



Forschungszentrum Karlsruhe
in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 7485

**Bestimmung der
inversen Transformation
für 8-knotige Elemente mit
ebenen Seitenflächen mittels
iterierter Projektione**

R. Schäfer

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

November 2009

Forschungszentrum Karlsruhe

in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 7485

Bestimmung der inversen Transformation für
8-knotige Elemente mit ebenen Seitenflächen
mittels iterierter Projektionen

Rolf Schäfer

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

2009

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021

Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft
Deutscher Forschungszentren (HGF)

ISSN 0947-8620

urn:nbn:de:0005-074858

Zusammenfassung

In diesem Bericht wird ein Verfahren zur Bestimmung der inversen Transformation, deren Kenntnis zur Ermittlung lokaler Koordinaten in einem Element notwendig ist, beschrieben. Dieses kann für Elemente, die aus 8 Knoten bestehen und ebene Seiten haben, angewendet werden. Die Bestimmung der inversen Transformation ist notwendig um den Wert einer Variablen an einem beliebigen Punkt innerhalb eines Elementes mittels trilinearer Interpolation bestimmen zu können. Da das hier vorgestellte Verfahren zur Bestimmung der lokalen Koordinaten bei der Iteration auf analytische Lösungen, wie sie für aus vier Knoten bestehende Elemente bekannt sind, zurückgreift kann, davon ausgegangen werden, dass es effizienter ist als ein Newton-Verfahren, das diese Information nicht nutzt. In diesem Bericht wird der Algorithmus des Verfahrens beschrieben. Darüber hinaus werden Interpolationsergebnisse für unterschiedliche Elementpaare, die mit einer Referenzimplementierung erzielt wurden, gezeigt. Dies dient dazu die Korrektheit der mit dem Verfahren erzielten lokalen Koordinaten nachzuweisen. Aus dem Vergleich der Anzahl der benötigten Iterationsschritte für die oben gezeigten Interpolationsbeispiele kann ersehen werden, dass der numerische Aufwand zur Bestimmung der inversen Transformation mit dem Grad der Verzerrung der zu interpolierenden Elemente ansteigt. Im Grenzfall von Elementen, die nur aus zueinander orthogonalen Seiten bestehen, werden die lokalen Koordinaten mit der kleinsten möglichen Anzahl von Iterationen ermittelt.

Abstract

The purpose of this report is to describe a procedure for the evaluation of the inverse transform. This transform is necessary for the determination of local coordinates in a finite element. On the other hand the local coordinates are necessary for the calculation of values inside the element by means of trilinear interpolation. The proposed procedure is valid for elements with eight nodes and planar surfaces. Since the procedure employs analytical solutions, as they are known for planar elements consisting of four nodes, during the iterative solution process, it is assumed to be more efficient than a procedure based on Newton's method, that does not use analytical solutions. This report describes the algorithm of the procedure. Furthermore interpolation results that had been obtained with a reference implementation for different element pairs will be shown to demonstrate the validity of the proposed scheme. Finally a comparison of the number of iterations needed to obtain solutions for the different element pairs mentioned above, shows that the numerical cost for the evaluation of the inverse transform with the proposed procedure increases with the deformation of the elements. In the limit case of elements that consist of sides that are all orthogonal to each other the local coordinates are evaluated with the lowest number of iterations possible.

INHALTSVERZEICHNIS

1	Einleitung.....	1
2	Der Algorithmus.....	3
3	Anwendung des Algorithmus.....	5
3.1	Interpolation.....	6
3.2	Konvergenz.....	10
4	Zusammenfassung und Ausblick	13
5	Literatur	14

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abb. 2-1	Schematische Darstellung des Verfahrens für den zweidimensionalen Fall.	3
Abb. 3-1	Elementpaar A (links) und graphische Darstellung der an den oberen Knoten vorgegebenen Werte (rechts).	5
Abb. 3-2	Die Elementpaare B, C, D und E.	6
Abb. 3-3	Interpolationsergebnisse des Elementpaares A.	7
Abb. 3-4	Interpolationsergebnisse des Elementpaares B.	7
Abb. 3-5	Interpolationsergebnisse des Elementpaares C.	8
Abb. 3-6	Interpolationsergebnisse des Elementpaares D.	8
Abb. 3-7	Interpolationsergebnisse des Elementpaares E.	9
Abb. 3-8	Iterationshistogramme des Elementpaares A.	10
Abb. 3-9	Iterationshistogramme des Elementpaares B.	10
Abb. 3-10	Iterationshistogramme des Elementpaares C.	11
Abb. 3-11	Iterationshistogramme des Elementpaares D.	11
Abb. 3-12	Iterationshistogramme des Elementpaares E.	12

1 Einleitung

Um Rechenergebnisse, die mit einem beliebigen finite Elemente Programm ermittelt wurden, als Eingaben für weiterführende Berechnungen mit einem möglicherweise anderen Programm, welches mit einem anderen Rechengitter arbeitet, verwenden zu können, müssen diese anhand der Daten des ersten Gitters auf das zweite Gitter interpoliert werden. Ein Beispiel für eine mögliche Anwendung ist der Fall, in dem die Temperaturfelder, die mit einer strömungsmechanischen Berechnung ermittelt wurden, als Eingabedaten für weitere strukturmechanische Untersuchungen verwendet werden sollen, genannt. Um die Werte für einen Knoten des zweiten Gitters (im Beispiel das strukturmechanische), der sich an der globalen Position $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ befinden möge, bestimmen zu können, ist es notwendig zum einen das Element des ersten Gitters, in dem sich der Knoten befindet, zu kennen und zum anderen muss die lokale Position $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ innerhalb dieses Elementes bestimmt werden. Die Transformation, die diesen Übergang ermöglicht, wird im Folgenden inverse Transformation genannt. Ihre numerische Bestimmung für Elemente mit ebenen aber nicht notwendigerweise orthogonalen zu einander stehenden Seiten ist Gegenstand dieses Berichts.

In dem Buch [SBus03] schreibt S. Bus in dem Abschnitt über trilineare Interpolation frei übersetzt Folgendes: *„Nach unseren besten Wissen existiert kein Weg die trilineare Interpolation in geschlossener Form zu invertieren. Allerdings besteht die Möglichkeit die dreifach lineare Interpolation mittels iterativer Verfahren, die auf der Verwendung des Newtonverfahrens beruhen, schnell durchzuführen“*. Das Ziel dieses Berichtes ist es, die obigen Verfahren zu verbessern, indem ein iterativen Algorithmus vorgestellt wird, der in den einzelnen Iterationsschritten auf bekannte analytische Ausdrücke für den zweidimensionalen Fall zurückgreift.

2 Der Algorithmus

Die in [CHua90] angegebenen analytischen Ausdrücke für rechteckige isoparametrische Elemente stellen einen wichtigen Teil des im Folgenden beschriebenen Algorithmus dar, da sie es erlauben die lokalen Koordinaten (α_j, α_k) eines auf ein Rechteck projizierten Punktes \mathbf{x} direkt anzugeben. Die Idee des hier beschriebenen Algorithmus besteht darin, den Punkt \mathbf{x} wiederholt auf durch α^n beschriebene Flächen zu projizieren um so immer bessere Approximationen für den wahren Wert des Vektors der lokalen Koordinaten α zu erhalten.

Die lokalen Koordinaten beziehen sich auf einen Referenzwürfel. Jeder Punkt innerhalb dieses Würfels kann durch die Angabe von $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ spezifiziert werden. Dabei unterliegen die einzelnen Alphas der Einschränkung, dass sie aus dem Intervall $[-1, 1]$ sind. Dieser Würfel wird häufig auch als Referenzelement bezeichnet.

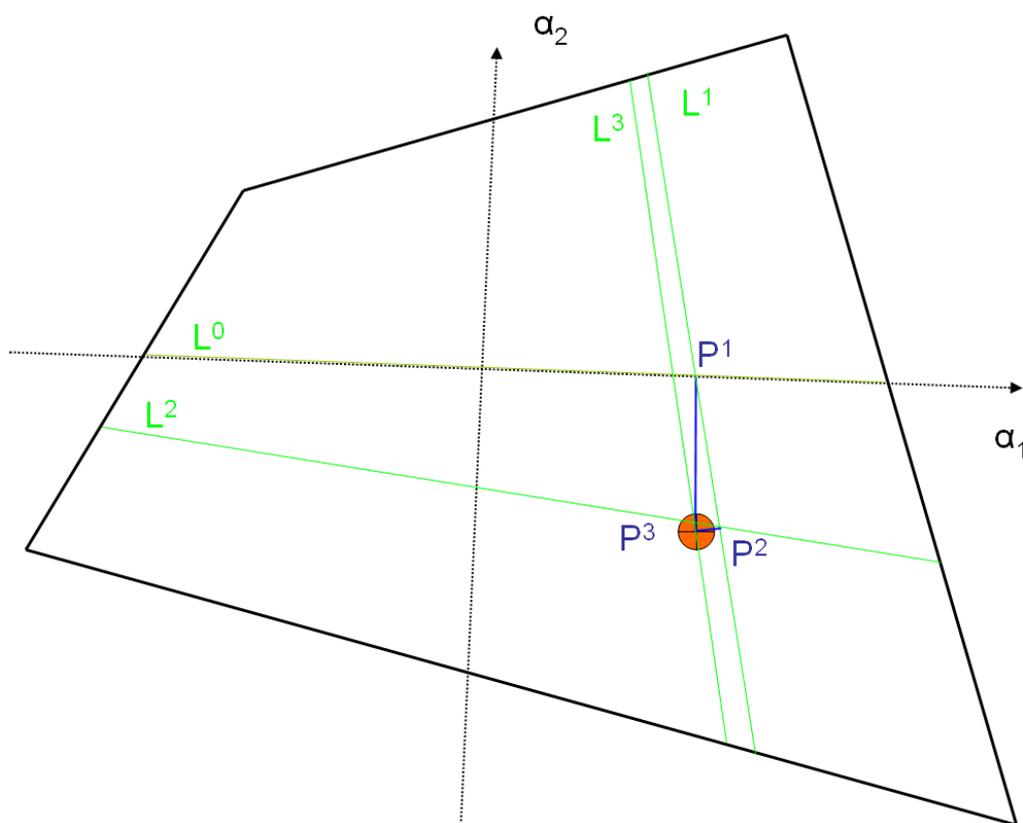


Abb. 2-1 Schematische Darstellung des Verfahrens für den zweidimensionalen Fall.

Um das Verfahren zu veranschaulichen sind in Abb. 2-1 die ersten Schritte des Algorithmus, der weiter unten beschrieben wird, schematisch für den zweidimensionalen Fall dargestellt. In das schwarze Element wurden die $\alpha_1 = 0$ und $\alpha_2 = 0$ entsprechenden Linien gestrichelt eingezeichnet und an einem Ende jeweils mit Pfeilspitzen versehen um daran zu erinnern, dass diese Linien den Koordinatenachsen im Referenzelement entsprechen. Der Punkt dessen Koordinaten bestimmt werden sollen, ist als roter Kreis mit einem Kreuz in der Mitte in

der unteren rechten Ecke des Elements dargestellt. Als Projektionsziel dient zu Beginn der Iteration die grün eingezeichnete Linie L^0 , deren Verlauf innerhalb des Elements mit der $\alpha_2 = 0$ entsprechenden Linie übereinstimmt. Die erste Projektion P^1 (blaue Linie) auf die Linie L^0 ergibt einen Wert für α_1 , der die Linie L^1 für die nächste Projektion P^2 festlegt. Diese Projektion liefert dann einen Wert für α_2 der die Linie L^2 festlegt. Dieses Verfahren wird solange wiederholt bis sich die Werte von α_1 und α_2 um weniger als ε zwischen den einzelnen Schritten ändern.

Nachfolgend werden die Indizes i, j und k als Variablen, die die Werte 1, 2 oder 3 annehmen können angesehen. Dabei sollen sie zusammen immer den gesamten Wertebereich abdecken. Dies bedeutet, dass wenn i , und j einen Wert haben, so ist der Wert von k dadurch ebenfalls bestimmt. Haben beispielsweise i den Wert eins und j den Wert zwei so muss k den Wert drei haben. Mit dieser Vereinbarung kann der Algorithmus wie folgt beschrieben werden:

Initialisiere die einzelnen Komponenten in $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$, $\alpha^{\text{alt}} = (\alpha_1^{\text{alt}}, \alpha_2^{\text{alt}}, \alpha_3^{\text{alt}})$ und $\delta = (\delta_1, \delta_2, \delta_3)$ mit null und Laufindex n mit eins.

Wähle für i einen beliebigen Wert aus dem Wertebereich.

Solange $n < n_{\text{min}}$ und nicht $n > n_{\text{max}}$ und $\|\delta\|_{\infty} < \varepsilon$ nicht erfüllt ist verfähre wie folgt:

Kopiere α nach α^{alt} .

Erzeuge das Viereck, das zur lokalen Koordinate α_i gehört.

Projiziere x auf das soeben festgelegte Viereck.

Ermittle (α_j, α_k) der Projektion.

Falls eine der ermittelten Koordinaten α_j oder α_k außerhalb des Referenzelements liegt ändere diese so, dass sie wieder innerhalb des Referenzelementes liegt.

Setze $\delta = \alpha - \alpha^{\text{alt}}$.

Setze i auf den Wert des Index der zur größten Komponente von δ gehört und erhöhe n um eins.

In dem Punkt des Algorithmus in dem (α_j, α_k) der Projektion bestimmt werden, sind die Ergebnisse aus [CHua90] zu verwenden. Der anschließende Punkt stellt sicher, dass falls sich bei der Berechnung im vorausgehenden Punkt aufgrund von numerischem Rauschen eine lokale Koordinate außerhalb des Referenzelementdefinitionsbereiches ergeben würde, diese wieder an die entsprechende Stelle innerhalb des Definitionsbereiches gebracht wird. Hierdurch wird sozusagen erzwungen, dass die durch α beschriebenen und im Verlauf der Iteration ermittelten Punkte immer innerhalb des Referenzelementes liegen.

3 Anwendung des Algorithmus

In diesem Abschnitt werden Ergebnisse, die mit dem oben beschriebenen Algorithmus erzielt wurden, dargestellt. Es werden fünf verschiedene Elementpaare betrachtet. Das erste Paar, das mit A bezeichnet werden soll, ist in Abbildung 3-1-a dargestellt. Es handelt sich um zwei Würfel mit der Kantenlänge eins. In diesem Fall können die lokalen Koordinaten direkt bestimmt werden. Aber auch für diesen Fall muss der Algorithmus die richtigen Ergebnisse liefern, was hier sehr leicht überprüft werden kann. Um die Qualität der Ergebnisse, die mit dem Algorithmus erzielt werden, bestimmen zu können, betrachten wir nicht die lokalen Koordinaten α , sondern die aus diesen mittels dreifach linearer Interpolation ermittelten Werte. Die Interpolationsaufgabe, die in allen Fällen gelöst werden soll, besteht darin, die der Position α entsprechenden Werte zu ermitteln, wenn die Knoten der Elemente, die im Folgenden, beschriebenen Werte haben. Die unteren Knoten haben den Wert null. Die oberen Knoten des linken Elements haben den Wert eins. Die beiden verbleibenden Knoten der rechten oberen Kante haben die Werte zwei und vier, wobei der höhere Wert dem hinteren Knoten zugeordnet wird. Die Situation für die oberen Knoten ist in Abbildung 3-1-b graphisch dargestellt.

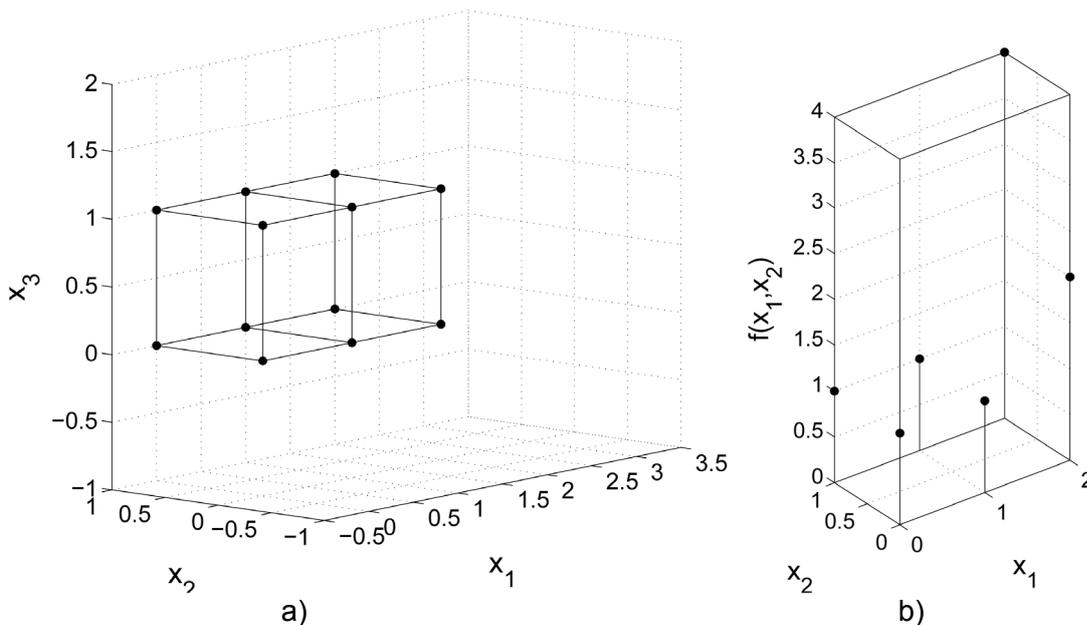


Abb. 3-1 Elementpaar A (links) und graphische Darstellung der an den oberen Knoten vorgegebenen Werte (rechts).

Der zweite Fall, B genannt, entsteht aus A durch Verschieben der oberen Knoten des Elementes in x_1 -Richtung. Im Fall C werden die oberen Knoten in x_1 - und in x_2 -Richtung um den gleichen Betrag gegenüber A verschoben. D entsteht aus A durch Verschieben der oberen Knoten in x_1 - und x_3 -Richtung. Schließlich werden die Knoten im Fall E in einer nicht mehr leicht beschreibbaren Art gegenüber A verschoben. Die geometrische Gestalt der Elementpaare B bis E ist in der Abbildung 3-2 dargestellt. Für die Berechnungen wurden die folgenden Parameterwerte verwendet: $n_{\min}=3$, $n_{\max}=100$ und $\varepsilon=10^{-8}$.

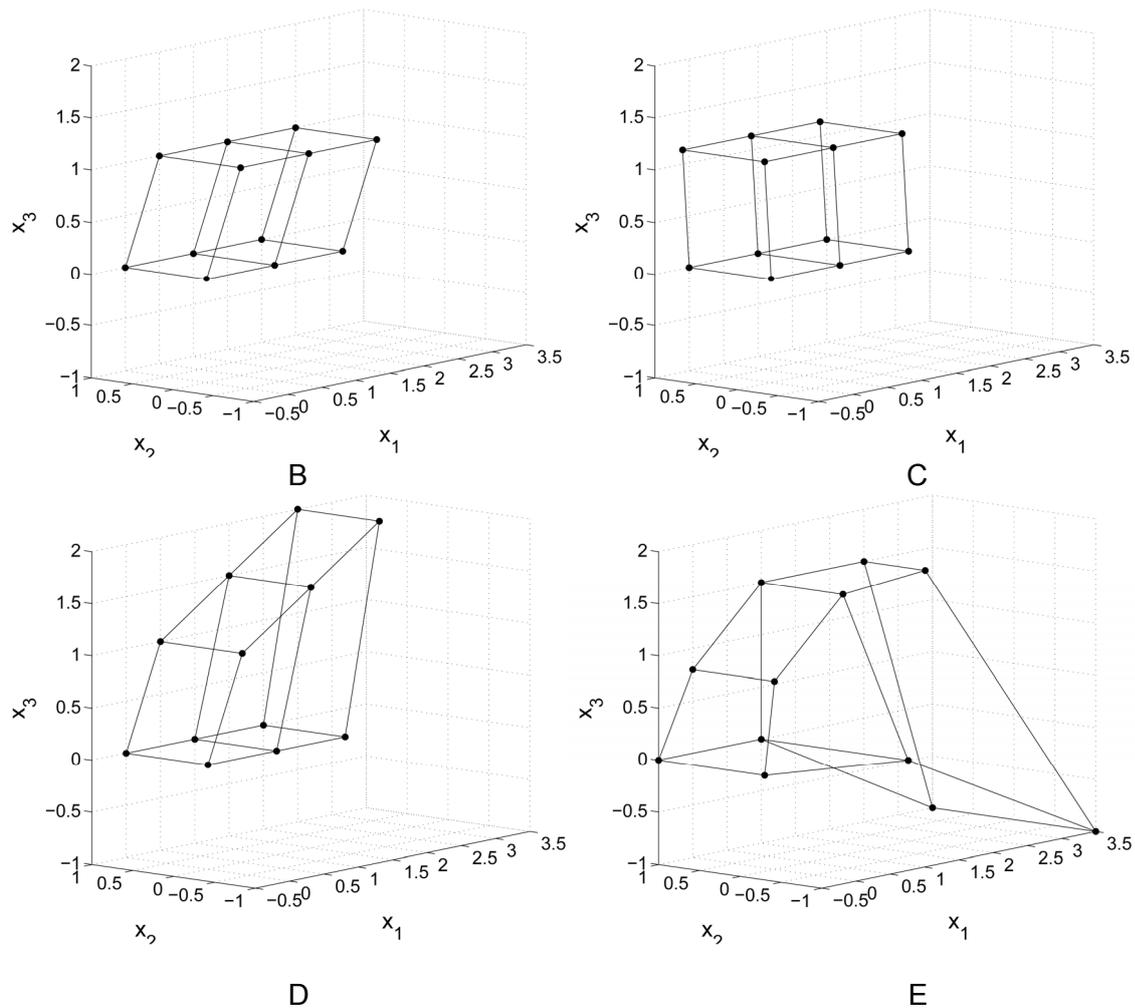


Abb. 3-2 Die Elementpaare B, C, D und E.

3.1 Interpolation

Für Punktmengen mit globalen Koordinaten für die die x_3 -Komponente die Werte 0.5 bzw. 0.75 annimmt, werden die Interpolationswerte in den zugehörigen Elementen bestimmt. Es werden nur Ergebnisse für Punkte gezeigt, für die das Programm den Punkt als zu dem Element gehörig angesehen hat und der vorgeschlagene Algorithmus konvergiert ist. Die erzielten Ergebnisse sind für das Elementpaar A in Abbildung Abb-3-3 dargestellt.

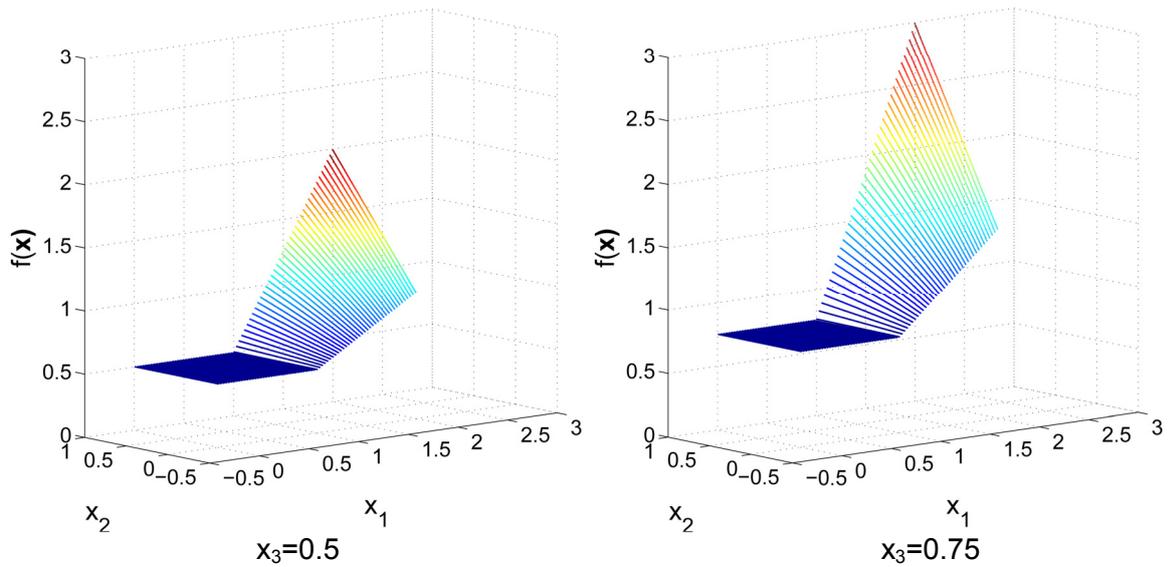


Abb. 3-3 Interpolationsergebnisse des Elementpaares A.

Es ist deutlich zu erkennen, dass die Interpolationswerte innerhalb des rechten Elements erwartungsgemäß die Werte 0.5 und 0.75 annehmen. Die Elementgrenze ist anhand des Verlaufs der interpolierten Werte ebenfalls deutlich zu erkennen. Der Verlauf der Interpolationsergebnisse im zweiten Element entspricht ebenfalls den Erwartungen. Daher kann davon ausgegangen werden, dass der Algorithmus für diesen Fall die lokalen Koordinaten korrekt ermittelt hat, da diese die Grundlage für die Interpolation darstellen.

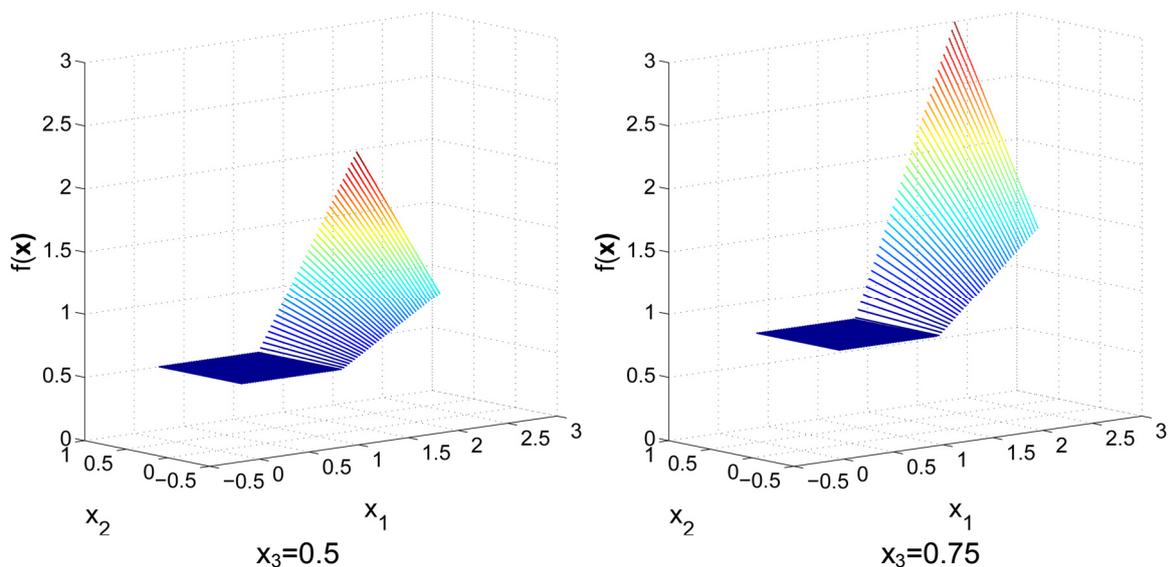


Abb. 3-4 Interpolationsergebnisse des Elementpaares B.

Die Interpolationsergebnisse, die sich für das Elementpaar B ergeben, können der Abbildung 3-4 entnommen werden. Hier ist zu beachten, dass die Elementgrenze sich erwartungsgemäß zu größeren x_1 -Werten hin verschiebt.

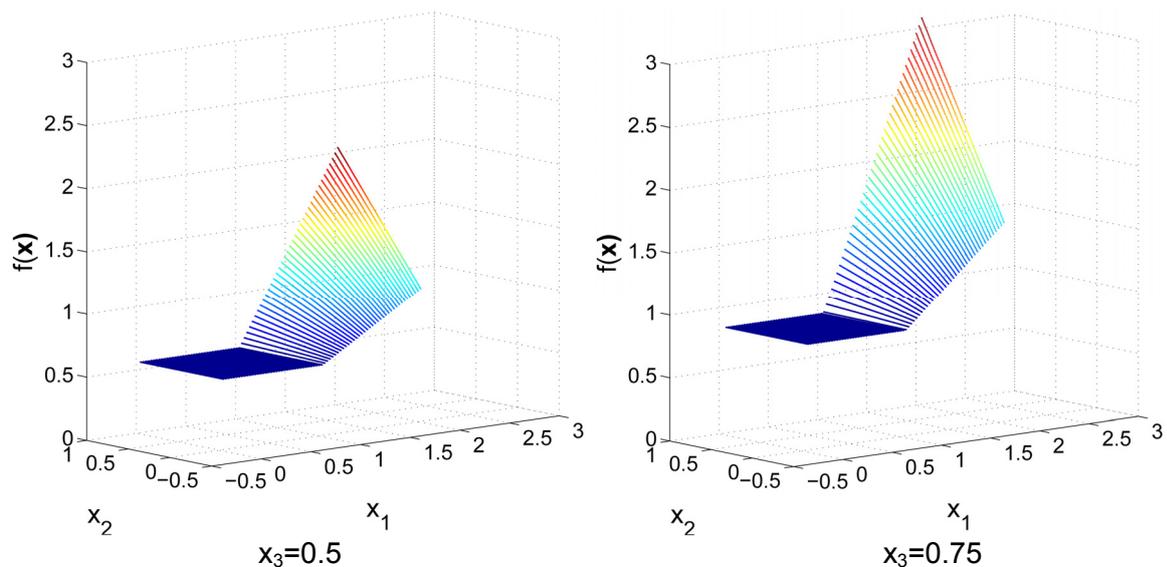


Abb. 3-5 Interpolationsergebnisse des Elementpaares C.

In Abbildung 3-5 sind die Interpolationsergebnisse, die für das Elementpaar C, bei dem die Knoten der oberen Seiten sowohl in x_1 - als auch in x_2 -Richtung verschoben wurden, dargestellt. Auch diese entsprechen den Erwartungen. Interessanter sind die Resultate die in Abbildung 3-6 gezeigt werden. Da für das Elementpaar die Knoten auch in z-Richtung verschoben wurden, sollten in den Ergebnissen des linken Elementes nun gegenüber den bisher gezeigten Fällen Variationen der Interpolationswerte auftreten. Diese sind in der Abbildung deutlich zu erkennen.

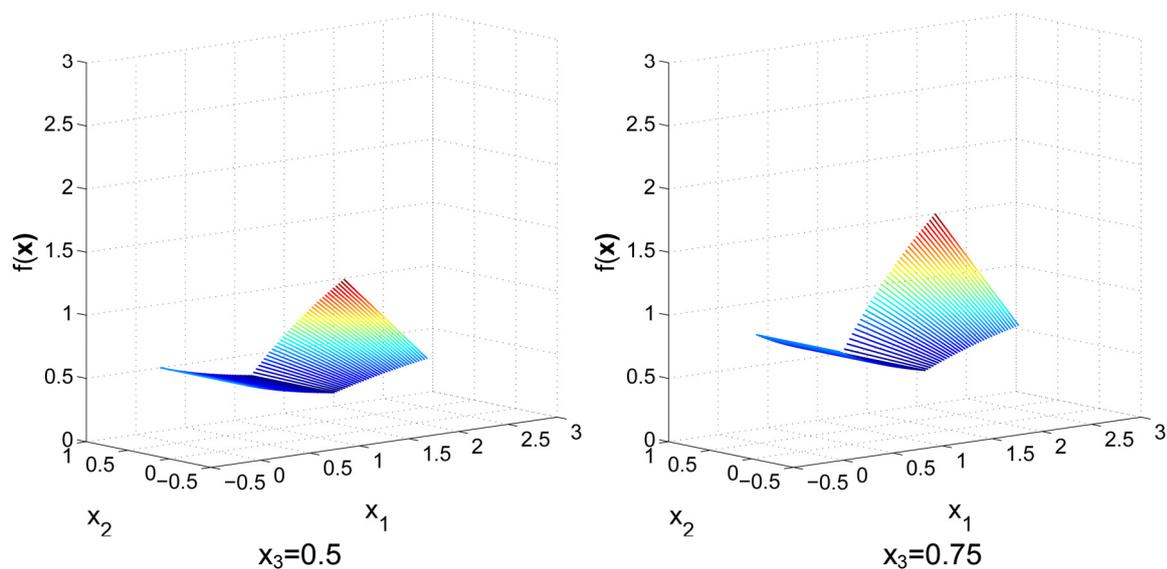


Abb. 3-6 Interpolationsergebnisse des Elementpaares D.

Schließlich sind in Abbildung 3-7 die Interpolationsergebnisse des stark deformierten Elementpaares E dargestellt.

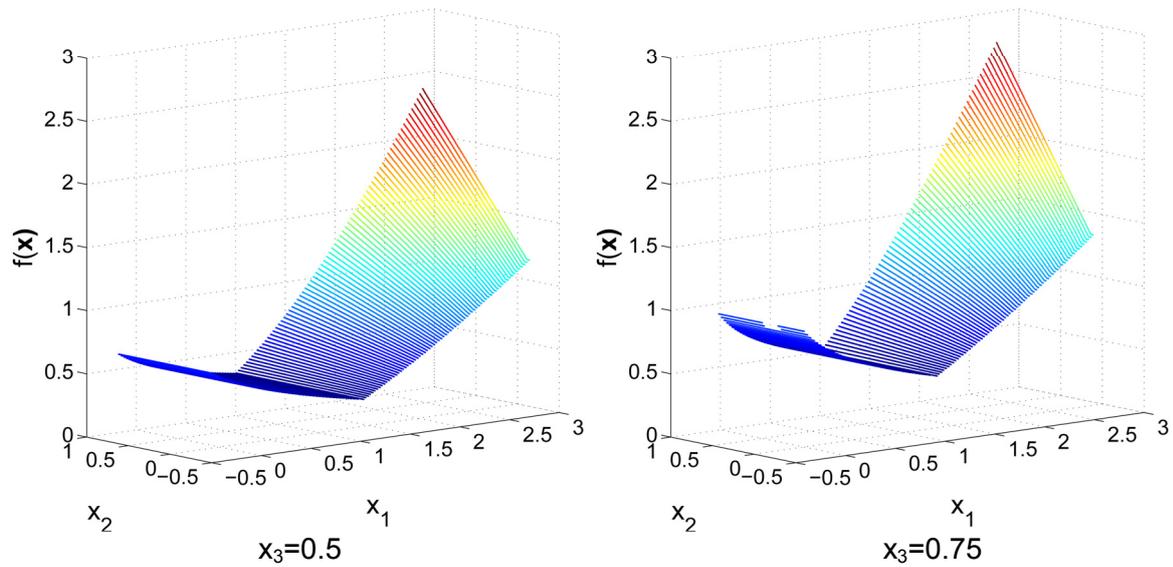


Abb. 3-7 Interpolationsergebnisse des Elementpaares E.

Fast alle gezeigten Fälle belegen, dass der Algorithmus dazu in der Lage ist, die lokalen Koordinaten zu bestimmen. Dies bedeutet, dass er zur Bestimmung der inversen Transformation für 8-knotige-Elemente verwendet werden kann. In den wenigen Fällen (Elementpaar E, $x_3=0.75$) in denen innerhalb der für die hier gezeigten Versuche vorgegebenen Schranken keine Konvergenz erzielt werden konnte, war der für n_{\max} vorgegebene Wert zu niedrig gewählt. Für $n_{\max}=150$ wird auch in diesen Punkt Konvergenz erzielt.

3.2 Konvergenz

Die nachfolgenden Abbildungen sollen bei der Einschätzung des Konvergenzverhaltens des Algorithmus behilflich sein. Die gezeigten Daten stammen von den Berechnungen, deren Ergebnisse oben gezeigt wurden.

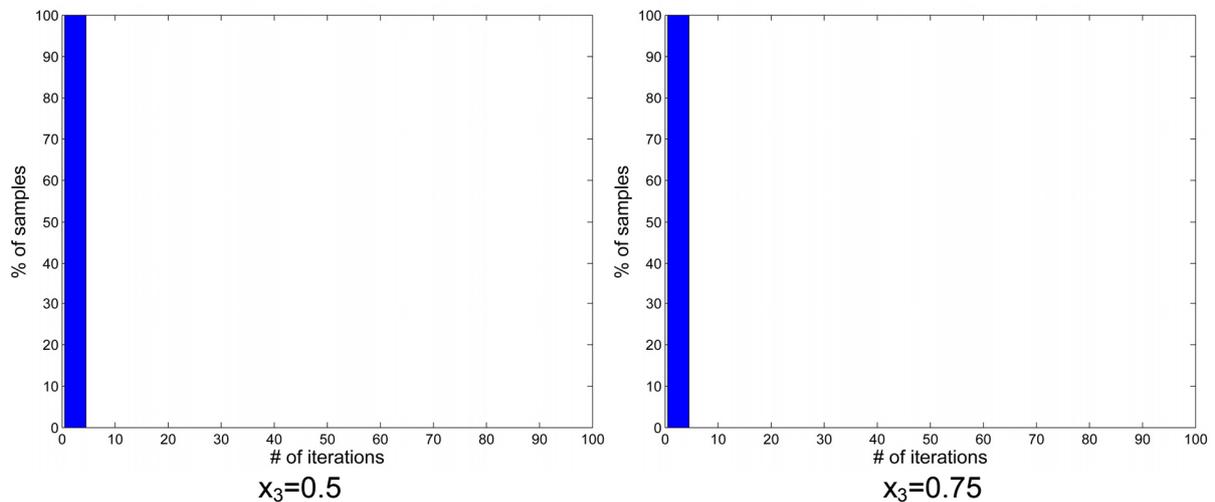


Abb. 3-8 Iterationshistogramme des Elementpaares A.

Betrachtet man zunächst Abbildung 3-8 so erkennt man, dass unabhängig vom Wert der z-Koordinate die lokalen Koordinaten eines vorgegebenen Punktes in 100 % der Fälle nach weniger als 5 Iterationen von dem Algorithmus gefunden wurden.

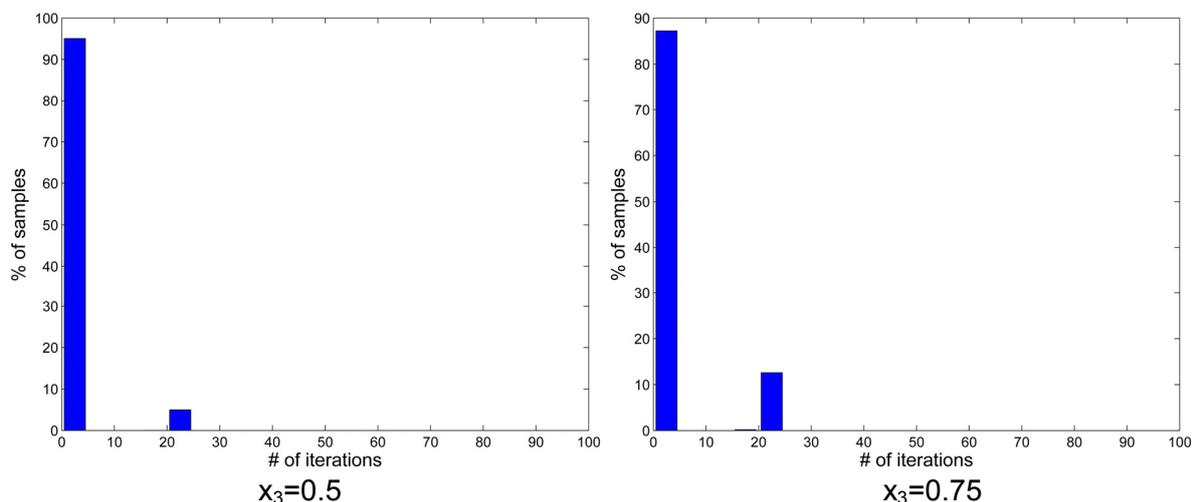


Abb. 3-9 Iterationshistogramme des Elementpaares B.

Dieses Bild ändert sich bei der Betrachtung von Abbildung 3-9, in der die Iterationshistogramme für das Elementpaar B dargestellt sind. Hier gibt es einige wenige Fälle in denen bis zu 25 Iterationen zum Erreichen der Abbruchbedingung benötigt werden. Die Anzahl dieser Fälle ist für Punkte mit $z=0.75$ ungefähr doppelt so hoch wie für Punkte mit $z=0.5$.

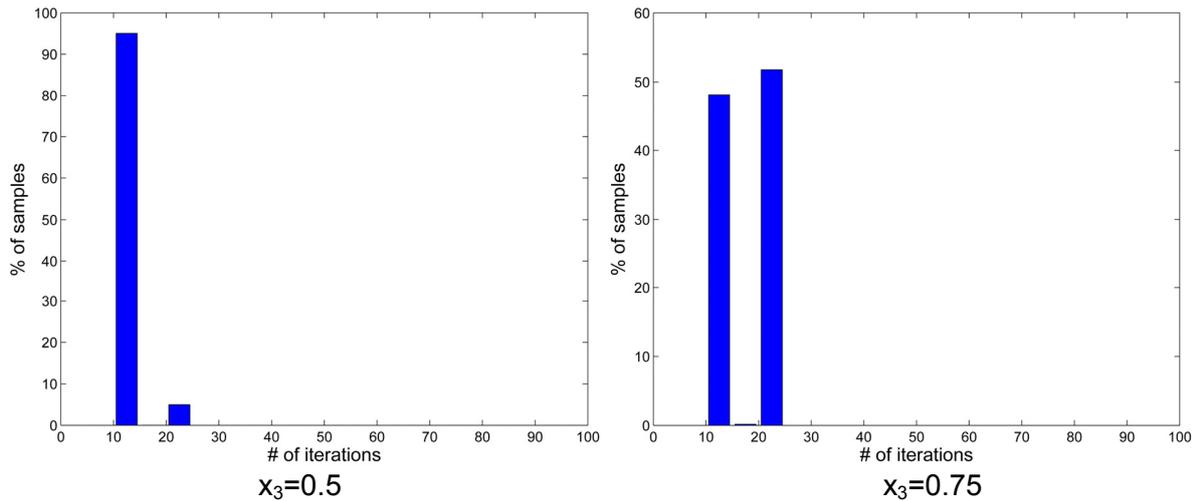


Abb. 3-10 Iterationshistogramme des Elementpaares C.

Der Abbildung 3-10 kann entnommen werden, dass der zum Bestimmen der lokalen Koordinaten zu betreibende Aufwand bezogen auf die Anzahl der bis zur Konvergenz notwendigen Iterationen mit zunehmender Deformation des Elementpaares weiterhin zunimmt.

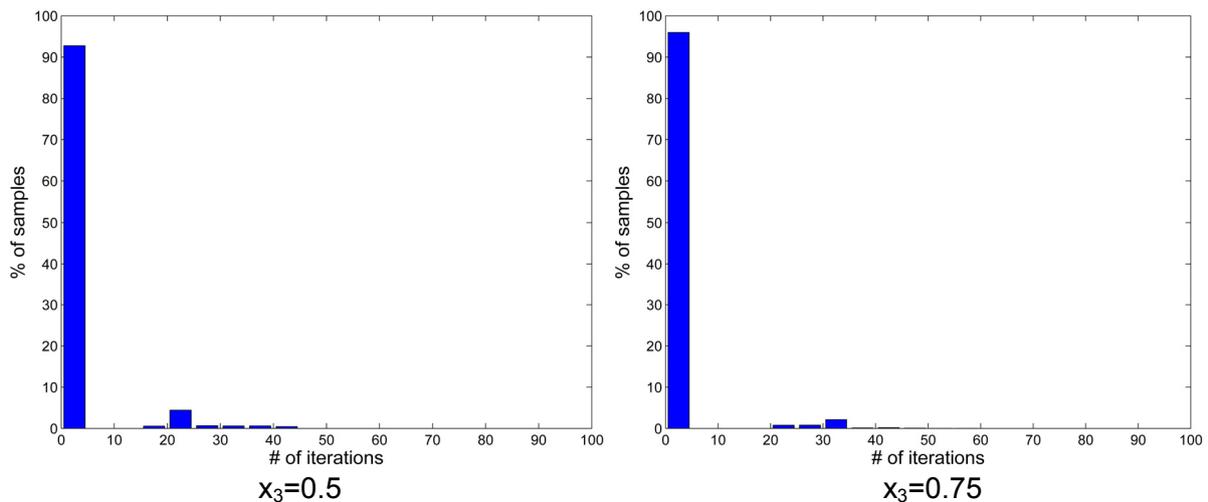


Abb. 3-11 Iterationshistogramme des Elementpaares D.

Gegenüber dem Elementpaar C scheint es sich bei der Deformation des Elementpaares D um Deformationen zu handeln, die dem Algorithmus entgegenkommen. Hier werden nur in sehr wenigen Fällen mehr als 40 Iterationen zum Auffinden einer Lösung benötigt, wie man der Abbildung 3-11 entnehmen kann.

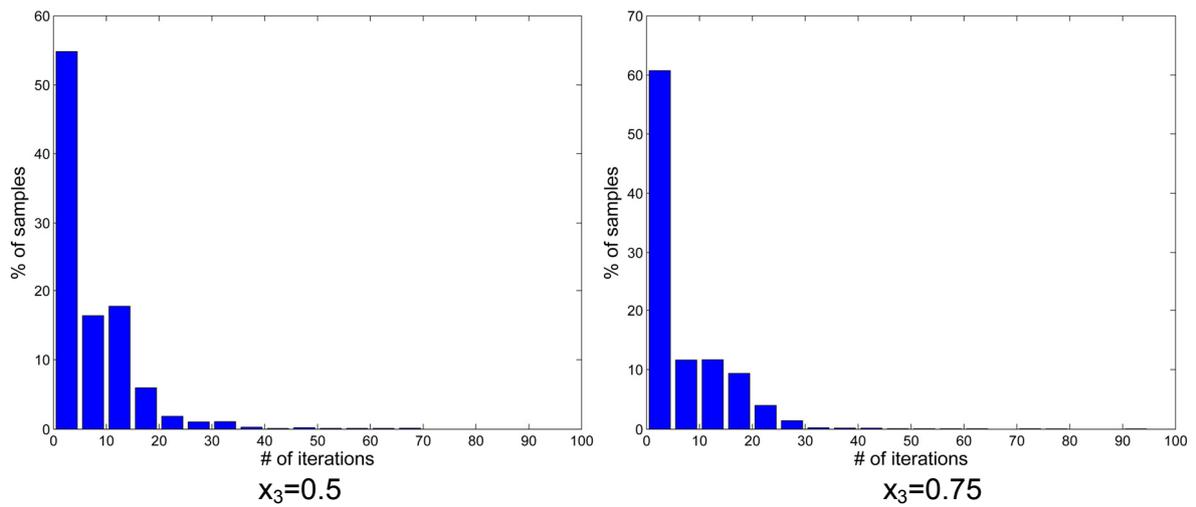


Abb. 3-12 Iterationshistogramme des Elementpaares E.

Abbildung 3-12 zeigt schließlich das Iterationshistogramm für das Elementpaar E. Hier werden für mehr Fälle als bei den bisher betrachteten Elementpaaren mehr Iterationen zum Auffinden einer Lösung benötigt.

4 Zusammenfassung und Ausblick

In diesem Bericht wurde ein neues Verfahren zur Bestimmung der inversen Transformation für 8-knotige Elemente vorgestellt. Das Verfahren verwendet innerhalb eines Iterationsschritts explizite Formeln um eine Näherungslösung für die lokalen Koordinaten zu ermitteln. Die Funktionsfähigkeit des Verfahrens wurde für mehrere unterschiedliche Fälle demonstriert. Hierbei wurde eine indirekte Vorgehensweise verwendet. Es wurden nicht die ermittelten lokalen Koordinaten α , sondern die mit Ihnen ermittelten Interpolationsergebnisse betrachtet und aus deren Korrektheit auf die Korrektheit der lokalen Koordinaten geschlossen. Hierbei ist zu beachten, dass es auch die Interpolationsergebnisse sind, die in der Praxis relevanten Fällen, wie zum Beispiel der Bestimmung von Werten in unterschiedlichen Knoten bei dem Transfer von Rechenergebnissen zwischen zwei Rechengittern auftreten. Weiterhin wurde ein Einblick in das Konvergenzverhalten der Methode gegeben. Hier konnte gezeigt werden, dass der numerische Aufwand mit zunehmender Deformation des Elementes ansteigt.

Für weitere Untersuchungen sollte ein Vergleich mit dem Newton-Verfahren durchgeführt werden. Bei diesem Vergleich sollte das Konvergenzverhalten, also die Anzahl der Schritte, die bis Konvergenz benötigt werden als auch die Kosten der einzelnen Iterationsschritte untersucht werden. Des Weiteren wäre ein analytischer Beweis, dass das Verfahren konvergiert wünschenswert. Von besonderem Interesse ist es darüber hinaus, das Verfahren so abzuändern, dass die Einschränkung auf ebene Elementseiten entfallen kann.

Das vorgestellte Verfahren hat das Potenzial, die bei der Übertragung von Rechenergebnissen zwischen unterschiedlichen Rechengittern benötigten Rechenzeiten deutlich zu reduzieren.

5 Literatur

[CHua90] Chongyu Hua, An inverse transformation for quadrilateral isoparametric elements: Analysis and application. Finite Elements in Analysis and Design 7, 1990, 159-166, Elsevier

[SBus03] Samuel R. Buss
3-D computer Graphics: a mathematical introduction with OpenGL
Cambridge University Press, 2003