



KfK 4974
Dezember 1991

Die Verwendung von Viereckelementen mit acht Knoten beim CAO-Verfahren

L. Harzheim
Institut für Materialforschung

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Materialforschung

KfK 4974

**Die Verwendung von Viereckelementen mit acht Knoten beim
CAO-Verfahren**

L. Harzheim

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003

Die Verwendung von Viereckelementen mit acht Knoten beim CAO-Verfahren

Zusammenfassung:

Das CAO-Verfahren, welches bis jetzt immer nur mit Elementen mit linearem Lösungsansatz zum Einsatz kam, wurde im 2-dimensionalen Fall auf Viereckelemente mit acht Knoten (quadratischer Ansatz) erweitert. Dazu muß nach jedem Wachstumszyklus, bei dem sich die Lage der Knoten verändert, sichergestellt werden, daß keine Spannungssingularitäten auf Grund der neuen geometrischen Lage der Zwischenknoten im Element auftreten. Notfalls muß eine Korrektur durchgeführt werden. Die entsprechende Korrekturroutine und das Korrekturverfahren wurden benutzerfreundlich in das bestehend CAO-Softwarepaket integriert. Somit sind die Voraussetzungen geschaffen, Verwendungsmöglichkeiten und Vorteile von Viereckelementen mit acht Knoten beim CAO-Verfahren zu untersuchen und auszutesten.

The application of 8 node biquadratic elements in the CAO-method

Summary:

The CAO-method which has been used only for first order interpolation elements has been extended to the use of 8 node biquadratic elements in two dimensions. Therefore it must be assured that after the change of the node positions during every cycle of growth no stress singularity occurs within an element according to the new geometric position of the intermediate nodes. If necessary a correction must be made. The corresponding correction routine and correction method was integrated in the existing CAO-software-package. Consequently the condition is given in order to study and test the advantage and the range of use of 8 node biquadratic elements for the CAO-method.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Zweidimensionale isoparametrische Viereckelemente mit quadratischem Ansatz	3
3. Bestimmung des zulässigen Bereiches für den Zwischenknoten	6
4. Programmstruktur der Zwischenknotenkontrolle und Korrekturstrategie	9
5. Zusammenfassung und Ausblick	11
6. Literatur	13
7. Anhang A1	14
8. Anhang A2	19

1. Einleitung

Die CAO-Methode [1-5], welche im Institut für Material- und Festkörperforschung am Kernforschungszentrum Karlsruhe entwickelt wurde, ist eine einfache und effektive Methode, um mit Hilfe der Finiten Elemente Methode (FEM) Bauteile bezüglich ihrer Form zu optimieren. Dabei fanden bei den FE-Rechnungen [6] immer Viereck- (2D) oder Hexaeder-Elemente (3D) Verwendung (siehe Abb.1), weil damit die Wachstumsschicht, über die das biologisch adaptive Wachstum simuliert wird, am einfachsten und am besten modelliert und die Netzkorrektur einfach durchgeführt werden kann. Weiterhin wurden bis jetzt immer Elemente mit linearem Ansatz für die Verschiebungsfunktionen verwendet. Letztere Beschränkung liegt nicht in dem CAO-Verfahren an sich begründet, sondern in den besonderen Eigenschaften der Elemente mit höheren Lösungsansätzen. Solche isoparametrischen (krummlinigen) Elemente, welche fast ausschließlich in den FE-Programmen verwendet werden, verlangen beim CAO-Verfahren eine besondere Behandlung und Kontrolle. So können bei Viereckselementen mit acht Knoten, sogenannte Elemente der Serendipity-Klasse, bei denen ein quadratischer Ansatz verwendet wird, je nach Lage der Knoten, Singularitäten in den Spannungen auftreten [7,8].

Singularitäten oder Uneindeutigkeiten in den verwendeten Transformationen können sich auch bei Elementen mit linearem Ansatz ergeben, wenn Knoten zusammenfallen oder andere Elementseiten durchdringen. Solche starken Deformationen von Elementen treten jedoch nur bei großen Wachstumsverschiebungen auf und kündigen sich meistens schon vorher durch die Ausbildung von Knicken an der Außenkontur an. In diesem Fall ist sowieso eine Glättung der Kontur und eine anschließende Neubildung des Netzes angesagt. Weiterhin können solche Elementdeformationen leicht visuell erkannt werden und sind somit unkritisch. Diese Fälle, an denen die Eckknoten zusammenfallen oder eine Elementseite durchdringen und die gleichermaßen bei Elementen mit linearem als auch quadratischem Ansatz auftreten können, sind hier jedoch nicht gemeint und sollen im folgenden immer ausgeschlossen sein.

Bei Viereckelementen mit acht Knoten sind vielmehr die Zwischenknoten problematisch. So kann bei einem solchen Element, obwohl es noch passabel aussieht, die Lage der Zwischenknoten so beschaffen sein, daß im Element Singularitäten in den Spannungen auftreten. Wegen dieser bekannten Schwierigkeiten wurde das CAO-Verfahren zunächst nur für Elemente mit linearem Ansatz getestet und weiterentwickelt.

Obwohl die Verwendung von Elementen mit linearem Ansatz im allgemeinen ausreicht, ist es für die universelle Anwendbarkeit der CAO-Methode durchaus wünschenswert, auch quadratische Ansätze benutzen zu können. Zudem ist es denkbar, daß bei gewissen Problemen ein quadratischer Ansatz vorteilhafter ist als ein linearer. Eine einfache Möglichkeit, dem Problem mit den auftretenden Singularitäten aus dem Weg zu gehen wäre, alle Zwischenknoten einfach auf ihre Mittelposition (d.h auf die Mitte der Verbindungsgeraden der entsprechenden Eckknoten) zu setzen. Dadurch wird jedoch der große Vorteil der isoparametrischen Elemente, die Außenkonturen besser nachbilden zu können, nicht genutzt. Letzteres ist gerade für ein Verfahren, mit dem eine optimierte Kontur berechnet wird, von Vorteil. So wird bei Viereckelementen mit linearem Ansatz

die Außenkontur immer durch einen Polygonzug approximiert, während sie bei quadratischem Ansatz durch Parabelsegmente angenähert werden kann. Weiterhin können isoparametrische Elemente mit quadratischem Ansatz auch für Kontaktprobleme geeigneter sein. So ergeben sich zwar bei einfachen Fällen mit linearen Ansätzen zufriedenstellende Ergebnisse [9,10], jedoch können bei ungünstigen Konstellationen, wie in Abb.2 dargestellt, regelrechte Blockaden von Knoten entstehen. In dem dargestellten Beispiel sind zwei sich kontaktierende Flächen, die beide wachsen dürfen, gezeigt. In dieser Konstellation war die Spannung in Element A höher als im Element C. Demnach müßte Knoten 1 stark nach oben wachsen. Dieser wird jedoch durch Knoten 3 blockiert, weil dieser auf der Verbindungsgeraden von Knoten 1 zu 4 liegt und die Elementseite bei linearem Ansatz starr ist. Dieser Zustand verbessert sich erst dann, wenn Knoten 3 durch die Querverschiebung zu Knoten 1 gerutscht ist, sich damit das Spannungmaximum aus Element A zu Element B verschiebt und Knoten 2, der nicht blockiert ist, das der Spannung entsprechende Wachstum aufzeigen darf. Es ist klar, daß ein solches Verhalten, das durch die Steifigkeit des Polygonzugs verursacht wird, nicht zufriedenstellend ist. Als Ausweg gibt es die Möglichkeit, bei diesen Konstellationen immer ein neues Netz anzulegen, was jedoch sehr arbeitsintensiv ist. Hier ist ein Fall gegeben, bei dem die Verwendung von isoparametrischen Elementen mit quadratischem Ansatz günstiger sein könnte, weil bei diesen die Kanten nicht starr sind und "nachgeben" können.

Ziel dieser Arbeit war es, für den 2-dimensionalen Fall das CAO-Verfahren auf Viereckelemente mit acht Knoten zu erweitern. Mit Hinblick auf die Anwendung wurde sich bei den Untersuchungen nur auf die Elemente der Wachstumsschicht beschränkt. Bei allen anderen Elementen wurden die Zwischenknoten auf ihre jeweilige Mittelposition gesetzt und sind somit unkritisch. In Kapitel 2 werden zunächst allgemein die Eigenschaften der isoparametrischen Elemente mit quadratischem Ansatz dargestellt und geschildert, unter welchen Bedingungen die unerwünschten Singularitäten in den Spannungen auftreten. Daraus wird in Kapitel 3 der zulässige Bereich bestimmt, in dem sich der Zwischenknoten aufhalten darf. In Kapitel 4 wird der Kontrollalgorithmus beschrieben, mit dem nach jedem Wachstumszyklus die Lage des Zwischenknotens jedes Elementes der Wachstumsschicht kontrolliert wird. Befindet er sich nicht im zulässigen Bereich, wird seine Lage mit einer einfachen Strategie korrigiert. Die Kontrolle und die Korrektur wurden in das Programm zur Netzkorrektur eingebunden, so daß sich für den Benutzer keine Unterschiede zur Verwendung von Viereckelementen mit vier Knoten ergeben (Netzkorrektur mit "prescribed displacements" [11] ist auch möglich). Kapitel 5 enthält die Zusammenfassung und den Ausblick. Alle aufwendigeren Rechnungen wurden, der besseren Lesbarkeit wegen, in die Anhänge verlegt.

2. Zweidimensionale isoparametrische Viereckelemente mit quadratischem Ansatz

Bei zweidimensionalen Viereckelementen der Serendipity-Klasse werden die Verschiebungen u , v mit einem quadratischen Ansatz über dem Einheitsquadrat (ξ, η) , $(-1 \leq \xi \leq +1, -1 \leq \eta \leq +1)$ (siehe Abb.3) approximiert [7,12,13,14].

$$u = \sum_{i=1}^8 u_i N_i(\xi, \eta) \quad (2.1a)$$

$$v = \sum_{i=1}^8 v_i N_i(\xi, \eta) \quad (2.1b)$$

Dabei sind u_i und v_i die jeweiligen Werte der Verschiebungen am Knoten i . Die Formfunktionen $N_i(\xi, \eta)$ sind gegeben durch

$$N_i(\xi, \eta) = [(1 + \xi \xi_i)(1 + \eta \eta_i) - (1 - \xi^2)(1 + \eta \eta_i) - (1 - \eta^2)(1 + \xi \xi_i)] \xi_i^2 \eta_i^2 / 4 + (1 - \xi^2)(1 + \eta \eta_i)(1 - \xi_i^2) \eta_i^2 / 2 + (1 - \eta^2)(1 + \xi \xi_i)(1 - \eta_i^2) \xi_i^2 / 2 \quad (2.1c)$$

wobei (ξ_i, η_i) die Koordinaten des Knotens i im Einheitsquadrat sind (siehe Abb.3).

Der Bezug zum aktuellen FE-Modell wird dadurch hergestellt, daß das Einheitsquadrat auf das entsprechende Element des Modells abgebildet wird (siehe Abb.3). Bei isoparametrischen Elementen werden für diese Abbildung die gleichen Formfunktionen verwendet wie für den Lösungsansatz in (2.1).

$$x = \sum_{i=1}^8 x_i N_i(\xi, \eta) \quad (2.2a)$$

$$y = \sum_{i=1}^8 y_i N_i(\xi, \eta) \quad (2.2b)$$

Dabei sind (x_i, y_i) die Koordinaten von Knoten i des betrachteten Elementes. Hier zeigt sich durch Einsetzen der Umkehrabbildung von (2.2) in (2.1), daß im allgemeinen die Verschiebungsfunktionen bei isoparametrischen Elementen mit acht Knoten nicht quadratisch und somit auch die Spannungen im allgemeinen nicht linear über dem Element sind (siehe auch Ausführungen zur Singularität weiter unten).

Die Dehnungen können mit der Steifigkeitsmatrix $[B]$ berechnet werden.

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix} = [B] \begin{bmatrix} \{u\} \\ \{v\} \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

$$[B] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_8}{\partial x} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \frac{\partial N_1}{\partial y} & \dots & \frac{\partial N_8}{\partial y} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & \dots & \frac{\partial N_8}{\partial y} & \frac{\partial N_1}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_8}{\partial x} \end{bmatrix} \quad \{u\} = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_8 \end{bmatrix} \quad \{v\} = \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_8 \end{bmatrix}$$

Die partiellen Ableitungen der Formfunktionen nach x und y ergeben sich aus den partiellen Ableitungen nach ξ und η

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \end{bmatrix} = [J]^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

wobei $[J]$ die Jakobi-Matrix ist.

$$[J] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial \xi} & \dots & \frac{\partial N_8}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_1}{\partial \eta} & \dots & \frac{\partial N_8}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 & y_1 \\ \vdots & \vdots \\ x_8 & y_8 \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

Eine notwendige und hinreichende Bedingung für die Regularität und Eineindeutigkeit der Abbildung in Gleichung (2.2) ist das Nichtverschwinden der Jakobi-Determinante [14,15]. Fordert man zudem, daß der Drehsinn bei der Transformation erhalten bleibt, muß die Determinante immer positiv sein. Diese mathematischen Forderungen können auch physikalisch begründet werden. So sind zwar die Formfunktionen selber und deren partielle Ableitungen (und damit auch die Verschiebungen) immer nichtsingulär, da sie dem Ansatz nach Polynome sind, jedoch werden die Dehnungen in Gleichung (2.3) und damit auch die Spannungen beim Verschwinden der Jakobi-Determinante über Gleichung (2.4) singulär [7,8]. Solche Singularitäten, die nur auf die Geometrie des Elementes zurückzuführen sind, sind natürlich im allgemeinen nicht erwünscht und dürfen somit nicht auftreten. So muß bei Verwendung von 2-dimensionalen Viereckelementen mit acht Knoten immer sichergestellt werden, daß nach jedem Wachstumszyklus die Jakobi-Determinante innerhalb jedes Elementes größer Null ist. Notfalls muß eine Korrektur durchgeführt werden.

Der oben dargestellte Sachverhalt kann auch gut am einfachen Beispiel eines eindimensionalen 3-Knotenelementes veranschaulicht werden (siehe Abb.4). Die Formfunktionen aus Gleichung (2.1) reduzieren sich dann auf

$$N_1(\eta) = \frac{1}{2} \eta(\eta - 1) \quad (2.6)$$

$$N_2(\eta) = \frac{1}{2} \eta(\eta + 1)$$

$$N_3(\eta) = (1 - \eta^2)$$

Wir setzen o.B.d.A. die Knotenkoordinaten $x_1 = 0$, $x_2 = L$, $x_3 = \lambda L$. Die Koordinatentransformation (2.2) lautet dann

$$x = L\left(\frac{1}{2} - \lambda\right)\eta^2 + \frac{L}{2}\eta + \lambda L \quad (2.7)$$

deren Extremum bei

$$\eta_0 = -\frac{1}{2 - 4\lambda}$$

liegt. Somit befindet sich das Extremum für $1/4 < \lambda < 3/4$ immer außerhalb des Definitionsbereiches $-1 \leq \eta \leq +1$. Die Jakobi-Matrix reduziert sich zu

$$[J] = \frac{\partial x}{\partial \eta}$$

beziehungsweise

$$[J]^{-1} = \frac{\partial \eta}{\partial x}$$

und ist somit direkt gleich der Determinante. Die Gleichung (2.3) für die Dehnung lautet

$$\varepsilon_x = \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial N_i(\eta)}{\partial x} = \frac{\partial \eta}{\partial x} \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial N_i(\eta)}{\partial \eta}$$

In Abb.4 ist für $\lambda \leq 0.5$ an vier charakteristischen Fällen dargestellt, wie die Lage der Transformations-Funktion (2.7) von der Lage des Zwischenknotens abhängt. Wenn sich der Zwischenknoten in der Mittelposition befindet, ist die Transformation linear (hier ist der Lösungsansatz für die Verschiebung auch wirklich rein quadratisch). Sonst ist die Transformation immer quadratisch, wobei sich das Extremum nur für $\lambda > 1/4$ außerhalb des Definitionsbereichs befindet. Für $\lambda < 1/4$ ist das Extremum innerhalb des Definitionsbereiches und die Transformation ist somit nicht mehr eineindeutig. Ein Grenzfall liegt bei $\lambda = 1/4$ vor, wo die Transformation noch eineindeutig ist, jedoch das Extremum genau bei Knoten 1 liegt und somit die Spannung bzw. die Dehnung dort singular wird. Hier liegt die sogenannte Viertelpunktsanordnung vor, die verwendet werden kann, um Spannungsfelder an Reißspitzen zu berechnen, da die Singularität in diesem Falle gerade von der Ordnung $1/\sqrt{r}$ (r =Abstand von Knoten 1) ist [7,8,16].

3. Bestimmung des zulässigen Bereiches für den Zwischenknoten

Wie im letzten Abschnitt ausgeführt wurde, ist der zulässige Bereich der Zwischenknoten durch die Bedingung $\det |J| > 0$ festgelegt. Im Gegensatz zu dem einfachen Beispiel mit dem eindimensionalen Element, wo der zulässige Bereich leicht überschaubar war, besitzt ein Viereckelement mit acht Knoten vier Zwischenknoten, deren Lage jeweils den zulässigen Bereich beeinflussen. Vor allem ist es problematisch zu entscheiden, wie und welche Knoten man verschiebt, wenn der zulässige Bereich überschritten worden ist. Da es zudem ein Ziel ist, die Außenkontur besser zu modellieren, werden nur den Zwischenknoten an der Außenkontur des Modells die Freiheit eingeräumt, sich aus ihrer Mittelposition zu bewegen. Alle anderen Zwischenknoten werden nach jedem Wachstumszyklus wieder auf ihre Mittelposition gesetzt. Damit vereinfacht sich die Lösung des Problems bedeutend. Eine weitere Vereinfachung ergibt sich dadurch, daß wir die Rotations- und Translationsinvarianz des Problems ausnützen und eine geeignete Basis wählen. Wir wählen die Basis so, daß für die einzelnen Ortskoordinaten gilt (siehe Abb.5)

$$\vec{r}_1 = \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} \quad \vec{r}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ -y \end{bmatrix} \quad \vec{r}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ y \end{bmatrix} \quad \vec{r}_4 = \begin{bmatrix} x_4 \\ y_4 \end{bmatrix} \quad \vec{r}_6 = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \quad (3.1a)$$

$$y > 0 \quad ; \quad x_1 < 0 \quad ; \quad x_4 < 0$$

Dabei ist \vec{r}_i der Ortsvektor zum Knoten i . Knoten 6 ist definitionsgemäß der Zwischenknoten an der Außenkontur, der kontrolliert werden soll. Die anderen Zwischenknoten befinden sich, wie oben erläutert, in der Mittelposition und haben somit folgende Koordinaten

$$\vec{r}_5 = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \quad \vec{r}_7 = \frac{\vec{r}_3 + \vec{r}_4}{2} \quad \vec{r}_8 = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_4}{2} \quad (3.1b)$$

Mit Hilfe von Gleichung (2.1c) können leicht die partiellen Ableitungen für die Jakobi-Determinante (2.5) berechnet werden. Der Rand des zulässigen Bereiches wird durch die Bedingung $\det |J| = 0$ über dem Einheitsquadrat festgelegt, so daß sich ergibt

$$0 = \det |J| = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{vmatrix} \quad (3.2)$$

$$= \frac{1}{16} \{ 2(x_4 y_1 - x_1 y_4)(1 - \xi) - 2(x_1 + x_4)y(1 + \xi) + 4(x_1 - x_4)y\eta$$

$$+ 2\alpha[(y_4 - y_1)(1 - \xi) + 2y(1 + \xi) - 2(y_1 + y_4)(1 + \xi)\eta - (y_4 - y_1)(3 + \xi)\eta^2 + 2y(1 + \xi)\eta^2]$$

$$+ 2\beta[(x_1 - x_4)(1 - \xi) + 2(x_1 + x_4)(1 + \xi)\eta - (x_1 - x_4)(3 + \xi)\eta^2] \}$$

Für jedes Wertepaar (ξ, η) ergibt sich eine Geradengleichung. Sie ist so zu deuten, daß bei jeder Koordinate (α, β) , die die Geradengleichung (3.2) erfüllt, im Punkte $(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta))$ (siehe Gleichung (2.2)) eine Spannungssingularität vorliegt. Der zulässige Bereich wird dabei dadurch gekennzeichnet, daß keine Gerade aus (3.2) diesen Bereich durchläuft. Der Rand dieses Bereiches wird, wie in Anhang 2 gezeigt wird, durch die Geradenschar aus (3.2) mit $\xi = +1$ begrenzt (siehe

auch Abb.12), so daß die Grenzkurve sich als Integralkurve an diese Geraden ergibt. Wie Anhang 1 dargestellt, ergibt sich folgende Lösung:

1. Für $\alpha \geq 0$ wird der zulässige Bereich durch die beiden Geraden β_+ und β_- (siehe Gleichung (A1.6)) begrenzt, die sich aus Gleichung (3.2) für $\xi = +1, \eta = +1$ und $\xi = +1, \eta = -1$ ergeben. Sie laufen durch die Viertelpunktsposition bezüglich Knoten 3 und 2.
2. Die Geraden gehen an den Punkten $\vec{R}(+1)$ und $\vec{R}(-1)$ stetig in die Kurve aus Gleichung (A1.4) über

$$\vec{R}(\eta) = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}(\eta) \\ \tilde{\beta}(\eta) \end{pmatrix} ; \quad \eta \in [-1, +1]$$

3. Es können vier Element-Typen unterschieden werden (siehe Abb.6). Kriterium ist dabei die relative Lage des Schnittpunktes $\vec{R}_x = (\alpha_x, \beta_x)$ der beiden Geraden β_+ und β_- zum Punkte $\vec{R}_{\min} = (\alpha_{\min}, \beta_{\min})$ aus Gleichung (A1.9), an dem die Steigung der Geradengleichung (A1.1b) unendlich wird. (Der Index "min" wurde verwendet, weil in allen Fällen, in denen die Kurve (A1.4) zur Abgrenzung des zulässigen Bereiches verwendet werden muß, die Koordinate α minimal wird.)
 - a. Typ 1:
In diesem Fall gibt es keinen Schnittpunkt der Geraden β_+ und β_- , d.h. die Geraden sind parallel. Hier ist die Lage des Zwischenknoten für $\alpha \geq 0$ nicht begrenzt.
 - b. Typ 2:
In diesem Fall gilt $0 \leq \alpha_x < +\infty$. Bei diesem Typ ist die Lage des Zwischenknotens auch für $\alpha \geq 0$ begrenzt.
 - c. Typ 3:
Hier gilt $\alpha_x < \alpha_{\min}$. Hier ist die Lage des Zwischenknoten wie bei Typ 1 für $\alpha \geq 0$ nicht begrenzt. Der zulässige Bereich vergrößert sich sogar durch das kegelförmige Öffnen der Geraden β_+ und β_- .
 - d. Typ 4:
Dieser Typ ist durch die Bedingung $\alpha_{\min} \leq \alpha_x < 0$ festgelegt. In diesem Fall wird der zulässige Bereich, der sich wie für Typ 3 zu positivem α hin erweitert, nur durch die beiden Geraden β_+ und β_- begrenzt. In diesem Fall wird die Kurve $\vec{R}(\eta)$ nicht benötigt. (Hier liegt auch gerade der Fall vor, wo α_{\min} nicht das Minimum, sondern das Maximum bezüglich der Kurve ist.)

Somit ist es möglich, mit Hilfe der oben angegebenen Formel, jederzeit zu kontrollieren, ob sich der Zwischenknoten im zulässigen Bereich befindet. Es mag jedoch zweckmäßig sein, den zulässigen Bereich einzuschränken, weil man nicht an die Grenzen gehen will (auf der Grenzkurve liegen schon Singularitäten auf dem Elementrand vor) oder weil man die Abweichung vom quadratischen Ansatz für die Verschiebungen in (1.1) in Grenzen halten will. Für diesen Fall kann man

mit dem Kontrollparameter ε_c den zulässigen Bereich (oder Kontrollbereich) verkleinern, wobei folgende Ähnlichkeitstransformationen für Gleichung (A1.4) und (A1.6) verwendet werden.

$$\vec{R}'(\eta) = \varepsilon_c \vec{R}(\eta)$$

$$\beta'_+ = \frac{y_4 - y}{x_4} \alpha + \varepsilon_c \frac{y}{2} \quad ; \quad 0 < \varepsilon_c \leq 1 \quad (3.3)$$

$$\beta'_- = \frac{y_1 + y}{x_4} \alpha - \varepsilon_c \frac{y}{2}$$

Für $\varepsilon_c = 1$ ergeben sich die ursprünglichen Gleichungen, während im Grenzfall $\varepsilon_c \rightarrow 0$ die Begrenzungskurve auf die Zwischenposition des Zwischenknotens zusammengezogen wird (siehe Abb.7).

4. Programmstruktur der Zwischenknotenkontrolle und Korrekturstrategie

Die im Kapitel 3 angegebenen Formeln erlauben die Lage der Zwischenknoten nach jedem Wachstumszyklus zu kontrollieren. Diese Kontrolle wurde in das Programm für die Netzkorrektur eingebaut. Dort wird zunächst die Netzkorrektur wie üblich durchgeführt, d.h. es werden, wie bei den Viereckelementen mit vier Knoten, nur die Eckknoten berücksichtigt. Nach der Netzkorrektur der Eckknoten werden alle Zwischenknoten bis auf die Außenknoten der weichen Schicht auf die Mittelposition gesetzt. Im letzten Schritt muß nur noch überprüft werden, ob in den Elementen der weichen Schicht der Zwischenknoten an der Außenkontur in der Kontrollzone, die durch den Parameter ε_c festgelegt ist, liegt oder nicht. Dazu wird das zu untersuchende Element durch eine Translation mit folgender Rotation in die Basis transformiert, die in (3.1) angegeben ist. Nach Bestimmung des Element-Types liegt fest, wie die Kontrollzone begrenzt ist und die Überprüfung der Lage des Zwischenknotens wird vorgenommen. Liegt der Knoten innerhalb der Kontrollzone, wird zur Überprüfung des nächsten Elementes übergewechselt, liegt er außerhalb, wird er korrigiert. Die korrigierten Koordinaten werden durch die inverse Rotation und Translation wieder in die ursprüngliche Basis transformiert und ersetzen dann die alten Koordinaten.

Für die Knotenkorrektur muß ein weiterer Parameter ε_s definiert werden, der nach Gleichung (3.3) die "Setzkurve" festlegt, auf die der Zwischenknoten zurückgesetzt werden soll, wenn er außerhalb der Kontrollzone liegt. In diesem Fall wird der Knoten auf den Punkt zurückgesetzt, der sich als Schnittpunkt der "Setzkurve" mit der Geraden durch die unkorrigierten Koordinaten und der Mittelposition des Zwischenknotens ergibt (siehe Abb.8). Die Einführung eines zusätzlichen Parameters zur Definition der "Setzkurve" ist sinnvoll und notwendig, weil bei $\varepsilon_c = 1$ schon Singularitäten am Elementrand auftreten und somit die begrenzende Kurve des Kontrollbereiches ("Kontrollkurve") schon nicht mehr zulässig ist. Der Knoten muß somit etwas weiter zurückgesetzt werden, was beispielsweise mit $\varepsilon_s = 0.99$ der Fall wäre. Dabei sollten die Werte von ε_c und ε_s sinnvollerweise immer eng beieinander liegen, um die Zone zwischen "Kontrollkurve" und "Setzkurve" möglichst gering zu halten. (Die Werte für ε_s und ε_c in Abb.8 sind für die Praxis nicht sinnvoll und wurden nur gewählt, um die Korrektur und den Unterschied zwischen "Kontrollkurve" und "Setzkurve" optisch hervorzuheben.) Prinzipiell können die Werte für ε_c und ε_s bei $\varepsilon_c < 1$ gleichgesetzt werden. Da jedoch die Korrektur auch schon vorgenommen wird, wenn der Zwischenknoten auf der "Kontrollkurve" liegt, würde bei Gleichsetzung von ε_c und ε_s der Zwischenknoten eines Elementes, wenn er einmal zurückgesetzt werden mußte, nach jedem Wachstumszyklus immer wieder als korrekturbedürftig angesehen werden, auch wenn er seine Lage nicht verändert hat und auch bei der Korrektur nicht ändern würde. Dies hat zwar keine negativen Konsequenzen, jedoch wird dem Benutzer, der in der Ausgabe des Programmes über die vorgenommenen Korrekturen informiert wird, ein falsches Bild darüber vermittelt, welche Elemente wirklich auf Grund von Verschiebungen der Zwischenknoten korrigiert werden mußten. Es ist deswegen immer sinnvoll ε_s etwas kleiner als ε_c zu wählen.

Um einen statistischen Überblick über die Lage der Zwischenknoten der weichen Schicht in dem Modell zu erhalten, ist es möglich mit den Parametern ε_i ($i = 1, \dots, 5$) bis zu fünf statistische Zonen

festzulegen. Die Programmausgabe enthält dann die Angabe, bei wievielen und welchen Elementen sich die Zwischenknoten in welcher statistischen Zone befinden.

5. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde das CAO-Verfahren auf die Verwendung von Viereckelementen mit acht Knoten erweitert. Dazu wurde zunächst der zulässige Bereich bestimmt, in dem sich der äußere Zwischenknoten eines Elementes aus der Wachstumsschicht aufhalten kann, ohne daß innerhalb des Elementes eine Singularität in den Spannungen auftreten kann. Dieses erlaubt wiederum, den Zwischenknoten auf seine Position hin zu kontrollieren und gegebenenfalls zu korrigieren. Die Kontrolle, bei der der zulässige Bereich für den Zwischenknoten vom Benutzer zusätzlich eingeschränkt werden kann, und die Korrekturmöglichkeit wurden in dem Programm zur Netzkorrektur implementiert, so daß die Handhabung des CAO-Verfahrens für den Anwender unverändert blieb.

Das CAO-Verfahren mit Viereckelementen mit acht Knoten wurde bisher an drei Beispielen erfolgreich erprobt. Bei diesen traten keinerlei Schwierigkeiten auf, obwohl es sich um Kontaktprobleme handelte, die besonders schwierig zu bearbeiten sind. So ist zu erwarten, daß sich die Elemente mit quadratischem Ansatz auch bei zukünftigen Rechnungen problemlos einsetzen lassen.

Ob man in Zukunft das CAO-Verfahren auch auf Hexaeder-Elemente mit quadratischem Ansatz erweitert, wird natürlich davon abhängen, wie sich der 2-dimensionale Fall bewährt. Prinzipiell ist eine Erweiterung möglich, wobei die Herleitung des zulässigen Bereiches auf die gleiche Weise erfolgen kann wie im 2-dimensionalen Fall. Jedoch hat im 3-dimensionalen Fall jedes Element der Wachstumsschicht, auch wenn man alle innenliegenden Zwischenknoten auf die Mittelposition setzt, immer vier Außenknoten, die kontrolliert werden müssen. Die Formel für den zulässigen Bereich wird dadurch komplexer, da sie von der Lage jedes der vier Zwischenknoten abhängt. Weiterhin ist unklar, welcher bzw. welche der Knoten beim Überschreiten des zulässigen Bereiches korrigiert werden sollen und auf welche Art. Verkompliziert wird die Lage noch durch die Tatsache, daß jeder der vier Zwischenknoten auch Zwischenknoten der jeweiligen Nachbarelemente ist. Korrigiert man in einem Element einen Zwischenknoten, verändert damit gleichzeitig den zulässigen Bereich im Nachbarelement, so daß dieses nochmals kontrolliert und eventuell auch korrigiert werden muß.

Natürlich ist die einfache Lösung immer möglich, nach jedem Wachstumszyklus alle Zwischenknoten auf die Mittelposition zu setzen. In diesem Fall hat man zwar einen quadratischen Ansatz für die Verschiebungsfunktionen, jedoch gibt man den Vorteil der besseren Konturenmodulation auf (wie in der Einleitung dargelegt). Dennoch ist es vorstellbar, daß diese einfache Korrektur ausreichend und zufriedenstellend sein könnte. So scheint sich bei den bisher durchgeführten Testrechnungen anzudeuten, daß die Zwischenknoten im allgemeinen keine große Tendenz zeigen, sich weit von ihrer Mittelposition und damit aus dem zulässigen Bereich zu entfernen. Nur an den Stellen mit großen Spannungsgradienten, wie sie beispielsweise nahe von Kontaktstellen auftreten, verlassen die Zwischenknoten den zulässigen Bereich und müssen korrigiert werden. Gerade Kontaktprobleme sind jedoch im 3-dimensionalen Fall sowieso nur begrenzt behandelbar. Schließt man diese aus, kann man davon ausgehen, daß große Spannungsgradienten nur in Ausnahmefällen auftreten und die Zwischenknoten somit in dem erlaubten Bereich bleiben. Wird

dieses Verhalten durch weitere Testrechnungen bestätigt, könnte man sich im 3-dimensionalen Fall mit einer Kontrolle der Zwischenknoten zufrieden geben. Sollte wirklich einmal der Fall auftreten, daß einmal der zulässige Bereich verlassen wird, würde als einfachste Korrektur ein Zurücksetzen der Knoten auf die Mittelposition genügen.

Zusammenfassend kann man sagen, daß jetzt die Voraussetzungen vorhanden sind das CAO-Verfahren mit Viereckelementen mit acht Knoten zu erproben. Die Ergebnisse der Untersuchungen werden darüber entscheiden, ob eine Erweiterung auf Hexagonal-Elemente mit quadratischem Ansatz wünschenswert und mit geringem Aufwand möglich ist.

6. Literatur

- [1] C. Mattheck, 'Design and Growth Rules for Biological Structures and their Application to Engineering', *Fatigue Fract. Engng. Mater. Struct.* Vol 13 Nr.5 (1990), 535-550
- [2] C. Mattheck, 'Engineering components grow like trees', *Mat.-wiss. u. Werkstofftech.* 21 (1990), 143-168
- [3] C. Mattheck and S. Burkhardt, 'A New Method of Structural Shape Optimization on the Basis of Biological Growth', *Int. J. Fatigue* 12 Nr.3 (1990), 185-190 (1990)
- [4] C. Mattheck and H. Moldenhauer, 'Intelligent CAO-Method Based on Biological Growth.', *Fatigue Fract. Engng. Mater. Struct.* 13 (1990), 41-51
- [5] C. Mattheck, 'Computer Aided Optimization - Engineering Components Grow like Trees into an Optimized Shape without Notch Stresses', *Information Brochure of the Karlsruhe Nuclear Research Center* (1989) (available from the authors)
- [6] Hibbitt, Karlsson and Sorensen, 'ABAQUS', User-Manual , Providence, Rhode Island (1985)
- [7] R. S. Barsoum, 'On the Use of Isoparametric Finite Elements in Linear Fracture Mechanics', *Int. J. Num. Meth. Engng* 10 (1976), 25-37
- [8] R. D. Henshell and K.G. Shaw, 'Crack Tip Finite Elements are unnecessary', *Int. J. Num. Meth. Engng* 9 (1975), 495-507
- [9] L. Harzheim and C. Mattheck, 'Die mechanische Steuerung der Jahresringformation bei Baumkontakten', *KfK-Bericht* 4951 (1991)
- [10] T. Fleig, 'Computervorhersage von Jahresringformationen', *Diplomarbeit am Institut für Zuverlässigkeit und Schadenskunde im Maschinenbau der Universität Karlsruhe* (1991)
- [11] C. Mattheck and L. Harzheim, 'Effect of Loading on the Optimized Shape of a Kinked Bar', *Mat.-wiss. u. Werkstofftech.* 22 (1991), 236-244
- [12] O. C. Zienkiewicz, 'The Finite Element in Engineering Science', McGraw-Hill, London (1971)
- [13] K.-J. Bathe, 'Finite-Elemente-Methoden', Springer, Berlin (1986)
- [14] T. J. Hughes, 'The Finite Element Method', Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall (1987)
- [15] H. R. Schwarz, 'Methode der finiten Elemente', B. G. Teubner, Stuttgart (1984)
- [16] C. Mattheck and H. Moldenhauer, unveröffentlichter Bericht, Kernforschungszentrum Karlsruhe (1987)

7. Anhang A1

In diesem Anhang wird die Formel für die Grenzkurve und deren Eigenschaften hergeleitet. Dabei wird vorausgesetzt, daß die erlaubte Zone durch die Geradenschar aus Gleichung (3.1) für $\xi = +1$ begrenzt wird. Daß dies zutrifft, wird in Anhang A2 bewiesen (siehe auch Abb.12).

Die Geradenschar aus Gleichung (3.2) als Funktion von η bei $\xi = +1$ lautet nach α bzw. β aufgelöst

$$\alpha = s_{\alpha}(\eta) \beta + m_{\alpha}(\eta) \quad (\text{A1.1a})$$

$$\beta = s_{\beta}(\eta) \alpha + m_{\beta}(\eta) \quad (\text{A1.1b})$$

mit

$$s_{\alpha}(\eta) = - \frac{c_1 \eta + c_2 \eta^2}{b_0 + b_1 \eta + b_2 \eta^2}$$

$$m_{\alpha}(\eta) = - \frac{a_0 + a_1 \eta}{b_0 + b_1 \eta + b_2 \eta^2}$$

$$s_{\beta}(\eta) = - \frac{b_0 + b_1 \eta + b_2 \eta^2}{c_1 \eta + c_2 \eta^2}$$

$$m_{\beta}(\eta) = - \frac{a_0 + a_1 \eta}{c_1 \eta + c_2 \eta^2}$$

und

$$a_0 = -4y(x_1 + x_4)$$

$$a_1 = 4y(x_1 - x_4)$$

$$b_0 = 8y$$

$$b_1 = -8(y_1 + y_4)$$

$$b_2 = 8(y + y_1 - y_4)$$

$$c_1 = 8(x_1 + x_4)$$

$$c_2 = 8(x_4 - x_1)$$

Die gesuchte Grenzkurve ist gerade die Kurve, zu der die Geraden aus Gleichung (A1.1) Tangenten sind. Zu jeder Geraden aus (A1.1) muß also der Berührungspunkt an die Kurve bestimmt werden. Dazu betrachten wir zwei benachbarte Geraden aus Gleichung (A1.1a) (siehe Abb.9)

$$\alpha_1 = s_{\alpha}(\eta)\beta + m_{\alpha}(\eta)$$

$$\alpha_2 = s_\alpha(\eta + \varepsilon)\beta + m_\alpha(\eta + \varepsilon)$$

deren Schnittpunkt gegeben ist durch

$$\beta_x = - \frac{m_\alpha(\eta + \varepsilon) - m_\alpha(\eta)}{s_\alpha(\eta + \varepsilon) - s_\alpha(\eta)} \quad (\text{A1.2})$$

Im Grenzfall $\varepsilon \rightarrow 0$ erhält man den gesuchten Berührungspunkt $\tilde{\beta}(\eta)$ als Funktion von η . Erweitert man (A1.2) mit $1/\varepsilon$ und nützt man aus, daß der Grenzwert eines Quotienten gleich dem Quotienten der Grenzwerte ist, wenn alle beteiligten Grenzwerte existieren, erhält man

$$\tilde{\beta}(\eta) = - \frac{\frac{dm_\alpha}{d\eta}}{\frac{ds_\alpha}{d\eta}} \quad (\text{A1.3a})$$

Entsprechend ergibt sich die Bestimmungsgleichung für $\tilde{\alpha}(\eta)$ aus Gleichung (A1.1b).

$$\tilde{\alpha}(\eta) = - \frac{\frac{dm_\beta}{d\eta}}{\frac{ds_\beta}{d\eta}} \quad (\text{A1.3b})$$

Man erhält Gleichung (A1.3a) auch, indem man Gleichung (A1.1a) bei festem β betrachtet und das Extremum bezüglich η sucht. Dies führt auf die Bedingung

$$0 = \frac{ds_\alpha}{d\eta} \tilde{\beta} + \frac{dm_\alpha}{d\eta}$$

und dieses wiederum zu Gleichung (A1.3a). Gleichermaßen kann man auch Gleichung (A1.3b) auf diese Art herleiten.

Verwendet man Gleichung (A1.3a) und (A1.3b), erhält man die gesuchte Grenzkurve in der Parameterdarstellung bezüglich η

$$\vec{R}(\eta) = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}(\eta) \\ \tilde{\beta}(\eta) \end{pmatrix} ; \quad \eta \in [-1, +1] \quad (\text{A1.4})$$

mit

$$\tilde{\alpha}(\eta) = \frac{-a_0c_1 - 2a_0c_2\eta - a_1c_2\eta^2}{b_0c_1 + 2b_0c_2\eta + (b_1c_2 - b_2c_1)\eta^2}$$

$$\tilde{\beta}(\eta) = - \frac{a_1b_0 - a_0b_1 - a_0b_2\eta - a_1b_2\eta^2}{b_0c_1 + 2b_0c_2\eta + (b_1c_2 - b_2c_1)\eta^2}$$

Die Umkehrfunktionen sind gegeben durch

$$\eta_2(\tilde{\alpha}) = -\frac{1}{2} \frac{f_1 - \tilde{\alpha}e_1}{f_2 - \tilde{\alpha}e_2} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4(f_0 - \tilde{\alpha}e_0)(f_2 - \tilde{\alpha}e_2)}{(f_1 - \tilde{\alpha}e_1)^2}} \right) \quad (\text{A1.5a})$$

$$\eta_2(\tilde{\beta}) = -\frac{1}{2} \frac{d_1 + \tilde{\beta}e_1}{d_2 + \tilde{\beta}e_2} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4(d_0 + \tilde{\beta}e_0)(d_2 + \tilde{\beta}e_2)}{(d_1 + \tilde{\beta}e_1)^2}} \right) \quad (\text{A1.5b})$$

mit

$$d_0 = a_1b_0 - a_0b_1$$

$$d_1 = -2a_0b_2$$

$$d_2 = -a_1b_2$$

$$e_0 = c_1b_0$$

$$e_1 = 2c_2b_0$$

$$e_2 = c_2b_1 - c_1b_2$$

$$f_0 = -a_0c_1$$

$$f_1 = -2a_0c_2$$

$$f_2 = -a_1c_2$$

Aus Gleichung (A1.1) ergeben sich für $\eta = +1$ und $\eta = -1$ die beiden Grenzgeraden β_+ und β_-

$$\beta_+ = \frac{y_4 - y}{x_4} \alpha + \frac{y}{2} \quad (\text{A1.6a})$$

$$\beta_- = \frac{y_1 + y}{x_1} \alpha - \frac{y}{2} \quad (\text{A1.6b})$$

Beide Geraden gehen an den Punkten $\vec{R}(+1)$ und $\vec{R}(-1)$ in die Kurve $\vec{R}(\eta)$ über.

Wir zeigen nun, daß $\tilde{\alpha}(\eta = +1) < 0$ gilt. Nach Gleichung (A1.4) ergibt sich

$$\tilde{\alpha}(+1) = \frac{1}{4} \frac{x_4^2 y}{yx_4 - yx_1 - y_1x_4 + y_4x_1}$$

Da y definitionsmäßig größer als Null ist, muß nur noch gezeigt werden, daß der Nenner kleiner Null ist.

$$yx_4 - yx_1 - y_1x_4 + y_4x_1 < 0 \quad (\text{A1.7a})$$

Dieses ist aber durch die Bedingung erfüllt, daß keine Knotendurchdringungen auftreten sollen, denn diese führt bei der getroffenen Basiswahl folgende Ungleichungen ein

$$2F_1 > 0 \quad \text{wobei} \quad 2F_1 \vec{e}_3 = \vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = -x_1 y$$

$$2F_2 > 0 \quad \text{wobei} \quad 2F_2 \vec{e}_3 = \vec{r}_3 \times \vec{r}_4 = -x_4 y \quad (\text{A1.7b})$$

$$2F_3 > 0 \quad \text{wobei} \quad 2F_3 \vec{e}_3 = \vec{r}_4 \times \vec{r}_1 = x_4 y_1 - x_1 y_4$$

wobei $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3$ und \vec{r}_4 jeweils die Ortsvektoren zu Knoten 1, 2, 3 und 4 sind. Dabei können F_1, F_2 und F_3 geometrisch als Fläche der in Abb.10 eingetragenen Dreiecke interpretiert werden. Mit der obigen Bezeichnung lautet (A1.7a)

$$F_1 < F_2 + F_3 \quad (\text{A1.8})$$

Dieses ist aber immer erfüllt, da im Grenzfall, wenn Knoten 1 und 4 zusammenfallen, offensichtlich $F_3 = 0$ und damit $F = F_2 = F_1$ gilt (siehe Abb.10). Für alle anderen Fälle, bei denen keine Durchdringung der Knoten stattfindet, ist $F < F_1 + F_3$, so daß Gleichung (A1.8) und damit (A1.7a) immer erfüllt ist. Für den Fall $\eta = -1$ erhält man die Ungleichung

$$F_2 < F_1 + F_3$$

die aus den gleiche Gründen, wie oben, immer erfüllt ist. Somit ist der zulässige Bereich für $\alpha > 0$ durch die beiden Geraden β_+ und β_- begrenzt, die zudem immer jeweils durch die Viertelpunktsposition bezüglich Knoten 3 und 2 laufen, wie es zu erwarten war.

Der Wert für $\tilde{\alpha}$ der Kurve $\vec{R}(\eta)$ wird minimal, wenn die Steigung der Geraden aus Gleichung (A1.1a) Null wird. Dies ist der Fall bei $\eta = 0$, so daß sich ergibt

$$\alpha_{\min} = \frac{x_1 + x_4}{2} \quad (\text{A1.9a})$$

mit dem dazugehörigen Wert

$$\beta_{\min} = - \frac{a_1 b_0 - a_0 b_1}{c_1 b_0} \quad (\text{A1.9b})$$

Prinzipiell könnte natürlich bei $\eta = 0$ auch ein Maximum oder ein Wendepunkt bezüglich α vorliegen. Dies würde den Kurvenformen entsprechen, wie sie in Abb.11 dargestellt sind. Diese können jedoch nicht auftreten, da es in beiden Fällen eine Tangente gibt, die durch die Mittelposition von Knoten 6 laufen. Diese Knotenposition ist jedoch nach Voraussetzung zulässig ($\det |J| > 0$) und darf somit nicht von einer Geraden aus (A1.1) berührt werden.

Eine Ausnahme liegt beim Element-Typ 4 vor (siehe Kapitel 3 und Abb.6), wenn für den Schnittpunkt (α_x, β_x) der beiden Geraden β_+ und β_- gilt:

$$\alpha_{\min} < \alpha_x < 0$$

In diesem Fall liegt bei α_{\min} ein Maximum vor. Jedoch ist in diesem Fall der erlaubte Bereich allein durch die beiden Geraden β_+ und β_- begrenzt, so daß die Kurve $\vec{R}(\eta)$ zur Abgrenzung des erlaubten Gebietes G nicht benötigt wird. Schließt man diesen Fall aus, so können nur Kurvenformen vom Typ 1, 2 und 3 auftreten, bei denen das Geradenstück β_+ mit $\alpha > \alpha(\eta = +1)$ bzw. β_- mit $\alpha > \alpha(\eta = -1)$ an den Punkten $\vec{R}(+1)$ bzw. $\vec{R}(-1)$ stetig differenzierbar in die Kurve $\vec{R}(\eta)$ über-

gehen. Der obere und untere Teil der Kurve konvergiert für $\eta \rightarrow 0$ gleichmäßig gegen $\bar{R}_{\min} = (\alpha_{\min}, \beta_{\min})$.

Weiterhin ist die Kurve für $\tilde{\beta} > \beta_{\min}$ streng konkav, dagegen bei $\tilde{\beta} < \beta_{\min}$ streng konvex. Dies ist leicht einzusehen, wenn man einige Eigenschaften der Funktion β aus Gleichung (A1.1b) untersucht. Die Funktion wird singular bei $\eta = 0$ und strebt dort im Bereich $\eta \geq 0$ gegen $+\infty$ und im Bereich $\eta \leq 0$ gegen $-\infty$. Dies kann man beispielsweise für den Bereich $\eta \geq 0$ leicht zeigen, indem wir die Umgebung der Singularität bei $\eta = 0$ betrachten. Dazu setzen wir $\eta = \varepsilon$ mit $\varepsilon > 0$, setzen dies in (A1.1b) ein und vernachlässigen die quadratischen Terme. Da nach der verwendeten Basiswahl und der Wahl von ε für den Nenner in (A1.1b) gilt $(x_1 + x_4)\varepsilon < 0$, ist die Behauptung erfüllt, wenn man zeigt, daß der Zähler im Grenzfall negativ ist, also

$$0 > -4(y - (y_1 + y_4)\varepsilon)\alpha + 2y(x_1 + x_4 - (x_1 - x_4)\varepsilon)$$

aus dem sich im Grenzfall $\varepsilon \rightarrow 0$ ergibt

$$\alpha > \frac{x_1 + x_4}{2} = \alpha_{\min}$$

was nach Gleichung (A1.9a) erfüllt ist. Entsprechendes Vorgehen im Bereich $\eta \leq 0$ führt zur selben Ungleichung, womit dieser Punkt bewiesen wäre.

Nach Gleichung (A1.4) und (A1.5) muß, wenn für $\eta(\alpha)$ zwei Lösungen im Einheitsquadrat vorliegen, eine immer größer und eine immer kleiner Null sein. Aus der Art der Singularitäten bei $\eta = 0$ folgt dann, daß an diesen Stellen bei $\xi = +1$ im Gebiet $\eta < 0$ ein Maximum, im Gebiet $\eta > 0$ dagegen ein Minimum von β vorliegen muß. (Die gesuchte Grenzkurve wurde ja gerade über Gleichung (A1.3b) aus den Extrema von β beim festen α und $\xi = +1$ bestimmt). Dies bedeutet aber wieder, daß die Kurve für $\tilde{\beta} > \beta_{\min}$ streng konkav, dagegen bei $\tilde{\beta} < \beta_{\min}$ streng konvex ist.

8. Anhang A2

In diesem Anhang wird bewiesen, daß die Tangenten für $\xi = +1$ aus Gleichung (3.2) den erlaubten Bereich begrenzen (siehe auch Abb.12). Wir zeigen zuerst, daß die Kurve aus Gleichung (A1.4) die Grenzkurve darstellt.

Wir betrachten die Funktion $\beta(\alpha, \xi, \eta)$, die sich aus (3.2) ergibt

$$\beta(\alpha, \xi, \eta) = - \frac{b_0^\xi + b_1^\xi \eta + b_2^\xi \eta^2}{c_0^\xi + c_1^\xi \eta + c_2^\xi \eta^2} \alpha - \frac{a_0^\xi + a_1^\xi \eta}{c_0^\xi + c_1^\xi \eta + c_2^\xi \eta^2} \quad (\text{A2.1})$$

mit

$$a_0^\xi = (x_4 y_1 - x_1 y_4)(1 - \xi) - (x_1 + x_4)y(1 + \xi)$$

$$a_1^\xi = 2(x_1 - x_4)y$$

$$b_0^\xi = (y_4 - y_1)(1 - \xi) + 2y(1 + \xi)$$

$$b_1^\xi = -2(y_4 + y_1)(1 + \xi)$$

$$b_2^\xi = 2y(\xi + 1) - (y_4 - y_1)(3 + \xi)$$

$$c_0^\xi = (x_1 - x_4)(1 - \xi)$$

$$c_1^\xi = 2(x_1 + x_4)(1 + \xi)$$

$$c_2^\xi = -(x_1 - x_4)(3 + \xi)$$

Diese Funktion fassen wir als alleinige Funktion von ξ und η auf, indem wir sie bei einem beliebigen aber festem α betrachten (Abb.13). Da nach (A1.9) die Grenzkurve bei $\alpha_{\min} = (x_1 + x_4)/2$ nach unten begrenzt ist, lassen wir auch nur Werte $0 > \alpha > \alpha_{\min}$ zu. Die Einschränkung auf $\alpha > \alpha_{\min}$ bedeutet in anderen Worten, daß wir uns bei der Kurve nur auf die Element-Typen 1-3 beschränken. Dies ist auch sinnvoll, da beim Element-Typ 4 der zulässige Bereich nur durch die beiden Geraden β_+ und β_- begrenzt ist. Es sei jedoch darauf hingewiesen, daß die nachfolgenden Eigenschaften bezüglich der Geradenschar auch für den Element-Typ 4 gelten.

In den Beweisen verwenden wir die Bezeichnung

$$x_4 = \lambda x_1 \quad ; \quad \lambda > 0 \quad (\text{A2.2})$$

und werden alle Eigenschaften nur für den Fall $\lambda \leq 1$ zeigen. Aus Symmetriegründen müssen dann auch alle Eigenschaften für $\lambda \geq 1$ gelten.

Wir werden sukzessiv zeigen, daß die Funktion $\beta|_{\alpha=\text{const.}}$ aus (A2.1) folgende Eigenschaften besitzt:

1. Die Funktion besitzt eine Singularität, die das Einheitsquadrat in zwei Gebiete teilt (siehe Abb.13). Für $\xi = +1$ liegt die Singularität, wie schon in Anhang A1 gezeigt, immer bei $\eta = 0$. (Wir nennen im folgenden den Bereich, in dem der Punkt $(\eta = -1, \xi = +1)$ liegt, das Gebiet 1, dagegen das Gebiet in dem Punkt $(\eta = +1, \xi = +1)$ liegt, das Gebiet 2).
2. Die Funktion β ist im Gebiet 1 und Gebiet 2 monoton entlang der Richtungen $\eta = const.$ (meistens sogar streng monoton).
3. Die Funktion ist im Gebiet 1 streng monoton steigend bezüglich ξ . Im Gebiet 2 ist β für ein festes η (streng) monoton fallend oder (streng) monoton steigend bezüglich ξ , jedoch ist das Minimum für $\xi = +1$ der absolut kleinste Wert im Gebiet 2.

In Anhang A1 wurde gezeigt, daß die Grenzkurve bei $\xi = +1$ als Maximum in Gebiet 1 und als Minimum im Gebiet 2 gegeben ist. Diese Kurve ist demnach auch Grenzkurve bezüglich aller Geraden, wenn das Maximum der größte Wert von β im gesamten Gebiet 1 und das Minimum der kleinste Wert im gesamten Gebiet 2 sind. Dies folgt jedoch direkt aus Eigenschaft 3, womit die Behauptung bewiesen wäre.

Beweis zu:

1. Da Steigung und Achsenabschnitt in (A2.1) den gleiche Nenner haben, besitzt die Funktion β , unabhängig von α , eine Singularität, wenn gilt

$$(1 - \lambda)x_1(1 - \xi) + 2(1 + \lambda)x_1(1 + \xi)\eta - (1 - \lambda)x_1(3 + \xi)\eta^2 = 0 \quad (\text{A2.3})$$

Es sind zwei Fälle zu unterscheiden:

- a. $\lambda < 1$

In diesem Fall ergibt sich der Verlauf der Singularität, indem man (A2.3) nach η auflöst

$$\eta_{1,2}(\xi) = \frac{1 + \lambda}{1 - \lambda} \frac{1 + \xi}{3 + \xi} \pm \sqrt{\left(\frac{1 + \lambda}{1 - \lambda} \frac{1 + \xi}{3 + \xi}\right)^2 + \frac{1 - \xi}{3 + \xi}} \quad (\text{A2.4})$$

Für die Funktion η_1 geht die Singularität bei $\xi = +1$ immer durch

$$\eta_1(+1) = 0$$

Bei $\xi = -1$ läuft sie durch

$$\eta_1(-1) = -1$$

Sie besitzt eine Asymtote bei

$$\eta_1(\xi) \xrightarrow{\xi \rightarrow \pm \infty} \eta_{A_1} = \frac{1 + \lambda}{1 - \lambda} - \sqrt{\left(\frac{1 + \lambda}{1 - \lambda}\right)^2 - 1} \quad (\text{A2.5a})$$

Weiterhin liegt bei ihr selber eine Singularität bei $\xi = -3$ vor, bei der die Funktion η_1 von $-\infty$ auf ∞ springt $(1 - \lambda)/(1 + \lambda)$ wenn man sich von $\xi = 0$ der Singularität nähert.

Dagegen hat η_2 eine Asymtote bei

$$\eta_2(\xi) \xrightarrow{\xi \rightarrow +\infty} \eta_{A_2} = \frac{1+\lambda}{1-\lambda} + \sqrt{\left(\frac{1+\lambda}{1-\lambda}\right)^2 - 1} \quad (\text{A2.5b})$$

und springt bei $\xi = -3$ von $(1-\lambda)/(1+\lambda)$ auf $+\infty$, wenn man sich von $\xi = 0$ der Singularität nähert.

Der Verlauf der Singularität ist in Abb.14 für zwei Fälle dargestellt.

b. $\lambda = 1$

In diesem Fall liegen die Singularitäten auf der Geraden $\eta = 0$ und $\xi = -1$, wie man unschwer aus Formel (A2.1) erkennen kann.

2. Um zu beweisen, daß die Funktion β aus (A2.1) im Gebiet 1 und Gebiet 2 (streng) monoton entlang der Richtungen $\eta = \text{const.}$ ist, bilden wir die partielle Ableitung von β nach ξ .

$$\frac{\partial \beta}{\partial \xi} = \frac{S(\eta)\alpha + B(\eta)}{(c_0^\xi + c_1^\xi \eta + c_2^\xi \eta^2)^2} \quad (\text{A2.6})$$

mit

$$S(\eta) = -4(x_1 - x_4)y(1 - \eta^4) - 8(y_4x_1 - y_1x_4)(\eta^3 - \eta)$$

$$B(\eta) = 2(x_1^2 - x_4^2)y - 2(2(y_4x_1 - y_1x_4)(x_1 + x_4) + (x_1 - x_4)^2y)\eta + 2((x_1^2 - x_4^2)y + 2(y_4x_1 - y_1x_4)(x_1 - x_4))\eta^2 - 2(x_1 - x_4)^2y\eta^3$$

Da der Nenner immer endlich ist und sowohl S wie auch B nicht von ξ abhängen, kann die partielle Ableitung von β nach ξ nur dann Null werden, wenn es ein η_0 gibt, daß

$$S(\eta_0)\alpha + B(\eta_0) = 0 \quad (\text{A2.7})$$

erfüllt. Dann wäre die Steigung auf der gesamten Geraden $\eta = \eta_0$ Null und β nur monoton bezüglich ξ . Sonst ist β streng monoton bezüglich ξ .

3. Wir unterscheiden wieder zwei Fälle.

a. $\lambda < 1$

Wie unter Punkt 1 gezeigt, läuft in diesem Fall die Singularität im Einheitsquadrat schräg vom Punkt $(\xi = +1, \eta = 0)$ zum Punkt $(\xi = -1, \eta = -1)$ (siehe auch Abb.13,14). Wir zeigen zuerst, daß β im Gebiet 1 streng monoton steigend ist. Dies ist nach Gleichung (A2.6) der Fall, wenn gilt

$$S(\eta)\alpha + B(\eta) > 0 \quad ; \quad \eta \in [-1, 0) \quad (\text{A2.8})$$

Bei $\eta = -1$ ist $S(-1) = 0$ und Gleichung (A2.8) ist wegen $B > 0$ erfüllt. Für $\eta \in (-1, 0)$ gilt $S(\eta) > 0$. Berücksichtigt man dieses, erhält man nach Einsetzen der Koeffizienten in Gleichung (A2.8)

$$\alpha > \frac{x_1(1+\lambda)}{2} \tau \quad (\text{A2.9a})$$

mit

$$T = \frac{-x_1 y (1-\lambda)(1+\eta^2) + x_1 y (1-\lambda)(\eta+\eta^3) - 4F_3 \eta + 4F_3 \frac{1-\lambda}{1+\lambda} \eta^2}{-x_1 y (1-\lambda)(1-\eta^4) + 4F_3(\eta^3 - \eta)} \quad (\text{A2.9b})$$

Dabei wurde die Größe F_3 aus Gleichung (A1.7b) verwendet, welche immer positiv ist. Es ist nur noch zu zeigen, daß gilt

$$T > 1 \quad (\text{A2.10})$$

Einsetzen von T in Gleichung (A2.10) liefert

$$-x_1 y (1-\lambda)(\eta^2 + \eta^4 - \eta - \eta^3) + 4F_3 \frac{1-\lambda}{1+\lambda} \eta^2 - 4F_3 \eta^3 > 0$$

was nach Wahl der Basis und für $\eta \in (-1,0)$ immer erfüllt ist. Somit ist gezeigt, daß β im Gebiet 1 streng monoton steigend ist und somit für $\eta < 0$ alle Geraden mit $\xi < +1$ außerhalb des zulässigen Bereichs liegen.

Der Beweis wäre abgeschlossen, wenn man für das Gebiet 2 zeigen könnte, daß β dort immer monoton fallend ist. Dies ist aber nicht der Fall (siehe auch Abb.13), da - wie oben bewiesen - zumindestens für $\eta < 0$ die Funktion β streng monoton steigend bezüglich ξ ist. Da zudem β beim Punkte ($\xi = -1, \eta = +1$) gegen $+\infty$ strebt, ist β in diesem Bereich streng monoton fallend bezüglich ξ .

Es genügt jedoch zu zeigen, daß im Gebiet 2 alle Werte von β für $\xi = -1$ größer oder gleich dem Minimum bezüglich η für $\xi = +1$ sind. Wegen der Monotonie müssen dann auch alle anderen Werte von β für $\xi \in (-1, +1)$ größer oder gleich dieses Minimums sein und die Behauptung wäre damit bewiesen.

Zum Beweis betrachten wir zunächst die Funktion β aus Gleichung (A2.1) bei $\xi = -1$ und erhalten

$$\beta = s_- \alpha + m(\eta) \quad (\text{A2.11})$$

mit

$$s_- = -\frac{y_4 - y_1}{x_1 - x_4}$$

$$m(\eta) = -\frac{x_4 y_4 - x_1 y_4 + (x_1 - x_4) y \eta}{(x_1 - x_4)(1 - \eta^2)}$$

Hier haben alle Geraden die gleiche Steigung und unterscheiden sich nur im Achsenabschnitt $m(\eta)$ (siehe auch Abb.12). Dieser wird im Intervall $\eta \in [-1, +1]$ minimal bei dem Wert

$$\eta_{\min} = -\frac{2F_3}{x_1(1-\lambda)y} - \sqrt{\left(\frac{2F_3}{x_1(1-\lambda)y}\right)^2 - 1} \quad (\text{A2.12})$$

der für $\lambda < 1$ immer positiv ist.

Wir suchen jetzt von allen Geraden mit $\xi = +1$ aus Gleichung (A1.1b) diejenige mit der Steigung s_- heraus.

$$s_{\beta}(\eta_+) = s_- = -\frac{y_4 - y_1}{x_1 - x_4}$$

Aufgelöst nach η_+ ergibt sich gerade

$$\eta_+ = \eta_{\min}$$

also der gleiche Wert, bei dem der Achsenabschnitt der Geraden mit $\xi = -1$ minimal wird. Hier muß also wegen der Monotonie gelten

$$\frac{\partial \beta}{\partial \xi}(\eta_{\min}) = 0$$

Setzen wir $\eta = \eta_{\min}$ in die Achsenabschnitte der Geraden für $\xi = +1$ und $\xi = -1$ ein und verwenden die Rekursionsformel

$$\eta^2 = \frac{-4F_3}{x_1(1-\lambda)y} \eta - 1$$

welche sich aus Gleichung (A2.12) ergibt, so erhalten wir

$$m_{\beta}(\eta_{\min}) = m(\eta_{\min})$$

Beide Geraden sind also identisch. Die Gerade mit $\xi = -1$ und $\eta = \eta_{\min}$ ist also auch Tangente an die Grenzkurve und wegen der Monotonie sogar alle Geraden mit $\eta = \eta_{\min}$ (siehe auch Abb.12). Da jedoch alle anderen Geraden mit $\xi = -1$ und $\eta \neq \eta_{\min}$ einen größeren Achsenabschnitt haben und die Grenzkurve streng konvex ist, liegen sie immer außerhalb des zulässigen Gebietes. Somit ist β bei $\xi = -1$ immer größer oder gleich dem Minimum von β bei $\xi = +1$ und die Behauptung ist damit bewiesen.

b. $\lambda = 1$

Hier zeigen wir, daß β im Gebiet 1 streng monoton steigend und im Gebiet 2 streng monoton fallend ist. Wir beginnen mit Gebiet 1 (d.h. $\eta < 0$). In diesem Fall müssen wie oben Gleichung (A2.8) und (A2.9) gelten, wobei jedoch T jetzt lautet

$$T = -\frac{\eta}{\eta^3 - \eta}$$

Aus Bedingung (A2.10) ergibt sich

$$1 - \eta^2 < 1 \tag{A2.13}$$

was offensichtlich immer erfüllt ist.

Für Gebiet 2 ergibt sich statt Gleichung (A2.8) die Forderung

$$S(\eta)\alpha + B(\eta) < 0 \quad ; \quad \eta \in (0, +1]$$

Berücksichtigt man, daß hier $S(\eta) < 0$ gilt, erhält man nach Auflösung nach α

$$\alpha > \frac{x_1(1 + \lambda)}{2} T$$

Dies ist jedoch identisch mit Gleichung (A2.9a) und führt somit auch zu Bedingung (A2.13), welche immer erfüllt ist. Damit ist auch dieser Fall bewiesen.

Somit wäre gezeigt, daß die Kurve $\bar{R}(\eta)$ aus (A1.4) wirklich die gesuchte Grenzkurve ist.

Weiterhin folgt auch, daß die restliche Begrenzung des zulässigen Bereiches durch die beiden Geraden β_+ und β_- gegeben ist. Denn die Funktion $\tilde{\beta}(\eta)$ ist, wie in Anhang A1 dargelegt, im Gebiet 1 streng konvex und in Gebiet 2 streng konkav. So müssen die Tangenten an $\bar{R}(\eta)$ ($\xi = +1$) außerhalb des Bereiches liegen, den die Geraden β_+ und β_- begrenzen. Dieses muß jedoch dann auch für alle anderen Geraden mit $-1 \leq \xi < +1$ zutreffen, da die obigen Eigenschaften 1-3 für alle $\alpha > \alpha_{\min}$ gelten. Aus dem gleichen Grunde liegen auch beim Element-Typ 4 alle Geraden der Geradenschar immer außerhalb des Bereiches, den die Geraden β_+ und β_- begrenzen.

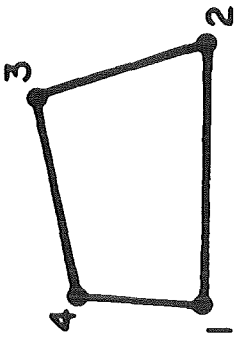
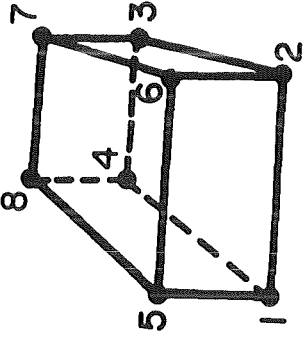
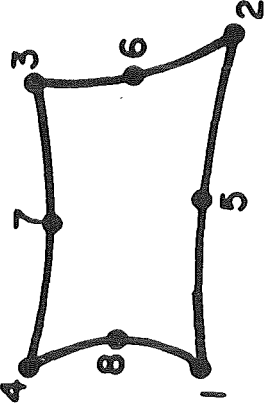
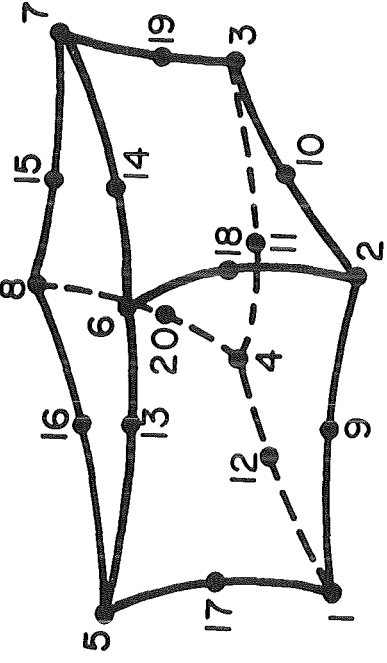
Ansatz	Viereckelement	Hexaeder-Element
linear		
quadratisch		

Abb.1: Übersicht über die Elementtypen, die für die CAO-Methode besonders geeignet sind.

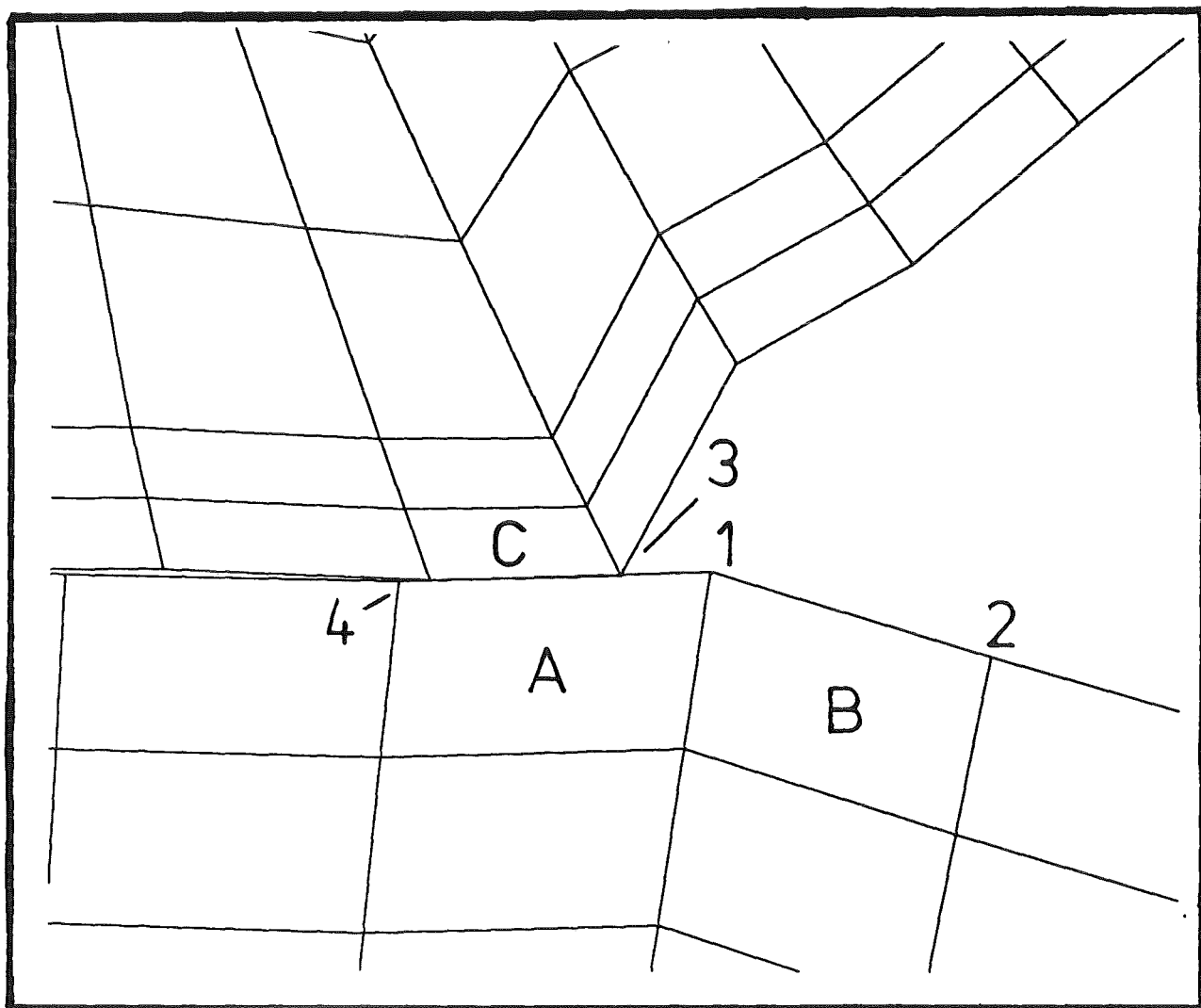


Abb.2: Beispiel einer Wachstumsblockade eines Knoten bei der Verwendung von Viereckelementen mit linearem Ansatz bei der Wachstumssimulation eines Druckwiesels.

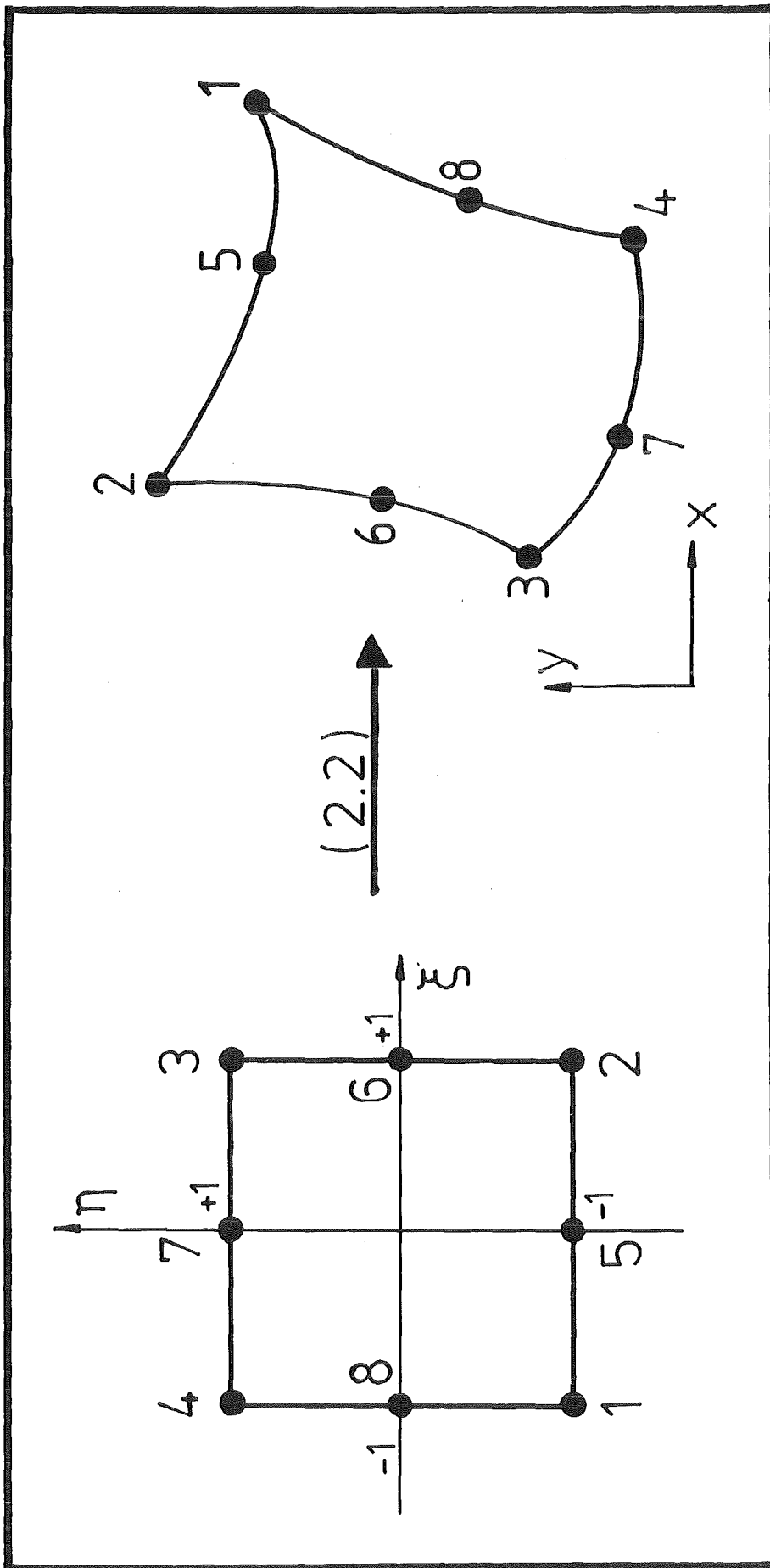


Abb.3: Abbildung des Einheitsquadrates auf ein Element des Modells über Gleichung (2.2).

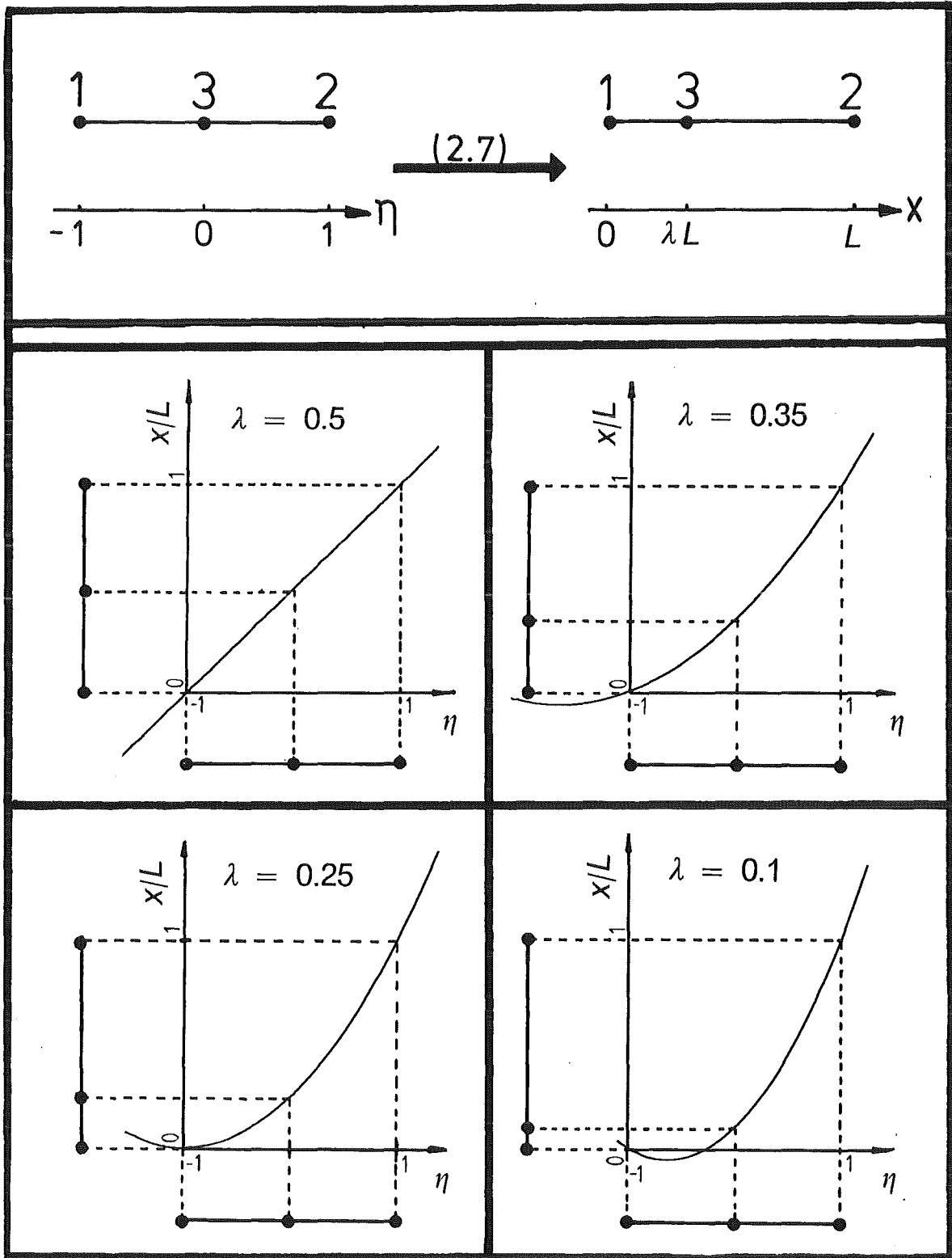


Abb.4: Die Koordinatentransformation (2.7) für verschiedene Lagen des Zwischenknotens.

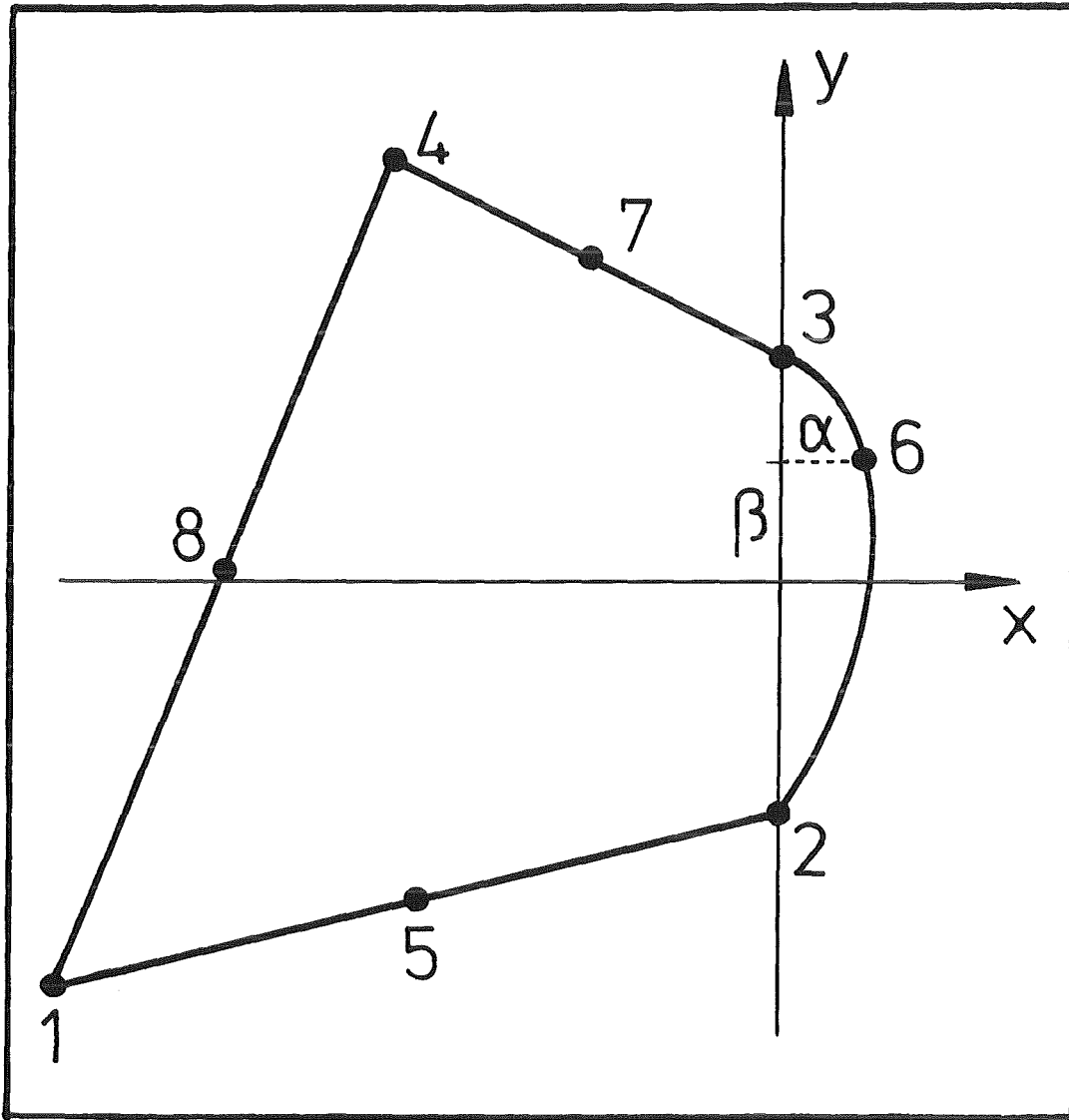


Abb.5: Die gewählte Basis mit Knotennummerierung.

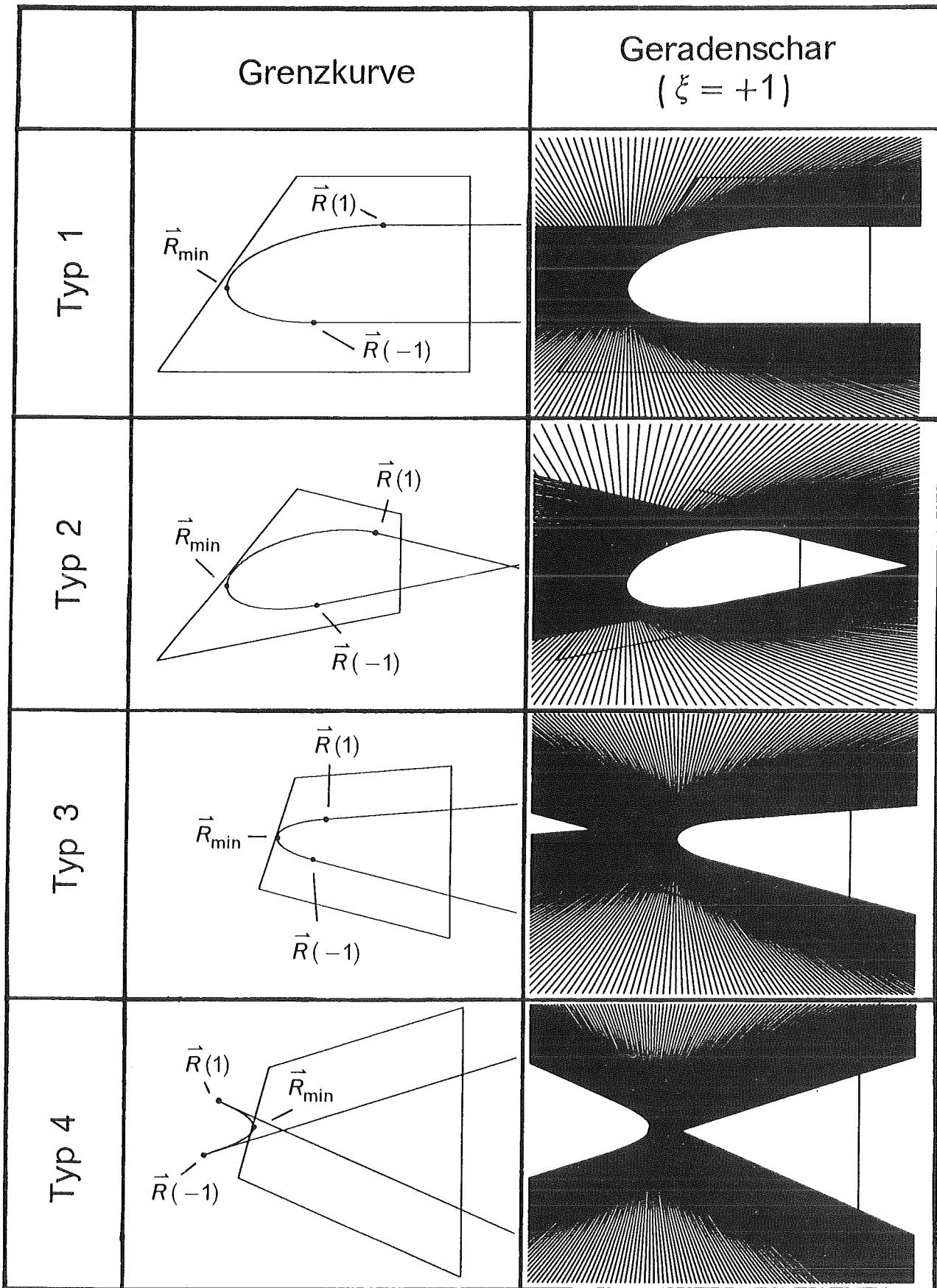


Abb.6: Die verschiedenen Elementypen mit jeweiliger Grenzkurve (links) und der den zulässigen Bereich begrenzenden Geradenschar (rechts) aus Gleichung (3.2) für $\xi = +1$ und $\eta = -1$ bis $+1$ in Schrittweiten von $1/100$. Zusätzlich sind die Punkte $R(+1)$, $R(-1)$ und R_{min} eingezeichnet.

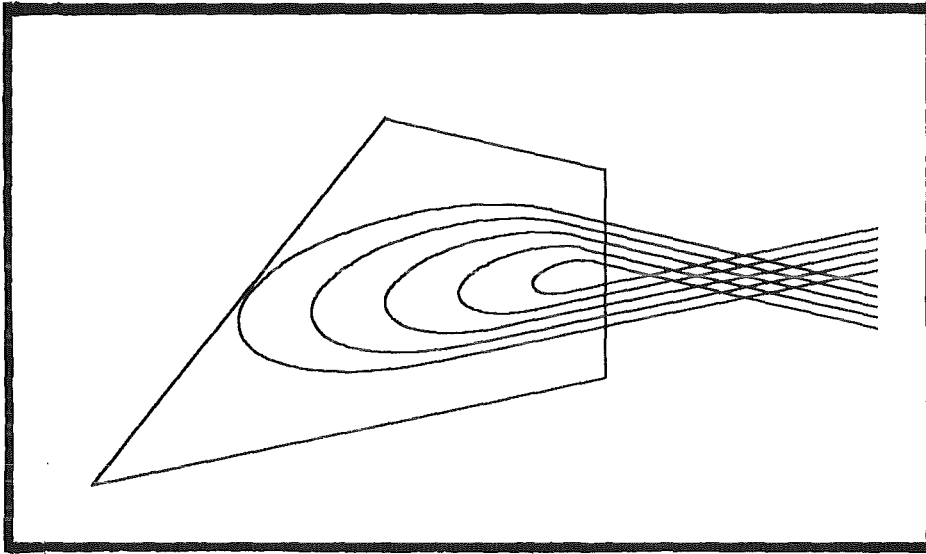


Abb.7: Begrenzungskurven für $\varepsilon = 1., 0.8, 0.6, 0.4$ und 0.2 .

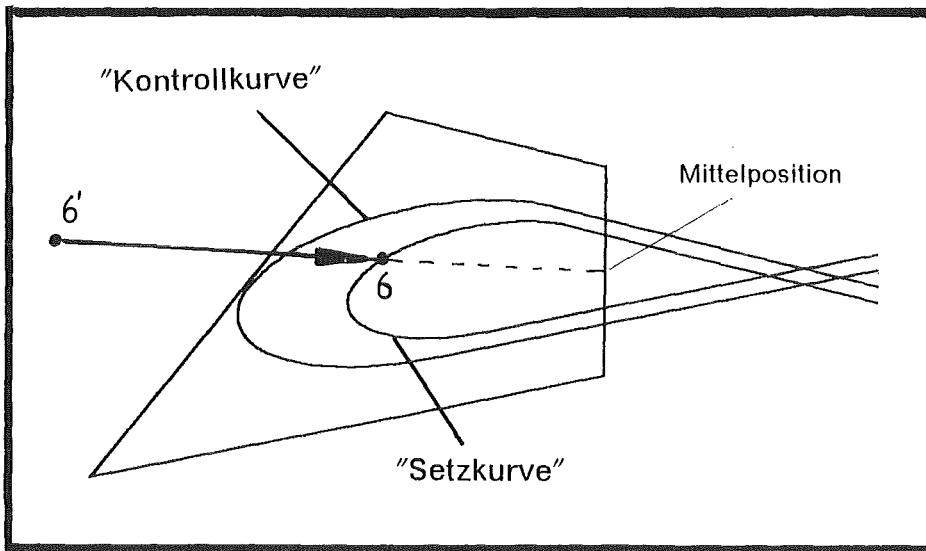


Abb.8: Demonstration der Korrekturstrategie, bei der der Zwischenknoten, der ausserhalb des zulässigen Bereiches liegt ($6'$), auf die neue Position auf der "Setzkurve" (6) zurückgesetzt wird.

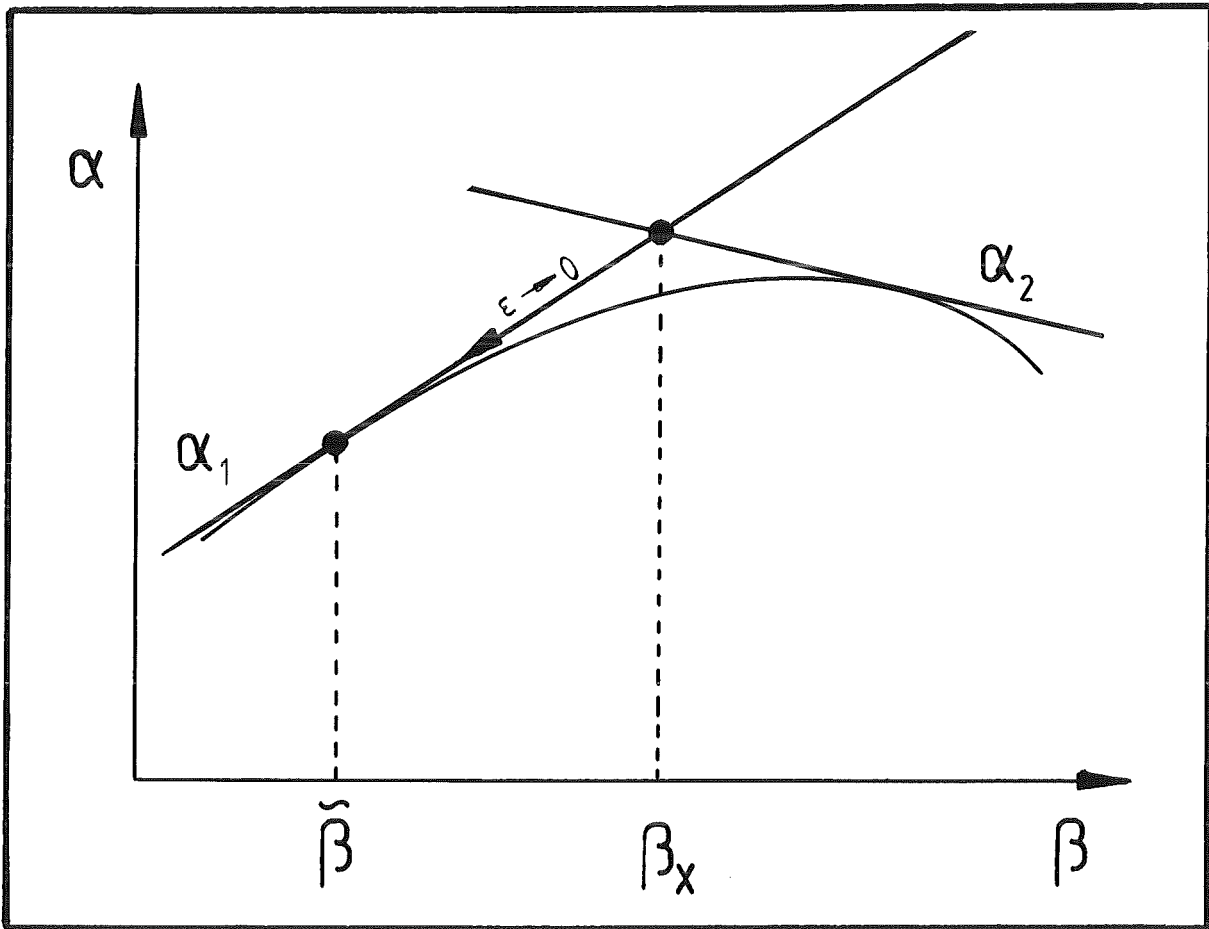


Abb.9: Graphische Darstellung zur Bestimmung des Berührungspunktes der Tangenten α_1 an die gesuchte Kurve.

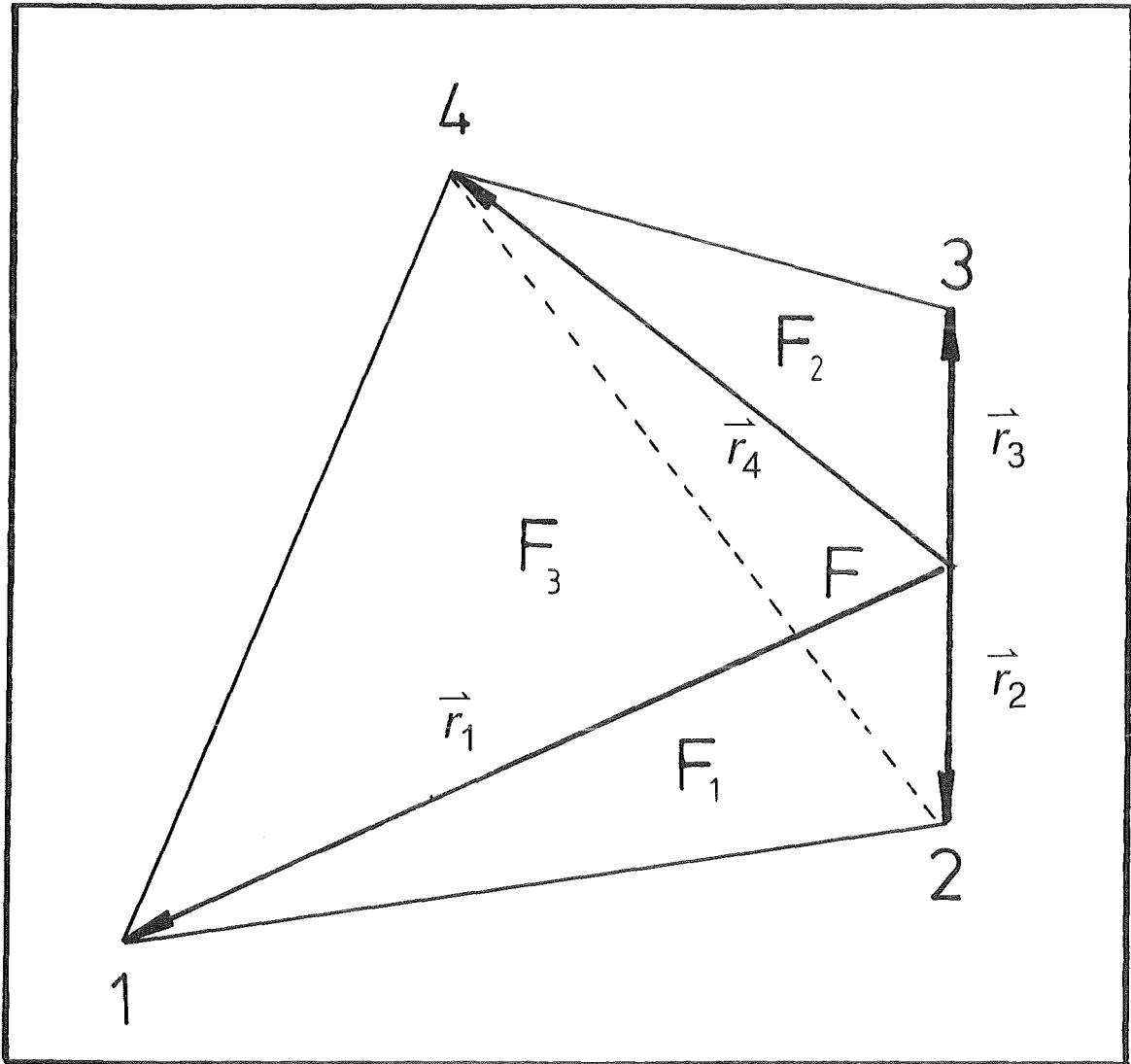


Abb.10: Bezeichnung der Flächen im Element.

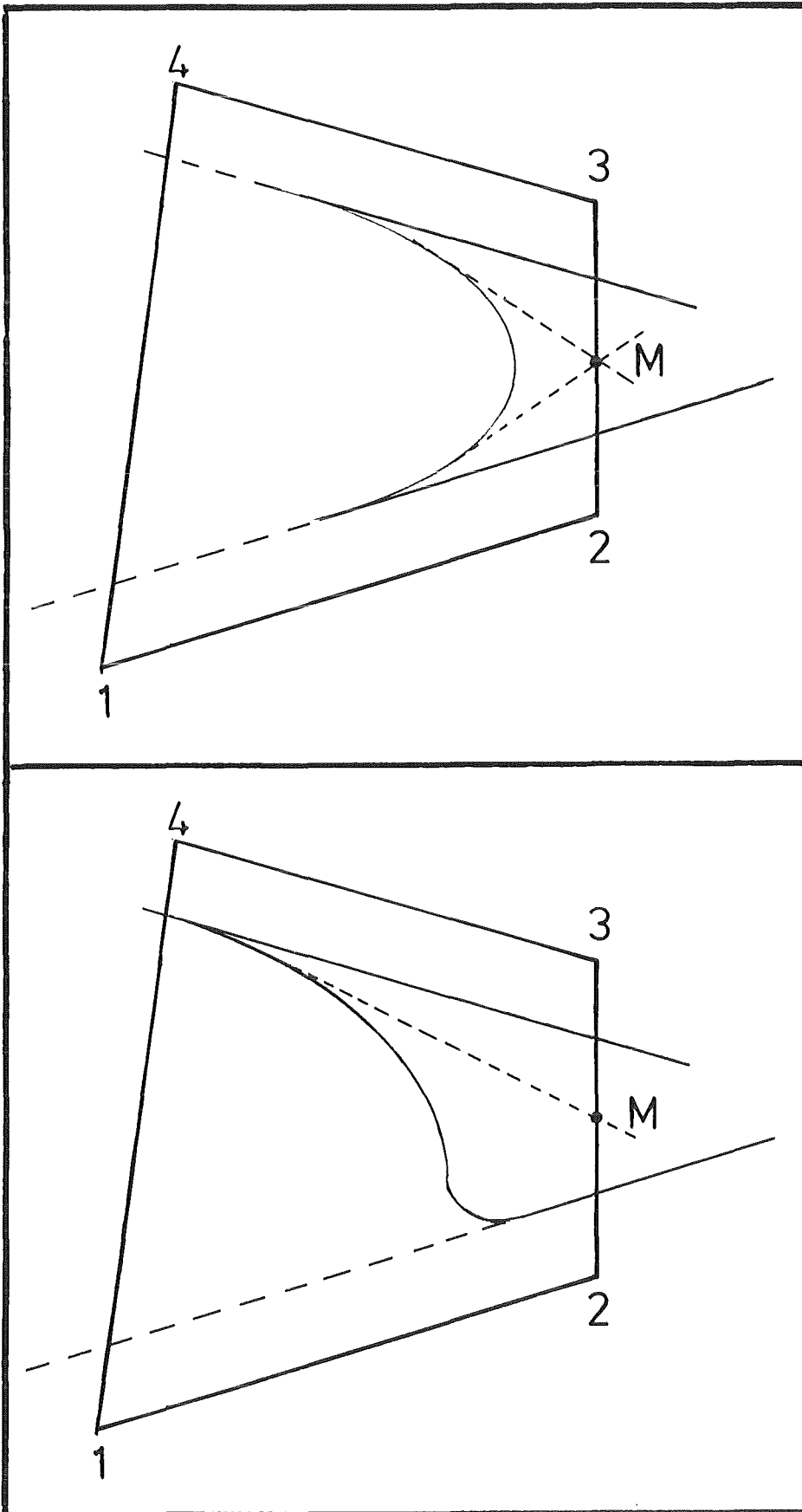


Abb.11: Zwei im Prinzip denkbare Kurvenformen für die den zulässigen Bereich begrenzende Kurve, die jedoch nicht möglich sind, weil es immer mindestens eine Tangente gibt (gestrichelte Linien), die durch die Mittelpunktslage M des Zwischenknotens gehen.

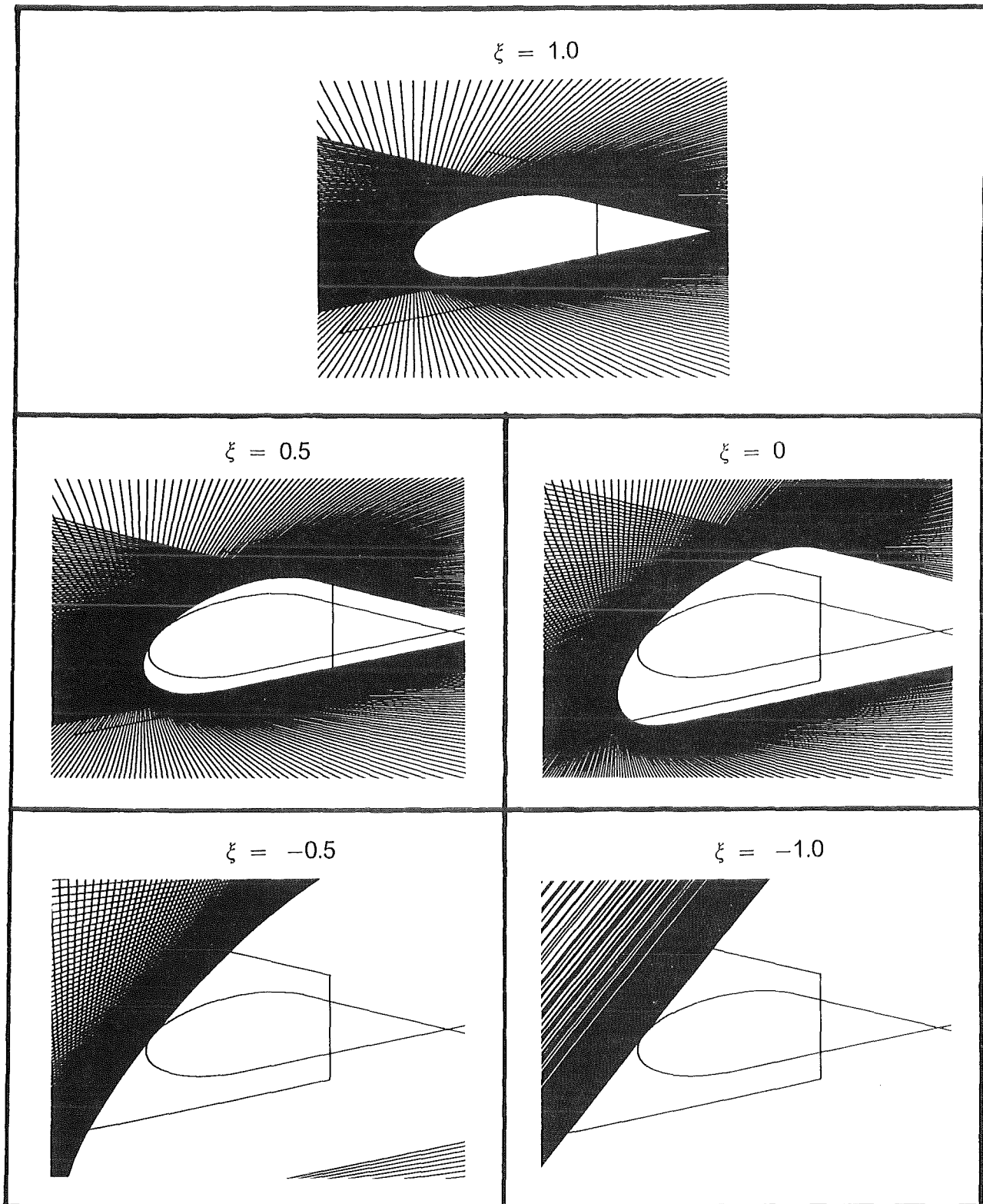


Abb.12: Geradenscharen aus Gleichung (3.2) für verschiedene Werte von ξ und mit $\eta = -1$ bis $+1$ in Schritten von $1/100$. Die begrenzende Kurve die sich aus Gleichung (A1.4) und (A1.6) ergibt ist zusätzlich eingezeichnet. Es ist deutlich zu erkennen, daß die Geradenschar für $\xi = +1$ den zulässigen Bereich begrenzt. Weiterhin ist erkennbar, daß die Geraden bei $\xi = -1$ alle die gleiche Steigung besitzen und eine dieser Geraden auch Tangente an die Grenzkurve ist.

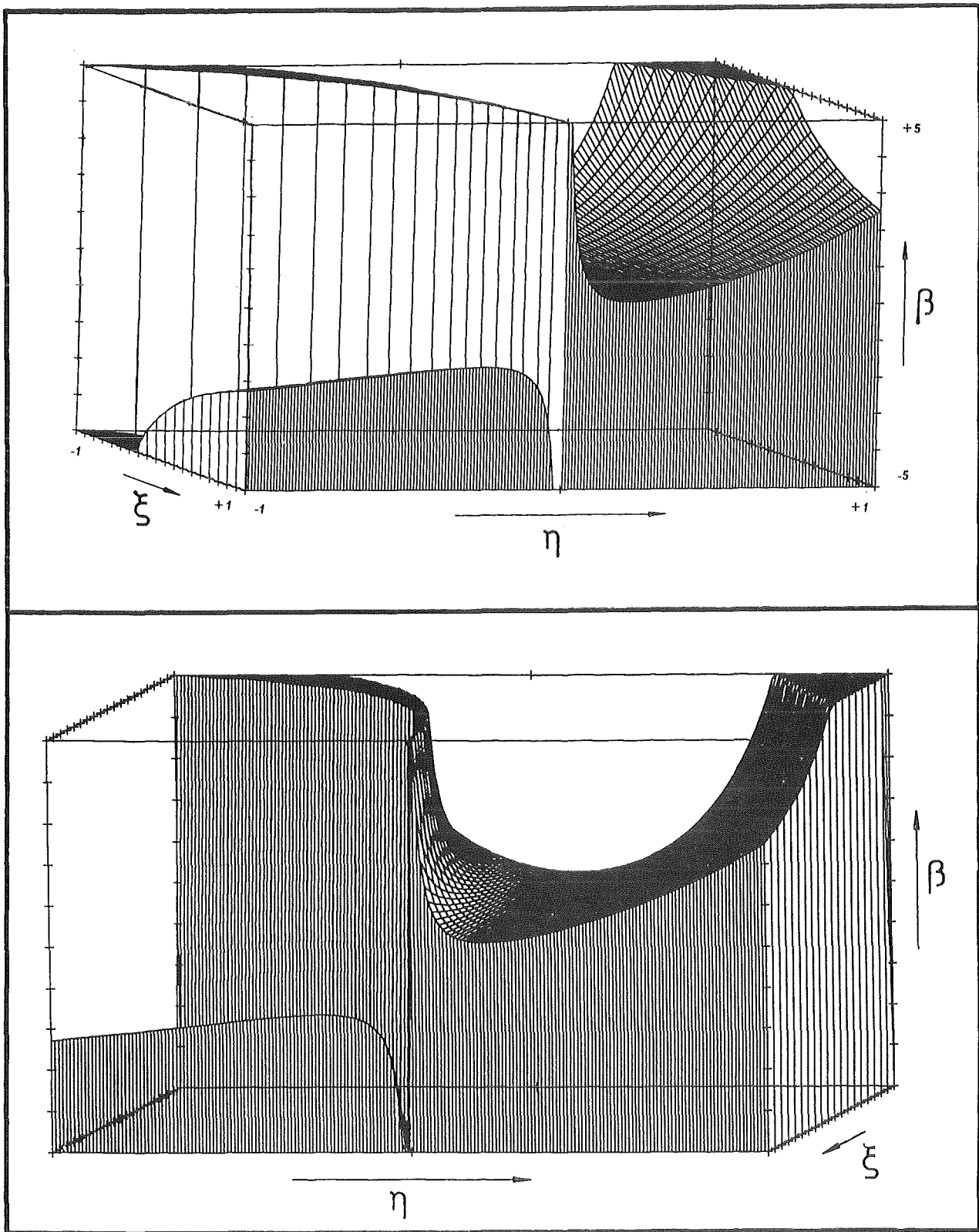


Abb.13: Zwei Plots der Funktion β aus Gleichung (A2.1) aus verschiedenen Blickwinkeln an der Stelle $\alpha = -4.5$ und $x_1 = -7.$, $y_1 = -4.$, $y = 2.$, $x_4 = -3.$, $y_4 = 3.$. Die Singularitäten wurden jeweils bei $\beta = +/- 5$ abgeschnitten.

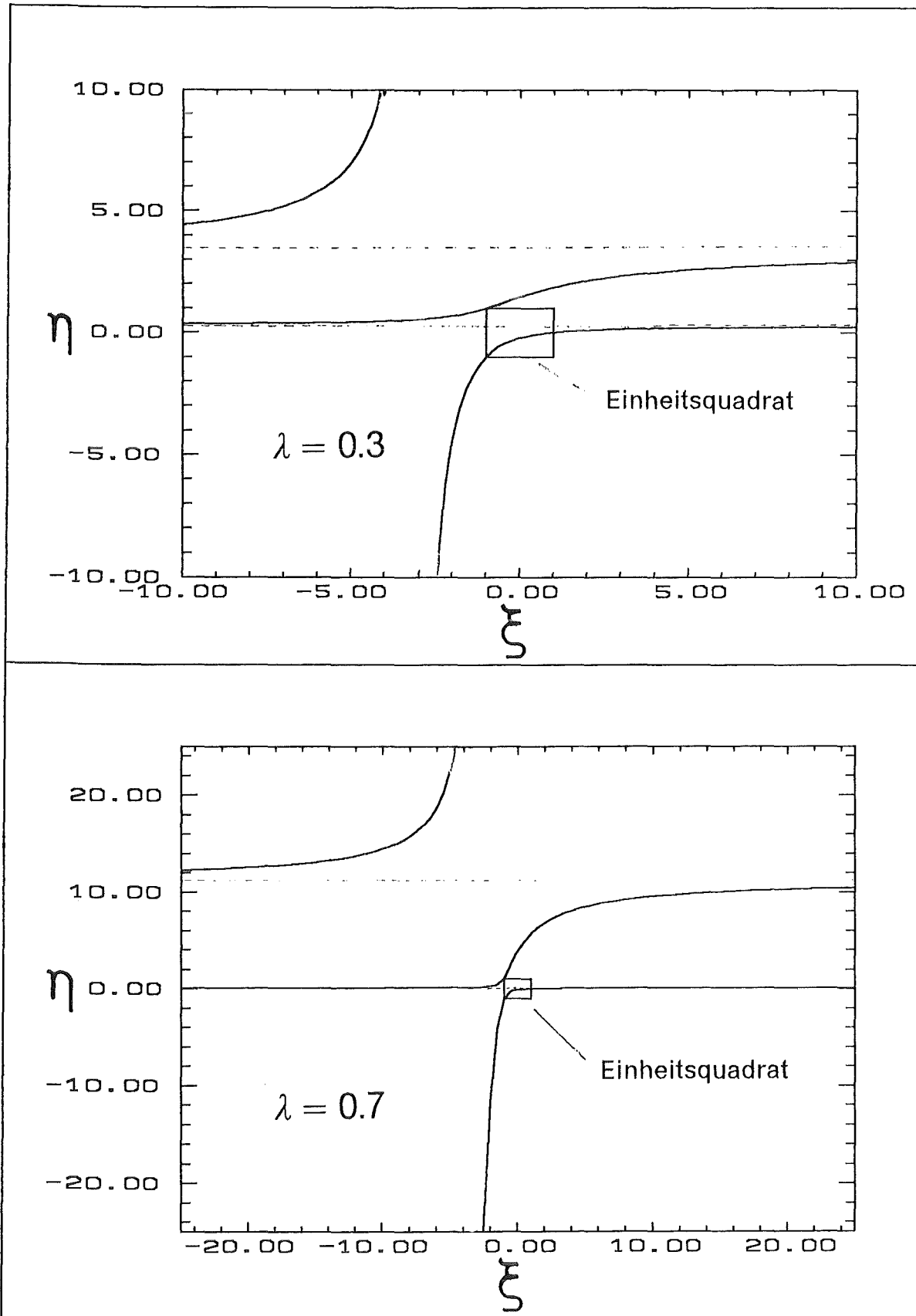


Abb.14: Verlauf der Singularitäten der Funktion β aus Gleichung (A2.1) in der $\xi - \eta$ Ebene für verschiedene Werte von λ . Die Asymptoten sind gestrichelt eingezeichnet. Für $\lambda > 1$ erhält man einen an der ($\eta = 0$)-Ebene gespiegelten Verlauf.