

---

**Fachhochschule Aachen**

Campus Jülich

Fachbereich: Medizintechnik und Technomathematik

Studiengang: Scientific Programming

---

# **Iso- und subparametrische Elemente in Monte-Carlo-Transportalgorithmen**

Bachelorarbeit von David Garre  
Matrikelnummer 982416

Jülich, August 2008

Die vorliegende Bachelorarbeit wurde in Zusammenarbeit mit dem Forschungszentrum Jülich, am Institut für Energieforschung (IEF), IEF-4: Plasmaphysik, angefertigt.

Sie wurde betreut von:

Referent:	Prof. Dr. rer. nat. Martin Reißel	Fachhochschule Aachen, Abt. Jülich
Koreferent:	Diplom-Informatikerin Petra Börner	Forschungszentrum Jülich, IEF-4

Diese Arbeit ist selbstständig angefertigt und verfasst. Es sind keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt worden.

Jülich, August 2008

## **Zusammenfassung**

In dieser Arbeit wird die Funktionsinterpolation über Lagrange-Interpolationspolynome in speziellen Iso- und subparametrischen Elementen erläutert, sowie deren partielle Ableitungen nach kartesischen Koordinaten. Dafür werden Shape-Funktionen, welche auf natürlichen Koordinaten basieren, eingeführt. Die Elemente, auf die sich diese Arbeit bezieht, sind Dreiecke und Tetraeder mit linearer, quadratischer und kubischer (nur beim Dreieck) Interpolation.

Dabei wird gezeigt, dass es möglich ist, die Linearität der Geometrie beizubehalten, während die Lagrangepolynome von höherem Grad sind.

Ein weiterer Teil der Arbeit beschreibt die mögliche Laufzeitoptimierung einer Monte-Carlo-Simulation durch Vorabberechnung von Konstanten.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>4</b>
1.1	Motivation . . . . .	4
1.2	Iso- und subparametrische Elemente . . . . .	5
1.3	Monte-Carlo-Methode . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Begriffe</b>	<b>6</b>
2.1	Interpolation . . . . .	6
2.2	Natürliche Koordinaten . . . . .	6
2.2.1	Definition der natürlichen Koordinaten . . . . .	7
2.2.2	Eigenschaften der natürlichen Koordinaten . . . . .	9
2.3	Shape-Funktionen . . . . .	10
2.3.1	Eigenschaften der Shape-Funktionen . . . . .	10
2.3.2	Herleitung der Shape-Funktionen . . . . .	11
2.3.3	Beweise . . . . .	13
<b>3</b>	<b>3-Punkt-Dreieck</b>	<b>15</b>
3.1	Übersicht . . . . .	15
3.2	Prüfung, ob ein Punkt innerhalb eines Dreiecks liegt . . . . .	16
3.3	Ableitung nach kartesischen Koordinaten . . . . .	17
<b>4</b>	<b>6-Punkt-Dreieck</b>	<b>18</b>
4.1	Übersicht . . . . .	18
4.2	Berechnungen im allgemeinen Fall . . . . .	18
4.2.1	Funktionsinterpolation . . . . .	18
4.2.2	Partielle Ableitungen . . . . .	19
4.3	Berechnungen mit linear interpolierten $f_4$ bis $f_6$ . . . . .	21
4.3.1	Funktionsinterpolation . . . . .	21
4.3.2	Partielle Ableitungen . . . . .	22
4.4	Realisierung/Optimierung in Java und C . . . . .	22
<b>5</b>	<b>10-Punkt-Dreieck</b>	<b>24</b>
5.1	Übersicht . . . . .	24
5.2	Die kartesischen Koordinaten von $P_4$ bis $P_{10}$ . . . . .	24
5.3	Funktionsinterpolation . . . . .	26
5.4	Partielle Ableitungen . . . . .	26
<b>6</b>	<b>4-Punkt-Tetraeder</b>	<b>29</b>
6.1	Übersicht . . . . .	29
6.2	Ableitung nach kartesischen Koordinaten . . . . .	30
<b>7</b>	<b>10-Punkt-Tetraeder</b>	<b>31</b>
7.1	Übersicht . . . . .	31
7.2	Funktionsinterpolation . . . . .	32
7.3	Partielle Ableitungen . . . . .	33
<b>8</b>	<b>Ausblick</b>	<b>36</b>
<b>9</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>36</b>

<b>A</b>	<b>Quellcode MonteCarlo.c</b>	<b>37</b>
<b>B</b>	<b>Quellcode MonteCarlo.java</b>	<b>42</b>
<b>C</b>	<b>Quellcode MonteCarloOpt.c</b>	<b>47</b>
<b>D</b>	<b>Quellcode MonteCarloOpt.java</b>	<b>51</b>
<b>E</b>	<b>Maple-Dokument</b>	<b>55</b>

## Tabellenverzeichnis

1	Lineare Koordinateninterpolation . . . . .	11
2	Übersicht 3-Punkt-Dreieck . . . . .	15
3	Partielle Ableitungen der natürlichen Koordinaten . . . . .	17
4	Übersicht 6-Punkt-Dreieck . . . . .	18
5	Übersicht 10-Punkt-Dreieck . . . . .	24
6	Übersicht 4-Punkt-Tetraeder . . . . .	29
7	Übersicht 10-Punkt-Tetraeder . . . . .	31

## Abbildungsverzeichnis

1	Normales Dreieck . . . . .	4
2	Ein mögliches 6-Punkt-Dreieck . . . . .	4
3	Spezialfall lineare Kanten . . . . .	4
4	Unterteilung in $A_1$ bis $A_3$ . . . . .	7
5	Konstantes $\zeta_1$ . . . . .	8
6	Q im 4-Punkt-Tetraeder . . . . .	8
7	Benachbarte Dreiecke . . . . .	14
8	Parallelogram aus $\vec{v}_1$ und $\vec{v}_2$ . . . . .	16
9	6-Punkt-Dreieck . . . . .	18
10	Einheitsquadrat mit acht Dreiecken . . . . .	22
11	10-Punkt-Dreieck mit linearen Kanten . . . . .	25
12	10-Punkt-Tetraeder mit linearen Kanten . . . . .	31

# 1 Einleitung

## 1.1 Motivation

Ausgangspunkt für diese Arbeit ist eine Monte-Carlo-Simulation der Flugbahnen von Atomen. Diesen wird zufällig ein Startpunkt, eine Bewegungsrichtung und eine Geschwindigkeit vorgegeben. Das Gebiet, durch das sich das Atom bewegt, wird durch ein Gitter aus Dreiecken (2D) oder Tetraedern (3D) diskretisiert. Dabei ist die Aufenthaltsdauer des Atoms in den einzelnen Gitterzellen von Interesse. Diese lässt sich berechnen aus den Schnittpunkten der Flugbahn mit den Kanten des Dreiecks bzw Tetraeders und der Geschwindigkeit des Atoms innerhalb des Dreiecks. Aus der Aufenthaltsdauer soll die Dichte von Atomen in dieser Zelle berechnet werden. Dafür sind an den Eckpunkten der Gitterzellen Funktionswerte definiert, von denen diese zu berechnende Dichte abhängt, z.B Temperatur, Magnetfeldstärke oder die Dichte anderer Atome.

Die Funktionswerte sollen möglichst präzise innerhalb der Zelle interpoliert werden. In einem normalen Dreieck (Abbildung 1) wäre die Funktion nur an drei Stellen definiert. Für eine genauere Interpolation (also höheren Grades) werden drei zusätzliche Punkte auf den Dreiecksseiten definiert - es entsteht ein 6-Punkt-Dreieck (Abbildung 2) mit parabolischen Kanten. Dadurch ist es möglich, Shape-Funktionen höherer Ordnung zu benutzen (beim 6-Punkt-Dreieck quadratisch, beim 10-Punkt-Dreieck kubisch) und somit genauere Annäherungen zu erhalten.

Um die Schnittpunkte der Teilchenbahn mit dem Dreieck möglichst effizient berechnen zu können, ist es sinnvoll dessen Kanten linear zu lassen. Dies geschieht, indem die zusätzlichen drei Punkte genau auf die Kanten gelegt werden (Abbildung 3). Die zu interpolierende Funktion ist aber an den zusätzlichen Punkten nicht wieder durch Interpolation, sondern unabhängig nach anderen Kriterien vorgebar. Damit bleibt die „Metrik“ linear, die Interpolation wird aber von höherer Ordnung und damit genauer. Die zusätzlichen Punkte können z.B. so gewählt werden, dass bestimmte Eigenschaften wie Divergenzfreiheit erfüllt werden.

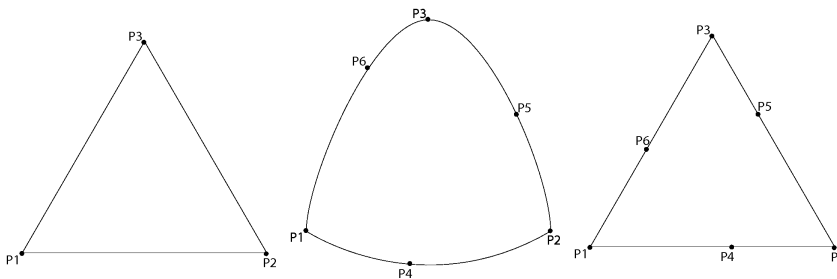


Abbildung 1: Normales Dreieck

Abbildung 2: Ein mögliches 6-Punkt-Dreieck

Abbildung 3: Spezialfall lineare Kanten

Definiert man im 3-dimensionalen einen weiteren Punkt pro TetraederKante erhält man ein 10-Punkt-Tetraeder, dessen Shape-Funktionen ebenfalls quadratisch sind.

Zur Zeit werden diese Teilchensimulationen nur mit linearen Funktionen auf gewöhnlichen 3-Punkt-Dreiecken und 4-Punkt-Tetraedern durchgeführt. Ziel dieser Arbeit war es die Berechnungen für Funktionen höherer Ordnung zu ermöglichen. Benötigt werden dafür die Funktionsinterpolation, sowie deren partielle Ableitungen nach  $x$  und  $y$  (und  $z$  im 3-dimensionalen).

## 1.2 Iso- und subparametrische Elemente

Die Gitterzellen, durch die ein Gebiet diskretisiert wird, bezeichnen wir als Elemente.

An die Geometrie eines Elementes wird ein Koordinatensystem angepasst, welches auf „natürlichen Koordinaten“ basiert. Dafür werden Polynome der Ordnung  $n$  benutzt. Für den Fall  $n = 1$  handelt es sich um eine Geometrie mit linearen Kanten (Abbildung 1 und 3), für  $n = 2$  um parabolische Kanten z.B. im allgemeinen 6-Punkt-Dreieck (Abbildung 2). Wird auf diesem Element eine Funktion definiert vom Grad  $m$ , so ist dieses Element für

$$\begin{aligned} n = m & \text{ isoparametrisch} \\ n < m & \text{ subparametrisch} \\ n > m & \text{ superparametrisch} \end{aligned}$$

Wir beschäftigen uns hier nur mit Elementen für die  $n = 1$  gilt, wegen der Effizianzforderung der Monte-Carlo-Methode bei geometrischen Berechnungen. Für das 6-Punkt-Dreieck und den 10-Punkt-Tetraeder ist der Grad  $m = 2$  und für das 10-Punkt-Dreieck gilt  $m = 3$ . Es handelt sich also um iso- und subparametrische Elemente.

## 1.3 Monte-Carlo-Methode

Monte-Carlo-Methoden beruhen auf der Verwendung von Zufallszahlen zur Lösung deterministischer oder stochastischer Probleme der experimentellen Mathematik (Modellierung von physikalischen Prozessen). Sie kommen immer dann zum Einsatz wenn die üblichen numerischen Methoden aufgrund der Komplexität der Problemstellung versagen.

Die Methode basiert auf dem Gesetz der großen Zahlen, d.h. dass „sich die relative Häufigkeit eines Zufallsergebnisses immer weiter an dessen Wahrscheinlichkeit annähert, je öfter das Zufallsexperiment durchgeführt wird“ [5]. Eine erste Anwendung der Monte-Carlo-Methode hat 1733 der Franzose Compte de Buffon erfunden [1]. Sein „Nadel-Experiment“ diente zur näherungsweise Berechnung von  $\pi$ . Wenn man eine Fläche mit parallelen Streifen des Abstands  $D$  hat und dort eine Nadel der Länge  $L$  fallen lässt, so dass sie zufällig landet, dann ist die Wahrscheinlichkeit  $p$  dafür, dass sie einen Streifen kreuzt

$$p = \frac{2L}{\pi D}$$

Führt man dieses Experiment sehr häufig aus, so entspricht diese Wahrscheinlichkeit dem Quotienten der kreuzenden Nadeln ( $n$ ) durch aller Nadeln ( $N$ ), also

$$\frac{2L}{\pi D} = \frac{n}{N} \Rightarrow \pi \approx \frac{2L}{D} \frac{N}{n}$$

Dies ist ein Beispiel für ein real durchgeführtes Zufalls-Experiment. Mit Hilfe von Computern können diese aber heute auch rein virtuell stattfinden und somit die Anzahl der Versuche stark erhöht werden.

## 2 Begriffe

### 2.1 Interpolation

Wenn an ausgewählten Punkten Funktionswerte definiert sind, so lassen sich die Funktionswerte zwischen diesen Punkten interpolieren, d.h. abschätzen. Es wird also eine kontinuierliche Funktion gesucht, welche die gegebenen Punkte mit den Funktionswerten trifft.

Das einfachste Beispiel ist eine lineare Interpolation, d.h. gegeben sind zwei Punkte mit deren Funktionswerten z.B.  $f(1) = 2$  und  $f(3) = 8$ . Nun lässt sich die sogenannte Interpolante bestimmen über die Geradengleichung

$$f(x) = \frac{8-2}{3-1}x + n$$

$n$  ist der y-Achsenabschnitt, der sich nun berechnen lässt  $2 = 3 \cdot 1 + n \Rightarrow n = -1$ . Die Interpolante lautet also  $f(x) = 3x - 1$ .

Damit lassen sich die Funktionswerte zwischen den Punkten  $(1, 2)$  und  $(3, 8)$  abschätzen, z.B.  $f(2) = 5$ .

Im Normalfall liegen der Interpolation jedoch mehr Werte zu Grunde, so dass komplizierte Interpolationspolynome (der Grad ist bestimmt durch die Anzahl Punkte - 1) oder andere Funktionen zum Einsatz kommen.

### 2.2 Natürliche Koordinaten

In „finite Elemente Algorithmen“ werden Interpolationen nicht in kartesischen, sondern sogenannten natürlichen Koordinaten, die auf ein Element beschränkt sind, durchgeführt. Wir wollen diese Konzepte der Interpolation auch für Monte-Carlo-Prozeduren nutzen. Deshalb werden nun zunächst diese natürlichen Koordinaten anhand des gewöhnlichen linearen Dreiecks eingeführt. Diese Einführung orientiert sich an Kapitel 15 von [3].

Alle Punkte innerhalb eines solchen Dreiecks sind darstellbar über drei natürliche Koordinaten  $\zeta_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ), von denen aber nur zwei unabhängig sind.



### 2.2.1 Definition der natürlichen Koordinaten

Ein beliebiger Punkt  $Q(x, y)$  in einem Dreieck  $P_1P_2P_3$  unterteilt dieses in drei disjunkte Dreiecke für die gilt

$$A = A_1 + A_2 + A_3 \quad (1)$$

mit  $A$  als Flächeninhalt des Dreiecks  $P_1P_2P_3$  (siehe Abbildung 4).

Die natürlichen Koordinaten des Punktes  $Q$  sind definiert als

$$\zeta_i = \frac{A_i}{A} \quad (2)$$

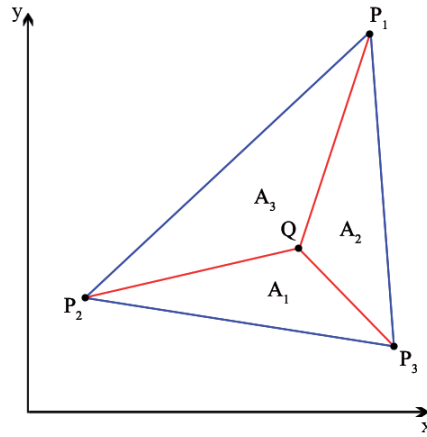


Abbildung 4: Unterteilung in  $A_1$  bis  $A_3$

d.h.  $\zeta_i = \zeta_i(x, y)$  ist die Transformation von kartesischen Koordinaten  $(x, y)$  in natürliche Koordinaten  $(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$ .

Der Flächeninhalt  $A$  lässt sich berechnen mit

$$A = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \end{vmatrix} = x_1(y_2 - y_3) + x_2(y_3 - y_1) + x_3(y_1 - y_2)$$

wenn die Punkte  $P_i(x_i, y_i)$  entgegen dem Uhrzeigersinn benannt werden, sonst ist  $A < 0$ . Für die Berechnung von  $A_1$  bis  $A_3$  gilt diese Bedingung ebenfalls.

$$A_1 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x & x_2 & x_3 \\ y & y_2 & y_3 \end{vmatrix} = \frac{1}{2}(xy_{23} + yx_{32} + x_2y_3 - x_3y_2)$$

$$A_2 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x & x_3 \\ y_1 & y & y_3 \end{vmatrix} = \frac{1}{2}(xy_{31} + yx_{13} + x_3y_1 - x_1y_3)$$

$$A_3 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x \\ y_1 & y_2 & y \end{vmatrix} = \frac{1}{2}(xy_{12} + yx_{21} + x_1y_2 - x_2y_1)$$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} x_2y_3 - x_3y_2 & y_{23} & x_{32} \\ x_3y_1 - x_1y_3 & y_{31} & x_{13} \\ x_1y_2 - x_2y_1 & y_{12} & x_{21} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ y \end{pmatrix} \quad (3)$$

mit

$$x_{ij} = x_i - x_j$$

$$y_{ij} = y_i - y_j$$

Wird der Punkt  $Q(x, y)$  entlang einer Parallelen zu  $\overline{P_2P_3}$  verschoben, so ändert sich  $A_1$  nicht, da die Grundseite und Höhe des Dreiecks  $P_2P_3Q$  gleich bleiben (siehe Abbildung 5). Somit ist auch  $\zeta_1$  entlang einer Parallelen zu  $\overline{P_2P_3}$  konstant. Auf  $\overline{P_2P_3}$  ist  $\zeta_1 = 0$ , da  $A_1 = 0$  und im Punkt  $P_1$  ist  $\zeta_1 = 1$ , da  $A_1 = A$ . Analoges gilt für die anderen natürlichen Koordinaten.

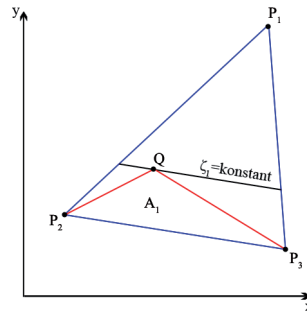


Abbildung 5: Konstantes  $\zeta_1$

Die Definition über den Flächenquotienten funktioniert für den linearen Tetraeder analog. Dort kann man sich die Bedeutung der natürlichen Koordinaten ähnlich vorstellen, nämlich über Volumenquotienten [2]. Jeder Punkt  $Q(x, y, z)$  in einem Tetraeder ( $P_1$  bis  $P_4$ ) unterteilt diesen in vier kleinere disjunkte Tetraeder:

1.  $P_2P_3P_4Q$
2.  $P_3P_4P_1Q$
3.  $P_4P_1P_2Q$
4.  $P_1P_2P_3Q$

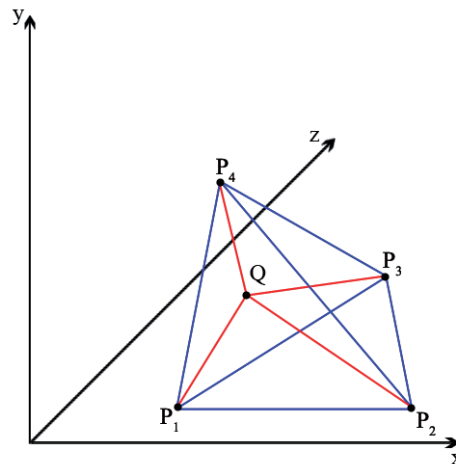


Abbildung 6: Q im 4-Punkt-Tetraeder

Nun lassen sich die natürlichen Koordinaten definieren als

$$\zeta_i = \frac{V_i}{V}$$

wobei  $V$  das Volumen des großen Tetraeders  $P_1P_2P_3P_4$  ist und  $V_i$  das Volumen des Tetraeders, bei dem der Eckpunkt  $P_i$  durch  $Q$  ersetzt wurde.

Auf die Anordnung der Eckpunkte im Tetraeder wird in Kapitel 6.1 auf Seite 29 eingegangen.

### 2.2.2 Eigenschaften der natürlichen Koordinaten

Aus den Gleichungen (1) und (2) folgt, dass die Summe aller natürlichen Koordinaten eines Punktes  $Q$  1 ergibt

$$\sum_{i=1}^3 \zeta_i = 1, \text{ d.h. } \zeta_3 = 1 - \zeta_2 - \zeta_1 \quad (4)$$

Die natürlichen Koordinaten können Werte im Bereich von 0 bis 1 annehmen, wobei  $\zeta_i$  1 im Eckpunkt Nummer  $i$  selbst sind und 0 in allen anderen Knoten. Zwischen den natürlichen und den kartesischen Koordinaten gilt die Beziehung

$$\sum_{i=1}^3 \zeta_i x_i = x \quad (5)$$

$$\sum_{i=1}^3 \zeta_i y_i = y \quad (6)$$

Zusammen mit der Bedingung (4) ergibt sich folgende Matrixschreibweise für ein Dreieck, welches durch die Eckpunkte  $P_1(x_1, y_1)$ ,  $P_2(x_2, y_2)$  und  $P_3(x_3, y_3)$  definiert ist

$$\begin{pmatrix} 1 \\ x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \end{pmatrix} \quad (7)$$

Die Transformation  $(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) \rightarrow (x, y)$  ist also linear.

Über Invertierung der Matrix in Gleichung (7) oder über die Formel (2) mit Gleichung (3) lassen sich die natürlichen Koordinaten in Abhängigkeit der Ortskoordinaten der Eckpunkte und des gegebenen Punktes  $Q(x, y)$  darstellen.

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \end{pmatrix} &= \frac{1}{2A} \begin{pmatrix} x_2 y_3 - x_3 y_2 & y_{23} & x_{32} \\ x_3 y_1 - x_1 y_3 & y_{31} & x_{13} \\ x_1 y_2 - x_2 y_1 & y_{12} & x_{21} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ y \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2A} \begin{pmatrix} 2A_{23} & y_{23} & x_{32} \\ 2A_{31} & y_{31} & x_{13} \\ 2A_{12} & y_{12} & x_{21} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ y \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (8)$$

mit

$$x_{ij} = x_i - x_j$$

$$y_{ij} = y_i - y_j$$

Dabei ist  $A_{ij}$  der Flächeninhalt eines Dreiecks bestehend aus den Punkten  $P_i$ ,  $P_j$  und dem Koordinatenursprung, daher

$$\begin{aligned} 2A_{23} &= \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & x_2 & x_3 \\ 0 & y_2 & y_3 \end{vmatrix} = x_2 y_3 - x_3 y_2 \\ 2A_{31} &= \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & 0 & x_3 \\ y_1 & 0 & y_3 \end{vmatrix} = x_3 y_1 - x_1 y_3 \\ 2A_{12} &= \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & 0 \\ y_1 & y_2 & 0 \end{vmatrix} = x_1 y_2 - x_2 y_1 \end{aligned}$$

## 2.3 Shape-Funktionen

Die Funktionsinterpolation wird in den oben definierten natürlichen Koordinaten über Lagrange-Interpolationspolynome durchgeführt. Es gilt also

$$F(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) = \sum_i f_i N_i(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) \quad (9)$$

wobei  $F$  das Interpolationspolynom ist,  $N_i$  die Shape-Funktionen in Form von Lagrange Polynomen und  $f_i$  die gegebenen Funktionswerte in den Punkten  $P_i$  sind.

Bei einer linearen Interpolation entsprechen die Shape-Funktionen den natürlichen Koordinaten selbst:

$$N_i = \zeta_i$$

Für die Elemente mit höherer Interpolationsordnung diskutieren wir weiter unten quadratische (6-Punkt-Dreieck, 10-Punkt-Tetraeder) und kubische (10-Punkt-Dreieck) Shape-Funktionen.

### 2.3.1 Eigenschaften der Shape-Funktionen

Wie für alle Lagrange Polynome gilt bei gegebenen Punkten  $P_j$

$$N_i(P_j) = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (10)$$

und dass ihre Summe in einem Punkt innerhalb des Dreiecks 1 ergibt

$$\sum_i N_i = 1$$

Geometrisch gelten die Beziehungen

$$\begin{aligned} \sum_i N_i x_i &= x \\ \sum_i N_i y_i &= y \end{aligned}$$

mit  $(x, y)$  als kartesische Koordinaten eines Punktes innerhalb des Dreiecks und  $(x_i, y_i)$  als kartesische Koordinaten der Knotenpunkte dieses Dreiecks.

Im 6-Punkt-Dreieck gilt also

$$\begin{pmatrix} 1 \\ x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 \\ y_1 & y_2 & y_3 & y_4 & y_5 & y_6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ N_4 \\ N_5 \\ N_6 \end{pmatrix} \quad (11)$$

Außerdem muss gelten, dass zwei benachbarte Dreiecke auf deren gemeinsamer Kante die selben Interpolationswerte erhalten, d.h. die Interpolation darf dann nur noch abhängig von dieser Linie und nicht mehr von dem dritten Punkt sein. Weiterhin darf die Interpolation innerhalb des Dreiecks nicht von der Reihenfolge, in der die Punkte benannt wurden, abhängig sein.

### 2.3.2 Herleitung der Shape-Funktionen

Als Beispiel diskutieren wir die Herleitung der quadratischen Shape-Funktionen des 6-Punkt-Dreiecks. Dieses Dreieck ist nicht nur definiert durch die drei Eckpunkte, sondern auch durch jeweils einen weiteren Punkt pro Kante. Da die Geometrie linear bleiben und nur die Funktion quadratisch werden soll, werden die Punkte  $P_4(x_4, y_4)$ ,  $P_5(x_5, y_5)$  und  $P_6(x_6, y_6)$  genau auf die linearen Verbindungen zwischen den Eckpunkten gelegt. Der Punkt  $P_4$  soll z.B. auf der Strecke  $\overline{P_1P_2}$  liegen, welche sich darstellen lässt durch

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} + \alpha_1 \begin{pmatrix} x_2 - x_1 \\ y_2 - y_1 \end{pmatrix}, \quad 0 \leq \alpha_1 \leq 1$$

So lassen sich die Koordinaten der Punkte  $P_4$ ,  $P_5$  und  $P_6$  berechnen.

$$\begin{aligned} x_4 &= (1 - \alpha_1)x_1 + \alpha_1x_2 & y_4 &= (1 - \alpha_1)y_1 + \alpha_1y_2 \\ x_5 &= (1 - \alpha_2)x_2 + \alpha_2x_3 & y_5 &= (1 - \alpha_2)y_2 + \alpha_2y_3 \\ x_6 &= (1 - \alpha_3)x_3 + \alpha_3x_1 & y_6 &= (1 - \alpha_3)y_3 + \alpha_3y_1 \end{aligned}$$

Tabelle 1: Lineare Koordinateninterpolation

Die  $\alpha_i$  dürfen nicht 0 oder 1 sein, d.h. die Punkte auf den Kanten dürfen nicht auf den Eckpunkten liegen, da sonst in den Shape-Funktionen die Nenner 0 werden.

Bestimmung der natürlichen Koordinaten des Punktes  $P_4$ :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ (1 - \alpha_1)x_1 + \alpha_1x_2 \\ (1 - \alpha_1)y_1 + \alpha_1y_2 \end{pmatrix}$$

Da weder  $x_3$  noch  $y_3$  auf der rechten Seite des Gleichungssystems vorkommen ergibt sich  $\zeta_3 = 0$  und es folgt  $\zeta_1 = 1 - \zeta_2$

$$\begin{aligned} \zeta_1x_1 + \zeta_2x_2 &= (1 - \alpha_1)x_1 + \alpha_1x_2 \\ (1 - \zeta_2)x_1 + \zeta_2x_2 &= x_1 - \alpha_1x_1 + \alpha_1x_2 \\ \zeta_2(x_2 - x_1) + x_1 &= \alpha_1(x_2 - x_1) + x_1 \\ \zeta_2 &= \alpha_1 \\ \Rightarrow \zeta_1 &= 1 - \alpha_1 \end{aligned}$$

Der Punkt  $P_4(x_4, y_4)$  hat also die natürlichen Koordinaten  $(1 - \alpha_1, \alpha_1, 0)$ . Die Berechnungen für  $P_5(x_5, y_5)$  und  $P_6(x_6, y_6)$  ergeben die natürlichen Koordinaten  $(0, 1 - \alpha_2, \alpha_2)$  und  $(\alpha_3, 0, 1 - \alpha_3)$ . In der Literatur wird gewöhnlich nur der Spezialfall für  $\alpha_i = \frac{1}{2}$  behandelt.

Um die Shape-Funktion  $N_1$  herzuleiten müssen wir die Bedingungen aus (10) erfüllen.  $N_1$  muss im Punkt  $P_1$  den Wert 1 annehmen. In den Punkten  $P_2$  bis  $P_6$  jedoch 0 sein.

Als Ansatz für eine quadratische Shapefunktion wählen wir:

$$N_i(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) = a_1\zeta_1 + a_2\zeta_2 + a_3\zeta_3 + a_4\zeta_1\zeta_2 + a_5\zeta_2\zeta_3 + a_6\zeta_3\zeta_1$$

Mit den natürlichen Koordinaten von  $P_1$  bis  $P_6$  ergeben sich die Gleichungen

$$\begin{aligned}
N_1(1, 0, 0) &= 1 \Rightarrow a_1 = 1 \\
N_1(0, 1, 0) &= 0 \Rightarrow a_2 = 0 \\
N_1(0, 0, 1) &= 0 \Rightarrow a_3 = 0 \\
N_1(1 - \alpha_1, \alpha_1, 0) &= 0 \Rightarrow a_4 = -\frac{1}{\alpha_1} \\
N_1(0, 1 - \alpha_2, \alpha_2) &= 0 \Rightarrow a_5 = 0 \\
N_1(\alpha_3, 0, 1 - \alpha_3) &= 0 \Rightarrow a_6 = \frac{1}{\alpha_3 - 1}
\end{aligned}$$

Die Shape-Funktion  $N_1$  lautet also

$$N_1(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) = \zeta_1 - \frac{\zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\zeta_3 \zeta_1}{\alpha_3 - 1}$$

Die Herleitung für  $N_2$  und  $N_3$  verläuft analog und ergibt

$$\begin{aligned}
N_2(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) &= \zeta_2 - \frac{\zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2} + \frac{\zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1 - 1} \\
N_3(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) &= \zeta_3 - \frac{\zeta_3 \zeta_1}{\alpha_3} + \frac{\zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2 - 1}
\end{aligned}$$

Für die Shape-Funktion  $N_4$  gilt

$$\begin{aligned}
N_4(1, 0, 0) &= 0 \Rightarrow a_1 = 0 \\
N_4(0, 1, 0) &= 0 \Rightarrow a_2 = 0 \\
N_4(0, 0, 1) &= 0 \Rightarrow a_3 = 0 \\
N_4(1 - \alpha_1, \alpha_1, 0) &= 1 \Rightarrow a_4 = -\frac{1}{\alpha_1(\alpha_1 - 1)} \\
N_4(0, 1 - \alpha_2, \alpha_2) &= 0 \Rightarrow a_5 = 0 \\
N_4(\alpha_3, 0, 1 - \alpha_3) &= 0 \Rightarrow a_6 = 0
\end{aligned}$$

Also

$$N_4(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) = -\frac{\zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1(\alpha_1 - 1)}$$

und

$$\begin{aligned}
N_5(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) &= -\frac{\zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2(\alpha_2 - 1)} \\
N_6(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) &= -\frac{\zeta_3 \zeta_1}{\alpha_3(\alpha_3 - 1)}
\end{aligned}$$

Ein anderer Ansatz für eine quadratische Shape-Funktion wäre auch

$$N_i(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) = a_1 \zeta_1^2 + a_2 \zeta_2^2 + a_3 \zeta_3^2 + a_4 \zeta_1 \zeta_2 + a_5 \zeta_2 \zeta_3 + a_6 \zeta_3 \zeta_1$$

Durch Einsetzen der Gleichungen ergibt sich

$$N_1(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) = \zeta_1^2 + \frac{(-1 + \alpha_1)\zeta_1\zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\alpha_3\zeta_3\zeta_1}{-1 + \alpha_3}$$

Es lässt sich zeigen, dass diese beiden Shape-Funktionen identisch sind:

$$\begin{aligned} \zeta_1^2 + \frac{(-1 + \alpha_1)\zeta_1\zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\alpha_3\zeta_3\zeta_1}{-1 + \alpha_3} &= \zeta_1 - \frac{\zeta_1\zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\zeta_3\zeta_1}{-1 + \alpha_3} \\ &\quad \text{ersetze } \zeta_3 = 1 - \zeta_1 - \zeta_2 \\ \zeta_1^2 + \frac{(-1 + \alpha_1)\zeta_1\zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\alpha_3(1 - \zeta_1 - \zeta_2)\zeta_1}{-1 + \alpha_3} &= \zeta_1 - \frac{\zeta_1\zeta_2}{\alpha_1} + \frac{(1 - \zeta_1 - \zeta_2)\zeta_1}{-1 + \alpha_3} \\ \frac{\zeta_1(-\zeta_1\alpha_1 + \zeta_2 - \zeta_2\alpha_3 - \zeta_2\alpha_1 + \alpha_1\alpha_3)}{\alpha_1(-1 + \alpha_3)} &= \frac{\zeta_1(-\zeta_1\alpha_1 + \zeta_2 - \zeta_2\alpha_3 - \zeta_2\alpha_1 + \alpha_1\alpha_3)}{\alpha_1(-1 + \alpha_3)} \end{aligned}$$

Für den Spezialfall  $\alpha_i = \frac{1}{2}$  erhalten wir die Shapefunktion

$$N_1 = 2\zeta_1^2 - 1\zeta_1 = \zeta_1(2\zeta_1 - 1)$$

wie in [3] oder [4] angegeben.

Die Shape-Funktionen sind eindeutig, da sie eigentlich nur durch zwei unabhängige Parameter bestimmt sind, denn z.B.  $\zeta_3 = 1 - \zeta_2 - \zeta_1$

Ein Polynom zweiten Grades zweier Veränderlicher hängt von sechs Koeffizienten ab, da

$$p(x, y) = a_0 + a_1x + a_2y + a_3xy + a_4x^2 + a_5y^2$$

Bei sechs gegebenen Gleichungen/Punkten sind diese eindeutig bestimmt.

### 2.3.3 Beweise

Zunächst wird gezeigt, dass die Summe aller Shape-Funktionen für einen Punkt  $Q(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$  den Wert 1 ergibt:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^6 N_i &= \underbrace{\zeta_1 - \frac{\zeta_1\zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\zeta_3\zeta_1}{\alpha_3 - 1}}_{N_1} + \underbrace{\zeta_2 - \frac{\zeta_2\zeta_3}{\alpha_2} + \frac{\zeta_1\zeta_2}{\alpha_1 - 1}}_{N_2} + \underbrace{\zeta_3 - \frac{\zeta_3\zeta_1}{\alpha_3} + \frac{\zeta_2\zeta_3}{\alpha_2 - 1}}_{N_3} \\ &\quad + \underbrace{\frac{-\zeta_1\zeta_2}{\alpha_1(\alpha_1 - 1)}}_{N_4} + \underbrace{\frac{-\zeta_2\zeta_3}{\alpha_2(\alpha_2 - 1)}}_{N_5} + \underbrace{\frac{-\zeta_3\zeta_1}{\alpha_3(\alpha_3 - 1)}}_{N_6} \\ &= \zeta_1 + \zeta_2 + \zeta_3 - \frac{\zeta_1\zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\zeta_1\zeta_2}{\alpha_1 - 1} - \frac{\zeta_1\zeta_2}{\alpha_1(\alpha_1 - 1)} \\ &\quad - \frac{\zeta_2\zeta_3}{\alpha_2} + \frac{\zeta_2\zeta_3}{\alpha_2 - 1} - \frac{\zeta_2\zeta_3}{\alpha_2(\alpha_2 - 1)} - \frac{\zeta_3\zeta_1}{\alpha_3} + \frac{\zeta_3\zeta_1}{\alpha_3 - 1} - \frac{\zeta_3\zeta_1}{\alpha_3(\alpha_3 - 1)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \underbrace{\zeta_1 + \zeta_2 + \zeta_3}_1 + \underbrace{\frac{-(\alpha_1 - 1)\zeta_1\zeta_2 + \alpha_1\zeta_1\zeta_2 - \zeta_1\zeta_2}{(\alpha_1 - 1)\alpha_1}}_0 \\
&+ \underbrace{\frac{-(\alpha_2 - 1)\zeta_2\zeta_3 + \alpha_2\zeta_2\zeta_3 - \zeta_2\zeta_3}{(\alpha_2 - 1)\alpha_2}}_0 + \underbrace{\frac{-(\alpha_3 - 1)\zeta_3\zeta_1 + \alpha_3\zeta_3\zeta_1 - \zeta_3\zeta_1}{(\alpha_3 - 1)\alpha_3}}_0 \\
&= 1
\end{aligned}$$

Außerdem müssen zwei benachbarte Dreiecke auf ihrer gemeinsamen Kante die

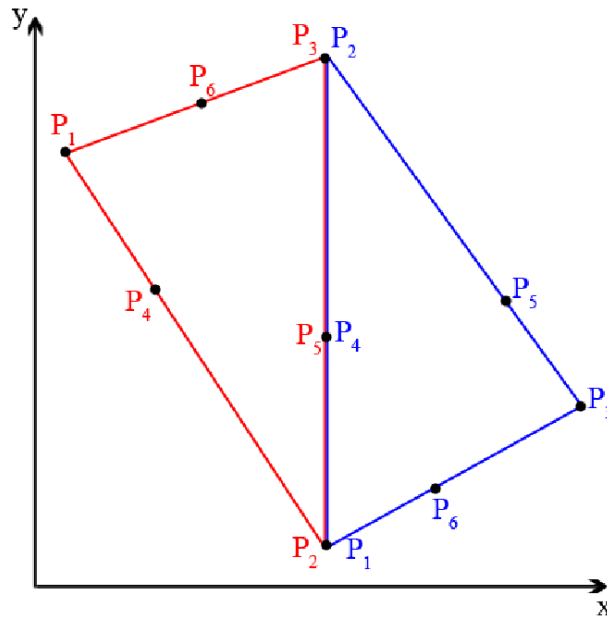


Abbildung 7: Benachbarte Dreiecke

selbe Funktionsinterpolation haben. Betrachtet man das rote Dreieck in Abbildung 7, so darf die Funktionsinterpolation nur noch von  $\alpha_2, f_2, f_3, f_5, \zeta_2$  und  $\zeta_3$  abhängig sein. Das selbe gilt für das blaue Dreieck bei der die Interpolation der Strecke  $\overline{P_1P_2}$  nur noch von  $\alpha_1, f_1, f_2, f_4, \zeta_1$  und  $\zeta_2$  abhängig ist, wobei diese Werte eben genau den eben genannten im roten Dreieck entsprechen müssen. Die Funktionsinterpolation lautet im allgemeinen Fall (Kapitel 4.2.1):

$$\begin{aligned}
F &= \sum_{i=1}^6 f_i N_i \\
&= \left( \left( -\frac{f_4}{\alpha_1(-1+\alpha_1)} + \frac{f_2}{-1+\alpha_1} - \frac{f_1}{\alpha_1} \right) \zeta_2 \right. \\
&+ \left. \left( \frac{f_1}{-1+\alpha_3} - \frac{f_6}{\alpha_3(-1+\alpha_3)} - \frac{f_3}{\alpha_3} \right) \zeta_3 + f_1 \right) \zeta_1 \\
&+ \left( \left( -\frac{f_2}{\alpha_2} - \frac{f_5}{\alpha_2(-1+\alpha_2)} + \frac{f_3}{-1+\alpha_2} \right) \zeta_3 + f_2 \right) \zeta_2 + f_3 \zeta_3
\end{aligned}$$



Wird nun  $\zeta_1 = 0$  gesetzt, so bleibt nur der hintere Teil übrig, also

$$F(0, \zeta_2, \zeta_3) = \left( \left( -\frac{f_2}{\alpha_2} - \frac{f_5}{\alpha_2(-1 + \alpha_2)} + \frac{f_3}{-1 + \alpha_2} \right) \zeta_3 + f_2 \right) \zeta_2 + f_3 \zeta_3$$

und diese Gleichung ist nur von den oben genannten Parametern abhängig. Setzt man  $\zeta_2 = 0$ , so erhält man eine Gleichung, die nur von  $\alpha_3, f_1, f_3, f_6, \zeta_1$  und  $\zeta_3$  abhängig ist und mit  $\zeta_3 = 0$  funktioniert es analog.

Mit Shape-Funktionen vom Grad 2 lässt sich die Koordinatentransformation des allgemeinen 6-Punkt-Dreiecks

$$\begin{pmatrix} 1 \\ x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 \\ y_1 & y_2 & y_3 & y_4 & y_5 & y_6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ \vdots \\ N_6 \end{pmatrix}$$

nur sehr kompliziert invertieren, daher werden die drei zusätzlichen Punkte wie bereits erwähnt auf die linearen Kanten gelegt (siehe Tabelle 1), denn so ergibt die Auflösung von

$$\begin{pmatrix} 1 \\ x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & (1 - \alpha_1)x_1 + \alpha_1 x_2 & (1 - \alpha_2)x_2 + \alpha_2 x_3 & (1 - \alpha_3)x_3 + \alpha_3 x_1 \\ y_1 & y_2 & y_3 & (1 - \alpha_1)y_1 + \alpha_1 y_2 & (1 - \alpha_2)y_2 + \alpha_2 y_3 & (1 - \alpha_3)y_3 + \alpha_3 y_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ \vdots \\ N_6 \end{pmatrix}$$

nach  $\zeta_i$  die bekannte Formel (8) auf dem 3-Punkt-Dreieck. Es ist also möglich die Geometrie des Dreiecks „einfach“ zu belassen, während die Interpolation auf dessen Fläche durch ein quadratisches Interpolationspolynom eine höhere Genauigkeit annimmt.

## 3 3-Punkt-Dreieck

### 3.1 Übersicht

$i$	$N_i$	$P_i(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$
1	$\zeta_1$	$(1, 0, 0)$
2	$\zeta_2$	$(0, 1, 0)$
3	$\zeta_3$	$(0, 0, 1)$

Tabelle 2: Übersicht 3-Punkt-Dreieck

Für die kartesischen Koordinaten gilt bei allen Dreiecken

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^3 \zeta_i \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix}$$

mit gegebenen natürlichen Koordinaten.

### 3.2 Prüfung, ob ein Punkt innerhalb eines Dreiecks liegt

Eine einfache Methode zur Feststellung, ob ein Punkt innerhalb eines Dreiecks liegt, ist es die natürlichen Koordinaten dieses Punktes zu berechnen und zu überprüfen, ob die Bedingung  $0 \leq \zeta_i \leq 1$  erfüllt ist. Wenn sie nicht erfüllt ist, so ist entweder  $A_i > A$  oder  $A_i < 0$ , also liegt der Punkt außerhalb des Dreiecks. Eine Realisierung in Java könnte wie folgt aussehen:

Das Dreieck ist definiert durch die globalen Variablen  $x[i]$  und  $y[i]$ ,  $i = 0,1,2$

```
public boolean contains(final double a, final double b) {
    if (x[1]*(y[2]-b)+x[2]*(b-y[1])+a*(y[1]-y[2]) < 0 ||
        x[2]*(y[0]-b)+x[0]*(b-y[2])+a*(y[2]-y[0]) < 0 ||
        x[0]*(y[1]-b)+x[1]*(b-y[0])+a*(y[0]-y[1]) < 0)
        return false;
    return true;
}
```

Eine andere Methode ist es über die Linearkombination der Richtungsvektoren des Dreiecks zu argumentieren. Die Richtungsvektoren lauten

$$\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} x_2 - x_1 \\ y_2 - y_1 \end{pmatrix}, \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} x_3 - x_1 \\ y_3 - y_1 \end{pmatrix}$$

Unter der Voraussetzung, dass  $\vec{v}_1$  und  $\vec{v}_2$  linear unabhängig sind, ist jeder Punkt im  $\mathbb{R}^2$  als Linearkombination dieser Vektoren darstellbar, also

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \vec{v}_1 + \mu \vec{v}_2, \quad \lambda, \mu \in \mathbb{R}$$

Wenn vom Startpunkt  $(x_1, y_1)$  zu einem beliebigen Punkt  $Q(x, y)$  der Richtungsvektor als Linearkombination der beiden Richtungsvektoren  $\vec{v}_1$  und  $\vec{v}_2$  dargestellt wird, erhalten wir

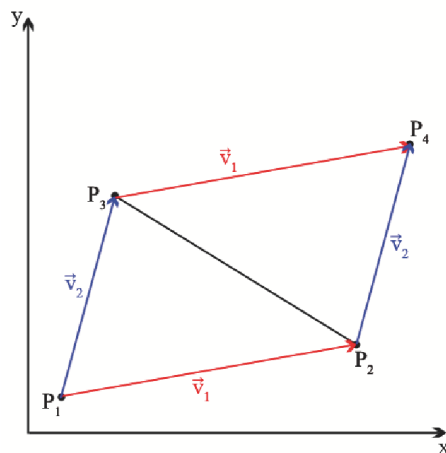


Abbildung 8: Parallelogramm aus  $\vec{v}_1$  und  $\vec{v}_2$

$$\begin{pmatrix} x - x_1 \\ y - y_1 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_2 - x_1 \\ y_2 - y_1 \end{pmatrix} + \mu \begin{pmatrix} x_3 - x_1 \\ y_3 - y_1 \end{pmatrix}$$

Gilt  $0 \leq \lambda, \mu \leq 1$ , so liegt der Punkt  $Q$  in dem von den beiden Richtungsvektoren aufgespannten Parallelogramm, welches seinen Ausgangspunkt in  $P_1$  hat. Damit  $Q$  auch im Dreieck  $P_1P_2P_3$  liegt muss sogar noch  $\lambda + \mu \leq 1$  gelten.

### 3.3 Ableitung nach kartesischen Koordinaten

Für das gewöhnliche 3-Punkt-Dreieck gilt an einem Punkt  $Q(x, y)$

$$F = \sum_{i=1}^3 f_i \zeta_i$$

und somit an diesem Punkt

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \sum_{i=1}^3 f_i \frac{\partial \zeta_i}{\partial x}$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = \sum_{i=1}^3 f_i \frac{\partial \zeta_i}{\partial y}$$

Die partiellen Ableitungen von  $\zeta_i$  nach  $x$  und  $y$  lassen sich aus der Formel (8) errechnen.

$$\frac{\partial \zeta_1}{\partial x} = \frac{1}{2A} y_{23} \quad \frac{\partial \zeta_1}{\partial y} = \frac{1}{2A} x_{32}$$

$$\frac{\partial \zeta_2}{\partial x} = \frac{1}{2A} y_{31} \quad \frac{\partial \zeta_2}{\partial y} = \frac{1}{2A} x_{13}$$

$$\frac{\partial \zeta_3}{\partial x} = \frac{1}{2A} y_{12} \quad \frac{\partial \zeta_3}{\partial y} = \frac{1}{2A} x_{21}$$

Tabelle 3: Partielle Ableitungen der natürlichen Koordinaten

Da  $y_{ij} = -y_{ji}$  gilt kann man also die partielle Ableitung der natürlichen Koordinaten nach  $y$  aus der partiellen Ableitung nach  $x$  herleiten indem alle  $y_{ij}$  durch  $x_{ij}$  ersetzt werden und ein negatives Vorzeichen vorangestellt wird. Dies ist bei späteren Ableitungen von Nutzen.

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{1}{2A} (f_1 y_{23} + f_2 y_{31} + f_3 y_{12}) \quad (12)$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = -\frac{1}{2A} (f_1 x_{23} + f_2 x_{31} + f_3 x_{12}) \quad (13)$$

$$(14)$$

Die partiellen Ableitungen von  $F$  an einem Punkt  $Q(x, y)$  im 3-Punkt-Dreieck sind also konstant, d.h. unabhängig von  $Q$  und lassen sich im Vorhinein berechnen. Die Bezeichnungen  $x_{ij} = x_i - x_j$  und  $y_{ij} = y_i - y_j$  gelten auch in allen weiteren Ableitungen und Formeln.

## 4 6-Punkt-Dreieck

### 4.1 Übersicht

$i$	$N_i$	$P_i(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$
1	$\zeta_1 - \frac{\zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\zeta_3 \zeta_1}{-1 + \alpha_3}$	$(1, 0, 0)$
2	$\zeta_2 - \frac{\zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2} + \frac{\zeta_1 \zeta_2}{-1 + \alpha_1}$	$(0, 1, 0)$
3	$\zeta_3 - \frac{\zeta_3 \zeta_1}{\alpha_3} + \frac{\zeta_2 \zeta_3}{-1 + \alpha_2}$	$(0, 0, 1)$
4	$-\frac{\zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1(-1 + \alpha_1)}$	$(1 - \alpha_1, \alpha_1, 0)$
5	$-\frac{\zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2(-1 + \alpha_2)}$	$(0, 1 - \alpha_2, \alpha_2)$
6	$-\frac{\zeta_3 \zeta_1}{\alpha_3(-1 + \alpha_3)}$	$(\alpha_3, 0, 1 - \alpha_3)$

Tabelle 4: Übersicht 6-Punkt-Dreieck

Das 6-Punkt-Dreieck ist durch die drei Eckpunkte  $P_1, P_2$  und  $P_3$ , sowie einem Punkt pro Kante definiert ( $P_4$  bis  $P_6$ ). Diese Punkte können beliebig auf den Kanten verschoben werden indem die  $\alpha_i$  variiert werden. Jedoch dürfen die Punkte  $P_4, P_5$  und  $P_6$  nicht auf den Eckpunkten selbst liegen, also

$$0 < \alpha_i < 1$$

(siehe Kapitel 2.3.2 auf Seite 11).

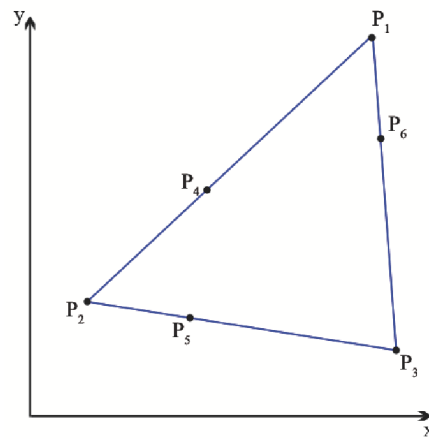


Abbildung 9: 6-Punkt-Dreieck

## 4.2 Berechnungen im allgemeinen Fall

### 4.2.1 Funktionsinterpolation

Mit dem Lagrange-Interpolationspolynom

$$F = \sum_{i=1}^6 f_i N_i$$

lässt sich der Funktionswert interpolieren

$$\begin{aligned}
F = & f_1 \left( \zeta_1 - \frac{\zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\zeta_3 \zeta_1}{-1 + \alpha_3} \right) + f_2 \left( \zeta_2 - \frac{\zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2} + \frac{\zeta_1 \zeta_2}{-1 + \alpha_1} \right) \\
& + f_3 \left( \zeta_3 - \frac{\zeta_3 \zeta_1}{\alpha_3} + \frac{\zeta_2 \zeta_3}{-1 + \alpha_2} \right) - \frac{f_4 \zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1)} \\
& - \frac{f_5 \zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2)} - \frac{f_6 \zeta_3 \zeta_1}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3)}
\end{aligned}$$

Dies lässt sich z.B. mit Maple nach den natürlichen Koordinaten auflösen:

$$\begin{aligned}
F = & \left( \left( -\frac{f_4}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1)} + \frac{f_2}{-1 + \alpha_1} - \frac{f_1}{\alpha_1} \right) \zeta_2 \right. \\
& + \left. \left( \frac{f_1}{-1 + \alpha_3} - \frac{f_6}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3)} - \frac{f_3}{\alpha_3} \right) \zeta_3 + f_1 \right) \zeta_1 \\
& + \left( \left( -\frac{f_2}{\alpha_2} - \frac{f_5}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2)} + \frac{f_3}{-1 + \alpha_2} \right) \zeta_3 + f_2 \right) \zeta_2 + f_3 \zeta_3 \\
= & (\nu_1 \zeta_2 + \nu_2 \zeta_3 + f_1) \zeta_1 + (\nu_3 \zeta_3 + f_2) \zeta_2 + f_3 \zeta_3
\end{aligned}$$

Die  $\nu_i (i = 1..3)$  lassen sich für jedes Dreieck vorab berechnen, denn sie sind unabhängig von dem Punkt  $Q = (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$ . In ihnen sind nur die Konstanten eines Dreiecks ( $f_1$  bis  $f_6$  und  $\alpha_1$  bis  $\alpha_3$ ) enthalten.

#### 4.2.2 Partielle Ableitungen

Nun wird dieser interpolierte Funktionswert partiell nach den kartesischen Koordinaten abgeleitet. Dabei ist die Kettenregel zu beachten, denn zunächst werden die Shape-Funktionen nach den natürlichen Koordinaten abgeleitet:

$$\vec{\nabla} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \zeta_1} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta_2} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta_3} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla} N_1 = & \begin{pmatrix} 1 - \frac{\zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\zeta_3}{-1 + \alpha_3} \\ -\frac{\zeta_1}{\alpha_1} \\ \frac{\zeta_1}{-1 + \alpha_3} \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_2 = & \begin{pmatrix} -\frac{\zeta_2}{-1 + \alpha_1} \\ 1 - \frac{\zeta_3}{\alpha_2} + \frac{\zeta_1}{-1 + \alpha_1} \\ -\frac{\zeta_2}{\alpha_2} \end{pmatrix} \\
\vec{\nabla} N_3 = & \begin{pmatrix} -\frac{\zeta_3}{\alpha_3} \\ \frac{\zeta_3}{-1 + \alpha_2} \\ 1 - \frac{\zeta_1}{\alpha_3} + \frac{\zeta_2}{-1 + \alpha_2} \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_4 = & \begin{pmatrix} -\frac{\zeta_2}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1)} \\ -\frac{\zeta_1}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1)} \\ 0 \end{pmatrix} \\
\vec{\nabla} N_5 = & \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{\zeta_3}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2)} \\ -\frac{\zeta_2}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2)} \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_6 = & \begin{pmatrix} -\frac{\zeta_3}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3)} \\ 0 \\ -\frac{\zeta_1}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3)} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Danach werden die natürlichen Koordinaten nach  $x$  und  $y$  wie in Tabelle 3 auf Seite 17 abgeleitet.

Aus dem interpolierten Funktionswert

$$F = \sum_{i=1}^6 f_i N_i$$

wird nach Kettenregel

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x} &= \sum_{i=1}^6 f_i \left( \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_1} \frac{\partial \zeta_1}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_2} \frac{\partial \zeta_2}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_3} \frac{\partial \zeta_3}{\partial x} \right) \\ &= \left( \left( 1 - \frac{\zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\zeta_3}{-1 + \alpha_3} \right) \frac{(y_2 - y_3)}{2A} + \frac{\zeta_1(-y_3 + y_1)}{\alpha_1 2A} + \frac{\zeta_1(-y_2 + y_1)}{(-1 + \alpha_3) 2A} \right) f_1 \\ &\quad + \left( \frac{\zeta_2(y_2 - y_3)}{(-1 + \alpha_1) 2A} - \left( 1 - \frac{\zeta_3}{\alpha_2} + \frac{\zeta_1}{-1 + \alpha_1} \right) \frac{(-y_3 + y_1)}{(2A)} - \frac{\zeta_2(-y_2 + y_1)}{\alpha_2 2A} \right) f_2 \\ &\quad + \left( -\frac{\zeta_3(y_2 - y_3)}{\alpha_3 2A} - \frac{\zeta_3(-y_3 + y_1)}{(-1 + \alpha_2) 2A} + \left( 1 - \frac{\zeta_1}{\alpha_3} + \frac{\zeta_2}{-1 + \alpha_2} \right) \frac{(-y_2 + y_1)}{2A} \right) f_3 \\ &\quad + \left( -\frac{\zeta_2(y_2 - y_3)}{\alpha_1(-1 + \alpha_1) 2A} + \frac{\zeta_1(-y_3 + y_1)}{\alpha_1(-1 + \alpha_1) 2A} \right) f_4 \\ &\quad + \left( \frac{\zeta_3(-y_3 + y_1)}{\alpha_2(-1 + \alpha_2) 2A} - \frac{\zeta_2(-y_2 + y_1)}{\alpha_2(-1 + \alpha_2) 2A} \right) f_5 \\ &\quad + \left( -\frac{\zeta_3(y_2 - y_3)}{\alpha_3(-1 + \alpha_3) 2A} - \frac{\zeta_1(-y_2 + y_1)}{\alpha_3(-1 + \alpha_3) 2A} \right) f_6 \\ &= \frac{1}{2A} \left( \left( \left( \frac{y_{13}}{\alpha_1} + \frac{y_{12}}{(-1 + \alpha_3)} \right) f_1 - \frac{y_{12}f_3}{\alpha_3} - \frac{y_{13}f_2}{(-1 + \alpha_1)} + \frac{y_{13}f_4}{\alpha_1(-1 + \alpha_1)} - \frac{y_{12}f_6}{\alpha_3(-1 + \alpha_3)} \right) \zeta_1 \right. \\ &\quad + \left( \left( -\frac{y_{12}}{\alpha_2} + \frac{y_{23}}{(-1 + \alpha_1)} \right) f_2 - \frac{y_{23}f_1}{\alpha_1} + \frac{y_{12}f_3}{(-1 + \alpha_2)} - \frac{y_{12}f_5}{\alpha_2(-1 + \alpha_2)} - \frac{y_{23}f_4}{\alpha_1(-1 + \alpha_1)} \right) \zeta_2 \\ &\quad + \left( \left( -\frac{y_{23}}{\alpha_3} - \frac{y_{13}}{(-1 + \alpha_2)} \right) f_3 + \frac{y_{13}f_2}{\alpha_2} + \frac{y_{23}f_1}{(-1 + \alpha_3)} - \frac{y_{23}f_6}{\alpha_3(-1 + \alpha_3)} + \frac{y_{13}f_5}{\alpha_2(-1 + \alpha_2)} \right) \zeta_3 \\ &\quad \left. + y_{23}f_1 - y_{13}f_2 + y_{12}f_3 \right) \\ \frac{\partial F}{\partial y} &= -\frac{1}{2A} \left( \left( \left( \frac{x_{13}}{\alpha_1} + \frac{x_{12}}{(-1 + \alpha_3)} \right) f_1 - \frac{x_{12}f_3}{\alpha_3} - \frac{x_{13}f_2}{(-1 + \alpha_1)} + \frac{x_{13}f_4}{\alpha_1(-1 + \alpha_1)} - \frac{x_{12}f_6}{\alpha_3(-1 + \alpha_3)} \right) \zeta_1 \right. \\ &\quad + \left( \left( -\frac{x_{12}}{\alpha_2} + \frac{x_{23}}{(-1 + \alpha_1)} \right) f_2 - \frac{x_{23}f_1}{\alpha_1} + \frac{x_{12}f_3}{(-1 + \alpha_2)} - \frac{x_{12}f_5}{\alpha_2(-1 + \alpha_2)} - \frac{x_{23}f_4}{\alpha_1(-1 + \alpha_1)} \right) \zeta_2 \\ &\quad + \left( \left( -\frac{x_{23}}{\alpha_3} - \frac{x_{13}}{(-1 + \alpha_2)} \right) f_3 + \frac{x_{13}f_2}{\alpha_2} + \frac{x_{23}f_1}{(-1 + \alpha_3)} - \frac{x_{23}f_6}{\alpha_3(-1 + \alpha_3)} + \frac{x_{13}f_5}{\alpha_2(-1 + \alpha_2)} \right) \zeta_3 \\ &\quad \left. + x_{23}f_1 - x_{13}f_2 + x_{12}f_3 \right) \end{aligned}$$

Die beiden partiellen Ableitungen lassen sich in der Form

$$\nu_1 \zeta_1 + \nu_2 \zeta_2 + \nu_3 \zeta_3 + \nu_4$$

schreiben, wobei die  $\nu_i$  pro Dreieck konstant sind (wie beim interpolierten Funktionswert). Will man also diese Konstanten in der Monte-Carlo-Simulation vorab berechnen, so sind für jede partielle Ableitung vier Gleitkomma-Koeffizienten nötig. Zusammen mit den drei Koeffizienten des Funktionswertes werden also pro Dreieck 11 Gleitkommazahlen benötigt.

### 4.3 Berechnungen mit linear interpolierten $f_4$ bis $f_6$

Diese Berechnungen dienen zur Kontrolle. Da bei linear interpolierten Funktionswerten in den Punkten  $P_4$  bis  $P_6$  keine neuen Information hinzukommen, muss sich die Berechnung auf die des 3-Punkt-Dreiecks reduzieren.

#### 4.3.1 Funktionsinterpolation

$$\begin{aligned} f_4 &= (1 - \alpha_1)f_1 + \alpha_1 f_2 \\ f_5 &= (1 - \alpha_2)f_2 + \alpha_2 f_3 \\ f_6 &= (1 - \alpha_3)f_3 + \alpha_3 f_1 \end{aligned}$$

Unter Verwendung der in Tabelle 4 auf Seite 18 angegebenen Shape-Funktionen für das 6-Punkt-Dreieck lässt sich der interpolierte Funktionswert  $F(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$  eines Punktes  $Q$  mit Hilfe der Formel (9) berechnen.

$$\begin{aligned} F(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) &= \sum_{i=1}^6 f_i N_i \\ &= f_1 \left( \zeta_1 - \frac{\zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\zeta_3 \zeta_1}{-1 + \alpha_3} \right) + f_2 \left( \zeta_2 - \frac{\zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2} + \frac{\zeta_1 \zeta_2}{-1 + \alpha_1} \right) \\ &\quad + f_3 \left( \zeta_3 - \frac{\zeta_3 \zeta_1}{\alpha_3} + \frac{\zeta_2 \zeta_3}{-1 + \alpha_2} \right) - \frac{((1 - \alpha_1) f_1 + \alpha_1 f_2) \zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1)} \\ &\quad - \frac{((1 - \alpha_2) f_2 + \alpha_2 f_3) \zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2)} - \frac{((1 - \alpha_3) f_3 + \alpha_3 f_1) \zeta_3 \zeta_1}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3)} \\ &= \left( \zeta_1 - \frac{\zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1} - \frac{(1 - \alpha_1) \zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1)} \right) f_1 + \left( \zeta_2 - \frac{\zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2} - \frac{(1 - \alpha_2) \zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2)} \right) f_2 \\ &\quad + \left( \zeta_3 - \frac{\zeta_3 \zeta_1}{\alpha_3} - \frac{(1 - \alpha_3) \zeta_3 \zeta_1}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3)} \right) f_3 \\ &= \underbrace{\left( 1 - \frac{\zeta_2}{\alpha_1} - \frac{(1 - \alpha_1) \zeta_2}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1)} \right)}_1 f_1 \zeta_1 + \underbrace{\left( 1 - \frac{\zeta_3}{\alpha_2} - \frac{(1 - \alpha_2) \zeta_3}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2)} \right)}_1 f_2 \zeta_2 \\ &\quad + \underbrace{\left( 1 - \frac{\zeta_1}{\alpha_3} - \frac{(1 - \alpha_3) \zeta_1}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3)} \right)}_1 f_3 \zeta_3 \\ &= \sum_{i=1}^3 f_i \zeta_i \end{aligned}$$

Wie vorhergesagt ist in diesem Fall die Interpolation identisch mit der im 3-Punkt-Dreieck.

### 4.3.2 Partielle Ableitungen

Das selbe Ergebnis ist auch für die partiellen Ableitungen zu erwarten. Maple vereinfacht den Ausdruck

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \sum_{i=1}^6 f_i \left( \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_1} \frac{\partial \zeta_1}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_2} \frac{\partial \zeta_2}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_3} \frac{\partial \zeta_3}{\partial x} \right)$$

schnell zu

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{-f_1 y_3 + f_1 y_2 + f_2 y_3 - f_2 y_1 + f_3 y_1 - f_3 y_2}{x_2 y_3 - x_3 y_2 + x_1 y_2 - x_1 y_3 + y_1 x_3 - y_1 x_2}$$

wobei der Nenner den  $2A$  aus den partiellen Ableitungen der natürlichen Koordinaten nach kartesischen entspricht, daher

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{1}{2A} (f_1 y_{23} + f_2 y_{31} + f_3 y_{12})$$

und

$$\frac{\partial F}{\partial y} = -\frac{1}{2A} (f_1 x_{23} + f_2 x_{31} + f_3 x_{12})$$

Vergleicht man das Ergebnis mit (12), so sieht man das auch die partiellen Ableitungen identisch sind mit denen des 3-Punkt-Dreiecks.

## 4.4 Realisierung/Optimierung in Java und C

Um die Berechnung der Ableitungen und des Funktionswertes zu optimieren wurde ein Programm geschrieben, bei dem acht Dreiecke in einem Einheitsquadrat liegen und dann für eine große Anzahl Zufallspunkte (die in diesem Quadrat liegen) die partiellen Ableitungen und der interpolierte Funktionswert berechnet wurden. Für jede Kante wurde ein zufälliges  $\alpha$  berechnet und daraus die Koordinaten der drei Punkte und deren Funktionswert auf den Kanten ermittelt. Zu beachten ist, dass zwei benachbarte Dreiecke sich den selben Punkt auf der Seite teilen, d.h. es muss evtl mit  $1 - \alpha_i$  gerechnet werden. Die zu interpolierende Funktion lautete

$$f(x, y) = x^4 + y^4$$

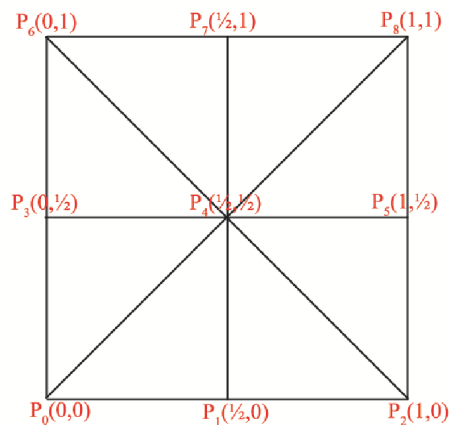


Abbildung 10: Einheitsquadrat mit acht Dreiecken



```

garre@ipp503 > time MonteCarlo
real    1m4.340s
user    1m1.672s
sys     0m0.628s
garre@ipp503 > time MonteCarloOpt
real    0m7.644s
user    0m7.536s
sys     0m0.084s
garre@ipp503 > time java MonteCarlo
real    1m9.897s
user    1m5.192s
sys     0m0.608s
garre@ipp503 > time java MonteCarloOpt
real    0m6.452s
user    0m6.272s
sys     0m0.108s

```

Dadurch, dass die Koeffizienten  $\nu_i$  vorab für jedes der acht Dreiecke berechnet wurden, konnte die Laufzeit bei 10 Millionen Zufallspunkten im C Programm (MonteCarlo.c) von ca 62,3 Sekunden auf etwa 7,6 Sekunden (MonteCarloOpt.c) verkürzt werden. In den äquivalenten Javaprogrammen ist eine Laufzeitreduktion von 65,7 Sekunden (MonteCarlo.java) auf 6,3 Sekunden (MonteCarloOpt.java) zu beobachten. Die genannten Programme sind im Anhang (A bis D) zu finden.

Ob sich diese Vorabberechnungen lohnen, hängt jedoch stark vom Verhältnis der Anzahl Dreiecke zu der Anzahl Zufallspunkte ab. Bei einer Million Dreiecke und nur tausend Punkte, würde es sich nicht lohnen, die 11 Koeffizienten pro Dreieck zu berechnen. Daher ist es am sinnvollsten, zunächst keine Werte vorab zu berechnen. Wenn während der Monte-Carlo-Simulation jedoch ein Punkt in einem Dreieck landet, so werden die Koeffizienten für dieses Dreieck zu gemerkt und gegebenenfalls wieder benutzt, falls ein weiterer Punkt im selben Dreieck landet. D.h. es wird ein zufälliger Punkt berechnet, ermittelt in welchem Dreieck er liegt, die natürlichen Koordinaten in dem Dreieck berechnet und überprüft, ob für dieses Dreieck schon die Koeffizienten ermittelt wurden.

Selbst wenn nur genau ein Punkt in einem Dreieck landet hat die Koeffizientenberechnung keine gravierenden Nachteile bezüglich der Laufzeit. Jedoch muss der Speicherverbrauch beachtet werden, denn bei einer Million Dreiecke und je  $11 * 8Byte$  wird allein dafür knapp 84MB Speicher verbraucht.

## 5 10-Punkt-Dreieck

### 5.1 Übersicht

$i$	$N_i$	$P_i(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$
1	$\frac{1}{2}\zeta_1(3\zeta_1 - 1)(3\zeta_1 - 2)$	$(1, 0, 0)$
2	$\frac{1}{2}\zeta_2(3\zeta_2 - 1)(3\zeta_2 - 2)$	$(0, 1, 0)$
3	$\frac{1}{2}\zeta_3(3\zeta_3 - 1)(3\zeta_3 - 2)$	$(0, 0, 1)$
4	$\frac{9}{2}\zeta_1\zeta_2(3\zeta_1 - 1)$	$(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0)$
5	$\frac{9}{2}\zeta_1\zeta_2(3\zeta_2 - 1)$	$(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0)$
6	$\frac{9}{2}\zeta_2\zeta_3(3\zeta_2 - 1)$	$(0, \frac{2}{3}, \frac{1}{3})$
7	$\frac{9}{2}\zeta_2\zeta_3(3\zeta_3 - 1)$	$(0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3})$
8	$\frac{9}{2}\zeta_3\zeta_1(3\zeta_3 - 1)$	$(\frac{1}{3}, 0, \frac{2}{3})$
9	$\frac{9}{2}\zeta_3\zeta_1(3\zeta_1 - 1)$	$(\frac{2}{3}, 0, \frac{1}{3})$
10	$27\zeta_1\zeta_2\zeta_3$	$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$

Tabelle 5: Übersicht 10-Punkt-Dreieck

Das 10-Punkt-Dreieck ist definiert durch die drei Eckpunkte sowie jeweils zwei Punkte auf den Kanten und einem Punkt im inneren des Dreiecks (siehe Abbildung 11 auf der nächsten Seite). Es lassen sich allgemeine Shape-Funktionen herleiten, bei denen die Punkte 4 bis 10 beliebig verschoben werden können (d.h. die Punkte 4 bis 9 auf den entsprechenden Kanten wie beim 6-Punkt-Dreieck und der zehnte Punkt innerhalb des Dreiecks). Die Herleitung dieser Shape-Funktionen mit dem Beweis, dass sie die nötigen Eigenschaften erfüllen sind im Anhang E zu finden, jedoch werden die Formeln der Funktionsinterpolation und der partiellen Ableitungen so kompliziert, dass eine Implementierung ineffizient wäre. Daher beschäftigen wir uns mit dem Spezialfall, dass die zwei zusätzlichen Punkte pro Kante diese in drei gleich lange Strecken unterteilt, d.h. die  $\alpha_i$ , welche die Koordinaten der Punkte  $P_4$ ,  $P_6$  und  $P_8$  bestimmen sind alle  $\frac{1}{3}$  und die  $\beta_i$  (für  $P_5$ ,  $P_7$ ,  $P_9$ ) sind fest bei  $\frac{2}{3}$ . Außerdem soll der zehnte Punkt genau in dem Schwerpunkt des Dreiecks liegen, d.h. bei  $\zeta_1 = \zeta_2 = \zeta_3 = \frac{1}{3}$ . Durch diese Spezialisierung erhalten wir die Shape-Funktionen, die auch in der Literatur [3] angegeben werden.

### 5.2 Die kartesischen Koordinaten von $P_4$ bis $P_{10}$

Die kartesischen Koordinaten lassen sich leicht aus den natürlichen Koordinaten berechnen über die bekannte Formel

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^3 \zeta_i \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix}$$

Sind jedoch die natürlichen Koordinaten unbekannt, so lassen sich die kartesischen Koordinaten über Geradengleichungen berechnen. Als Beispiel wird die Herleitung der kartesischen Koordinaten von  $P_4$  und  $P_5$  gezeigt, welche sich analog auf die Punkte  $P_6$  bis  $P_9$  anwenden lässt.

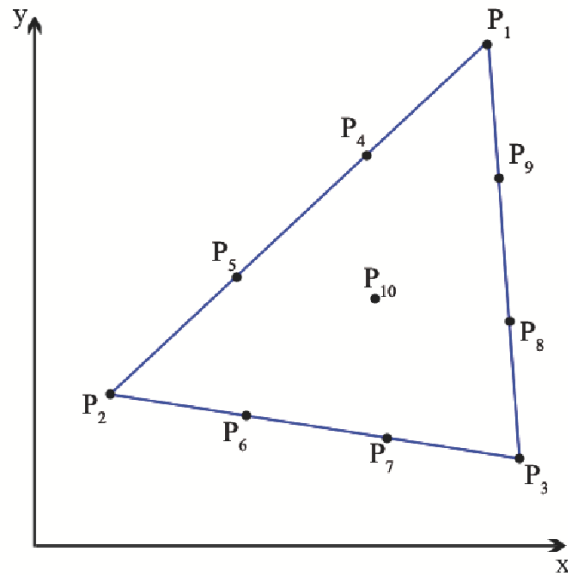


Abbildung 11: 10-Punkt-Dreieck mit linearen Kanten

Jeder Punkt auf der Strecke  $\overline{P_1P_2}$  lässt sich darstellen über

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} x_2 - x_1 \\ y_2 - y_1 \end{pmatrix}, \lambda = 0..1$$

Für den Punkt  $P_4$  ist  $\lambda = \frac{1}{3}$ , für  $P_5$  ist  $\lambda = \frac{2}{3}$ .

Wir erhalten:

$$\begin{pmatrix} x_4 \\ y_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2x_1 + x_2 \\ 2y_1 + y_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_5 \\ y_5 \end{pmatrix} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} x_1 + 2x_2 \\ y_1 + 2y_2 \end{pmatrix}$$

Zur Berechnung des Mittelpunktes  $P_{10}$  gibt es z.B. die Möglichkeit die Seitenhalbierende der Strecke  $\overline{P_2P_3}$  zu zeichnen mit der Darstellung

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} \frac{x_2+x_3}{2} - x_1 \\ \frac{y_2+y_3}{2} - y_1 \end{pmatrix}, \lambda = 0..1$$

Der Mittelpunkt des Dreiecks teilt die Seitenhalbierenden im Verhältnis 2 zu 1, daher lässt sich dieser über  $\lambda = \frac{2}{3}$  berechnen

$$\begin{pmatrix} x_{10} \\ y_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} + \frac{2}{3} \begin{pmatrix} \frac{x_2+x_3}{2} - x_1 \\ \frac{y_2+y_3}{2} - y_1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} x_1 + x_2 + x_3 \\ y_1 + y_2 + y_3 \end{pmatrix}$$

### 5.3 Funktionsinterpolation

Wir wollen nun die interpolierten Funktionswerte für den Spezialfall  $\alpha_i = \frac{1}{3}$ ,  $\beta_i = \frac{2}{3}$  und  $\delta_i = \frac{1}{3}$  ( $i$  jeweils von 1 bis 3) berechnen:

$$\begin{aligned}
F &= \sum_{i=1}^{10} N_i f_i \\
&= \left( \zeta_1 - \frac{9}{2} \zeta_1^2 \zeta_2 - \frac{9}{2} \zeta_3 \zeta_1^2 \right) f_1 + \left( \zeta_2 - \frac{9}{2} \zeta_1 \zeta_2^2 - \frac{9}{2} \zeta_2^2 \zeta_3 \right) f_2 \\
&+ \left( \zeta_3 - \frac{9}{2} \zeta_2 \zeta_3^2 - \frac{9}{2} \zeta_3^2 \zeta_1 \right) f_3 + \left( 9 \zeta_1^2 \zeta_2 - \frac{9}{2} \zeta_1 \zeta_2^2 - \frac{9}{2} \zeta_1 \zeta_2 \zeta_3 \right) f_4 \\
&+ \left( -\frac{9}{2} \zeta_1^2 \zeta_2 + 9 \zeta_1 \zeta_2^2 - \frac{9}{2} \zeta_1 \zeta_2 \zeta_3 \right) f_5 + \left( 9 \zeta_2^2 \zeta_3 - \frac{9}{2} \zeta_2 \zeta_3^2 - \frac{9}{2} \zeta_1 \zeta_2 \zeta_3 \right) f_6 \\
&+ \left( -\frac{9}{2} \zeta_2^2 \zeta_3 + 9 \zeta_2 \zeta_3^2 - \frac{9}{2} \zeta_1 \zeta_2 \zeta_3 \right) f_7 + \left( 9 \zeta_3^2 \zeta_1 - \frac{9}{2} \zeta_3 \zeta_1^2 - \frac{9}{2} \zeta_1 \zeta_2 \zeta_3 \right) f_8 \\
&+ \left( -\frac{9}{2} \zeta_3^2 \zeta_1 + 9 \zeta_3 \zeta_1^2 - \frac{9}{2} \zeta_1 \zeta_2 \zeta_3 \right) f_9 \\
&+ 27 \zeta_1 \zeta_2 \zeta_3 f_{10}
\end{aligned}$$

Wieder mit Maple aufgelöst nach den natürlichen Koordinaten ergibt:

$$\begin{aligned}
F &= \left( \left( -\frac{9}{2} f_5 + 9 f_4 - \frac{9}{2} f_1 \right) \zeta_2 + \left( -\frac{9}{2} f_1 - \frac{9}{2} f_8 + 9 f_9 \right) \zeta_3 \right) \zeta_1^2 \\
&+ \left( \left( -\frac{9}{2} f_2 + 9 f_5 - 9/2 f_4 \right) \zeta_2^2 \right. \\
&+ \left. \left( -\frac{9}{2} f_7 - \frac{9}{2} f_8 - \frac{9}{2} f_4 - \frac{9}{2} f_6 - \frac{9}{2} f_5 + 27 f_{10} - \frac{9}{2} f_9 \right) \zeta_3 \zeta_2 \right. \\
&+ \left. \left( 9 f_8 - \frac{9}{2} f_3 - \frac{9}{2} f_9 \right) \zeta_3^2 + f_1 \right) \zeta_1 + \left( -\frac{9}{2} f_2 - \frac{9}{2} f_7 + 9 f_6 \right) \zeta_3 \zeta_2^2 \\
&+ \left( \left( -\frac{9}{2} f_3 + 9 f_7 - \frac{9}{2} f_6 \right) \zeta_3^2 + f_2 \right) \zeta_2 + \zeta_3 f_3
\end{aligned}$$

### 5.4 Partielle Ableitungen

Nun kommen wir wieder zu den partiellen Ableitungen nach kartesischen Koordinaten, für die, wie im 6-Punkt-Dreieck, die Kettenregel beachtet werden muss. Die Ableitung der Shape-Funktionen (siehe Tabelle 5 auf Seite 24) nach den natürlichen Koordinaten liefert:

$$\vec{\nabla} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \zeta_1} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta_2} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta_3} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla} N_1 &= \begin{pmatrix} \frac{27}{2} \zeta_1^2 - 9\zeta_1 + 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_2 &= \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{27}{2} \zeta_2^2 - 9\zeta_2 + 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_3 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{27}{2} \zeta_3^2 - 9\zeta_3 + 1 \end{pmatrix} \\
\vec{\nabla} N_4 &= \begin{pmatrix} 27\zeta_1\zeta_2 - \frac{9}{2}\zeta_2 \\ \frac{27}{2}\zeta_1^2 - \frac{9}{2}\zeta_1 \\ 0 \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_5 &= \begin{pmatrix} \frac{27}{2}\zeta_2^2 - \frac{9}{2}\zeta_2 \\ 27\zeta_2\zeta_1 - \frac{9}{2}\zeta_1 \\ 0 \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_6 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 27\zeta_2\zeta_3 - \frac{9}{2}\zeta_3 \\ \frac{27}{2}\zeta_2^2 - \frac{9}{2}\zeta_2 \end{pmatrix} \\
\vec{\nabla} N_7 &= \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{27}{2}\zeta_3^2 - \frac{9}{2}\zeta_3 \\ 27\zeta_3\zeta_2 - \frac{9}{2}\zeta_2 \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_8 &= \begin{pmatrix} \frac{27}{2}\zeta_3^2 - \frac{9}{2}\zeta_3 \\ 0 \\ 27\zeta_3\zeta_1 - \frac{9}{2}\zeta_1 \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_9 &= \begin{pmatrix} 27\zeta_1\zeta_3 - \frac{9}{2}\zeta_3 \\ 0 \\ \frac{27}{2}\zeta_1^2 - \frac{9}{2}\zeta_1 \end{pmatrix} \\
\vec{\nabla} N_{10} &= \begin{pmatrix} 27\zeta_2\zeta_3 \\ 27\zeta_1\zeta_3 \\ 27\zeta_1\zeta_2 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Zusammen mit den partiellen Ableitungen der natürlichen Koordinaten (Tabelle 3 auf Seite 17) nach  $x$  und  $y$  lässt sich  $F$  partiell ableiten.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial x} &= \sum_{i=1}^{10} f_i \left( \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_1} \frac{\partial \zeta_1}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_2} \frac{\partial \zeta_2}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_3} \frac{\partial \zeta_3}{\partial x} \right) \\
&= \frac{1}{2A} \left( \left( (1 - 9\zeta_1\zeta_2 - 9\zeta_3\zeta_1) y_{23} - \frac{9}{2} \zeta_1^2 y_{31} - \frac{9}{2} \zeta_1^2 y_{12} \right) f_1 \right. \\
&\quad + \left( -\frac{9}{2} \zeta_2^2 y_{23} + (1 - 9\zeta_1\zeta_2 - 9\zeta_2\zeta_3) y_{31} - \frac{9}{2} \zeta_2^2 y_{12} \right) f_2 \\
&\quad + \left( -\frac{9}{2} \zeta_3^2 y_{23} - \frac{9}{2} \zeta_3^2 y_{31} + (1 - 9\zeta_2\zeta_3 - 9\zeta_3\zeta_1) y_{12} \right) f_3 \\
&\quad + \left( \left( 18\zeta_1\zeta_2 - \frac{9}{2} \zeta_2^2 - \frac{9}{2} \zeta_2\zeta_3 \right) y_{23} + \left( 9\zeta_1^2 - 9\zeta_1\zeta_2 - \frac{9}{2} \zeta_3\zeta_1 \right) y_{31} - \frac{9}{2} \zeta_1\zeta_2 y_{12} \right) f_4 \\
&\quad + \left( \left( -9\zeta_1\zeta_2 + 9\zeta_2^2 - \frac{9}{2} \zeta_2\zeta_3 \right) y_{23} + \left( -\frac{9}{2} \zeta_1^2 + 18\zeta_1\zeta_2 - \frac{9}{2} \zeta_3\zeta_1 \right) y_{31} - \frac{9}{2} \zeta_1\zeta_2 y_{12} \right) f_5 \\
&\quad + \left( -\frac{9}{2} \zeta_2\zeta_3 y_{23} + \left( 18\zeta_2\zeta_3 - \frac{9}{2} \zeta_3^2 - \frac{9}{2} \zeta_3\zeta_1 \right) y_{31} + \left( 9\zeta_2^2 - 9\zeta_2\zeta_3 - \frac{9}{2} \zeta_1\zeta_2 \right) y_{12} \right) f_6 \\
&\quad + \left( -\frac{9}{2} \zeta_2\zeta_3 y_{23} + \left( -9\zeta_2\zeta_3 + 9\zeta_3^2 - \frac{9}{2} \zeta_3\zeta_1 \right) y_{31} + \left( -\frac{9}{2} \zeta_2^2 + 18\zeta_2\zeta_3 - \frac{9}{2} \zeta_1\zeta_2 \right) y_{12} \right) f_7 \\
&\quad + \left( \left( 9\zeta_3^2 - 9\zeta_3\zeta_1 - \frac{9}{2} \zeta_2\zeta_3 \right) y_{23} - \frac{9}{2} \zeta_3\zeta_1 y_{31} + \left( 18\zeta_3\zeta_1 - \frac{9}{2} \zeta_1^2 - \frac{9}{2} \zeta_1\zeta_2 \right) y_{12} \right) f_8 \\
&\quad + \left( \left( -\frac{9}{2} \zeta_3^2 + 18\zeta_3\zeta_1 - \frac{9}{2} \zeta_2\zeta_3 \right) y_{23} - \frac{9}{2} \zeta_3\zeta_1 y_{31} + \left( -9\zeta_3\zeta_1 + 9\zeta_1^2 - \frac{9}{2} \zeta_1\zeta_2 \right) y_{12} \right) f_9 \\
&\quad \left. + (27\zeta_2\zeta_3 y_{23} + 27\zeta_3\zeta_1 y_{31} + 27\zeta_1\zeta_2 y_{12}) f_{10} \right)
\end{aligned}$$

Ersetzen aller  $y_{ij}$  durch  $x_{ij}$  und ein negatives Vorzeichen führt zur partiellen Ableitung nach  $y$ .

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial y} &= \sum_{i=1}^{10} f_i \left( \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_1} \frac{\partial \zeta_1}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_2} \frac{\partial \zeta_2}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_3} \frac{\partial \zeta_3}{\partial y} \right) \\
&= -\frac{1}{2A} \left( \left( (1 - 9\zeta_1\zeta_2 - 9\zeta_3\zeta_1) x_{23} - \frac{9}{2}\zeta_1^2 x_{31} - \frac{9}{2}\zeta_1^2 x_{12} \right) f_1 \right. \\
&\quad + \left( -\frac{9}{2}\zeta_2^2 x_{23} + (1 - 9\zeta_1\zeta_2 - 9\zeta_2\zeta_3) x_{31} - \frac{9}{2}\zeta_2^2 x_{12} \right) f_2 \\
&\quad + \left( -\frac{9}{2}\zeta_3^2 x_{23} - \frac{9}{2}\zeta_3^2 x_{31} + (1 - 9\zeta_2\zeta_3 - 9\zeta_3\zeta_1) x_{12} \right) f_3 \\
&\quad + \left( \left( 18\zeta_1\zeta_2 - \frac{9}{2}\zeta_2^2 - \frac{9}{2}\zeta_2\zeta_3 \right) x_{23} + \left( 9\zeta_1^2 - 9\zeta_1\zeta_2 - \frac{9}{2}\zeta_3\zeta_1 \right) x_{31} - \frac{9}{2}\zeta_1\zeta_2 x_{12} \right) f_4 \\
&\quad + \left( \left( -9\zeta_1\zeta_2 + 9\zeta_2^2 - \frac{9}{2}\zeta_2\zeta_3 \right) x_{23} + \left( -\frac{9}{2}\zeta_1^2 + 18\zeta_1\zeta_2 - \frac{9}{2}\zeta_3\zeta_1 \right) x_{31} - \frac{9}{2}\zeta_1\zeta_2 x_{12} \right) f_5 \\
&\quad + \left( -\frac{9}{2}\zeta_2\zeta_3 x_{23} + \left( 18\zeta_2\zeta_3 - \frac{9}{2}\zeta_3^2 - \frac{9}{2}\zeta_3\zeta_1 \right) x_{31} + \left( 9\zeta_2^2 - 9\zeta_2\zeta_3 - \frac{9}{2}\zeta_1\zeta_2 \right) x_{12} \right) f_6 \\
&\quad + \left( -\frac{9}{2}\zeta_2\zeta_3 x_{23} + \left( -9\zeta_2\zeta_3 + 9\zeta_3^2 - \frac{9}{2}\zeta_3\zeta_1 \right) x_{31} + \left( -\frac{9}{2}\zeta_2^2 + 18\zeta_2\zeta_3 - \frac{9}{2}\zeta_1\zeta_2 \right) x_{12} \right) f_7 \\
&\quad + \left( \left( 9\zeta_3^2 - 9\zeta_3\zeta_1 - \frac{9}{2}\zeta_2\zeta_3 \right) x_{23} - \frac{9}{2}\zeta_3\zeta_1 x_{31} + \left( 18\zeta_3\zeta_1 - \frac{9}{2}\zeta_1^2 - \frac{9}{2}\zeta_1\zeta_2 \right) x_{12} \right) f_8 \\
&\quad + \left( \left( -\frac{9}{2}\zeta_3^2 + 18\zeta_3\zeta_1 - \frac{9}{2}\zeta_2\zeta_3 \right) x_{23} - \frac{9}{2}\zeta_3\zeta_1 x_{31} + \left( -9\zeta_3\zeta_1 + 9\zeta_1^2 - \frac{9}{2}\zeta_1\zeta_2 \right) x_{12} \right) f_9 \\
&\quad \left. + (27\zeta_2\zeta_3 x_{23} + 27\zeta_3\zeta_1 x_{31} + 27\zeta_1\zeta_2 x_{12}) f_{10} \right)
\end{aligned}$$

## 6 4-Punkt-Tetraeder

### 6.1 Übersicht

$i$	$N_i$	$P_i(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3, \zeta_4)$
1	$\zeta_1$	$(1, 0, 0, 0)$
2	$\zeta_2$	$(0, 1, 0, 0)$
3	$\zeta_3$	$(0, 0, 1, 0)$
4	$\zeta_4$	$(0, 0, 0, 1)$

Tabelle 6: Übersicht 4-Punkt-Tetraeder

Für die kartesischen Koordinaten gilt bei allen Tetraedern

$$P \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^4 N_i \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix}$$

Der lineare 4-Punkt-Tetraeder ist dem gewöhnlichen Dreieck sehr ähnlich. Da er jedoch ein 3-dimensionaler Körper ist, kommt eine weitere kartesische Koordinate  $z$  hinzu. Außerdem wird er durch einen vierten Punkt  $P_4(x_4, y_4, z_4)$  definiert.

Die allgemeine Form lautet daher:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & x_4 \\ y_1 & y_2 & y_3 & y_4 \\ z_1 & z_2 & z_3 & z_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \end{pmatrix} \quad (15)$$

Die Invertierung von Formel (15) ergibt

$$\begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{6V} \begin{pmatrix} 6V_1 & a_1 & b_1 & c_1 \\ 6V_2 & a_2 & b_2 & c_2 \\ 6V_3 & a_3 & b_3 & c_3 \\ 6V_4 & a_4 & b_4 & c_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (16)$$

mit

$$V = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & x_4 \\ y_1 & y_2 & y_3 & y_4 \\ z_1 & z_2 & z_3 & z_4 \end{vmatrix}$$

Wie beim Dreieck müssen auch beim Tetraeder die Punkte in der richtigen Reihenfolge benannt werden, so dass  $V$  positiv wird [2]. Dies geschieht indem man:

1. Einen Ausgangspunkt als  $P_1$  definiert
2. Eine Seite des Tetraeders auswählt, die die ersten drei Punkte enthalten soll
3. Die Punkte dieser Seite gegen den Uhrzeigersinn durchnummeriert vom vierten Punkt aus betrachtet

Die weiteren Koeffizienten  $V_1$  bis  $V_4$ , sowie  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  und  $\vec{c}$  lassen sich berechnen über

$$V_1 = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} x_2 & x_3 & x_4 \\ y_2 & y_3 & y_4 \\ z_2 & z_3 & z_4 \end{vmatrix} \quad V_2 = -\frac{1}{6} \begin{vmatrix} x_1 & x_3 & x_4 \\ y_1 & y_3 & y_4 \\ z_1 & z_3 & z_4 \end{vmatrix}$$

$$V_3 = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} x_1 & x_2 & x_4 \\ y_1 & y_2 & y_4 \\ z_1 & z_2 & z_4 \end{vmatrix} \quad V_4 = -\frac{1}{6} \begin{vmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \\ z_1 & z_2 & z_3 \end{vmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & z_{43} & z_{24} & z_{32} \\ z_{34} & 0 & z_{41} & z_{13} \\ z_{42} & z_{14} & 0 & z_{21} \\ z_{23} & z_{31} & z_{12} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & x_{43} & x_{24} & x_{32} \\ x_{34} & 0 & x_{41} & x_{13} \\ x_{42} & x_{14} & 0 & x_{21} \\ x_{23} & x_{31} & x_{12} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & y_{43} & y_{24} & y_{32} \\ y_{34} & 0 & y_{41} & y_{13} \\ y_{42} & y_{14} & 0 & y_{21} \\ y_{23} & y_{31} & y_{12} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}$$

## 6.2 Ableitung nach kartesischen Koordinaten

Aus Gleichung 16 auf der vorherigen Seite lassen sich leicht die partiellen Ableitungen der natürlichen nach den kartesischen Koordinaten berechnen

$$\frac{\partial \zeta_i}{\partial x} = \frac{1}{6V} a_i \quad \frac{\partial \zeta_i}{\partial y} = \frac{1}{6V} b_i \quad \frac{\partial \zeta_i}{\partial z} = \frac{1}{6V} c_i$$

und somit aus

$$F = \sum_{i=1}^4 f_i \zeta_i$$

die partiellen Ableitungen von  $F$  nach  $x, y$  und  $z$  herleiten

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{1}{6V} \sum_{i=1}^4 f_i a_i$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = \frac{1}{6V} \sum_{i=1}^4 f_i b_i$$

$$\frac{\partial F}{\partial z} = \frac{1}{6V} \sum_{i=1}^4 f_i c_i$$



## 7 10-Punkt-Tetraeder

### 7.1 Übersicht

$i$	$N_i$	$P_i(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3, \zeta_4)$
1	$\zeta_1 - \frac{\zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\zeta_1 \zeta_3}{-1+\alpha_3} - \frac{\zeta_1 \zeta_4}{\alpha_4}$	$(1, 0, 0, 0)$
2	$\zeta_2 + \frac{\zeta_1 \zeta_2}{-1+\alpha_1} - \frac{\zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2} - \frac{\zeta_2 \zeta_4}{\alpha_5}$	$(0, 1, 0, 0)$
3	$\zeta_3 - \frac{\zeta_1 \zeta_3}{\alpha_3} + \frac{\zeta_2 \zeta_3}{-1+\alpha_2} - \frac{\zeta_3 \zeta_4}{\alpha_6}$	$(0, 0, 1, 0)$
4	$\zeta_4 + \frac{\zeta_1 \zeta_4}{-1+\alpha_4} + \frac{\zeta_2 \zeta_4}{-1+\alpha_5} + \frac{\zeta_3 \zeta_4}{-1+\alpha_6}$	$(0, 0, 0, 1)$
5	$-\frac{\zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1(-1+\alpha_1)}$	$(1 - \alpha_1, \alpha_1, 0, 0)$
6	$-\frac{\zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2(-1+\alpha_2)}$	$(0, 1 - \alpha_2, \alpha_2, 0)$
7	$-\frac{\zeta_1 \zeta_3}{\alpha_3(-1+\alpha_3)}$	$(\alpha_3, 0, 1 - \alpha_3, 0)$
8	$-\frac{\zeta_1 \zeta_4}{\alpha_4(-1+\alpha_4)}$	$(1 - \alpha_4, 0, 0, \alpha_4)$
9	$-\frac{\zeta_2 \zeta_4}{\alpha_5(-1+\alpha_5)}$	$(0, 1 - \alpha_5, 0, \alpha_5)$
10	$-\frac{\zeta_3 \zeta_4}{\alpha_6(-1+\alpha_6)}$	$(0, 0, 1 - \alpha_6, \alpha_6)$

Tabelle 7: Übersicht 10-Punkt-Tetraeder

Der 10-Punkt-Tetraeder ist durch vier Eckpunkte  $P_1$  bis  $P_4$ , sowie jeweils einem Punkt pro Kante definiert ( $P_5$  bis  $P_{10}$ ). In Abbildung 12 sind diese Punkte genau auf den Mitten dieser Kanten, d.h.

$$\alpha_i = \frac{1}{2}, \forall i$$

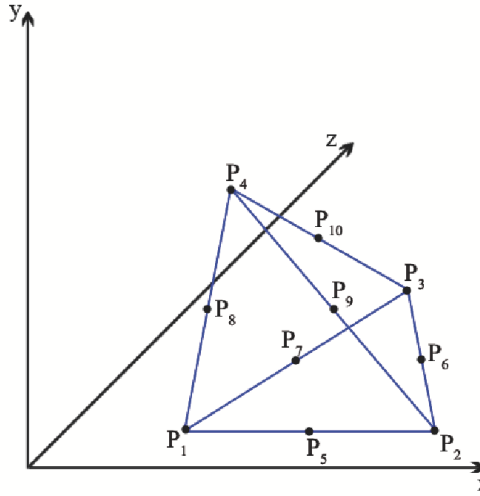


Abbildung 12: 10-Punkt-Tetraeder mit linearen Kanten

## 7.2 Funktionsinterpolation

Die Funktionsinterpolation wird wie üblich über das Lagrange-Interpolationspolynom durchgeführt. Mit den quadratischen Shape-Funktionen aus Tabelle 7 als Lagrange-Polynome ergibt das:

$$\begin{aligned}
F &= \sum_{i=1}^{10} N_i f_i \\
&= \left( \zeta_1 - \frac{\zeta_1 \zeta_2}{\alpha_1} - \frac{\zeta_4 \zeta_1}{\alpha_4} + \frac{\zeta_1 \zeta_3}{-1 + \alpha_3} \right) f_1 \\
&+ \left( \zeta_2 + \frac{\zeta_1 \zeta_2}{-1 + \alpha_1} - \frac{\zeta_2 \zeta_3}{\alpha_2} - \frac{\zeta_4 \zeta_2}{\alpha_5} \right) f_2 \\
&+ \left( \zeta_3 + \frac{\zeta_2 \zeta_3}{-1 + \alpha_2} - \frac{\zeta_3 \zeta_4}{\alpha_6} - \frac{\zeta_1 \zeta_3}{\alpha_3} \right) f_3 \\
&+ \left( \zeta_4 + \frac{\zeta_3 \zeta_4}{-1 + \alpha_6} + \frac{\zeta_4 \zeta_1}{-1 + \alpha_4} + \frac{\zeta_4 \zeta_2}{-1 + \alpha_5} \right) f_4 \\
&- \frac{\zeta_1 \zeta_2 f_5}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1)} - \frac{\zeta_2 \zeta_3 f_6}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2)} - \frac{\zeta_1 \zeta_3 f_7}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3)} \\
&- \frac{\zeta_4 \zeta_1 f_8}{\alpha_4 (-1 + \alpha_4)} - \frac{\zeta_4 \zeta_2 f_9}{\alpha_5 (-1 + \alpha_5)} - \frac{\zeta_3 \zeta_4 f_{10}}{\alpha_6 (-1 + \alpha_6)} \\
&= \left( \left( \frac{f_2}{-1 + \alpha_1} - \frac{f_5}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1)} - \frac{f_1}{\alpha_1} \right) \zeta_2 \right. \\
&+ \left( -\frac{f_7}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3)} + \frac{f_1}{-1 + \alpha_3} - \frac{f_3}{\alpha_3} \right) \zeta_3 \\
&+ \left( \frac{f_4}{-1 + \alpha_4} - \frac{f_1}{\alpha_4} - \frac{f_8}{\alpha_4 (-1 + \alpha_4)} \right) \zeta_4 + f_1 \Big) \zeta_1 \\
&+ \left( \left( -\frac{f_2}{\alpha_2} + \frac{f_3}{-1 + \alpha_2} - \frac{f_6}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2)} \right) \zeta_3 \right. \\
&+ \left. \left( \frac{f_4}{-1 + \alpha_5} - \frac{f_9}{\alpha_5 (-1 + \alpha_5)} - \frac{f_2}{\alpha_5} \right) \zeta_4 + f_2 \right) \zeta_2 \\
&+ \left( \left( -\frac{f_{10}}{\alpha_6 (-1 + \alpha_6)} + \frac{f_4}{-1 + \alpha_6} - \frac{f_3}{\alpha_6} \right) \zeta_4 + f_3 \right) \zeta_3 + \zeta_4 f_4 \\
&= (\nu_1 \zeta_2 + \nu_2 \zeta_3 + \nu_3 \zeta_4 + f_1) \zeta_1 \\
&+ (\nu_4 \zeta_3 + \nu_5 \zeta_4 + f_2) \zeta_2 \\
&+ (\nu_6 \zeta_4 + f_3) \zeta_3 \\
&+ f_4 \zeta_4
\end{aligned}$$

Im Gegensatz zum 6-Punkt-Dreieck, wo zur Vorabberechnung nur 4 Konstanten benötigt wurden, müssen hier also 6 Konstanten  $\nu_i$  abgespeichert werden.

### 7.3 Partielle Ableitungen

Die Vorgehensweise für die partiellen Ableitungen nach den kartesischen Koordinaten (hier  $x$ ,  $y$  und  $z$ ) ist die selbe wie im 2-dimensionalen auch. Zunächst werden die Shape-Funktionen nach den natürlichen Koordinaten abgeleitet:

$$\vec{\nabla} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \zeta_1} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta_2} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta_3} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta_4} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} N_1 &= \begin{pmatrix} 1 - \frac{\zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\zeta_3}{-1+\alpha_3} - \frac{\zeta_4}{\alpha_4} \\ -\frac{\zeta_1}{\alpha_1} \\ \frac{\zeta_1}{-1+\alpha_3} \\ -\frac{\zeta_1}{\alpha_4} \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_2 &= \begin{pmatrix} \frac{\zeta_2}{-1+\alpha_1} \\ 1 + \frac{\zeta_1}{-1+\alpha_1} - \frac{\zeta_3}{\alpha_2} - \frac{\zeta_4}{\alpha_5} \\ -\frac{\zeta_2}{\alpha_2} \\ -\frac{\zeta_2}{\alpha_5} \end{pmatrix} \\ \vec{\nabla} N_3 &= \begin{pmatrix} -\frac{\zeta_3}{\alpha_3} \\ \frac{\zeta_3}{-1+\alpha_2} \\ 1 - \frac{\zeta_1}{\alpha_3} + \frac{\zeta_2}{-1+\alpha_2} - \frac{\zeta_4}{\alpha_6} \\ -\frac{\zeta_3}{\alpha_6} \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_4 &= \begin{pmatrix} \frac{\zeta_4}{-1+\alpha_4} \\ \frac{\zeta_4}{-1+\alpha_5} \\ \frac{\zeta_4}{-1+\alpha_6} \\ 1 + \frac{\zeta_1}{-1+\alpha_4} + \frac{\zeta_2}{-1+\alpha_5} + \frac{\zeta_3}{-1+\alpha_6} \end{pmatrix} \\ \vec{\nabla} N_5 &= \begin{pmatrix} -\frac{\zeta_2}{\alpha_1(-1+\alpha_1)} \\ -\frac{\zeta_1}{\alpha_1(-1+\alpha_1)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_6 &= \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{\zeta_3}{\alpha_2(-1+\alpha_2)} \\ -\frac{\zeta_2}{\alpha_2(-1+\alpha_2)} \\ 0 \end{pmatrix} \\ \vec{\nabla} N_7 &= \begin{pmatrix} -\frac{\zeta_3}{\alpha_3(-1+\alpha_3)} \\ 0 \\ -\frac{\zeta_1}{\alpha_3(-1+\alpha_3)} \\ 0 \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_8 &= \begin{pmatrix} -\frac{\zeta_4}{\alpha_4(-1+\alpha_4)} \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{\zeta_1}{\alpha_4(-1+\alpha_4)} \end{pmatrix} \\ \vec{\nabla} N_9 &= \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{\zeta_4}{\alpha_5(-1+\alpha_5)} \\ 0 \\ -\frac{\zeta_2}{\alpha_5(-1+\alpha_5)} \end{pmatrix} & \vec{\nabla} N_{10} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{\zeta_4}{\alpha_6(-1+\alpha_6)} \\ -\frac{\zeta_3}{\alpha_6(-1+\alpha_6)} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Mit den bekannten Ableitungen der natürlichen Koordinaten nach den kartesischen (Kapitel 6.2) kann nun  $F$  abgeleitet werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x} &= \sum_{i=1}^6 f_i \left( \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_1} \frac{\partial \zeta_1}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_2} \frac{\partial \zeta_2}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_3} \frac{\partial \zeta_3}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial \zeta_4} \frac{\partial \zeta_4}{\partial x} \right) \\ &= \left( \left( 1 - \frac{\zeta_2}{\alpha_1} + \frac{\zeta_3}{-1+\alpha_3} - \frac{\zeta_4}{\alpha_4} \right) \frac{a_1}{6V} - \frac{\zeta_1 a_2}{\alpha_1 6V} + \frac{\zeta_1 a_3}{(-1+\alpha_3) 6V} - \frac{\zeta_1 a_4}{\alpha_4 6V} \right) f_1 \\ &+ \left( \frac{\zeta_2 a_1}{(-1+\alpha_1) 6V} + \left( 1 + \frac{\zeta_1}{-1+\alpha_1} - \frac{\zeta_3}{\alpha_2} - \frac{\zeta_4}{\alpha_5} \right) \frac{a_2}{6V} - \frac{\zeta_2 a_3}{\alpha_2 6V} - \frac{\zeta_2 a_4}{\alpha_5 6V} \right) f_2 \\ &+ \left( -\frac{\zeta_3 a_1}{\alpha_3 6V} + \frac{\zeta_3 a_2}{(-1+\alpha_2) 6V} + \left( 1 - \frac{\zeta_1}{\alpha_3} + \frac{\zeta_2}{-1+\alpha_2} - \frac{\zeta_4}{\alpha_6} \right) \frac{a_3}{6V} - \frac{\zeta_3 a_4}{\alpha_6 6V} \right) f_3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left( \frac{\zeta_4 a_1}{(-1 + \alpha_4) 6V} + \frac{\zeta_4 a_2}{(-1 + \alpha_5) 6V} + \frac{\zeta_4 a_3}{(-1 + \alpha_6) 6V} \right. \\
& + \left. \left( 1 + \frac{\zeta_1}{-1 + \alpha_4} + \frac{\zeta_2}{-1 + \alpha_5} + \frac{\zeta_3}{-1 + \alpha_6} \right) \frac{a_4}{6V} \right) f_4 \\
& + \left( -\frac{\zeta_2 a_1}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1) 6V} - \frac{\zeta_1 a_2}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1) 6V} \right) f_5 \\
& + \left( -\frac{\zeta_3 a_2}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2) 6V} - \frac{\zeta_2 a_3}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2) 6V} \right) f_6 \\
& + \left( -\frac{\zeta_3 a_1}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3) 6V} - \frac{\zeta_1 a_3}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3) 6V} \right) f_7 \\
& + \left( -\frac{\zeta_4 a_1}{\alpha_4 (-1 + \alpha_4) 6V} - \frac{\zeta_1 a_4}{\alpha_4 (-1 + \alpha_4) 6V} \right) f_8 \\
& + \left( -\frac{\zeta_4 a_2}{\alpha_5 (-1 + \alpha_5) 6V} - \frac{\zeta_2 a_4}{\alpha_5 (-1 + \alpha_5) 6V} \right) f_9 \\
& + \left( -\frac{\zeta_4 a_3}{\alpha_6 (-1 + \alpha_6) 6V} - \frac{\zeta_3 a_4}{\alpha_6 (-1 + \alpha_6) 6V} \right) f_{10} \\
& = \frac{1}{6V} \left( \left( \left( -\frac{a_2}{\alpha_1} + \frac{a_3}{-1 + \alpha_3} - \frac{a_4}{\alpha_4} \right) f_1 - \frac{a_3 f_3}{\alpha_3} - \frac{a_3 f_7}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3)} \right. \right. \\
& - \frac{a_2 f_5}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1)} - \frac{a_4 f_8}{\alpha_4 (-1 + \alpha_4)} + \frac{a_4 f_4}{-1 + \alpha_4} + \left. \left. \frac{a_2 f_2}{-1 + \alpha_1} \right) \zeta_1 \right. \\
& + \left( \left( \frac{a_1}{-1 + \alpha_1} - \frac{a_3}{\alpha_2} - \frac{a_4}{\alpha_5} \right) f_2 + \frac{a_3 f_3}{-1 + \alpha_2} + \frac{a_4 f_4}{-1 + \alpha_5} \right. \\
& - \frac{a_1 f_5}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1)} - \frac{a_3 f_6}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2)} - \frac{a_1 f_1}{\alpha_1} - \left. \frac{a_4 f_9}{\alpha_5 (-1 + \alpha_5)} \right) \zeta_2 \\
& + \left( \left( -\frac{a_1}{\alpha_3} + \frac{a_2}{-1 + \alpha_2} - \frac{a_4}{\alpha_6} \right) f_3 + \frac{a_1 f_1}{-1 + \alpha_3} - \frac{a_2 f_2}{\alpha_2} \right. \\
& + \left. \frac{a_4 f_4}{-1 + \alpha_6} - \frac{a_4 f_{10}}{\alpha_6 (-1 + \alpha_6)} - \frac{a_2 f_6}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2)} - \frac{a_1 f_7}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3)} \right) \zeta_3 \\
& + \left( \left( \frac{a_1}{-1 + \alpha_4} + \frac{a_2}{-1 + \alpha_5} + \frac{a_3}{-1 + \alpha_6} \right) f_4 - \frac{a_1 f_8}{\alpha_4 (-1 + \alpha_4)} \right. \\
& - \frac{a_1 f_1}{\alpha_4} - \frac{a_2 f_9}{\alpha_5 (-1 + \alpha_5)} - \frac{a_3 f_{10}}{\alpha_6 (-1 + \alpha_6)} - \frac{a_2 f_2}{\alpha_5} - \left. \frac{a_3 f_3}{\alpha_6} \right) \zeta_4 \\
& \left. + a_1 f_1 + a_3 f_3 + a_4 f_4 + a_2 f_2 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial y} & = \frac{1}{6V} \left( \left( \left( -\frac{b_2}{\alpha_1} + \frac{b_3}{-1 + \alpha_3} - \frac{b_4}{\alpha_4} \right) f_1 - \frac{b_3 f_3}{\alpha_3} - \frac{b_3 f_7}{\alpha_3 (-1 + \alpha_3)} \right. \right. \\
& - \frac{b_2 f_5}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1)} - \frac{b_4 f_8}{\alpha_4 (-1 + \alpha_4)} + \frac{b_4 f_4}{-1 + \alpha_4} + \left. \left. \frac{b_2 f_2}{-1 + \alpha_1} \right) \zeta_1 \right. \\
& + \left( \left( \frac{b_1}{-1 + \alpha_1} - \frac{b_3}{\alpha_2} - \frac{b_4}{\alpha_5} \right) f_2 + \frac{b_3 f_3}{-1 + \alpha_2} + \frac{b_4 f_4}{-1 + \alpha_5} \right. \\
& - \frac{b_1 f_5}{\alpha_1 (-1 + \alpha_1)} - \frac{b_3 f_6}{\alpha_2 (-1 + \alpha_2)} - \frac{b_1 f_1}{\alpha_1} - \left. \frac{b_4 f_9}{\alpha_5 (-1 + \alpha_5)} \right) \zeta_2 \\
& \left. + a_1 f_1 + a_3 f_3 + a_4 f_4 + a_2 f_2 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left( \left( -\frac{b_1}{\alpha_3} + \frac{b_2}{-1+\alpha_2} - \frac{b_4}{\alpha_6} \right) f_3 + \frac{b_1 f_1}{-1+\alpha_3} - \frac{b_2 f_2}{\alpha_2} \right. \\
& + \left. \frac{b_4 f_4}{-1+\alpha_6} - \frac{b_4 f_{10}}{\alpha_6(-1+\alpha_6)} - \frac{b_2 f_6}{\alpha_2(-1+\alpha_2)} - \frac{b_1 f_7}{\alpha_3(-1+\alpha_3)} \right) \zeta_3 \\
& + \left( \left( \frac{b_1}{-1+\alpha_4} + \frac{b_2}{-1+\alpha_5} + \frac{b_3}{-1+\alpha_6} \right) f_4 - \frac{b_1 f_8}{\alpha_4(-1+\alpha_4)} \right. \\
& - \left. \frac{b_1 f_1}{\alpha_4} - \frac{b_2 f_9}{\alpha_5(-1+\alpha_5)} - \frac{b_3 f_{10}}{\alpha_6(-1+\alpha_6)} - \frac{b_2 f_2}{\alpha_5} - \frac{b_3 f_3}{\alpha_6} \right) \zeta_4 \\
& + b_1 f_1 + b_3 f_3 + b_4 f_4 + b_2 f_2 \Big) \\
\frac{\partial F}{\partial z} = & \frac{1}{6V} \left( \left( \left( -\frac{c_2}{\alpha_1} + \frac{c_3}{-1+\alpha_3} - \frac{c_4}{\alpha_4} \right) f_1 - \frac{c_3 f_3}{\alpha_3} - \frac{c_3 f_7}{\alpha_3(-1+\alpha_3)} \right. \right. \\
& - \left. \frac{c_2 f_5}{\alpha_1(-1+\alpha_1)} - \frac{c_4 f_8}{\alpha_4(-1+\alpha_4)} + \frac{c_4 f_4}{-1+\alpha_4} + \frac{c_2 f_2}{-1+\alpha_1} \right) \zeta_1 \\
& + \left( \left( \frac{c_1}{-1+\alpha_1} - \frac{c_3}{\alpha_2} - \frac{c_4}{\alpha_5} \right) f_2 + \frac{c_3 f_3}{-1+\alpha_2} + \frac{c_4 f_4}{-1+\alpha_5} \right. \\
& - \left. \frac{c_1 f_5}{\alpha_1(-1+\alpha_1)} - \frac{c_3 f_6}{\alpha_2(-1+\alpha_2)} - \frac{c_1 f_1}{\alpha_1} - \frac{c_4 f_9}{\alpha_5(-1+\alpha_5)} \right) \zeta_2 \\
& + \left( \left( -\frac{c_1}{\alpha_3} + \frac{c_2}{-1+\alpha_2} - \frac{c_4}{\alpha_6} \right) f_3 + \frac{c_1 f_1}{-1+\alpha_3} - \frac{c_2 f_2}{\alpha_2} \right. \\
& + \left. \frac{c_4 f_4}{-1+\alpha_6} - \frac{c_4 f_{10}}{\alpha_6(-1+\alpha_6)} - \frac{c_2 f_6}{\alpha_2(-1+\alpha_2)} - \frac{c_1 f_7}{\alpha_3(-1+\alpha_3)} \right) \zeta_3 \\
& + \left( \left( \frac{c_1}{-1+\alpha_4} + \frac{c_2}{-1+\alpha_5} + \frac{c_3}{-1+\alpha_6} \right) f_4 - \frac{c_1 f_8}{\alpha_4(-1+\alpha_4)} \right. \\
& - \left. \frac{c_1 f_1}{\alpha_4} - \frac{c_2 f_9}{\alpha_5(-1+\alpha_5)} - \frac{c_3 f_{10}}{\alpha_6(-1+\alpha_6)} - \frac{c_2 f_2}{\alpha_5} - \frac{c_3 f_3}{\alpha_6} \right) \zeta_4 \\
& + c_1 f_1 + c_3 f_3 + c_4 f_4 + c_2 f_2 \Big)
\end{aligned}$$

$\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  und  $\vec{c}$  sind abhängig von den  $x_i, y_i$  und  $z_i$ , wie in Kapitel 6.1 auf Seite 29 angegeben wurde. Ersetzt man in  $\frac{\partial F}{\partial x}$  die  $a_i$  durch  $b_i$  oder  $c_i$  so erhält man die partiellen Ableitungen nach  $y$  oder  $z$ .

Die Ableitungen lassen sich wie auch beim 6-Punkt-Dreieck in der Form

$$\nu_1 \zeta_1 + \nu_2 \zeta_2 + \nu_3 \zeta_3 + \nu_4$$

schreiben, wobei die  $\nu_i$  konstant, d.h. nicht vom Punkt  $Q = (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3, \zeta_4)$  abhängig, sind.

## 8 Ausblick

Mit den in dieser Arbeit hergeleiteten Formeln lassen sich die benötigten Berechnungen für Dreiecke und Tetraeder durchführen. Es gibt allerdings auch Geometrien die aus andersartigen Elementen bestehen, welche in Dreiecke und Tetraeder zerlegt werden müssten. Das führt dazu, dass sich die Anzahl Gitterzellen vervielfacht, was den Speicherverbrauch und Arbeitsaufwand enorm ansteigen lässt. Daher lohnt sich eine Implementierung dieser weiteren Elemente.

Ein Beispiel wäre das gekrümmte triquadratische 27-Punkt-Hexaeder. Dieser Körper entspricht einem Quader mit gekrümmten Seiten und Kanten. „Triquadratisch“ daher, weil die Shape-Funktionen quadratisch in den drei natürlichen Koordinaten sind.

Die 27 Punkte setzen sich zusammen aus

- 8 Eckpunkten
- den Mittelpunkten der 12 Kanten
- den Mittelpunkten der 6 Seiten
- dem Mittelpunkt des gesamten Hexaeders

Dieser Körper wird zur Zeit durch eine Zerlegung in 48 4-Punkt-Tetraeder approximiert.

Für den 2-dimensionalen Fall wären die Berechnungen, die hier für Dreiecke geschehen sind, für Vierecke denkbar, so dass auf diesen trotz linearer Kanten eine quadratische oder kubische Interpolation ermöglicht wird.

## 9 Literaturverzeichnis

### Literatur

- [1] D. Reiter, Kap. 3 in: Computational Many-Particle Physics, Springer Lecture Notes in Physics 739
- [2] Colorado University - Advanced Finite Element Methods <http://www.colorado.edu/engineering/CAS/courses.d/AFEM.d/>
- [3] Colorado University - Introduction to Finite Element Methods <http://www.colorado.edu/engineering/CAS/courses.d/IFEM.d/>
- [4] Prof. Suvaranu De - Introduction to Finite Elements <http://www.rpi.edu/~des/HigherOrder.ppt>
- [5] Wikipedia - Gesetz der großen Zahlen

## A Quellcode MonteCarlo.c

## B Quellcode MonteCarlo.java



## C Quellcode MonteCarloOpt.c

## D Quellcode MonteCarloOpt.java

## **E Maple-Dokument**