegen bereits die oben dokumentierten Ergebnisse. Es werden sowohl der Zeitpunkt der ersten Bifurkation als auch zu diesem Zeitpunkt entstehende Scherbänder gut approximiert, obwohl die Diskretisierung auf unstrukturiert verteilten Stützstellen basiert. Dies war in den früheren Untersuchungen mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode mit linearen Ansatzfunktionen nicht möglich.

Nun soll anhand von weiteren Ergebnissen demonstriert werden, dass die zuvor betrachteten Stützstellensätze — trotz unstrukturierter Verteilung — nicht besonders günstige Sonderfälle darstellen, sondern die positiven Eigenschaften der MLS-Approximation auch bei anderen Knotenverteilungen erhalten bleiben. Wir verwenden Stützstellenverteilungen mit mittlerer Stützstellenzahl $N \approx 2000$. Die Integration erfolgt mit 7 Gauß-Punkten je Delaunay-Dreieck. Für jede Stützstellenverteilung führen wir Rechnungen mit dem Überdeckungsparameter $c_r = 2$ und $c_r = 3$ durch.

Wir bleiben zunächst beim kreisförmigen Grundgebiet und verändern die Art der Stützstellenverteilung, indem beim Einsatz des in Kapitel 3 beschriebenen Algorithmus eine andere Anzahl der Lloyd-Iterationen gewählt bzw. eine nicht konstante Dichtefunktion benutzt wird. Die in Bild 5.13 oben gezeigte Stützstellenverteilung¹⁸ ist mit 150 Lloyd-Iterationen in der Endphase und 50 Lloyd-Iterationen nach jedem Einfügen neuer Stützstellen generiert worden. Die Optimalitätseigenschaften der Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme werden deutlich in Form einer nahezu strukturierten, aus vielen gleichseitigen Dreiecken bestehenden Triangulation. Diese Stützstellenverteilung lässt Vorzugsrichtungen erkennen, die allerdings nicht mit der erwarteten Bandorientierung zusammenfallen. Der basierend auf dieser räumlichen Diskretisierung ermittelte Bifurkationszeitpunkt weicht um etwa 9% von dem theoretischen Wert ab und liefert damit zwar eine recht gute, aber dennoch um 3% schlechtere Näherung als die zuvor verwendete mit weniger Lloyd-Iterationen erzeugte Stützstellenverteilung.

Die Rechnungen mit Stützstellenverteilungen mit bewusst so gewählter stark veränderlicher Dichte (Bild 5.13 unten und Bild 5.14) unterstreichen die Fähigkeit der MLS-Diskretisierung, bei nahezu beliebigen Stützstellenverteilungen akzeptable Näherungswerte für den ersten Bifurkationszeitpunkt zu liefern und die Bandstruktur der Lokalisierungszone gut abzubilden.

Im letzten Vergleich betrachten wir ein zum theoretischen Bifurkationszeitpunkt quadratisches Grundgebiet und stellen einen Knotensatz, der mit dem Algorithmus aus Kapitel 3 generiert wurde (Bild 5.15 unten), und eine Stützstellenverteilung, die mit dem Programm `Triangle` erzeugt wurde (Bild 5.15 oben), gegenüber. Auch bei der recht unregelmäßigen Stützstellenverteilung von `Triangle` ist die Abschätzung des ersten Bifurkationszeitpunktes bei einer Abweichung vom theoretischen Wert von ca. 16% noch brauchbar. Mit einer deutlich gleichmäßigeren (jedoch unstrukturierteren) Stützstellenverteilung (Bild 5.15 unten) ist auch beim rechteckigen Gebiet die Bestimmung des ersten Bifurkationszeitpunktes mit einer Abweichung von deutlich unter 10% möglich. Es sollte an dieser Stelle betont werden, dass `Triangle` die in Bild 5.15 oben gezeigte Stützstellenverteilung

¹⁸Die ebenfalls dargestellte Delaunay-Triangulation lässt die Struktur der Stützstellenverteilung gut erkennen.

in etwa 0.02 Sekunden erzeugt und unser Algorithmus für die Verteilung aus Bild 5.15 unten ca. eine Sekunde benötigt.

Abschließend kann festgehalten werden, dass

- das implementierte Verfahren robust gegenüber der Veränderung der Stützstellenverteilung ist,
- gute Abschätzungen des ersten Bifurkationszeitpunktes auch mit stark unregelmäßigen und nahezu strukturierten Stützstellenverteilungen erzielt werden,
- mit möglichst gleichmäßigen, jedoch unstrukturierten Stützstellenverteilungen, wie sie der in Kapitel 3 vorgestellte Algorithmus liefert, der Zeitpunkt der ersten Bifurkation mit den geringsten Abweichungen approximiert und die Lokalisierungszone in Form von parallel verlaufenden Bändern am besten nachgebildet wird,
- die Veränderung der Größe des Überdeckungsparameters (hier von $c_r = 2$ auf $c_r = 3$) sich je nach Art der Stützstellenverteilung sowohl positiv als auch negativ auf die Abweichung des approximierten Zeitpunktes der ersten Bifurkation auswirken kann. Die Werte variieren allerdings nur unwesentlich, so dass auch hier die bei den vorangegangenen Untersuchungen festgestellte Robustheit gegenüber der Größe der Einflussgebiete bestätigt werden kann.

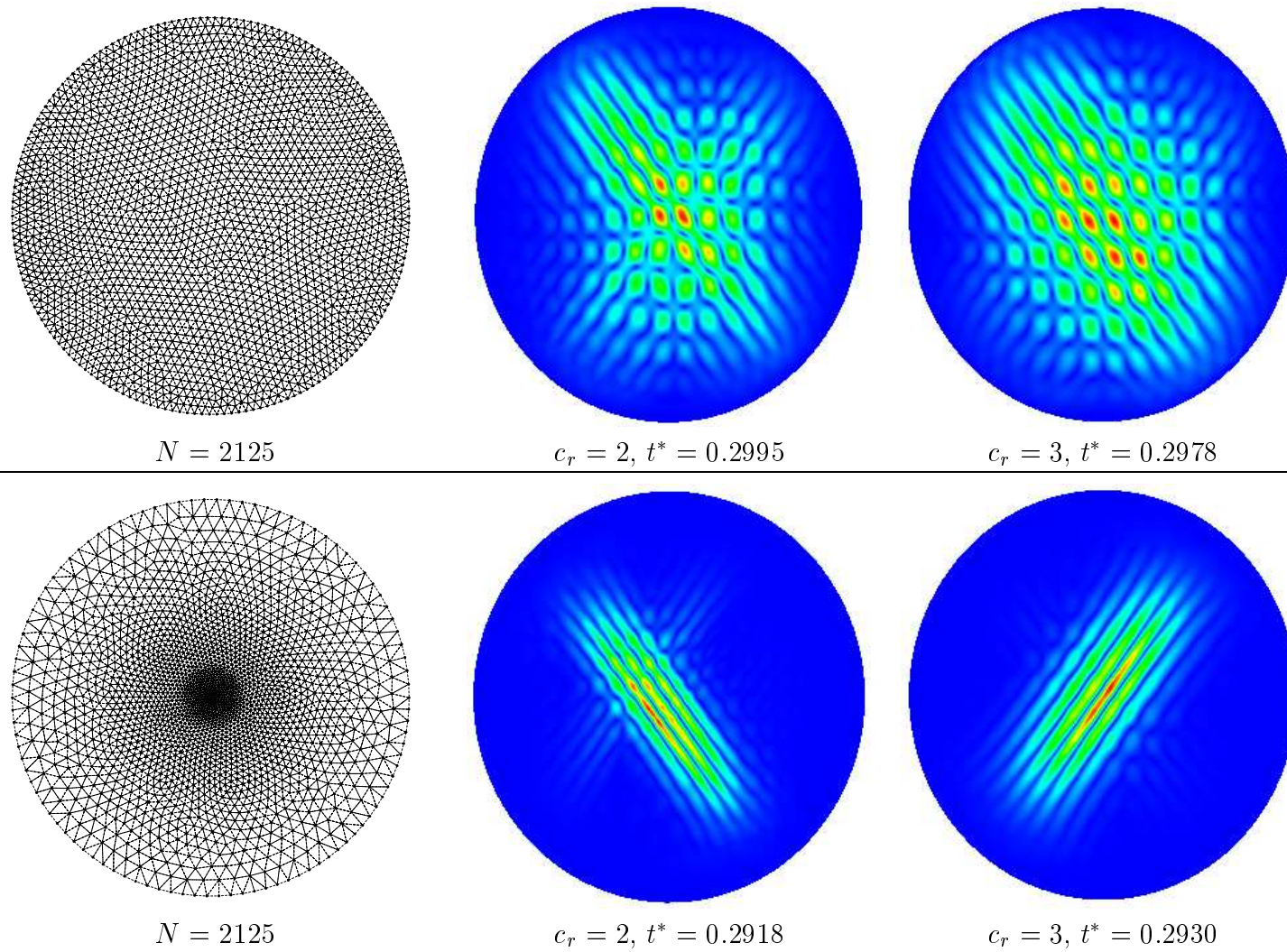


Bild 5.13: Bifurkationsmuster zum Zeitpunkt der ersten Bifurkation t_{MLS}^* in Abhängigkeit von der Stützstellenverteilung

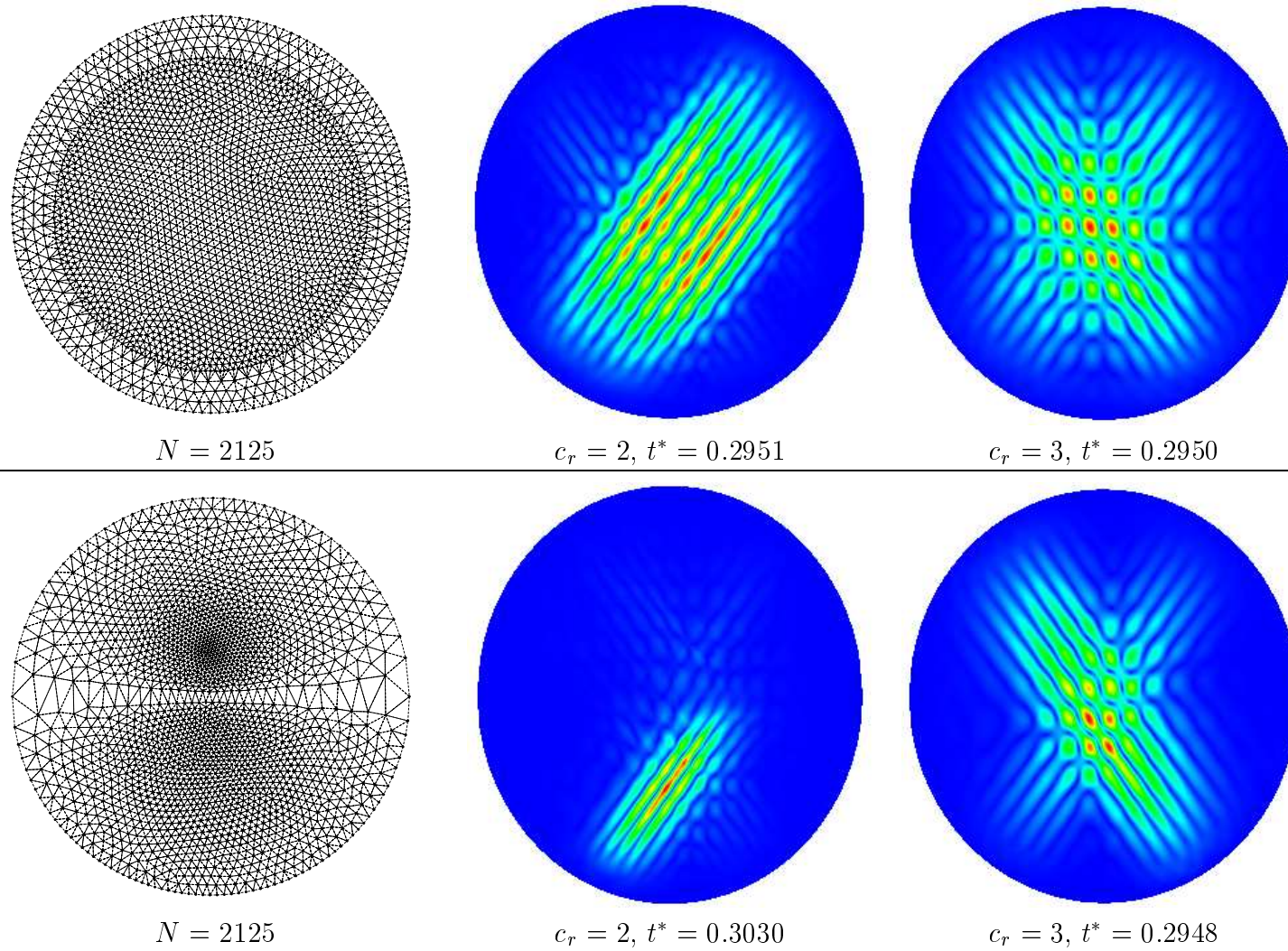


Bild 5.14: Bifurkationsmuster zum Zeitpunkt der ersten Bifurkation t_{MLS}^* in Abhängigkeit von der Stützstellenverteilung

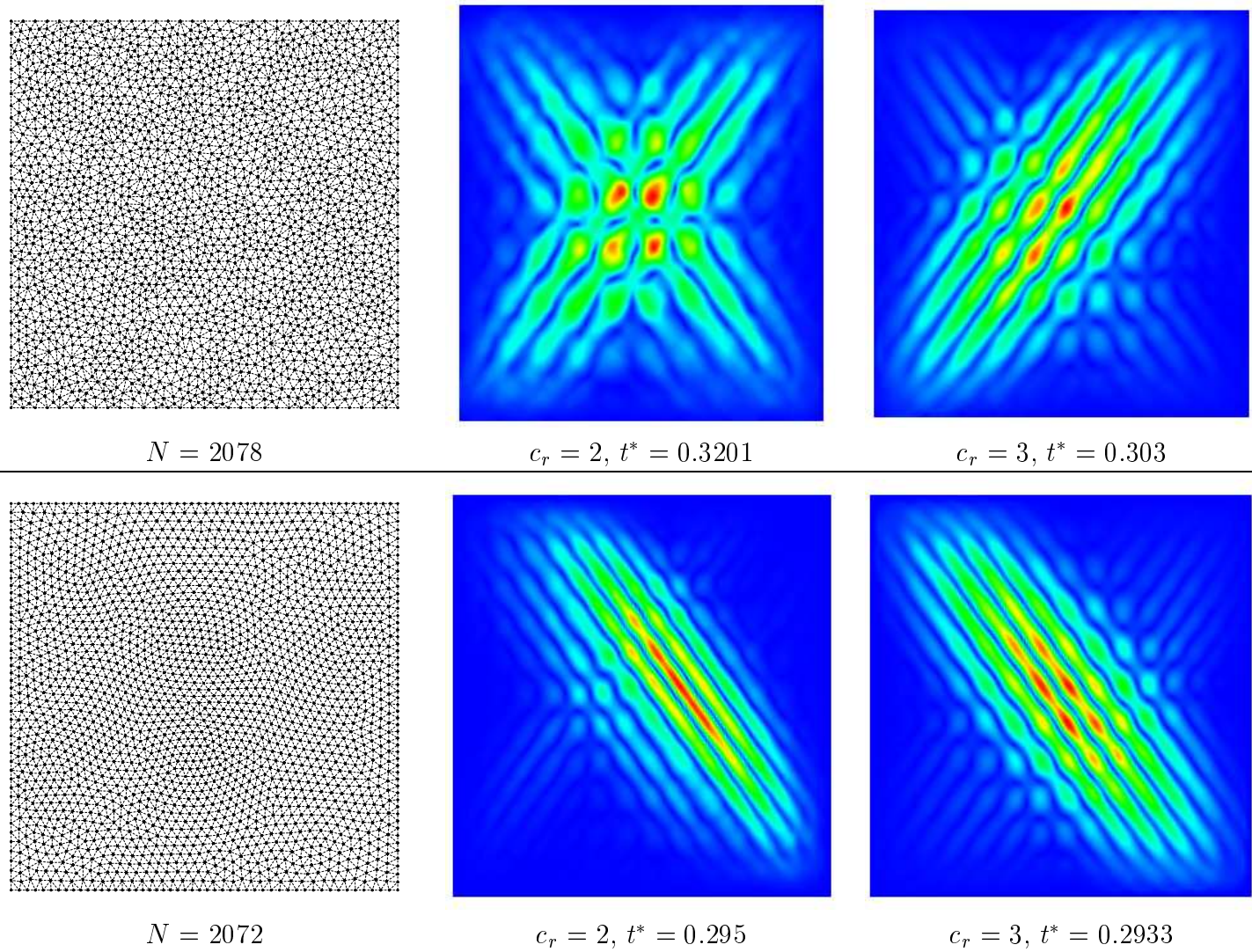


Bild 5.15: Bifurkationsmuster zum Zeitpunkt der ersten Bifurkation t_{MLS}^* in Abhängigkeit von der Stützstellenverteilung

6 Zusammenfassung

Die vorliegende Dissertation beschäftigt sich mit der Frage, ob netzfreie Verfahren zur numerischen Analyse materieller Instabilitäten inkrementell nichtlinearer Werkstoffe grundsätzlich geeignet sind. Es wird für die Fließbeckentheorie von Christoffersen und Hutchinson (1979) untersucht, ob die theoretisch zu erwartenden Deformationsmuster, die zum ersten Bifurkationszeitpunkt die homogene Deformation ablösen und eine stabile Prozessfortführung ermöglichen, nachgebildet werden. Das zu diesem Zweck implementierte netzfreie Diskretisierungsverfahren verwendet Ansatzfunktionen, die auf der Grundlage der *Moving Least Squares Approximation* konstruiert werden.

Kapitel 2 enthält eine umfassende Beschreibung der Implementierung. Es werden zwei Möglichkeiten zur Herleitung von MLS-basierten Ansätzen zunächst in allgemeiner Form ausführlich besprochen. Ansatzfunktionen linearer Konsistenz, wie sie für die Diskretisierung der in dieser Arbeit betrachteten Differentialgleichungen zweiter Ordnung erforderlich sind, werden sodann explizit angegeben. Es wird gezeigt, dass die Konstruktion einer hinreichenden Überdeckung für den Spezialfall linear konsistenter Ansatzfunktionen in einfacher Weise erfolgen kann, wenn der verwendeten Stützstellenverteilung eine Triangulation zugeordnet wird. Die resultierende Strategie erfordert nur die Betrachtung der Triangulationskanten und weist den Stützstellen Einflussgebiete zu, deren Gesamtheit bei beliebiger Stützstellenverteilung eine hinreichende Überdeckung des Grundgebietes garantiert.

Die numerische Auswertung der Gebietsintegrale basiert ebenfalls auf der dem Stützstellensatz zugeordneten Triangulation. Innerhalb einzelner Dreiecke werden Gauß-Regeln verwendet in Verbindung mit der Möglichkeit, einzelne Dreiecke in kleinere Integrationszellen zu unterteilen und damit die Integrationsgenauigkeit praktisch beliebig zu steigern. Da akzeptable Integrationsgenauigkeiten nur bei Verwendung einer recht hohen Anzahl von Integrationspunkten erzielt werden können, was bereits von Belytschko et al. (1994) festgestellt wurde, ist es im Sinne einer effizienten Implementierung notwendig, den mit der Auswertung der Ansatzfunktionen und ihrer Ableitungen verbundenen numerischen Aufwand möglichst zu minimieren.

In der vorliegenden Arbeit wird hierzu eine Möglichkeit beschrieben, die im Allgemeinen sehr unübersichtlichen Konnektivitätsbeziehungen auf eine vergleichsweise effiziente Art bereits zu einem frühen Zeitpunkt zu bestimmen und die gewonnenen Informationen bei der Kompilation der globalen Gleichungssysteme zu nutzen. Neben einer deutlichen Verkürzung der Rechenzeiten ermöglicht die Konnektivitätsinformation eine effiziente Speicherverwaltung, so dass Diskretisierungen mit einer großen Anzahl von Freiheitsgraden verwendet werden können.

Wesentliche Teile der entwickelten Programme sind in Form detaillierter Pseudocodes angegeben, womit dem Leser die Möglichkeit geboten wird, die beschriebenen Implementierungsvorschläge unabhängig von der verwendeten Programmierumgebung in eigene Software zu integrieren.

Die räumliche Diskretisierung wird — bis auf wenige Ausnahmen — mit dem in Kapitel 3 vorgestellten Algorithmus realisiert. Dieser beruht auf dem Konzept der *Schwerpunkt-Voronoi-Diagramme* und liefert insbesondere Stützstellenverteilungen variabler Dichte, wenn eine entsprechende Dichtefunktion auf dem betrachteten Grundgebiet vorgegeben

wird. Neben einer ausführlichen Beschreibung der für die Implementierung des Algorithmus notwendigen Zusammenhänge werden seine Eigenschaften qualitativ in Form von ausgewählten Stützstellenverteilungen und durch quantitative Angaben zur Qualität der erzeugten Knotensätze sowie zum benötigten Aufwand dokumentiert.

Anwendungen der entwickelten Programme auf Probleme der linearen Elastostatik in Kapitel 4 validieren die Implementierung. Darüber hinaus werden zwei Techniken zur Behandlung kinematischer Randbedingungen auf der Grundlage der erzielten numerischen Ergebnisse verglichen. Das von Belytschko et al. (1995) vorgeschlagene Verfahren und die Technik von Huerta und Fernández-Méndez (2000) grenzen sich von zahlreichen anderen Vorschlägen dadurch ab, dass die vorgeschriebene Kinematik entlang des betreffenden Gebietsrandes analog zur Finite-Elemente-Methode vollständig vorgegeben werden kann. Damit können kinematisch zulässige Ansatzfunktionen korrekt konstruiert werden. Beide Techniken benötigen eine Vernetzung des Randbereiches, so dass der netzfreie Charakter der Diskretisierung in Randnähe verloren geht. Um die damit eventuell verbundenen Genauigkeitsnachteile zu beurteilen, wird eine Implementierung der Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren in den Vergleich einbezogen. Diese eignet sich auf Grund der Sattelpunkteigenschaft allerdings nicht für die Behandlung der Minimierungsaufgabe im letzten Kapitel der Arbeit. Die unter Verwendung der Techniken von Belytschko et al. und Huerta und Fernández-Méndez erzielten Ergebnisse weisen geringere Genauigkeiten auf, als sie in Verbindung mit der Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren möglich sind. Dabei sind alle drei Varianten stets genauer als die Finite-Elemente-Methode mit linearen Ansatzfunktionen bei gleicher Anzahl von Freiheitsgraden. Der Vergleich der beiden im Vordergrund stehenden Techniken untereinander zeigt leichte Genauigkeitsvorteile der Methode von Belytschko et al.

Numerische Untersuchungen zur Effizienz der eingesetzten, auf der Stützstellentriangulation basierenden Gauß-Quadratur rechtfertigen ihren Einsatz innerhalb der Implementierung. Insbesondere zeigen eindimensionale Rechnungen, dass die in den letzten Jahren oft beschriebene Integration über Schnittmengen der Einflussbereiche einzelner Stützstellen deutliche Genauigkeitsnachteile aufweist.

Die für einzelne Rechnungen benötigten Programmlaufzeiten werden dokumentiert und diskutiert. Die Unterroutine zur Konstruktion einer hinreichenden Überdeckung gemäß der vorgestellten Strategie beansprucht auch bei Verwendung von 10000 Stützstellen keine messbaren CPU-Zeiten. Diese Strategie bildet auf Grund ihrer Effizienz und in Verbindung mit der Tatsache, dass sie bei beliebigen Stützstellenverteilungen einsetzbar ist, eine wichtige Grundlage für eine robuste und effektive Gesamtimplementierung. Durch die Bestimmung der Konnektivität kann die für die Assemblierung der Steifigkeitsmatrix benötigte CPU-Zeit bereits bei moderaten Stützstellenzahlen ca. um den Faktor 10 reduziert werden. Unter Beachtung der relativ kurzen Zeiten, in denen die Konnektivität bestimmt werden kann, erweist sich diese Implementierungsvariante als sehr nützlich. Dennoch benötigt die netzfreie Diskretisierungstechnik einen höheren Zeitaufwand als Finite-Elemente-Rechnungen vergleichbarer Genauigkeit. So kann die verbreitete Meinung, dass der Einsatz netzfreier Verfahren nur in Verbindung mit der Finite-Elemente-Diskretisierung bzw. nur in Fällen, in denen Finite-Elemente-Simulationen versagen, sinnvoll eingesetzt werden kann, bestätigt werden.

Die numerische Analyse materieller Instabilitäten ist ein solcher Fall. In Kapitel 5 wer-

den mit Hilfe der entwickelten Implementierung Simulationen der Scherbandausbildung zum ersten Bifurkationszeitpunkt durchgeführt, nachdem die für das Verständnis der numerischen Studien wesentlichen theoretischen Grundlagen in kompakter Form dargelegt wurden. Als Materialmodell wird die J_2 *corner theory* von Christoffersen und Hutchinson (1979) verwendet. Das Stabilitätskriterium für Deformationsprozesse von H. Petryk bildet die Basis für die in diesem Kapitel durchgeführten Untersuchungen.

Am Beispiel eines isochoren Stauchprozesses wird der approximierter Zeitpunkt der ersten Bifurkation für unstrukturierte Stützstellenverteilungen ermittelt. Die Übereinstimmung mit dem aus der Theorie bekannten Wert wird gegenüber Finite-Elemente-Ergebnissen bedeutend verbessert und die Orientierung der parallelen Lokalisierungsbander bemerkenswert gut wiedergegeben. Die Approximationen des ersten Bifurkationszeitpunktes und der Bandorientierung erweisen sich gegenüber der Veränderung der Diskretisierungsparameter, wie beispielsweise der Größe der Einflussgebiete, als robust. Um den ebenfalls theoretisch bekannten Volumenanteil der Lokalisierungszone näherungsweise zu bestimmen, sind weitere Überlegungen erforderlich. Hierzu müsste eine solche Zone zunächst einmal definiert werden, da die prognostizierten Unstetigkeiten des Geschwindigkeitsgradienten als scharfe Grenzen dieser Zonen verfahrensbedingt bei der MLS-Methode entfallen.

Die Anwendung der implementierten Diskretisierungstechnik auf die Scherbandanalyse zum ersten Bifurkationszeitpunkt zeigt insgesamt erfreuliche Resultate, so dass weitere Untersuchungen insbesondere im nachkritischen Bereich erfolgversprechend erscheinen.

Literaturverzeichnis

- Arroyo, M. und Ortiz, M. (2006). Local maximum-entropy approximation schemes: a seamless bridge between finite elements and meshfree methods. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 65:2167–2202.
- Aurenhammer, F. (1991). Voronoi diagrams - a survey of a fundamental geometric data structure. *ACM Computing Surveys* 23:345–405.
- Babuska, I., Banerjee, U., Osborn, J. und Li, Q. (2008). Quadrature for meshless methods. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 9:1434–1470.
- Babuska, I. und Melenk, J. M. (1997). The partition of unity method. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 40:727–758.
- Bathe, K.-J. (1986). *Finite-Elemente-Methoden*. Springer Verlag, Berlin.
- Beissel, S. und Belytschko, T. (1996). Nodal integration of the element-free galerkin method. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 139:49–74.
- Belytschko, T., Lu, Y. und Gu, L. (1994). Element-free Galerkin methods. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 37:229–256.
- Belytschko, T., Organ, D. und Krongauz, Y. (1995). A coupled finite element — element-free Galerkin method. *Computational Mechanics* 17:186–195.
- Belytschko, T., Krongauz, Y., Fleming, M., Organ, D. und Liu, W. (1996a). Smoothing and accelerated computations in the element free Galerkin method. *J. Comput. Appl. Math.* 76:111–126.
- Belytschko, T., Krongauz, Y., Organ, D., Fleming, M. und Krysl, P. (1996b). Meshless methods: An overview and recent developments. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 139:3–47.
- Belytschko, T., Krongauz, Y., Dolbow, J. und Gerlach, C. (1998). On the completeness of meshfree particle methods. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 43:785 – 819.
- Belytschko, T. und Chen, J. S. (2007). *Meshfree and Particle Methods*. John Wiley & Sons Ltd.
- Breitkopf, P., Rassineux, A., Savignat, J. und Villon, P. (2004). Integration constraint in diffuse element methods. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 193:1203–1220.
- Buhmann, M. D. (2003). *Radial Basis Functions*. Cambridge University Press, New York.
- Chen, J.-S., Wu, C.-T., Yoon, S. und You, Y. (2001). A stabilized conforming nodal integration for Galerkin mesh-free methods. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 50:435–466.

- Chen, Y., Lee, J. und Eskandarian, A. (2006). *Meshless Methods in Solid Mechanics*. Springer Verlag.
- Christoffersen, J. und Hutchinson, J. W. (1979). A class of phenomenological corner theories of plasticity. *J. Mech. Phys. Solids* 27:465–487.
- Cuthill, E. und McKee, J. (1969). Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices. In *Proc. 24. Nat. Conf. ACM*, 157–172.
- De, S. und Bathe, K. J. (2000). The method of finite spheres. *Computational Mechanics* 25:329–345.
- De, S. und Bathe, K. J. (2001). The method of finite spheres with improved numerical integration. *Comput. Struct.* 79:2183–2196.
- Dolbow, J. und Belytschko, T. (1998). An introduction to programming the meshless element free Galerkin method. *Arch. Comput. Methods Eng.* 5:207–241.
- Dolbow, J. und Belytschko, T. (1999). Numerical integration of the Galerkin weak form in meshfree methods. *Computational Mechanics* 23:219–230.
- Du, Q., Faber, V. und Gunzburger, M. (1999). Centroidal Voronoi tessellations: Applications and algorithms. *SIAM Review* 41:637–676.
- Du, Q., Gunzburger, M. und Ju, L. (2002). Meshfree, probabilistic determination of point sets and support regions for meshless computing. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 191:1349–1366.
- Du, Q. und Emelianenko, M. (2006). Acceleration schemes for computing centroidal Voronoi tessellations. *Numer. Linear Algebra Appl.* 13:173–192.
- Du, Q. und Wang, D. (2003). Tetrahedral mesh generation and optimization based on centroidal Voronoi tessellations. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 56:1355–1373.
- Duarte, C. A. und Oden, J. T. (1996). H-p clouds – an h-p meshless method. *Num. Methods Part. Dif. Eq.* 12:673–705.
- Fasshauer, G. E. (2007). *Meshfree Approximation Methods with MATLAB*. World Scientific Publishers, Singapore.
- Fejes Tóth, L. (1959). Sur la représentation d’une population infinie par un nombre fini d’éléments. *Acta Math. Acad. Sci. Hung.* 10:76–81.
- Fernández-Méndez, S. und Huerta, A. (2004). Imposing essential boundary condition in mesh-free methods. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 183:1257–1275.
- Fletcher, R. (1987). *Practical Methods for Optimization*. Chichester: John Wiley.
- Fries, T. P. und Matties, H. G. (2004). Classification and overview of meshfree methods. Informatikbericht 2003-3, Technical University Braunschweig, Germany.

- Gay, D. M. (1981). Computing optimally constrained steps. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 2:186–197.
- Gay, D. M. (1983). Algorithm 611, subroutines for unconstrained minimization using a model/trust-region approach. *ACM Transactions on Mathematical Software* 9:503–524.
- George, A. und Liu, J. (1981). *Computer Solutions of Large Sparse Positive Definite Systems*. Prentice Hall.
- Gersho, A. (1979). Asymptotically optimal block quantization. *IEEE Trans. Inform. Theory* 25:373–380.
- Geuzaine, C. und Remacle, J.-F. (2009). Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* (Accepted for publication).
- Gray, R. M. und Neuhoff, D. L. (1998). Quantization. *IEEE Trans. Inform. Theory* 44:137–139.
- Griebel, M. und Schweitzer, M. A. (2000). A particle-partition of unity method for the solution of elliptic, parabolic and hyperbolic PDEs. *SIAM J. Sci. Comput.* 22:853–890.
- Griebel, M. und Schweitzer, M. A. (2002). A particle-partition of unity method - Part II: Efficient cover construction and reliable integration. *SIAM J. Sci. Comput.* 23:1655–1682.
- Gurtin, M. E. (1972). The Linear Theory of Elasticity. In Flügge, S., ed., *Handbuch der Physik, Vol. IVa/2*. Springer-Verlag.
- Han, X., Oliveira, S. und Stewart, D. (2000). Finding sets covering a point with application to mesh-free Galerkin methods. *SIAM J. Sci. Comput.* 30:1368 – 1383.
- Hegen, D. (1997). *An Element-free Galerkin Method for Crack Propagation in Brittle Materials*. Ph.D. Dissertation, Technische Universiteit Eindhoven.
- Herault, C., Leconte, V., Marechal, Y. und Meunier, G. (2000). The node distribution for meshless methods. *Eur. Phys. J. AP* 15:135–140.
- Hill, R. (1959). Some basic principles in the mechanics of solids without a natural time. *J. Mech. Phys. Solids* 7:209–225.
- Hill, R. (1978). Aspects of invariance in solid mechanics. *Adv. Appl. Mech.* 18:1–75.
- Huerta, A. und Fernández-Méndez, S. (2000). Enrichment and coupling of the finite element and meshless methods. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 48:1615–1636.
- Ju, L. (2007). Conforming centroidal Voronoi Delaunay triangulation for quality mesh generation. *Int. J. Num. Analysis Modeling* 4:531–547.

- Kessel, S. und Fröhling, D. (1998). *Technische Mechanik / Technical Mechanics: Fachbegriffe im deutschen und englischen Kontext*. Teubner Verlag, Stuttgart, Leipzig.
- Koren, Y. und Yavneh, I. (2006). Adaptive multiscale redistribution for vector quantization. *SIAM J. Sci. Comput.* 27:1573–1593.
- Krongauz, Y. und Belytschko, T. (1996). Enforcement of essential boundary condition in meshless approximations using finite elements. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 131:133–145.
- Krysl, P. und Belytschko, T. (2001). ESFLIB: A library to compute the element free Galerkin shape functions. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 190:2181–2205.
- Lancaster, P. und Salkauskas, K. (1981). Surface generated by moving least square methods. *Math. Comput.* 37:141–158.
- Lawson, C. L. (1977). Software for C^1 Surface Interpolation. In Rice, J., ed., *Mathematical Software III*. Academic Press, New York. 161–194.
- Li, S. und Liu, W. (2002). Meshfree and particle methods and their applications. *Appl. Mech. Rev.* 5:1–34.
- Li, S. und Liu, W. K. (2004). *Meshfree Particle Methods*. Springer Verlag.
- Linde, Y., Buzo, A. und Gray, R. M. (1980). An algorithm for vector quantizer design. *IEEE Trans. Commun.* 28:84–95.
- Liu, W. K., Adee, J. und Jun, S. (1993). Reproducing kernel and wavelet particle methods for elastic and plastic problems. In Benson, D. J. und Asaro, R. A., eds., *Adv. Comp Meth. Mat. Modelling AMD 180/PVP 268 ASME*, 175–190.
- Liu, W. K., Jun, S. und Zhang, Y. F. (1995). Reproducing kernel particle methods. *Int. J. Num. Meth. Fluids* 20:1081–1106.
- Liu, W. K., Li, S. und Belytschko, T. (1997). Moving least square reproducing kernel particle methods (i): Methodology and convergence. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 143:113–154.
- Liu, G. R. und Gu, Y. T. (2005). *An Introduction to Meshfree Methods and their Programming*. Springer.
- Liu, A. und Joe, B. (1996). Quality local refinement of tetrahedral meshes based on 8-subtetrahedron subdivision. *Math. Comput.* 65:1183–1200.
- Liu, G. R. (2003). *Mesh Free Methods: Moving beyond the Finite Element Method*. CRC Press, Boca Raton.
- Lloyd, S. P. (1982). Least squares quantization in PCM. *IEEE Trans. Inform. Theory* 28:129–137.

- Lucy, L. B. (1977). A numerical approach to the testing of the fission thesis. *Astronom. J.* 82:1013–1024.
- Lulla, C. (2002). *Ein Beitrag zur numerischen Scherbandanalyse elasto-plastischer Werkstoffe mit nicht-glatter Fließfläche*. Ph.D. Dissertation, Fachgebiet Mechanik, insb. Maschinendynamik, Universität Dortmund.
- Moré, J. J. und Sorensen, D. C. (1983). Computing a trust region step. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 4:553–572.
- Nayroles, B., Touzot, G. und Villon, P. (1992). Generalizing the Finite Element Method: Diffuse approximation and diffuse elements. *Computational Mechanics* 10:307–318.
- Newman, D. J. (1964). The hexagon theorem. Technical report, Bell Laboratories Technical Memorandum.
- Newman, D. J. (1982). The hexagon theorem. *IEEE Trans. Inform. Theory* 28:137–139.
- Nguyen, V. P., Rabczuk, T., Bordas, S. und Duflot, M. (2008). Meshless methods: A review and computer implementation aspects. *Math. Comput. Simulation* 79:763–813.
- Nguyen, H., Burkardt, J., Gunzburger, M., Ju, L. und Saka, Y. (2009). Constrained CVT meshes and a comparison of triangular mesh generators. *Comput. Geom. Theory Appl.* 42:1–19.
- Organ, D., Fleming, M., Terry, T. und Belytschko, T. (1996). Continuous meshless approximations for nonconvex bodies by diffraction and transparency. *Computational Mechanics* 18:225–235.
- Palnau, V. (2007). Ein MLS-Verfahren mit triangulationskonformen Einflussbereichen und Fensterfunktionen auf der Grundlage von R -Funktionen: Implementierung und numerische Studien. (*unveröffentlichtes Manuskript*).
- Persson, P.-O. und Strang, G. (2004). A simple mesh generator in MATLAB. *SIAM Review* 46:329–345.
- Petryk, H. und Thermann, K. (1992). On discretized plasticity problems with bifurcations. *Int. J. Solids Structures* 29:745–765.
- Petryk, H. und Thermann, K. (1996). Post-critical plastic deformation of biaxially stretched sheets. *Int. J. Solids Structures* 33:689–705.
- Petryk, H. und Thermann, K. (1997). A yield-vertex modification of two-surface models of metal plasticity. *Arch. Mech.* 49:847–863.
- Petryk, H. und Thermann, K. (2000). Post-critical deformation pattern in plane strain plastic flow with yield-surface vertex effect. *Int. J. Mech. Sci.* 42:2133–2146.
- Petryk, H. und Thermann, K. (2002). Post-critical plastic deformation in incrementally nonlinear materials. *J. Mech. Phys. Solids* 50:925–954.

- Petryk, H. und Thermann, K. (2004). Incremental energy minimization in material instability problems. Lecture at IUTAM Congress, Warsaw 2004, (unpublished).
- Petryk, H. (1982). A consistent energy approach to defining stability of plastic deformation processes. In Schroeder, F., ed., *Stability in the Mechanics of Continua, Proc. IUTAM Symposium, Nümbrecht 1981*, 262–272. Berlin: Springer.
- Petryk, H. (1985). On energy criteria of plastic instability. In *Plastic Instability, Proc. Considère Memorial*, 215–226. Paris: Ecole Nat. Ponts Chauss.
- Petryk, H. (1991). The energy criteria of instability in time-independent inelastic solids. *Arch. Mech.* 43:519–545.
- Petryk, H. (1992). Material instability and strain-rate discontinuities in incrementally nonlinear continua. *J. Mech. Phys. Solids* 40:1227–1250.
- Petryk, H. (1997). Instability of plastic deformation processes. In Tatsumi, T. et al., eds., *Theoretical and applied mechanics, Proc. XIXth IUTAM Congress, Kyoto 1996*, 497–516. Elsevier.
- Petryk, H. (1999). Theory of material instability on incrementally nonlinear plasticity. In Petryk, H., ed., *Material instabilities in elastic and plastic solids*, 261–331. Springer, Wien, New York.
- Piela, K. und Korbel, A. (1996). The effect of shear banding on spatial arrangement of the second phase particles in the aluminium alloy. *Materials Science Forum* 217-222:1037–1042.
- Qiang, D. und Gunzburger, M. (2002). Grid generation and optimization based on centroidal Voronoi tessellations. *Appl. Math. Comput.* 133:591 – 607.
- Rvachev, V. L. (1982). *Theory of R-functions and some Applications*. Naukova Dumka. (Original russisch).
- Sambridge, M., Braun, J. und McQueen, H. (1995). Geophysical parameterization and interpolation of irregular data using natural neighbours. *Geophys. J. Int.* 122:837–857.
- Schwarz, H. R. (1980). *Methode der finiten Elemente*. Teubner Verlag, Stuttgart.
- Schweitzer, M. A. (1997). Ein Partikel-Galerkin-Verfahren mit Ansatzfunktionen der Partition of Unity Method. Master's thesis, Universität Bonn.
- Schütze, A. (2006). *Numerische Umsetzung einer Fließeckentheorie metallischer Vielkristalle und ihre Anwendung auf die Scherbandanalyse mittels inkrementeller Energieminimierung*. Ph.D. Dissertation, Fachgebiet Mechanik, insb. Maschinendynamik, Universität Dortmund.
- Shapiro, V. (1991). Theory of R-functions and applications: A primer. Technical report TR91-1219, Computer Science Department, Cornell University, Ithaca, NY.

- Shewchuk, J. R. (1996). Triangle: Engineering a 2D Quality Mesh Generator and Delaunay Triangulator. In Lin, M. C. und Manocha, D., eds., *Applied Computational Geometry: Towards Geometric Engineering*, volume 1148 of *Lecture Notes in Computer Science*. Springer Verlag. 203–222. From the First ACM Workshop on Applied Computational Geometry.
- Shewchuk, J. R. (1997). *Delaunay Refinement Mesh Generation*. Ph.D. Dissertation, School of Computer Science, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, Pennsylvania. Available as Technical Report CMU-CS-97-137.
- Shewchuk, J. R. (2002). Delaunay refinement algorithms for triangular mesh generation. *Comput. Geom. Theory Appl.* 22:21–74.
- Sibson, R. (1980). A vector identity for the Dirichlet tessellation. *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* 87:151–155.
- Steinhaus, H. (1956). Sur la division des corps materiels en parties. *Bull. Acad. Sci. Polon., Cl. III IV*:801–804.
- Sukumar, N., Moran, B. und Belytschko, T. (1998). The natural element method in solid mechanics. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 43:839–887.
- Sukumar, N. (2004). Construction of polygonal interpolants: a maximum entropy approach. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 61:2159–2181.
- Taylor, M. A., Wingate, B. A. und Bos, L. P. (2007). Several new quadrature formulas for polynomial integration in the triangle. [arXiv:math/0501496v2](https://arxiv.org/abs/math/0501496v2) [math.NA].
- Thermann, K. (1999). Post-critical plastic deformation pattern in incrementally nonlinear materials at finite strain. In Petryk, H., ed., *Material instabilities in elastic and plastic solids*, 333–384. Springer, Wien, New York.
- Tvergaard, V., Needleman, A. und Lo, K. (1981). Flow localization in the plane strain tensile test. *J. Mech. Phys. Solids* 29:115–147.
- Unger, J. F. (2003). Development of an efficient algorithm for the application of the natural neighbor interpolation for crack growth simulation. Master’s thesis, Bauhaus-Universität Weimar.

Lebenslauf

Name: Vadim Palnau
Geburtsdatum: 12. Juli 1976
Geburtsort: Omsk/Russland
Familienstand: verheiratet, ein Kind
Staatsangehörigkeit: deutsch

Schulausbildung: 09/1983 – 04/1991 Mittelschule in Omsk/Russland
08/1991 – 12/1991 Hauptschule am Wall in Lingen (Ems)
12/1991 – 07/1994 Kreisrealschule in Lingen (Ems)
08/1994 – 07/1997 Gymnasium Johanneum in Lingen (Ems)
Allgemeine Hochschulreife

Studium: 10/1998 – 07/2003 Maschinenbau, Vertiefungsrichtung
Produktionstechnik an der
Universität Dortmund
Diplom am 17. Juli 2003

Berufstätigkeit: seit 08/2003 Wissenschaftlicher Angestellter
am Fachgebiet Mechanik, insbesondere
Maschinendynamik der Fakultät
Maschinenbau der Technischen
Universität Dortmund,
Prof. Dr.-Ing. K. Thermann (bis 09/2007)
Prof. Dr.-Ing. A. Menzel (seit 10/2007)