Fehlerschätzer für FE-Berechnungen bei entfestigenden Materialien

von

Holger Steeb

Bericht Nr. 37 (2002) Institut für Baustatik der Universität Stuttgart Professor Dr.-Ing. E. Ramm Stuttgart 2002



© Holger Steeb

Berichte können bezogen werden über: Institut für Baustatik Universität Stuttgart Pfaffenwaldring 7 D-70550 Stuttgart Tel.: ++49 (0)711 685 6123 Fax.: ++49 (0)711 685 6130 http://www.uni-stuttgart.de/ibs/

Alle Rechte, insbesondere das der Übersetzung in andere Sprachen, vorbehalten. Ohne Genehmigung des Autors ist es nicht gestattet, diesen Bericht ganz oder teilweise auf photomechanischem, elektronischem oder sonstigem Wege zu kommerziellen Zwecken zu vervielfältigen.

D 93 – Dissertation an der Universität Stuttgart ISBN 3-00-009801-1

Fehlerschätzer für FE-Berechnungen bei entfestigenden Materialien

Von der Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Holger Steeb

aus Leinfelden-Echterdingen

Hauptberichter:Prof. Dr.-Ing. Ekkehard RammMitberichterin:Prof. Dr. rer. nat. Barbara WohlmuthTag der mündlichen Prüfung:14. Juni 2002

Institut für Baustatik der Universität Stuttgart Stuttgart 2002

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit der Entwicklung und numerischen Untersuchung von *a posteriori*-Fehlerschätzern im Rahmen von adaptiven Finite-Element-Methoden.

Nach einer Gegenüberstellung der bekannten klassischen expliziten bzw. impliziten residuenbasierten und gradientenorientierten Fehlerschätzern werden diese Methoden auf zielorientierte Fehlerabschätzungsmethoden erweitert.

Zielorientierte Fehlerschätzer basieren auf Dualitätstechniken, die im Rahmen dieser Arbeit formuliert und mittels Finite-Element-Methoden numerisch ausgewertet werden. Gegenüber den o. g. klassischen Methoden haben zielorientierte Fehlerschätzer den Vorteil, daß das zu minimierende Fehlerfunktional *zielorientiert* vom Anwender an das zu untersuchende Randwertproblem angepaßt werden kann. Dieser Punkt macht diese Art von Fehlerschätzer für die vielfältigen numerisch zu analysierenden Ingenieuraufgaben der Praxis besonders attraktiv.

Der zweite Teil der Arbeit beinhaltet die Erweiterung der vorgestellten zielorientierten Methoden auf inelastisches Materialverhalten. Von besonderem Interesse ist hierbei die Anwendung auf entfestigende Materialien, die hier mittels der *Perzyna*-Viskoplastizität beschrieben werden. Ausgangspunkt der Entwicklung von Fehlerschätzern im Tangentialraum der (Visko-) Plastizität bilden die kanonischen Gleichungen des zugrunde liegenden Anfangsrandwertproblems. Im Rahmen einer Raum-Zeit-Galerkin-Methode wird im Anschluß daran auf gekoppelte Raum-Zeit-Fehlerschätzer für inelastisches Materialverhalten hingeführt.

Die Umsetzbarkeit der Fehlerschätzer im Rahmen von Verfeinerungsindikatoren in adaptiven Finite-Element-Programmen wird diskutiert und in einigen numerischen Beispielen belegt.

Abstract

In the following contribution *a posteriori* error estimation techniques for adaptive *Galerkin* finite elements are developed and analyzed.

After a respective comparison of the well-known classical explicit and implicit residual based error estimators and gradient-based error estimators, the presented methods are extended to goal-oriented error estimation techniques.

Goal-oriented error estimators are based on duality techniques. These techniques are formulated within this work and numerically evaluated using *Galerkin* finite element methods. Comparing goal-oriented and classical error estimators, the advantage of the first technique is the higher flexibility with respect to the analyzed error norm. This means that the error functional can be adjusted to the boundary value problem in a goal-oriented way. Thus, from a view point of a practical engineer, this highly flexible technique is very attractive for various numerical applications in the industry.

In the second part of this contribution the introduced goal-oriented techniques are extended to inelastic material response. The extension to softening materials, here described within the framework of the *Perzyna*-viscoplasticity, is especially considered. In a first step the previously presented goal-oriented techniques are developed in the tangential space of the *Perzyna* viscoplasticity model, based on the canonical equations of the initial value problem in strong form. In a second step the methods are extended to space-time error estimations techniques.

In the last two sections of this contribution the applicability and reliability of the presented error estimation techniques are shown in various numerical examples. Thus the error estimators are extended to refinement indicators and are implemented in an adaptive finite element code.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Baustatik der Universität Stuttgart in den Jahren 1996 – 2001.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Ing. Ekkehard Ramm für die Übernahme des Hauptberichts. Die wissenschaftlichen Freiheiten, die ich am Institut genoß, haben diese Arbeit erst ermöglicht.

Frau Prof. Dr. rer. nat. Barbara Wohlmuth möchte ich ganz herzlich für die Übernahme des Mitberichts danken. Die zügige Korrektur, ihr Interesse an der Arbeit und ihre konstruktive Kritik haben mir weitergeholfen und mich sehr gefreut.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Ehlers möchte ich danken für die Freiräume und die eingeräumte Arbeitszeit, die mir in der Endphase dieser Arbeit zur Verfügung gestellt wurde.

Ich danke meinen Kollegen und Freunden an der Universität Stuttgart, die mich während der Entstehung dieser Arbeit begleitet haben. Die vielen fachlichen Diskussionen, welche in sehr fruchtbarer Weise geführt wurden, genoß ich sehr.

Insbesondere bedanken möchte ich mich bei Stefan Diebels, Ellen Kuhl und Kerstin Kottke für die Übernahme der langwierigen Arbeit des Korrekturlesens. Ihre Verbesserungsvorschläge und Hinweise haben sehr zur Klarheit der Arbeit beigetragen.

Bei meinen Eltern und meinem Bruder Karsten möchte ich mich für die entgegengebrachte Toleranz und die oftmals nötigen aufmunternden Worte bedanken.

Nicht zuletzt gilt mein herzlicher Dank Christine. Ihr Rückhalt und ihre Unterstützung machten diese Arbeit überhaupt erst möglich.

Stuttgart, im Juni 2002

Holger Steeb

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Übersicht						
	1.1	Motiv	ation	1			
	1.2	em und Zielsetzung	2				
	1.3	Gliederung					
2	Kor	Kontinuumsmechanik und Diskretisierungsmethoden					
	2.1	Kontinuumsmechanische Grundlagen					
	2.2	Schwache Form und Diskretisierung					
		2.2.1	Schwache Form des Gleichgewichts	12			
		2.2.2	Finite-Element-Methode	14			
		2.2.3	Linearisierung	17			
3	Fehlerabschätzung für das linear-elastische Randwertproblem						
	3.1	Globale Fehlerschätzer					
		3.1.1	Globale explizite residuenbasierte Fehlerschätzer	19			
		3.1.2	Globale implizite residuenbasierte Fehlerschätzer	26			
		3.1.3	Globale gradientenbasierte Fehlerindikatoren	33			
	3.2	Zielorientierte oder lokale Fehlerschätzer					
		3.2.1	Allgemeine Motivation	38			
		3.2.2	Zielorientierte, residuenbasierte Fehlerabschätzung	39			
		3.2.3	Zielorientierte, gradientenbasierte Fehlerabschätzung	49			
		3.2.4	Zielorientierte Fehlerabschätzung in der Energienorm	52			
		3.2.5	Ein einfacher zielorientierter Fehlerindikator	54			
	3.3	Zusan	nmenfassung	55			
4	Fehlerabschätzung für das nichtlineare Anfangsrandwertproblem						
	4.1	Die <i>Prandtl-Reuss-</i> Plastizität					
	4.2	Die <i>Perzyna</i> -Viskoplastizität					

		4.2.1	Einfluß der Belastungsgeschwindigkeit	. 68		
	4.3	4.3 Schwache Form der Plastizität				
		4.3.1	Viskose Regularisierung	. 70		
		4.3.2	Semi-diskrete schwache Formulierungen	. 71		
	4.4 Abschätzung des Fehlers der Ortsdiskretisierung			. 73		
	4.5 Gekoppelte Fehlerabschätzung in Ort und Zeit					
		4.5.1	Raum-Zeit-Galerkin-Formulierungen	. 76		
5	Nichtlineare adaptive Finite-Element-Methoden					
	5.1	5.1 Adaptive Finite-Element-Methoden				
	5.2	Strategien der adaptiven Netzgenerierung				
		5.2.1	Beschreibung der Dichtefunktion	. 85		
		5.2.2	Netzoptimalitätskriterien	. 85		
		5.2.3	Wiedervernetzungsstrategie	. 88		
		5.2.4	Hierarchische Netzverfeinerung	. 89		
	5.3 Aspekte nichtlinearer adaptiver Finiter Elemente		te nichtlinearer adaptiver Finiter Elemente	. 92		
		5.3.1	Das algorithmische Gesamtkonzept	. 93		
		5.3.2	Zielorientierte Fehlermethoden – das duale Problem	. 94		
		5.3.3	Transformation der diskreten Größen	. 95		
6	Numerische Beispielrechnungen 99					
	6.1	Linear	r-elastische Beispiele	. 100		
		6.1.1	Kragscheibe	. 100		
		6.1.2	L-Scheibe mit Aussparungen	. 104		
	6.2	Beispi	el zur <i>Prandtl-Reuss</i> -Plastizität	. 110		
	6.3	Beispi	el zur <i>Perzyna</i> -Viskoplastizität	. 114		
Zυ	ısam	menfa	ssung, Bewertung und Ausblick	119		
	$fassung \ldots \ldots$. 119				
	Bewertung					
	Ausblick					
A	Notation und Tensorrechnung					
в	Sob	olev-F	Räume	137		
С	Eindimensionale Lagrange-Ansatzfunktionen					

Kapitel 1 Einleitung und Übersicht

1.1 Motivation

Nicht zuletzt durch eine rasante Entwicklung der Mikroelektronik in den letzten Jahrzehnten gelang es der Finite-Element-Methode (FEM), sich als das numerische Basiswerkzeug in vielen Bereichen des Ingenieurwesens und der angewandten Physik durchzusetzen. Heute haben Ingenieure damit ein Simulationswerkzeug zur Hand, mit dem die vielfältigsten Rand- und Anfangsrandwertprobleme numerisch analysiert werden können. Gemeinsam mit der Entwicklung der Rechenkapazität der Mikroprozessoren haben sich aber auch die Anforderungen, die in der heutigen Zeit an numerische Analysen gestellt werden, weiterentwickelt. Beispielsweise werden in der Strukturmechanik häufig geometrisch oder material nichtlineare Fragestellungen untersucht, die auch heute noch höchste Anforderungen an die Leistung der Computer stellen. Die effiziente Verteilung der vorhandenen Rechenzeitressourcen stellt dabei immer noch eine wichtige und teilweise nicht einfach zu lösende Aufgabe für den Anwender dar. Da die Finite-Element-Methode die dem Randbzw. Anfangsrandwertproblem zugrundeliegenden partiellen Differentialgleichungen nur näherungsweise löst, haben die numerischen Rechenergebnisse ebenfalls nur approximativen Charakter. Zieht man die Konsequenzen aus den beiden letztgenannten Punkten, so motiviert sich daraus direkt die Entwicklung bzw. der Einsatz adaptiver Techniken, mit dem Ziel eine vorgegebene Genauigkeit der Lösung mit minimalem numerischem Aufwand zu erreichen. Somit soll unter einer adaptiven Methode verstanden werden, daß die Diskretisierung der zugrundeliegenden schwachen Formen im Laufe einer numerischen Analyse an vom Anwender vorgegebene Rahmenbedingungen angepaßt werden können. Versteht man unter der Rahmenbedingung eine normierte Fehlertoleranz, so wird dementsprechend eine Qualitätssicherung der durchgeführten numerischen Analyse erreicht.

Mit adaptiven Finite-Element-Methoden kann also eine solche geforderte Qualität der numerischen Ergebnisse gewährleistet werden. Adaptive Finite-Element-Methoden können dabei unter Vorgabe eines Qualitätskriteriums die optimale numerische Diskretisierung liefern. Das zugrundeliegende Optimierungsproblem kann man also folgendermaßen formulieren:

"Finde eine Finite-Element-Diskretisierung, die bei einem minimalen numerischen Aufwand (Anzahl der Rechenoperationen \mapsto min) die Bedingung (numerische Fehler \leq Qualitätskriterium) nicht verletzt."

Zur Konstruktion adaptiver Finite-Element-Methoden werden Fehlerindikatoren bzw. Fehlerschätzer benötigt. Fehlerschätzer bewerten die Qualität der durchgeführten Diskreti-

sierung, indem der Diskretisierungsfehler gegenüber einer i. a. nicht bekannten kontinuierlichen Lösung quantitativ abgeschätzt wird. Demgegenüber stehen Fehlerindikatoren, welche den Fehler nicht unbedingt quantitativ abschätzen können, aber trotz allem die Stellen des diskretisierten Gebietes finden, in denen der Diskretisierungsfehler groß ist. Aus der abgeschätzten Fehlerverteilung im betrachteten Diskretisierungsgebiet läßt sich dann ein Verfeinerungsindikator zur Verbesserung der Diskretierungsmethode im folgenden Rechenschritt konstruieren. Ausgehend von einer vorgegebenen Anfangsdiskretisierung kann damit die FEM-Diskretisierung entweder lokal verfeinert oder vergröbert werden.

Der Entwicklung von Fehlerschätzern oder Fehlerindikatoren kommt im Rahmen einer adaptiven Finite-Element-Methode also eine entscheidende Rolle zu.

Da die den Rand- bzw. Anfangsrandwertproblemen der Strukturmechanik zugrundeliegenden partiellen Differentialgleichungen sich in unterschiedliche Typen unterscheiden lassen, welche angepaßte Finite-Element-Formulierungen erfordern, müssen je nach betrachteter Problemklasse auch speziell angepaßte Fehlerschätzer entwickelt werden. Besonders werden für das im Rahmen dieser Arbeit betrachtete, materiell nichtlineare Anfangsrandwertproblem der ratenunabhängigen *Prandtl-Reuss*-Plastizität bzw. der ratenabhängigen *Perzyna*-Viskoplastizität eine umfassende Betrachtung der zugrundeliegenden Feldgleichungen und deren numerische Umsetzung erforderlich.

1.2 Problem und Zielsetzung

Klassische Fehlerschätzer für Finite-Element-Methoden schätzen den Diskretisierungsfehler in der Energienorm ab, da infolge der Optimalität des *Galerkin*-Verfahrens bezüglich der Energienorm diese Norm als natürlich erscheint.

Im Gegensatz dazu ist für den praktisch tätigen Ingenieur keinesfalls immer die Fehlerenergie einer untersuchten Struktur von aussagekräftiger Bedeutung. Falls der Gebrauchstauglichkeit von Bauteilen eine primäre Bedeutung zukommt, spielt z. B. die L_{∞} -Norm der Verschiebung oder die L_2 -Norm der Verschiebungen in einem Teilgebiet eine entscheidende Rolle. Steht die Tragsicherheit, also die Versagenswahrscheinlichkeit von Bauteilen im Vordergrund, ist die L_2 -Norm der Spannungen oder der Verzerrungen in einem Teilgebiet eher aussagekräftig. Somit möchte man als Ingenieur neben energienormkontrollierten adaptiven Methoden noch weitere, problemabhängige Fehlerkontrollen zur Verfügung haben.

Betrachtet man nun die Energienormfehlerschätzer etwas genauer, so treten z. B. in expliziten residuenbasierten Fehlerschätzern Stabilitätskonstanten auf, die nur für spezielle Randwertprobleme analytisch bestimmt werden können, z. B. für das Problem der linearen Elastizität. Für komplexere Problemklassen, z. B. die *Prandtl-Reuss*-Plastizität oder die *Perzyna*-Viskoplastizität, können analytische Abschätzungen entweder nicht mehr gefunden werden, oder die Abschätzungen sind so unscharf, daß der praktische Einsatz energienormbasierter Fehlerschätzer klassischer Art für diese Problemklassen fraglich erscheint.

Ziel dieser Arbeit ist es nun, einen allgemeinen erweiterten Zugang zu Methoden der Fehlerabschätzung zu entwickeln, welche ohne globale Stabilitätskonstanten auskommen. Die Stabilität des betrachteten *primalen Problems* wird vielmehr durch die numerische Lösung eines weiteren *dualen Problems* berücksichtigt. Aufbauend auf bereits bekannten Ansätzen zu lokalen bzw. zielorientierten Fehlermethoden wird das Konzept der Fehlerabschätzung mittels dualer Methoden auch auf gradientenbasierte Methoden, explizite residuenbasierte sowie implizite residuenbasierte Fehlerschätzer mittels lokaler *Neumann*-Hilfsprobleme erweitert.

Um den praktischen Ingenieuranforderungen gerecht zu werden, umfassen die in dieser Arbeit vorgestellten Fehlernormen neben der Energienorm sowohl die L_{∞} -Norm und die L_2 -Norm der Verschiebungen als auch sekundäre Größen wie Spannungen, Verzerrungen usw. Diese können entweder in einem Teilgebiet oder auch auf dem Gesamtgebiet des betrachteten Problems formuliert werden. Die Klasse der entwickelten Fehlerschätzer ist somit weit universeller als die bekannter Energienormschätzer.

Einen weiteren Aspekt dieser Arbeit stellt die Anwendung der hier vorgestellten Fehlerschätzer auf irregulären Netzen in nichtlinearen adaptiven Finite-Element-Programmen dar. Es werden dabei verschiedene Methoden vorgestellt, wie die zur Fehlerabschätzung nötigen dualen Fehleranteile bestimmt werden können.

Die Anwendung auf Anfangsrandwertprobleme der *Perzyna*-Viskoplastizität erfordert im Rahmen einer klassischen Finite-Element-Methode nach einer zeitlichen Diskretisierung eine Linearisierung der mittels der FEM diskretisierten schwachen Form. Die Lösung an einem Gleichgewichtspunkt wird dann im Rahmen eines globalen *Newton-Raphson*-Verfahrens auf iterativem Weg bestimmt.

Die vorgestellte Klasse der dualen Fehlermethoden wird ebenfalls auf diese Problemklasse übertragen. Dabei wird zuerst das linearisierte Problem betrachtet. Die Fehlerabschätzung erfolgt dann im Tangentialraum des primalen Problems. Der numerische Mehraufwand für die Lösung des linearisierten dualen Problems ist dabei sehr gering und erfordert nur ein zusätzliches Rückwärtseinsetzen in die dreieckszerlegte Tangentensteifigkeitsmatrix des primalen Problems.

Um dem komplexen Materialverhalten der Viskoplastizität gerecht zu werden, z. B. dem Einspringen von Scherbändern in endlichen lokalen Zonen, wird anschließend anhand Finiter-Element-Verfahren in Raum und Zeit eine gekoppelte Betrachtung des Raum-Zeit-Fehlers aufgezeigt.

Abschließend werden anhand der *Perzyna*-Viskoplastizität Aspekte nichtlinearer adaptiver Finite-Element-Programme diskutiert. Dem Variablentransfer von Knoten- und *Gauß*-Punkt-Variablen von einem alten auf ein neues Netz kommt dabei eine entscheidende Bedeutung zu.

Die numerische Umsetzung der in dieser Arbeit vorgestellten Fehlerschätzer und adaptiven Finite-Element-Methoden erfolgte in dem Programmsystem **CAT**des Instituts für Baustatik (welches in der ursprünglichen Fassung auf *Stegmüller*, *Bletzinger & Kimmich* [129] zurückgeht). Zur Beschreibung der verwendeten Netzgeneratoren sei auf die Arbeit von *Rehle* [120] verwiesen.

1.3 Gliederung

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in fünf Kapitel. Zu Beginn der einzelnen Kapitel erfolgt eine kurze Zusammenfassung, in welcher der aktuelle Stand der Forschung sowie die zugrundeliegenden wichtigsten Arbeiten erwähnt werden.

In *Kapitel 1* erfolgt eine kurze Einführung in die Kontinuumsmechanik. Hierbei stehen die Kinematik und die Feld- und Bilanzgleichungen, welche im Rahmen der untersuchten Rand- und Anfangsrandwertprobleme betrachtet werden, im Vordergrund. Die Diskretisierung der schwachen Form der Impulsbilanz erfolgt mit der Finite-Element-Methode, die

einführend beschrieben wird. Dabei wird vor allem der nachfolgenden Fehlerbetrachtung besondere Aufmerksamkeit geschenkt.

Die bekannten expliziten residuenbasierten, die impliziten residuenbasierten Fehlerschätzer und die Gradientenschätzer werden in *Kapitel 2* für das Randwertproblem der linearen Elastizität vorgestellt. Anschließend wird ein sowohl mechanischer als auch abstrakter mathematischer Zugang zu dualen Fehlermethoden hergeleitet. Analog zu den o.g. Klassen der globalen Fehlermethoden werden die entsprechenden lokalen oder zielorientierten Fehlerschätzer hergeleitet. Ein Vorteil der allgemeinen zielorientierten Fehlerschätzer wird anhand verschiedener möglicher Fehlernormen herausgearbeitet. Im speziellen werden in diesem Kapitel auch mögliche Techniken zur Abschätzung der dualen Fehleranteile aufgezeigt werden.

In Kapitel 3 wird basierend auf regularisierten Variationsungleichungen das Problem der *Perzyna*-Viskoplastizität betrachtet. Die regularisierte inkrementelle Variationsmethode erlaubt eine Fehlerabschätzung im *Tangentialraum* des primalen Problems. Eine Kontrolle von Raum-Zeit-Fehlerakkumulationen wird durch eine gekoppelte Finite-Element-Formulierung in Raum und Zeit möglich, welche abschließend diskutiert werden wird.

Die numerische Umsetzung im Rahmen eines adaptiven Finite-Element-Programmes ist Inhalt des *Kapitels 4*. Die dazu notwendigen Techniken einer inkrementellen iterativen Betrachtung des nichtlinearen Anfangsrandwertproblemes werden hinsichtlich des Datentransfers, der Dichtefunktionen und des numerischen Lösens der dualen Hilfsprobleme betrachtet.

Zur Verifikation der vorgestellten neuen dualen Fehlerschätzer dienen numerische Beispielrechnungen anhand von Problemen der linearen Elastizität, eines Benchmark-Problems mit ratenunabhängiger *Prandtl-Reuss*-Plastizität, formuliert im Rahmen einer Forschergruppe der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG), und eines Beispiels mit einem Entfestigungsmaterial – der *Perzyna*-Viskoplastizität.

Eine zusammenfassende Bewertung der vorgestellten Methoden und ein Ausblick auf zukünftige Ziele schließen die Arbeit ab.

Kapitel 2

Kontinuumsmechanik und Diskretisierungsmethoden

Im vorliegenden Kapitel werden die Grundgleichungen der im folgenden näher betrachteten Rand- und Anfangsrandwertprobleme im Rahmen einer geometrisch linearen Theorie eingeführt. Die dem Gleichgewicht in starker Form äquivalenten schwachen Formen der betrachteten partiellen Differentialgleichungen werden mit Hilfe der Finite-Element-Methode in diskrete bzw. semi-diskrete Gleichungssysteme überführt. Dieser soweit als möglich allgemein gehaltene Zugang wird die Grundlage für die angeführte Fehlerabschätzungen in den nachfolgenden Kapiteln liefern.

2.1 Kontinuumsmechanische Grundlagen

Im folgenden werden die betrachteten Randwert- bzw. Anfangsrandwertprobleme im Rahmen der Kontinuumsmechanik kurz hergeleitet. Die betrachteten geometrisch linearen Probleme werden dabei so aufbereitet, daß sie im Rahmen einer *Galerkin*-Methode diskretisiert und numerisch untersucht werden können. Für weitere, detaillierte kontinuumsmechanische als auch mathematische Ausführungen sei auf die klassische Literatur verwiesen, *Chadwick* [30], *Ciarlet* [32], *Haupt* [63], *Gurtin* [60], *Green & Zerna* [59], *Malvern* [90], *Marsden & Hughes* [91], *Truesdell & Toupin* [143], *Truesdell & Noll* [142].

Kinematik

Betrachtet wird ein materieller Körper $\mathcal{B} = \{\mathcal{P}\}$ bestehend aus den materiellen Punkten $\mathcal{P} \in \mathcal{B}$. Eine Plazierung (Konfiguration) \mathcal{X} des Körpers \mathcal{B} ist so definiert, daß \mathcal{X} jedem materiellen Punkt $\mathcal{P} \in \mathcal{B}$ einen Ortsvektor $\mathbf{x} = \mathcal{X}(\mathcal{P})$ zuordnet:

Definition:

$$\boldsymbol{\mathcal{X}}: \boldsymbol{\mathcal{B}} \longrightarrow \boldsymbol{\Omega} \subset \mathbb{R}^n, \ n = 2, 3.$$

Die Bewegung eines materiellen Punktes \mathcal{P} eines Körpers \mathcal{B} ist eine Abfolge von Konfigurationen \mathcal{X}_t , die jedem materiellen Punkt $\mathcal{P} \in \mathcal{B}$ zu jedem Zeitpunkt t einen Ortsvektor $\boldsymbol{x} = \mathcal{X}(\mathcal{P}, t)$ zuordnet. Der Verschiebungsvektor $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t)$ kann damit zu einem Zeitpunkt tdurch die Differenz des Ortsvektors der Momentankonfiguration \boldsymbol{x} und der Referenzkonfiguration \boldsymbol{X} beschrieben werden.

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},t) = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{X}.$$
(2.2)

Im folgenden soll der Deformationsgradient F(X, t) eingeführt werden. Der Deformationsgradient als elementare Größe in der Kontinuumsmechanik stellt das Differential der Bewegungsfunktion $\mathcal{X}(X, t)$ dar:

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X},t) = \frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{X}}(\boldsymbol{X},t)}{\partial \boldsymbol{X}}.$$
(2.3)

Drückt man die Bewegungsfunktion $\mathcal{X}(\mathbf{X}, t)$ durch den Ortsvektor $\mathbf{x} = \mathcal{X}(\mathbf{X}, t)$ der Momentankonfiguration aus, so läßt sich der Deformationsgradient in einem Punkt \mathbf{X} der Referenzkonfiguration darstellen als

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X},t) = \frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{X}}(\boldsymbol{X},t)}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\mathcal{X}}(\boldsymbol{X},t)}{\mathrm{d}\boldsymbol{X}} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}\boldsymbol{X}} = \mathrm{Grad}\,\boldsymbol{x},\tag{2.4}$$

was den Transport von *Linienelementen* d $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{F} d\boldsymbol{X}$ der Referenzkonfiguration auf Linienelemente d \boldsymbol{x} der Momentankonfiguration ausdrückt. Im folgenden wird als ein Verzerrungsmaß der Referenzkonfiguration der *Greensche* Verzerrungstensor $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{X}, t)$ eingeführt:

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{X},t) = \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{F}^T \cdot \boldsymbol{F} - \boldsymbol{1} \right).$$
(2.5)

Im Rahmen dieser Arbeit wird im weiteren von kleinen Deformationen ausgegangen. Diese Annahme trifft für viele physikalische Vorgänge in der Natur zu und vereinfacht sowohl die Beschreibung im Rahmen der Kontinuumsmechanik als auch deren numerische Umsetzung. Von kleinen Deformationen spricht man, wenn sowohl das Verschiebungsfeld $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},t)$ als auch alle Gradienten des Verschiebungsfeldes klein sind:

$$|\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},t)| \ll \hat{l}, \qquad (2.6)$$

$$\delta = \|\operatorname{Grad} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t)\| \ll 1.$$
(2.7)

Mit \hat{l} wird eine charakteristische Länge des betrachteten Körpers \mathcal{B} bezeichnet. Die kinematischen Größen können nun linearisiert werden, wodurch man eine geometrisch lineare Theorie erhält.

Durch den Gradienten des Verschiebungsvektors ergibt sich eine Aussage für den Deformationsgradienten:

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X},t) = \operatorname{Grad} \boldsymbol{x} = \operatorname{Grad} (\boldsymbol{X} + \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},t)) = \boldsymbol{1} + \operatorname{Grad} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},t).$$
(2.8)

Unter Voraussetzung der getroffen Annahme (2.7) erhält man damit einen Ausdruck für den Deformationsgradienten:

$$\delta = \|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}, t) - \boldsymbol{1}\| \ll 1.$$
(2.9)

Die eingeführten Deformationsmaße lassen sich nun durch den Verschiebungsgradienten und Terme höherer Ordnung $\mathcal{O}(\delta^n)$ ausdrücken:

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{1} + \mathcal{O}(\delta), \tag{2.10}$$

$$\boldsymbol{E} = \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{F}^T \cdot \boldsymbol{F} - \boldsymbol{1} \right) = \frac{1}{2} \left(\operatorname{Grad} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t) + \operatorname{Grad}^T \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t) \right) + \mathcal{O}(\delta^2), \quad (2.11)$$

damit gilt für den linearisierten Deformationsgradient:

$$\lim(\boldsymbol{F}) = \boldsymbol{1}.\tag{2.12}$$

Somit muß im Rahmen einer geometrisch linearen Theorie zwischen der Referenzkonfiguration und der Momentankonfiguration nicht weiter unterschieden werden, da diese nun zusammenfallen.

Der linearisierte Greensche Verzerrungstensor reduziert sich zu:

$$lin(\boldsymbol{E}) := \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left(\nabla \boldsymbol{u} + \nabla^T \boldsymbol{u} \right),$$
(2.13)

bzw. enthält nur noch den symmetrischen Anteil des Verschiebungsgradienten:



$$\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^{sym} \boldsymbol{u}. \tag{2.14}$$

Abbildung 2.1: Kinematik eines materiellen Körpers

Bilanzgleichungen

Im weiteren soll nur auf die Erhaltungsgleichungen der mechanischen Größen eingegangen werden, die später noch näher beleuchtet werden.

Die Masse eines Körpers bleibt für alle Zeit konstant, so daß gilt:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}m = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega}\mathrm{d}m = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega}\rho\,\mathrm{d}v = 0.$$
(2.15)

Darin wurde die Masse m über die Massendichte ρ ausgedrückt. Durch Anwendung des *Gauß*schen Integralsatzes können die Oberflächenintegrale in Volumenintegrale überführt werden, so daß man schlußendlich unter der Annahme von Stetigkeit und Differenzierbarkeit die *lokale Form der Massenbilanz* erhält:

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \dot{\boldsymbol{x}} = 0. \tag{2.16}$$

Zwischen der Dichte ρ_0 und dem Volumen dV der Referenzkonfiguration beziehungsweise dem Volumen dv der Momentankonfiguration gilt:

$$\rho_0(\boldsymbol{X}) \, \mathrm{d}V = \rho(\boldsymbol{x}, t) \, \mathrm{d}v. \tag{2.17}$$

Nutzt man nun die Beziehung $dv = \det \mathbf{F} dV$ zwischen den Volumenelementen aus, so erhält man:

$$\rho = \rho_0 \, (\det \mathbf{F})^{-1}.$$
(2.18)

Hierin stellt ρ_0 die Dichte zum Ausgangszeitpunkt $t = t_0$ dar. In einer geometrisch linearen Theorie bleibt somit die Dichte erhalten, und es gilt:

$$\rho \equiv \rho_0. \tag{2.19}$$

Die Impulsbilanz bilanziert die zeitliche Änderung des Impulses der inneren und äußeren Kräfte

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{\Omega} \rho \, \dot{\boldsymbol{x}} \, \mathrm{d}v = \int_{\partial \Omega} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} \, \mathrm{d}a + \int_{\Omega} \rho \, \boldsymbol{b} \, \mathrm{d}v, \qquad (2.20)$$

wobei ρb die Volumenkräfte des Körpers (im allgemeinen die Gravitationskraft), σ den Cauchyschen Spannungstensor und n den Einheitsnormalenvektor der Oberfläche des betrachteten Körpers darstellen.

Mit analoger Argumentation und unter Ausnutzung der Massenbilanz folgt die *lokale* Form der Impulsbilanz zu:

$$\rho \, \ddot{\boldsymbol{x}} = \operatorname{div} \, \boldsymbol{\sigma} + \rho \, \boldsymbol{b}. \tag{2.21}$$

Durch Vernachlässigung der Trägheitsterme $\rho \ddot{x}$ erhält man die quasi-statische Form der lokalen Impulsbilanz, die im folgenden näher betrachtet wird:

$$-\operatorname{div}\boldsymbol{\sigma} = \rho \,\boldsymbol{b}.\tag{2.22}$$

Im klassischen *Boltzmann*-Kontinuum führt die *Drallbilanz* auf die Symmetrie des *Cauchyschen Spannungstensors*. Im Rahmen dieser Arbeit wird der *Cauchysche Spannungstensor a priori* als symmetrisch angenommen, so daß die Drallbilanz nicht weiter berücksichtigt wird:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T. \tag{2.23}$$

Die Beobachtung physikalischer Prozesse hat gezeigt, daß mechanische Energie zwar vollständig in thermische Energie umgewandelt werden kann, eine komplette Rückgewinnung der mechanischen Energie dagegen nicht möglich ist. Diese Erkenntnis hat zur Formulierung eines weiteren mechanischen Grundsatzes geführt, zum *Prinzip der Irreversibilität*. Aus dem Prinzip der Irreversibilität läßt sich eine spezielle *Entropieungleichung*, die *Clausius-Duhem*-Ungleichung, ableiten. Der Entropieproduktion kommt darin ein Maß der Irreversibilität eines thermodynamischen Prozesses zu.

Im Gegensatz zu allen anderen Bilanzgleichungen dient die Entropiebilanz nicht zur Bestimmung der Änderung einer physikalischen Größe, sondern bestimmt die Richtung des thermodynamischen Prozesses.

Dies hat zur Folge, daß die Entropiebilanz in Form einer Ungleichung formuliert werden muß. Durch Einführen einer freien *Helmholtz*schen Energie Ψ und Einsetzen in die Entropiebilanz erhält man dann die *Clausius-Duhem*-Ungleichung, die auch als 2. Hauptsatz der Thermodynamik bezeichnet wird:

$$\mathcal{D} := \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \dot{\Psi} \ge 0. \tag{2.24}$$

In der Materialtheorie liefert das *Entropieprinzip* stark einschränkende Bedingungen an die materiellen Funktionen des Spannungstensors und der internen Variablen. Die Formulierung der freien Energie Ψ nimmt dabei eine Schlüsselrolle ein.

Auf die weitere Auswertung der *Clausius-Duhem*-Ungleichung wird in Kapitel 3 im Rahmen einer thermodynamisch konsistenten Materialformulierung eingegangen. Hinsichtlich der numerischen Formulierung nichtlinearer Materialmodelle und deren Fehlerkontrolle kommt der thermodynamischen Betrachtung dann eine wichtige Bedeutung zu.

Eine ausführliche thermodynamische Betrachtung findet man unter anderem in den Arbeiten von Truesdell [141], Müller [98], Müller & Ruggeri [99].

Rand- und Anfangsrandwertprobleme

Basierend auf den Resultaten der vorangegangenen Abschnitte wird nun das quasi-statische Rand- bzw. Anfangsrandwertproblem angegeben. Betrachtet man den materiellen Körper \mathcal{B} mit den Plazierungsfunktionen $\mathcal{X} : \mathcal{B} \longrightarrow \Omega \subset \mathbb{R}^n$, n = 2, 3, dann erfüllen die Cauchy-Spannungen σ die lokale Form der Impulsbilanz (2.22) im Raum-Zeit-Gebiet $\Omega \times T$:

$$-\operatorname{div}\boldsymbol{\sigma} = \rho \boldsymbol{b} = \boldsymbol{f} \qquad \text{in} \quad \Omega \times T. \tag{2.25}$$

Die Volumenkraftdichte $\rho \mathbf{b}$ wird im folgenden mit dem Vektor \mathbf{f} abgekürzt. Unter der Annahme kleiner Deformationen lassen sich die Verzerrungen nach (2.14) als symmetrischer Anteil des Verschiebungsgradienten ausdrücken:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^{sym} \boldsymbol{u} \qquad \text{in} \quad \Omega \times T. \tag{2.26}$$

Betrachtet man plastische bzw. viskoplastische Materialmodelle, so sind in Experimenten elastische Dehnungen ε^{el} und inelastische Dehnungen ε^{pl} zu beobachten.

Im Rahmen einer Theorie kleiner Deformationen lassen sich die Gesamtverzerrungen ε additiv in einen elastischen und einen plastischen Anteil zerlegen:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^{el} + \boldsymbol{\varepsilon}^{pl} \quad \text{in} \quad \Omega \times T.$$
 (2.27)

Die Spannungen σ sind nichtlineare Funktionen, die von den elastischen und inelastischen Verzerrungen $\varepsilon^{el}, \varepsilon^{pl}$ sowie gegebenenfalls einem Satz weiterer interner Variablen q abhängen:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}^{el}, \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}, \boldsymbol{q}) \quad \text{in} \quad \Omega \times T.$$
(2.28)

Aus den thermodynamischen Auswertungen ergeben sich im allgemeinen Rahmen einer materiell nichtlinearen Theorie die Spannungen aus der freien *Helmholtz*schen Energie Ψ :

۱

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \hat{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}^{el}, \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}, \boldsymbol{q})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{el}} \quad \text{in} \quad \Omega \times T, \quad (2.29)$$

$$\Psi = \hat{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}^{el}, \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}, \boldsymbol{q}). \tag{2.30}$$

Der Rand des Körpers \mathcal{B} mit Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, n = 2, 3 läßt sich in einen Teil Γ_D , auf dem Verschiebungsrandbedingungen, und einen Teil Γ_N , auf dem Spannungsrandbedingungen vorgeschrieben sind, unterteilen. Die Verschiebungsrandbedingungen werden auch wesentliche Randbedingungen oder *Dirichlet*-Randbedingungen genannt. Für die Spannungsrandbedingungen ist der Begriff der natürlichen Randbedingungen oder *Neumann*-Randbedingungen ebenfalls gebräuchlich. Die Vereinigung der Teilmengen müssen wiederum den Gesamtrand ergeben, so daß gilt: $\partial \Omega = \Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ bzw. $\Gamma_N \cap \Gamma_D = \emptyset$, vgl. Abbildung 2.2:

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{\bar{u}} \quad \text{auf} \quad \Gamma_D \times T, \quad (2.31)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = \bar{\boldsymbol{t}}$$
 auf $\Gamma_N \times T$. (2.32)

Zur vollständigen Beschreibung des Anfangsrandwertproblems werden für den Satz interner Variablen noch Anfangsbedingungen zum Zeitpunkt $t = t_0$ benötigt:¹

 $^{^{1}}$ Im Rahmen der hier untersuchten Prozesse werden sowohl ratenunabhängige Formulierungen



Abbildung 2.2: Randbedingungen des betrachteten Randwertproblems des Körpers \mathcal{B}

$$\left.\boldsymbol{\varepsilon}^{pl}\right|_{t_0} = \mathbf{0} \qquad \text{bei} \quad \Omega \times t_0, \tag{2.33}$$

$$\dot{\boldsymbol{q}}|_{t_0} = 0$$
 bei $\Omega \times t_0.$ (2.34)

Bemerkung:

Für den Sonderfall eines linear-elastischen isotropen Materialmodells reduzieren sich die nichtlinearen konstitutiven Beziehungen zu einer linearen Spannungs-Verzerrungsgleichung

$$\hat{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \lambda (\operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon})^2 + \mu \operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^2 = \frac{1}{2} \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^2, \qquad (2.35)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \Psi(\boldsymbol{\varepsilon})}{\boldsymbol{\varepsilon}} = \lambda (\operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{1} + 2 \, \mu \, \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}, \qquad (2.36)$$

mit dem vierstufigen Hookeschen Werkstofftensor C:

$$\boldsymbol{C} = \lambda \, \boldsymbol{1} \otimes \boldsymbol{1} + 2\,\mu \, \boldsymbol{I}. \tag{2.37}$$

Die beiden Lamé-Konstanten λ und μ sind unabhängige Werkstoffkonstanten zur Beschreibung des homogenen, isotropen Verhaltens des betrachteten Materials.Im Falle der linearen Elastizität reduzieren sich die Gleichungen auf ein Randwertproblem, d. h. die Zeitabhängigkeit verschwindet, und damit entfallen natürlich auch die Anfangsbedingungen (2.33) und (2.34).

2.2 Schwache Form und Diskretisierung

Im Rahmen dieser Arbeit werden die schwachen Formen der Rand- bzw. Anfangsrandwertprobleme numerisch mit Hilfe der Finite-Element-Methode diskretisiert. Die Verbreitung der Finite-Element-Methode, sowohl in der Forschung als auch in industriellen Anwendungen, hat parallel zu der fortschreitenden Entwicklung der Computerleistung stattgefunden. Heutzutage ist sie ein Standardwerkzeug zur Lösung verschiedenster partieller Differentialgleichungen der Strömungs- und Festkörpermechanik und findet darüber hinaus auch Einsatz in akustischen, geophysikalischen, astrophysischen und weiteren naturund ingenieurwissenschaftlichen Disziplinen.

Neben Ingenieuren haben sich seit jeher auch mathematische Wissenschaftler mit der Finite-Element-Methode auseinandergesetzt. Im weiteren wird nur insofern auf die Methode eingegangen, als sie für die Entwicklung der Arbeit benötigt wird.

Zur Studie weiterer Details sei auf die grundlegenden Arbeiten aus Sicht der Ingenieure verwiesen, z. B. Bathe [18], Hughes [70], Zienkiewicz & Taylor [150, 149], bzw. auf mathematische Arbeiten, z. B. Braess [25], Brenner & Scott [26], Brezzi & Fortin [27], Ciarlet

⁽*Prandtl-Reuss*-Plastizität) als auch ratenabhängige Formulierungen (*Perzyna*-Viskoplastizität) betrachtet. Eine physikalisch-echte Zeitabhängigkeit kann dabei nur der viskoplastischen Formulierung zugeordnet werden. Falls im weiteren dennoch allgemein von einer Prozeßzeit gesprochen wird, so ist diese im Falle der ratenunabhängigen Formulierung als fiktive Zeit zu verstehen.

²In der allgemeinen Ingenieurliteratur ist ebenfalls eine Darstellung des Werkstofftensors abhängig von dem Elastizitätsmodul E, der Querdehnzahl ν bzw. dem Schubmodul G gebräuchlich. Diese Darstellung ist der o.g. äquivalent.

[31], Eriksson et al. [52], Oden & Reddy [103], Schwarz [124], Strang & Fix [135], Szabo & Babuška [138], Wohlmuth [148].

Im folgenden Abschnitt wird nun mittels der Galerkin-Methode, ein Sonderfall der Methode der gewichteten Residuen, eine Finite-Element-Formulierung für die im letzten Abschnitt hergeleiteten Rand- und Anfangsrandwertprobleme abgeleitet. Dabei werden die Impulsbilanz und die natürlichen Randbedingungen schwach erfüllt, d. h. das Verschiebungsfeld kennzeichnet die Primärvariablen des Problems. Diesem Vorgehen äquivalent ist das Prinzip der virtuellen Verschiebungen. Die Testfunktionen entsprechen also in einer physikalischen Interpretation virtuellen Verschiebungsgrößen.

Finite Elemente, basierend ausschließlich auf Verschiebungsgrößen als primären Variablen, werden dementsprechend auch häufig als Verschiebungselemente bezeichnet.

Eine andere Klasse von Elementformulierungen besitzt neben Verschiebungsgrößen noch weitere Primärvariablen. Auf diese Klasse der *gemischten Finiten Elemente* soll im Rahmen dieser Arbeit nicht eingegangen werden. Hierzu sei auf die einschlägige Literatur verwiesen, z. B. *Braess* [25] oder *Brezzi & Fortin* [27].

2.2.1 Schwache Form des Gleichgewichts

Die schwache Form des Anfangsrandwertproblems erhält man, indem man die Impulsbilanz (2.25) mit einer Testfunktion v skalar multipliziert und anschließend über das Gebiet Ω des Körpers \mathcal{B} integriert:

$$-\int_{\Omega} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{v} \, \operatorname{d} \boldsymbol{v} = \int_{\Omega} \boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{v} \, \operatorname{d} \boldsymbol{v}, \qquad \forall \, \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}, \qquad \mathcal{V} := \left\{ \boldsymbol{v} \in \mathcal{H}^{1}(\Omega), \boldsymbol{v}|_{\Gamma_{D}} = \boldsymbol{0} \right\}, \quad (2.38)$$

Durch partielle Integration und unter Ausnutzung der kinematischen Beziehung (2.26) kann Gleichung (2.38) weiter umgeformt werden:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} = \int_{\Omega} \boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} + \int_{\Omega} \mathrm{div} \left(\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{v}\right) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v}.$$
(2.39)

Unter Ausnutzung des Gaußschen Integralsatzes kann das Volumenintegral $\int_{\Omega} \operatorname{div}(\cdot) \, dv$ in ein Oberflächenintegral umgewandelt werden. Wendet man weiter das Cauchy-Theorem darauf an, so erhält man die schwache Form des Gleichgewichts in der bekannten Form:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} = \int_{\Omega} \boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} + \int_{\Gamma_N} \bar{\boldsymbol{t}} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\boldsymbol{a}.$$
(2.40)

Der Ausdruck schwache Form des Gleichgewichts deutet auf die geringeren Anforderungen an die Differenzierbarkeit der Primärvariablen \boldsymbol{u} in Gl. (2.40) hin. Während in der starken Form des Gleichgewichts, also der lokalen Form der Impulsbilanz (2.25), die Existenz von Ableitungen div $(f(\nabla^{sym}\boldsymbol{u}))$ gefordert wird, benötigt man in der schwachen Form (2.40) nur noch die Existenz des Gradienten $f(\nabla^{sym}\boldsymbol{u})$ der Primärvariablen bzw. der Testfunktion $\nabla^{sym}\boldsymbol{v}$. Dies bedeutet, daß sowohl die Verschiebungen \boldsymbol{u} als auch die Testfunktionen \boldsymbol{v} aus dem selben Sobolev-Raum \mathcal{H}^1 gewählt werden können. Mit dem Sobolev-Raum \mathcal{H}^1 wird der Raum aller Funktionen bezeichnet, dessen Funktionen und Ableitungen Quadrat-integrierbar sind.

Des weiteren drückt die schwache Form als eine integrale Gleichgewichtsaussage aus, daß die lokale Form der Impulsbilanz nicht mehr an jedem materiellen Punkt, sondern nur noch im betrachteten Gebiet Ω global erfüllt werden muß.

Der symmetrische Term der linken Seite von (2.40) ist identifizierbar als virtuelle interne Arbeit und kann in der symmetrischen Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ abgekürzt werden. Die äußere virtuelle Arbeit der Oberflächen- und Volumenkräfte kann der rechten Seite von (2.40)zugeordnet werden. Die äußere virtuelle Arbeit soll in der Linearform $l(\cdot)$ abgekürzt dargestellt werden:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} =: (\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v})) =: a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}), \qquad (2.41)$$

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}v + \int_{\Gamma_N} \bar{\boldsymbol{t}} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}a \quad =: \quad l(\boldsymbol{v}). \tag{2.42}$$

In kompakter Form und unter Spezifizierung der Räume der Verschiebungen sowie der Testfunktionen gilt für die schwache Form:

$$a(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = l(\boldsymbol{v}) \qquad \begin{cases} \forall \, \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}, \qquad \mathcal{V} := \{\boldsymbol{v} \in \mathcal{H}^1(\Omega), \boldsymbol{v}|_{\Gamma_D} = \boldsymbol{0}\}, \\ \forall \, \boldsymbol{u} \in \mathcal{U}, \qquad \mathcal{U} := \{\boldsymbol{u} \in \mathcal{H}^1(\Omega), \boldsymbol{u}|_{\Gamma_D} = \bar{\boldsymbol{u}}\}. \end{cases}$$
(2.43)

Bemerkung:

Betrachtet man noch einmal die einzelnen Gleichungen des Anfangsrandwertproblems, so wird deutlich, daß im Rahmen der hier betrachteten Ein-Feld-Formulierung in der Primärvariablen \boldsymbol{u} die Impulsbilanz im Gebiet Ω und die Neumann-Randbedingungen schwach erfüllt werden. Die Dirichlet-Randbedingungen und die Kinematik werden stark erfüllt. Die Konstitutivgleichungen einschließlich der Anfangsbedingungen stellen gewöhnliche Differentialgleichungen dar, die punktweise, und zwar im allgemeinen an den Gauß-Legendre-Punkten der Finiten Elemente, integriert werden. Sie werden also ebenfalls punktweise stark erfüllt, was sich als eine Kollokationsmethode für diesen Satz von Gleichungen interpretieren läßt.

Bemerkung:

Reduziert sich das Problem auf das Randwertproblem der linearen Elastizität, so kann die schwache Form des Gleichgewichts auch über ein Variationsprinzip hergeleitet werden. Hierbei kann das *Prinzip vom Minimum der potentiellen Energie* ausgenutzt werden. Das Ein-Feld-Funktional lautet dafür

$$\Pi(\boldsymbol{u}) = \int_{\Omega} \hat{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} - \int_{\Omega} \rho \, \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{u} \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} - \int_{\Gamma_N} \bar{\boldsymbol{t}} \cdot \boldsymbol{u} \, \mathrm{d}\boldsymbol{a} \longrightarrow \min, \qquad (2.44)$$

einschließlich der notwendigen Dirichlet-Randbedingungen:

$$\boldsymbol{u} = \bar{\boldsymbol{u}}$$
 auf Γ_N . (2.45)

Durch Variation des Funktionals erhält man die notwendige Bedingung für die Stationarität des Funktionals $\delta \Pi(\boldsymbol{u}) = 0$. Das Resultat ist schließlich ebenfalls die schwache Form des Gleichgewichts (2.40).

2.2.2 Finite-Element-Methode

Die Diskretisierung des Gebietes $\Omega \longrightarrow \mathcal{T}_h$ des betrachteten Körpers \mathcal{B} erfordert die Unterteilung in einfach zu beschreibende Teilgebiete, die Finiten Elemente T:

$$\Omega \approx \mathcal{T}_h := \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} T.$$
(2.46)

Das diskretisierte Gebiet \mathcal{T}_h wird im weiteren als Finite-Element-Netz bezeichnet. Jedes einzelne Finite Element T besteht des weiteren aus Kanten E(T) und Knoten N(T). Die Menge aller Kanten wird dann mit \mathcal{E}_h , die der Knoten mit \mathcal{N}_h bezeichnet. Damit gilt:

$$\mathcal{E}_h := \bigcup_{E \in \mathcal{E}_h} E(T) \quad \text{und} \quad \mathcal{N}_h := \bigcup_{N \in \mathcal{N}_h} N(T).$$
 (2.47)

Im Hinblick auf die Formulierung von Fehlerschätzern wird die Menge der Kanten \mathcal{E}_h noch weiter spezifiziert: $\mathcal{E}_{h,N}$ bezeichnet Kanten eines Finiten Elementes auf dem Neumann-Rand. $\mathcal{E}_{h,D}$ sind dementsprechend Kanten auf einem Dirichlet-Rand. Die Kanten $E \in \mathcal{E}_{h,\Omega}$ liegen im Inneren des Gebietes Ω , siehe Abbildung 2.3. Weiterhin soll die Vereinigung dieser Teilmengen die Gesamtmenge aller Kanten der Finiten Elemente ergeben:

$$\mathcal{E}_h = \mathcal{E}_{h,\Omega} \cup \mathcal{E}_{h,D} \cup \mathcal{E}_{h,N}.$$
(2.48)

Im nächsten Schritt kann nun die kontinuierliche schwache Form (2.43) mit den unendlichdimensionalen Räumen der Ansatzfunktionen des Verschiebungsfeldes $\boldsymbol{u} \in \mathcal{U}$ und Testfunktionen $\boldsymbol{v} \in \mathcal{V}$ durch endlich-dimensionale Unterräume $\mathcal{U}_h \subset \mathcal{U}$ bzw. $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$ approximiert werden. Im Rahmen des allgemeineren *Petrov-Galerkin*-Verfahrens können dabei prinzipiell unterschiedliche Ansatz- und Testfunktionen gewählt werden. Allerdings resultieren daraus unsymmetrische Systemmatrizen, was sich negativ in einem erhöhten Speicherbedarf und einem größeren numerischen Aufwand bei der Lösung des algebraischen Gleichungssystems niederschlägt.



Abbildung 2.3: Finite-Element-Netz \mathcal{T}_h des diskretisierten Körpers \mathcal{B}

In dieser Arbeit wird ausschließlich das Bubnov-Galerkin-Verfahren angewandt werden, bei dem Ansatz- und Testfunktionen aus demselben Funktionenraum gewählt werden. Setzt man nun die approximierten Funktionen in die schwache Form (2.43) ein, so erhält man das zu lösende diskrete Finite-Element-Problem: Finde ein $\boldsymbol{u}_h \in \mathcal{U}_h \subset \mathcal{U}$, so daß gilt:

$$a(\boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}_h) = l(\boldsymbol{v}_h) \qquad \forall \, \boldsymbol{u}_h \in \mathcal{U}_h \quad \text{und} \quad \forall \, \boldsymbol{v}_h \in \mathcal{V}_h.$$
 (2.49)

Die kontinuierliche schwache Form gilt wegen $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$ auch für alle Testfunktionen \boldsymbol{v}_h :

$$a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}_h) = l(\boldsymbol{v}_h) \qquad \forall \, \boldsymbol{u}_h \in \mathcal{U}_h \quad \text{und} \quad \forall \, \boldsymbol{v}_h \in \mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}.$$
 (2.50)

Die Subtraktion der Gleichung (2.49) von Gleichung (2.50) liefert die fundamentale *Galerkin*-Orthogonalität, die für später folgende Fehlerabschätzungen eine wichtige Rolle spielt:

$$a(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}_h) = a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{v}_h) = 0 \qquad \forall \, \boldsymbol{v}_h \in \mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}.$$
(2.51)

In Gleichung (2.51) wird der Diskretisierungsfehler e als Differenz der kontinuierlichen Referenzlösung u und der approximierten FEM-Lösung u_h eingeführt:

$$\boldsymbol{e} := \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h \tag{2.52}$$

Die Galerkin-Orthogonalität besagt also, daß sich die endlich-dimensionalen Testfunktionen \boldsymbol{v}_h energieorthogonal zu dem Fehler \boldsymbol{e} verhalten, also keinen energetischen Beitrag zur numerischen Lösung des untersuchten Problems liefern. Das heißt, daß das Galerkin-Verfahren im Rahmen des gewählten endlich-dimensionalen Ansatzraumes \mathcal{V}_h die bestmögliche Lösung bezüglich der Energienorm liefert, vgl. Hughes [70], Oden [104], Strang & Fix [135]. Somit gilt unter der Voraussetzung, daß $a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ positiv definit und symmetrisch ist und damit $a(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}) \geq 0$ bzw. $a(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}) = 0$ nur für $\boldsymbol{v} = 0$ gilt, das folgende Optimierungsproblem bezüglich der Energienorm:

$$a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{e}) \longmapsto \min.$$
 (2.53)

Dies motiviert die Formulierung des folgenden Satzes. Hierin sind \tilde{u}_h diskretisierte Verschiebungsfelder, die das o.g. Optimierungsproblem (2.53) nicht erfüllen.

Satz:

$$a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{e}) = a(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h) \le a(\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{u}}_h, \boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{u}}_h) \quad \forall \tilde{\boldsymbol{u}}_h \in \mathcal{U}_h \subset \mathcal{U}.$$
 (2.54)

Beweis:

$$a(\boldsymbol{e} + \boldsymbol{v}_h, \boldsymbol{e} + \boldsymbol{v}_h) = a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{e}) + \underbrace{2 \, a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{v}_h)}_{= 0, \text{ s. Gl.}(2.51)} + \underbrace{a(\boldsymbol{v}_h, \boldsymbol{v}_h)}_{> 0, a(\cdot, \cdot) \text{ positiv definit}}$$
(2.55)

Somit folgt für die Fehlerenergie:

$$\implies \quad a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{e}) \le a(\boldsymbol{e} + \boldsymbol{v}_h, \boldsymbol{e} + \boldsymbol{v}_h) \tag{2.56}$$

Mit

$$\boldsymbol{e} + \boldsymbol{v}_h = \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{v}_h = \boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{u}}_h \tag{2.57}$$

erhält man die getroffene Aussage (2.54):

$$a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{e}) \leq a(\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{u}}_h, \boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{u}}_h) \quad \Box$$
 (2.58)

Das bedeutet also, daß die diskreten Verschiebungsfelder u_h im Sinne eines Fehlerquadratminimums die optimale Lösung bezüglich der Energienorm darstellen.

Durch die Wahl von Basisfunktionen $\phi^i(\mathbf{x})$ mit kompaktem Träger lassen sich die Ansatzbzw. Testfunktionen $u_h(\mathbf{x})$ und $v_h(\mathbf{x})$ durch das Produkt der Basisfunktionen $\phi^i(\mathbf{x})$ mit den diskreten Knotenwerten \hat{u}_i bzw. \hat{v}_i ausdrücken. In diesem Fall bleiben die Stützstellen der Lagrange-Funktionen lokal auf ein einzelnes Finites Element beschränkt. Jedem Finite-Element-Knoten N wird dabei genau ein Vektor in \mathbb{R}^n , n = 2, 3 diskreter Verschiebungsgrößen zugeordnet:

$$\boldsymbol{u}_h(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{nodes} \boldsymbol{\phi}^i(\boldsymbol{x}) \, \hat{\boldsymbol{u}}_i + \bar{\boldsymbol{u}} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{v}_h(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{nodes} \boldsymbol{\phi}^i(\boldsymbol{x}) \, \hat{\boldsymbol{v}}_i. \tag{2.59}$$

Wobei für die Basisfunktion $\phi^i \equiv \mathbf{0}$ auf Γ_D gilt. Die Summation ist dabei über alle Knoten des Elementes von i = 1 bis *nodes* durchzuführen.

Nach dem Einsetzen der Ansatzfunktionen (2.59) in die diskrete schwache Form (2.49) ergibt sich das folgende globale Gleichungssystem:³

$$\bigcup_{T \in \mathcal{T}_{h}} \int_{T} \sum_{i=1}^{nodes} \nabla^{sym} \phi^{i}(\boldsymbol{x}) \, \hat{\boldsymbol{v}}_{i} : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_{h}} \int_{T} \sum_{i=1}^{nodes} \phi^{i}(\boldsymbol{x}) \, \hat{\boldsymbol{v}}_{i} \cdot \boldsymbol{f} \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} + \bigcup_{E \in \mathcal{E}_{h}} \int_{E} \sum_{i=1}^{nodes} \phi^{i}(\boldsymbol{x}) \, \hat{\boldsymbol{v}}_{i} \cdot \bar{\boldsymbol{t}} \, \mathrm{d}\boldsymbol{a}.$$
(2.60)

Gleichung (2.60) stellt dabei das Gleichgewicht zwischen der *virtuellen inneren* und der *virtuellen äußeren Arbeit* dar. Dies motiviert eine abkürzende Darstellung in der folgenden Form:

$$\delta W^{int} = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} \delta W_T^{int} \quad \text{mit} \quad \delta W_T^{int} = \int_T \sum_{i=1}^{nodes} \nabla^{sym} \phi^i(\boldsymbol{x}) \, \hat{\boldsymbol{v}}_i : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v},$$

$$\delta W^{ext} = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} \delta W_T^{ext} \quad \text{mit} \quad \delta W_T^{ext} = \int_T \sum_{i=1}^{nodes} \phi^i(\boldsymbol{x}) \, \hat{\boldsymbol{v}}_i \cdot \boldsymbol{f} \, \mathrm{d}\boldsymbol{v}$$

$$+ \int_E \sum_{i=1}^{nodes} \phi^i(\boldsymbol{x}) \, \hat{\boldsymbol{v}}_i \cdot \bar{\boldsymbol{t}} \, \mathrm{d}\boldsymbol{a}.$$
(2.61)

Setzt man die virtuellen Arbeiten nach vorgenommener Assemblierung in Gleichung (2.60) ein, dann folgt die Gleichheit der virtuellen inneren sowie äußeren Arbeiten:

$$\delta W^{int} = \delta W^{ext}.$$
(2.62)

 $^{^3}$ Im Rahmen eines Finite-Element-Programmes erfolgt die Assemblierung über alle Knoten, wobei in dem resultierenden Gleichungssystem die entsprechende Gleichung für die Verschiebung an einem *Dirichlet*-Knoten durch die Verschiebungsvorgabe ersetzt wird, siehe Gl. (2.59). Durch eine Modifikation der rechten Seite kann das Gleichungssystem, für die in dieser Arbeit behandelten Randwertprobleme, wieder symmetrisiert werden.

Die Assemblierung des globalen Gleichungssystems erfolgt dabei über einen konformen Zusammenbau an den Finite-Element-Knoten N(T), d. h. die lokalen primären Verschiebungsfreiheitsgrade $\hat{u}_i(x)$ sollen an einem Knoten den Freiheitsgraden aller angrenzenden Elemente in diesem Knoten entsprechen. Für 2- bzw. 3-dimensionale Kontinua werden die Basisfunktionen also aus einem Funktionenraum der C^0 -kontinuierlichen Funktionen gewählt (C^0 -Kontinuität). Die lokalen Freiheitsgrade gehen somit nach der Assemblierung in globale Freiheitsgrade über.

Damit folgt anschließend für das Gleichgewicht:

$$\bigcup_{T \in \mathcal{T}_{h}} \int_{T} \sum_{i=1}^{nodes} \nabla^{sym} \boldsymbol{\phi}^{i}(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}) \, \mathrm{d}v = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_{h}} \int_{T} \sum_{i=1}^{nodes} \boldsymbol{\phi}^{i}(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{f} \, \mathrm{d}v + \bigcup_{E \in \mathcal{E}_{h}} \int_{E} \sum_{i=1}^{nodes} \boldsymbol{\phi}^{i}(\boldsymbol{x}) \cdot \bar{\boldsymbol{t}} \, \mathrm{d}a.$$
(2.63)

Dies entspricht analog Gl. (2.62) einer Beziehung zwischen den *inneren* und *äußeren Kno*tenkräften, die entsprechend Gl. (2.61) eingeführt werden sollen:

$$\boldsymbol{f}^{int} = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} \boldsymbol{f}_T^{int} \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{f}_T^{int} = \int_T \sum_{i=1}^{nodes} \nabla^{sym} \boldsymbol{\phi}^i(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v},$$
$$\boldsymbol{f}^{ext} = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} \boldsymbol{f}_T^{ext} \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{f}_T^{ext} = \int_T \sum_{i=1}^{nodes} \boldsymbol{\phi}^i(\boldsymbol{x}) \, \boldsymbol{f} \, \mathrm{d}\boldsymbol{v}$$
$$+ \int_E \sum_{i=1}^{nodes} \boldsymbol{\phi}^i(\boldsymbol{x}) \, \boldsymbol{\bar{t}} \, \mathrm{d}\boldsymbol{a}.$$
$$(2.64)$$

Für das Gleichgewicht der inneren und äußeren Knotenkräfte gilt nach der Assemblierung:

$$\boldsymbol{f}^{int} = \boldsymbol{f}^{ext}.$$
 (2.65)

Die rechte Seite des Gleichungssystems, die äußeren Kräfte, werden mit dem konsistenten Knotenlastvektor bezeichnet. Die linke Seite des Gleichungssystem, die inneren Kräfte, stellen das Produkt einer (Tangenten-)steifigkeitsmatrix mit dem Vektor der Primärvariablen dar.

Bemerkung:

Im Rahmen einer geometrisch und materiell linearen Theorie können das Stoffgesetz (2.36) und die Kinematik (2.14) für den Spannungstensor σ eingesetzt werden. Das anschließende Einsetzen der gewählten Ansatzfunktionen für die Verschiebungen u_h gestattet dann eine elementweise Auswertung des verbleibendes Integrals \int_T , so daß man erst die Steifigkeitsmatrix eines einzelnen Finiten Elementes und nach der Assemblierung die globale Systemsteifigkeitsmatrix erhält.

2.2.3 Linearisierung

Im Rahmen der hier allgemein betrachteten nichtlinearen Stoffgesetze stellt sich der Spannungstensor $\sigma(u)$ als eine Funktion der Verzerrungen und eines Satzes interner Variablen dar. Die Beziehung (2.63) ist somit nichtlinear und muß nach einer entsprechenden Inkrementierung bzw. zeitlichen Diskretisierung zuerst linearisiert und dann z. B. im Rahmen eines Newton-Raphson-Verfahrens auf iterativem Wege gelöst werden.

Gleichung (2.65) läßt sich dazu mit Hilfe eines Residuums umformulieren, welches am gesuchten Gleichgewichtspunkt identisch Null ist:

$$\boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}) := \boldsymbol{f}^{int}(\hat{\boldsymbol{u}}) - \boldsymbol{f}^{ext} = \boldsymbol{0}.$$
(2.66)

Ziel eines iterativen Verfahrens ist es nun, die Nullstelle des Residuums bzw. der Ungleichgewichtskräfte $f^{res}(\hat{u})$ auf iterativem Weg zu bestimmen. Dazu wird zuerst Gleichung (2.66) an einer Stelle \hat{u}_i in der Umgebung $U(\hat{u})$ der Nullstelle in einer Taylor-Reihe entwickelt:

$$\boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}) = \boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}_i) + \frac{\partial \boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}_i)}{\partial \hat{\boldsymbol{u}}_i} (\hat{\boldsymbol{u}} - \hat{\boldsymbol{u}}_i) \\
+ \frac{\partial^2 \boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}_i)}{\partial^2 \hat{\boldsymbol{u}}_i} \frac{\hat{\boldsymbol{u}} - \hat{\boldsymbol{u}}_i}{2!} + \dots \\
+ \frac{\partial^k \boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}_i)}{\partial^k \hat{\boldsymbol{u}}_i} \frac{(\hat{\boldsymbol{u}} - \hat{\boldsymbol{u}}_i)^k}{k!} = \boldsymbol{0}.$$
(2.67)

Die dem Newton-Raphson Verfahren zugrundeliegende Idee ist nun die Annahme, daß Terme höherer Ordnung zunächst weggelassen werden können. Damit folgt für die *linearisierte* Gleichung:

$$\ln\left(\boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}})\right) = \boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}_i) + \frac{\partial \boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}_i)}{\partial \hat{\boldsymbol{u}}_i} \left(\hat{\boldsymbol{u}} - \hat{\boldsymbol{u}}_i\right) = \boldsymbol{0}.$$
(2.68)

Die verbesserte Lösung \hat{u} der linearisierten Gleichung (2.68) liefert somit einen Startwert für den nächsten Iterationsschritt. Die iterative Form der Gleichung (2.68) lautet damit:

$$\ln\left(\boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}_{i+1})\right) = \boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}_i) + \frac{\partial \boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}_i)}{\partial \hat{\boldsymbol{u}}_i} \left(\hat{\boldsymbol{u}}_{i+1} - \hat{\boldsymbol{u}}_i\right) = \boldsymbol{0}.$$
(2.69)

Löst man Gleichung (2.69) nach der verbesserten Lösung \hat{u}_{i+1} des Iterationsschrittes i+1 auf, erhält man die bekannte Iterationsvorschrift des Newton-Raphson-Verfahrens:

$$\hat{\boldsymbol{u}}_{i+1} = \hat{\boldsymbol{u}} - \left[\frac{\partial \boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}_i)}{\partial \hat{\boldsymbol{u}}_i}\right]^{-1} \boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}_i)$$

$$= \hat{\boldsymbol{u}}_i - [\boldsymbol{K}^{tan}]^{-1} \boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}_i).$$
(2.70)

 \mathbf{K}^{tan} stellt dabei die *Tangentensteifigkeitsmatrix* dar, die sich in jedem Iterationsschritt ändert. Ein mögliches Abbruchkriterium des Iterationsschemas kann z. B. in der L_2 -Norm der Ungleichgewichtskräfte formuliert werden und lautet:

$$\|\boldsymbol{f}^{res}(\hat{\boldsymbol{u}}_i)\| \le \text{TOL.}$$
 (2.71)

Kapitel 3

Fehlerabschätzung für das linear-elastische Randwertproblem

Dann folgt im zweiten Abschnitt des Kapitels eine Motivation für erweiterte zielorientierte Fehlerschätzer basierend auf dualen Hilfsproblemen. Die Konstruktion dieser erweiterten zielorientierten Fehlerschätzer steht nachfolgend im Mittelpunkt dieses Kapitels. Eine Gegenüberstellung globaler und zielorientierten Fehlermethoden schließt dieses Kapitel ab.

3.1 Globale Fehlerschätzer

Im weiteren werden nun verschiedene globale residuenbasierte Fehlerschätzer hergeleitet. Allen im folgenden konstruierten Fehlerschätzern ist das zugrundeliegende, innerhalb eines adaptiven Finite-Element-Programmes zu lösende Optimierungsproblem gemein: "Finde eine Finite-Element-Diskretisierung, so daß das Netz optimal in dem Sinne ist, daß bezüglich einer vorgegebenen Fehlertoleranzschranke TOL der Fehler im gesamten Gebiet Ω homogen verteilt ist."

3.1.1 Globale explizite residuenbasierte Fehlerschätzer

Im Rahmen einer Finite-Element-Methode, in der ausschließlich die Impulsbilanz (2.25) und die natürlichen Rand- und Übergangsbedingungen schwach erfüllt werden, läßt sich der Diskretisierungsfehler der primären Lösungsvariablen u wie folgt darstellen:

$$\boldsymbol{e} := \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h. \tag{3.1}$$

Da die diskretisierten Testfunktionen einen Unterraum des Raumes der kontinuierlichen Testfunktionen darstellen, $v_h \in \mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$, wird die schwache Form der Impulsbilanz (2.43) auch durch alle Testfunktionen v_h erfüllt:

$$a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}_h) = l(\boldsymbol{v}_h). \tag{3.2}$$

Im Rahmen des vorliegenden Kapitels werden zu Beginn die bekannten globalen Fehlerschätzer anhand des Randwertproblems der linearen Elastizität aufgearbeitet. Dabei wird Bezug auf eine praktische Umsetzung der vorgestellten Methoden im Rahmen eines adaptiven Konzeptes genommen.

Subtrahiert man nun Gleichung (3.2) von der diskretisierten schwachen Form (2.49), so erhält man die *Galerkin*-Orthogonalität, vgl. (2.51).

$$a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}_h) - a(\boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}_h) = a(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}_h) = a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{v}_h) = 0.$$

Das bedeutet, daß sich der Fehler e energieorthogonal zu den Ansatzfunktionen v_h verhält, oder anders ausgedrückt, daß das energetische Produkt der Ansatzfunktionen v_h und des Fehlers e Null ergibt, d. h. $(\sigma(e), \varepsilon(v_h)) = 0$. In der Konstruktion von *a posteriori*-Fehlerschätzern wird diese Aussage im folgenden eine fundamentale Rolle spielen. Der Fehler e soll nun mit der Testfunktion v getestet werden. Nach partieller Integration

Der Fenler e soll nun mit der Testfunktion v getestet werden. Nach partieller Integration und Anwendung des *Gauß*schen Integralsatzes wird damit eine schwache Formulierung für den Fehler erreicht:

$$a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{v}) = a(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}) = l(\boldsymbol{v}) - a(\boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v})$$
$$= \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \left\{ \int_T \boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} + \int_{E_{\Gamma_N}} \bar{\boldsymbol{t}} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\boldsymbol{a} - \underbrace{\int_T \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v}}_{P_{\Gamma_N}} \right\}.$$
(3.3)

Mit E_{Γ_N} wird dabei eine Kante auf dem Neumann-Rand bezeichnet. Eine weitere partielle Integration des unterstrichenen Terms und Anwendung des Gaußschen Satzes verschiebt den Differentialoperator auf die von den diskreten Verschiebungsgrößen u_h abhängigen Spannungen $\sigma(u_h)$:

$$a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{v}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \left\{ \int_T \boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}v + \int_{E_{\Gamma_N}} \bar{\boldsymbol{t}} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}a + \int_T \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h) \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}v \right. \\ \left. - \int_{\partial T} (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h)) \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}a, \right\}$$

bzw.

$$a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{v}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T (\boldsymbol{f} + \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h)) \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}v + \sum_{E \in \mathcal{E}_{h,N}} \int_E (\bar{\boldsymbol{t}} - (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h))) \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}a + \sum_{E \in \mathcal{E}_{h,\Omega}} \int_E \llbracket (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h)) \rrbracket \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}a.$$
(3.4)

Der Rand eines Elementes T wird in Gleichung (3.4) mit $\partial T = E$ bezeichnet, siehe auch Gleichung (3.8). Für die Definition des Sprungtermes $[\cdot]$ zwischen zwei benachbarten Elementen T_i und T_j gilt:

$$\llbracket (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h)) \rrbracket := \boldsymbol{n}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_i(\boldsymbol{u}_h) - \boldsymbol{n}_j \cdot \boldsymbol{\sigma}_j(\boldsymbol{u}_h). \tag{3.5}$$

Wie man in Gleichung (3.4) erkennen kann, wird elementweise die diskrete Finite-Element-Lösung in die starke Form der Impulsbilanz (2.25) und die natürlichen Rand- und Übergangsbedingungen eingesetzt. Die sich daraus ergebenden Residuen werden mit den Testfunktionen v getestet. Damit erhält man eine globale Aussage für den Energienormfehler, welcher abgekürzt dargestellt werden kann:

$$a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{v}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T \operatorname{Res}_T(\boldsymbol{u}_h) \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}v + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E \operatorname{Res}_E(\boldsymbol{u}_h) \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}a := (\operatorname{Res}, \boldsymbol{v}). \tag{3.6}$$

In Gleichung (3.6) wurden für die Residuenanteile im Gebiet des Finiten Elementes die Abkürzung Res_T sowie für die Sprungresiduen zwischen zwei benachbarten Elementen die Abkürzung Res_E eingeführt. Diese sind wie folgt definiert:

$$\operatorname{Res}_{T}(\boldsymbol{u}_{h}) := \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}) + \boldsymbol{f} \qquad \forall T \in \mathcal{T}_{h}, \qquad (3.7)$$

$$\operatorname{Res}_{E}(\boldsymbol{u}_{h}) := \begin{cases} \llbracket (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}) \rrbracket & \forall E \in \mathcal{E}_{h,\Omega} \\ \bar{\boldsymbol{t}} - \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}) & \forall E \in \mathcal{E}_{h,\Gamma_{N}} \\ \boldsymbol{0} & \forall E \in \mathcal{E}_{h,\Gamma_{D}}. \end{cases}$$
(3.8)

Dabei ist n der Normalenvektor auf der Kante des Finiten Elementes. Bis auf die kontinuierliche Testfunktion v enthält die schwache Form der Fehlergleichung (3.6) nur die aus der Finite-Element-Lösung bekannten Größen der Residuen (3.8). Nun kann man natürlich die Fehlergleichung (3.6) ebenfalls mit Ansatzfunktionen diskretisieren und den Fehler numerisch berechnen. Da hierzu allerdings der Raum der Ansatzfunktionen erweitert werden muß, ist der numerische Aufwand für die Fehlerberechnung größer als der Aufwand, den man für die Lösung des ursprünglichen Problems aufgebracht hatDies ist natürlich nicht wünschenswert. Die Idee, die den globalen residuenbasierten Fehlerschätzern zugrundeliegt, ist es nun, die Fehlergleichung nicht explizit zu lösen, sondern ihre Lösung abzuschätzen. Die grundlegende Methodik des hier vorgestellten Fehlerschätzers geht auf die fundamentale Arbeit von Babuška & Rheinboldt [12] zurück. In dieser Arbeit wird für das eindimensionale Laplace-Problem ein residuenbasierter Fehlerschätzer hergeleitet. In der Arbeit von Babuška & Miller [11] wird diese Methode auf das Randwertproblem der linearen Elastizität erweitert. In den darauf folgenden Jahren wurde die Methode der expliziten residuenbasierten Fehlerabschätzung auf weitere verschiedene Randwertprobleme der Strukturmechanik sowie der Strömungsmechanik angewandt, z.B. Ainsworth & Oden [4], Cirak [34], Díez, Egozcue & Huerta [44], Mücke & Whiteman [97], Süli & Houston [136] sowie Verfürth [144, 146]. Erweiterungen auf gemischte Finite-Element-Formulierungen findet man unter anderem in Braess et al. [25], Brink & Stein [28] und Hoppe & Wohlmuth [69].

Ausgehend von der schwachen Form der Fehlergleichung (3.6) nutzt man die Galerkin-Orthogonalität (2.51) aus, die wegen (3.9) auch für eine Quasi-Interpolierende gilt. Der Clément -Operator Π_h , [38], bildet alle kontinuierliche Testfunktionen in den Raum der diskreten Testfunktionen ab, so daß gilt:

$$\Pi_h: \mathcal{V} \longmapsto \mathcal{V}_h, \quad \text{mit} \quad \Pi_h \, \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}_h \quad \text{und} \quad \boldsymbol{v}_h = \Pi_h \, \boldsymbol{v}. \tag{3.9}$$

¹Eine Erweiterung des Ansatzraumes ist notwendig, da man bei gleicher Ansatzordnung und demselbem Finite-Element-Netz für die Lösung des ursprünglichen Randwertproblems und für die Lösung der Fehlergleichung für den Fehler eine Nullösung erhalten würde. Unter einer Erweiterung des Ansatzraumes wird die Wahl höherer Polynomordnung oder die Verwendung einer feineren Netzdiskretisierung verstanden.

Man erhält damit:

$$a(\boldsymbol{e},\boldsymbol{v}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T \operatorname{Res}_T(\boldsymbol{u}_h) \cdot (\boldsymbol{v} - \Pi_h \boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E \operatorname{Res}_E(\boldsymbol{u}_h) \cdot (\boldsymbol{v} - \Pi_h \boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{a}.$$
 (3.10)

Nach Anwendung der *Cauchy-Schwarz*-Ungleichung für Integrale ergibt sich eine Ungleichung für die Energie des Fehlers:

$$a(\boldsymbol{e},\boldsymbol{v}) \leq \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \|\operatorname{Res}_T(\boldsymbol{u}_h)\| \| (\boldsymbol{v} - \Pi_h \boldsymbol{v})\| + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \|\operatorname{Res}_E(\boldsymbol{u}_h)\| \| (\boldsymbol{v} - \Pi_h \boldsymbol{v})\|.$$
(3.11)

Im weiteren verwendet man nun eine Interpolationsabschätzung, bei der sich die L_2 -Norm des Fehlers der kontinuierlichen Funktion \boldsymbol{v} und ihrer Interpolierenden $\Pi_h \boldsymbol{v}$ in der \mathcal{H}_1 -Seminorm abschätzen läßt. Für die Herleitung residuenbasierter Fehlerschätzer in der Energienorm wird diese Aussage für die gewichtete L_2 -Norm, welche identisch mit der Energienorm ist, verwendet, vgl. Johnson et al. [51].

Diese für die Bestimmung der Interpolationsfehler fundamentale Aussage geht auf die Arbeit von *Clément* [38] zurück und findet sich auch bei *Ciarlet* [33]:

$$\|\boldsymbol{v} - \Pi_h \boldsymbol{v}\|_T \leq C_{i,1} h_T \|\nabla \boldsymbol{v}\|_{\tilde{T}} = C_{i,1} h_T |\boldsymbol{v}|_{\mathcal{H}_1,\tilde{T}}, \qquad (3.12)$$

$$\|\boldsymbol{v} - \Pi_h \boldsymbol{v}\|_E \leq C_{i,2} h_E^{1/2} \|\nabla \boldsymbol{v}\|_{\tilde{E}} = C_{i,2} h_E^{1/2} |\boldsymbol{v}|_{\mathcal{H}_1,\tilde{E}}.$$
 (3.13)

Die Interpolationsabschätzung ist lokal, sie kann also in einem kleinen Gebiet um das zu betrachtende Element T oder um die zu betrachtende Kante E durchgeführt werden. Dieses Gebiet wird im weiteren mit \tilde{T} bzw. \tilde{E} bezeichnet, siehe Abbildung 3.1 und Verfürth [145]:

$$\tilde{T} := \bigcup_{\mathcal{N}(T) \cap \mathcal{N}(T') \neq \emptyset} T', \qquad \qquad \tilde{E} := \bigcup_{\mathcal{N}(E) \cap \mathcal{N}(T') \neq \emptyset} T'.$$
(3.14)

Die elementabhängige Größe h_E ist identisch mit der Länge der Kante E eines Finiten Elementes. Des weiteren wird die charakteristische Elementgröße h_T aus einem flächengleichen Kreis bestimmt:

$$h_T = 2\sqrt{\frac{A_T}{\pi}},\tag{3.15}$$

wobei A_T den Flächeninhalt des betrachteten Finiten Elementes darstellt.

Die eingeführten lokalen Interpolationskonstanten $C_{i,1}$ und $C_{i,2}$ sind im allgemeinen *a priori* nicht bekannt, sondern müssen erst noch quantitativ bestimmt werden. Numerisch können die Konstanten aus einem Randwertproblem mit bekannter analytischer Lösung berechnet werden. Dazu wird ein endlich dimensionales Eigenwertproblem gelöst, wie z. B. in Kelly et al. [77] beschrieben.

Eine weitere Möglichkeit ist, ein Supremum numerisch auszuwerten, vgl. Johnson & Hansbo [75]. Auch hier geht man von einem Randwertproblem mit analytisch bekannter Lösung aus. Damit ist für die Auswertung der Gleichungen (3.16) und (3.17) elementweise sowohl die L_2 -Norm $\|\cdot\|$ als auch der exakte Verlauf der Lösung \boldsymbol{v} bekannt. Wird das zu lösende Randwertproblem mit beliebig verzerrten Finiten Elementen diskretisiert, z. B. mittels Freivernetzer, kann man durch das Auswerten der Gleichungen (3.16) und (3.17)

²Der Index i kennzeichnet die Interpolationskonstanten.

mit hinreichend genauer numerischer Integration die Interpolationskonstanten für die verwendeten Finiten Elemente bestimmen. In numerischen Experimenten hat sich gezeigt, daß eine Integrationsvorschrift, die auch die verwendeten Polynome der Finiten Elemente exakt integriert, ausreichend ist:

$$C_{i1} = \sup_{T \in \mathcal{T}_h} \sup_{\boldsymbol{v} \in \mathcal{V}} \frac{h_T^{-1} \| \boldsymbol{v} - \Pi_h \boldsymbol{v} \|_T}{\| \nabla \boldsymbol{v} \|_{\tilde{T}}}, \qquad (3.16)$$
$$\| \nabla \boldsymbol{v} \|_{\tilde{T}} \neq 0$$

$$C_{i2} = \sup_{E \in \mathcal{E}_h} \sup_{\boldsymbol{v} \in \mathcal{V}} \frac{h_E^{-\frac{1}{2}} \|\boldsymbol{v} - \Pi_h \boldsymbol{v}\|_E}{\|\nabla \boldsymbol{v}\|_{\tilde{E}}}.$$

$$(3.17)$$

Wie man in den Gleichungen (3.16) und (3.17) erkennt, hängen die Interpolationskonstanten ausschließlich von lokalen Parametern, also von elementweise bekannten Größen, ab. Desweiteren sind die Interpolationskonstanten vom Aspektverhältnis h_T/ρ_T abhängig. ρ_T ist dabei der charakteristische, d. h. minimale, Innenwinkel eines Elementes. In (3.16) und (3.17) spiegelt sich das Aspektverhältnis in der Größe der Gebiete \tilde{T} und \tilde{E} wieder. Die lokale skalare Abhängigkeit der Interpolationskonstanten kann durch die eingeführten Größen der Elemente h_T sowie h_E ausgedrückt werden. Des weiteren ist die Interpolationskonstante noch von der betrachteten Norm, hier der Energienorm bzw. der L_2 -Norm und dem Polynomgrad der Ansatzräume \mathcal{V}_h abhängig, welches durch den Parameter p ausgedrückt wird. Damit läßt sich die lokale Interpolationskonstante als Funktion allgemein angeben:

$$C_i = f(h_{T,E}, p, \rho_T).$$
 (3.18)



Abbildung 3.1: Definition der Gebiete \tilde{T} bzw. \tilde{E} , siehe Verfürth [145]

In Gleichung (3.18) erkennt man, daß die Interpolationskonstanten natürlich nur dann neu bestimmt werden müssen, falls sich die getroffenen Voraussetzungen geändert haben. Nun lassen sich die bestimmten Interpolationskonstanten in Gleichung (3.11) einsetzen:

$$\begin{aligned} a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{v}) &\leq \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} C_{i,1} h_{T} \| \operatorname{Res}_{T}(\boldsymbol{u}_{h}) \| \, |\boldsymbol{v}|_{\mathcal{H}_{1},\tilde{T}} + \sum_{E \in \mathcal{E}_{h}} C_{i,2} h_{E}^{1/2} \| \operatorname{Res}_{E}(\boldsymbol{u}_{h}) \| \, |\boldsymbol{v}|_{\mathcal{H}_{1},\tilde{E}} \\ &\leq \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} C_{i,1}^{2} h_{T}^{2} \| \operatorname{Res}_{T}(\boldsymbol{u}_{h}) \|^{2} + \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} \sum_{E \subset T} \frac{1}{2} C_{i,2}^{2} h_{E} \| \operatorname{Res}_{E}(\boldsymbol{u}_{h}) \|^{2} \right\}^{1/2} \\ &\quad \cdot \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} |\boldsymbol{v}|_{\mathcal{H}_{1},\tilde{T}}^{2} + \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} \sum_{E \subset T} \frac{1}{2} |\boldsymbol{v}|_{\mathcal{H}_{1},\tilde{E}}^{2} \right\}^{1/2} \\ &\quad \leq C_{r} \, |\boldsymbol{v}|_{\mathcal{H}_{1},\Omega} \\ &\leq C_{i} \, C_{r} \, |\boldsymbol{v}|_{\mathcal{H}_{1},\Omega} \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} h_{T}^{2} \| \operatorname{Res}_{T}(\boldsymbol{u}_{h}) \|^{2} + \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} \sum_{E \subset T} \frac{1}{2} h_{E} \| \operatorname{Res}_{E}(\boldsymbol{u}_{h}) \|^{2} \right\}^{1/2} \\ &\quad \text{und} \qquad C_{i} = \max \left(C_{i,n} \right)_{T,E}, \qquad n = 1, 2. \end{aligned}$$

Die Konstante C_r hängt dabei von der maximalen Anzahl der Elemente in den Gebieten \hat{T} bzw. \tilde{E} , also dem kleinsten Innenwinkel ρ_T des Finiten Elemente Netzes ab. In der Ungleichung (3.19) wurden die Sprungresiduen zwischen zwei benachbarten Elementen jedem Element gleichermaßen (Faktor $\frac{1}{2}$) zugeordnet. Damit ist die Auswertung der Ungleichung in einer Summation über alle Elemente T möglich. Nun kann die V-Elliptizität oder Koerzivitätsbedingung, vgl. Anhang (B.21), ausgenutzt werden. Sie erlaubt eine Abschätzung der \mathcal{H}_1 -Seminorm gegen die Energienorm:

$$|\boldsymbol{v}|_{\mathcal{H}_1} \le C_s |||\boldsymbol{v}|||. \tag{3.20}$$

Die globale Stabilitätskonstante C_s in Ungleichung (3.20) spiegelt die Sensitiviät der Differentialgleichung bezüglich aufgebrachter Störungen der betrachteten Randwertprobleme wider. Unter Störung kann hierbei eine Singularität (z. B. geometrischer Natur), ein Randschichteffekt (z. B. bei der *Reissner-Mindlin*-Plattentheorie) oder eine Schockwelle (z. B. bei konvektionsdominanten Strömungen) verstanden werden. Der "Transport" dieser Störungen und ihr Einfluß auf die numerische Lösung wird durch die globale Stabilitätskonstante wiedergegeben.

Bei elliptischen partiellen Differentialgleichungen findet kein Transport von Störungen entlang charakteristischer Ausbreitungsrichtungen statt, so daß *a priori* die Stabilitätskonstante zu $C_s = 1$ gesetzt werden kann. Es soll allerdings darauf hingewiesen werden, daß im Falle parabolischer oder hyperbolischer partieller Differentialgleichungen solche scharfen Grenzen für die Stabilitätskonstante analytisch i. a. nicht gezeigt werden können. Allgemein läßt sich damit die Stabilitätskonstante ausdrücken als folgende Funktion:

$$C_s = f(\text{Typ der PDE, Sensitivität bzgl. Störungen}).$$
 (3.21)

Setzt man die Koerzivitätsbedingung (3.20) in die Ungleichung (3.19) ein und wählt als Testfunktion den Fehler $e = u - u_h \forall u_h \in \mathcal{U}_h \subset \mathcal{U}$ und $u \in \mathcal{U}$, so folgt:

$$|||\boldsymbol{e}||| \le C_i C_r C_s \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} h_T^2 \|\operatorname{Res}_T(\boldsymbol{u}_h)\|^2 + \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \sum_{E \subset T} \frac{1}{2} h_E \|\operatorname{Res}_E(\boldsymbol{u}_h)\|^2 \right\}^{1/2}.$$
 (3.22)

Der Fehler wird nun ausschließlich durch die bekannten Konstanten C_s und C_i sowie die berechenbaren Residuen $\operatorname{Res}_{T,E}$ und die Element- bzw. Kantengrößen $h_{T,E}$ ausgedrückt. Der lokale, d. h. elementabhängige Fehlerindikator lautet damit:

$$\eta_T := \left\{ h_T^2 \| \operatorname{Res}_T(\boldsymbol{u}_h) \|^2 + \sum_{E \subset T} \frac{1}{2} h_E \| \operatorname{Res}_E(\boldsymbol{u}_h) \|^2 \right\}^{1/2}.$$
(3.23)

Hierbei wurde der Sprunganteil der Kantenresiduen zwischen zwei benachbarten Finiten Elementen gleichmäßig den beiden Elementen zugeschlagen. Andere Verteilungen, z. B. in Abhängigkeit von den Elementgrößen, sind allerdings ebenso denkbar.

Aus der Summe aller lokalen Fehlerindikatoren aller Finiter Elemente folgt die Definition des globalen Fehlerindikators:

$$\eta := \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_T^2 \right\}^{1/2}.$$
(3.24)

Dieser Fehlerschätzer wird als globaler, expliziter residuenbasierter Fehlerschätzer bezeichnet. Er geht auf die fundamentalen Arbeit von *Babuška & Rheinboldt* [12] zurück. Weitere ausführliche Diskussionen dazu findet man unter anderem in den Arbeiten von *Verfürth* [145] und Ainsworth & Oden [4].

Die obere Schrankeneigenschaft des Fehlerindikators η wird deutlich, wenn man den Fehlerindikator (3.24) in die Fehlerabschätzung (3.22) einsetzt³. In numerischen Simulationen kann diese Eigenschaft von sehr großem Nutzen sein, da man sich bei der Abschätzung der numerischen Qualität der Ergebnisse auf der sicheren Seite befindet. Allerdings sollte man sich bewußt sein, daß sich diese Sicherheit auf den Fehler gemessen in der Energienorm des ganzen Randwertproblems bezieht. Über die Qualität der Primärvariablen (der Verschiebungen) oder gar über die Qualität lokaler Größen kann noch nichts ausgesagt werden. Ebenso kann die Frage nach der Effizienz des Fehlerschätzers noch nicht beantwortet werden. Unter Effizienz wird dabei eine scharfe obere Abschätzung verstanden, d. h. ein Effektivitätsindex $\Theta \approx 1.0 - 2.0$. Der Effektivitätsindex ist wie folgt definiert:

$$\Theta := \frac{e^{gesch\ddot{a}tzt}}{e^{exakt}} = \frac{\eta}{e^{exakt}}.$$
(3.25)

In Gleichung (3.25) wird mit e^{exakt} der exakte Fehler, d. h. der Diskretisierungsfehler als Differenz der numerischen und der kontinuierlichen Lösung bezeichnet. Der z. B. mit

³Auf untere Schrankeneigenschaften des Fehlerindikators wird im Rahmen dieser Arbeit nicht eingegangen, da man sich bei der Abschätzung der numerischen Qualität der Diskretisierung auf der unsicheren Seite befindet, d. h. der Diskretisierungsfehler wird unterschätzt. Der Einsatz von Fehlerindikatoren mit unteren Schrankeneigenschaften ist daher für praktische Aufgaben im Ingenieurwesen fraglich, da z. B. geforderte (Trag-)Sicherheiten einer Konstruktion nicht mehr garantiert werden können. Für die mathematische Herleitung sei hierzu z. B. auf die Arbeit von Verfürth [145] verwiesen.

Gleichung (3.24) abgeschätzte Diskretisierungsfehler wird mit $e^{geschätzt} = \eta$ bezeichnet. Gilt die Beziehung

$$\lim_{n \to 0} \Theta = 1.0^+, \tag{3.26}$$

so spricht man von einem asymptotisch exakten Fehlerschätzer mit oberen Schrankeneigenschaften.

3.1.2 Globale implizite residuenbasierte Fehlerschätzer

Im Unterschied zu dem im letzten Abschnitt 3.1.1 erläuterten expliziten Vorgehen der Fehlerabschätzung, bei dem keine weiteren Randwertprobleme herangezogen werden müssen, ist bei der nun betrachteten impliziten Methode die Lösung zusätzlicher Randwertprobleme erforderlich. Diese zusätzlich zu lösenden Randwertprobleme können lokal formuliert werden, d. h. man betrachtet Randwertprobleme auf einem einzelnen Finiten Element oder Randwertprobleme in einem Teilgebiet $\overline{\Omega} \subset \Omega$ mit wenigen Finiten Elementen. Damit die numerische Lösung dieser Teilprobleme voneinander entkoppelt erfolgen kann, muß die schwache Form der Fehlergleichung, (3.3) bzw. (3.6) in eine Summe über alle Finite Elemente T umformuliert werden. Dies gelingt dann, wenn die Sprunganteile, $\sum_{E \in \mathcal{E}_{h,\Omega}} \llbracket \cdot \rrbracket$, siehe (3.4), verschwinden. Dies bedeutet aber nichts anderes, als daß jedes einzelne Finite Element mit seinen Randspannungsvektoren im Gleichgewicht steht. Der zusätzliche numerische Aufwand dieser Methode wird natürlich nur in Kauf genommen, wenn der daraus resultierende Fehlerschätzer auch gewisse Vorteile gegenüber der aus numerischer Sicht "billigeren" expliziten Fehlerabschätzung verspricht. Dies wird deutlich, wenn man noch einmal die Abhängigkeit der expliziten Fehlerschätzer von den vorgenommenen Interpolations- bzw. Stabilitätsabschätzungen und den dazugehörigen Konstanten (3.18), (3.21) betrachtet. Damit explizite Fehlerschätzer den gewünschten Schrankeneigenschaften genügen, müssen die Konstanten für den ungünstigsten Fall analytisch oder numerisch abgeschätzt werden. Im Falle einer oberen Fehlerschranke bedeutet dies, daß man unter Umständen mit der Fehlerabschätzung sehr weit auf der "sicheren Seite" liegt, den tatsächlichen Fehler also stark überschätzt.

Durch die direkte Abhängigkeit impliziter Fehlerschätzer von berechenbaren Residuen des betrachteten ursprünglichen Randwertproblems sowie durch das Lösen lokaler Randwertprobleme mit eben diesen Residuenanteilen als Volumenlasten bzw. vorgegebenen Randdaten können allgemeine Konstanten vermieden werden. Das Resultat sind Fehlerschätzer mit schärferen Schrankeneigenschaften.

Im folgenden soll speziell auf implizite Fehlerschätzer eingegangen werden, die auf im Gleichgewicht stehenden *Neumann*-Randspannungen basieren.

Diese Neumann-Schätzer wurden als erstes von Ladèveze & Leguillon [79] für die lineare Elastizität entwickelt. Den Nachweis oberer Schrankeneigenschaften lieferten Bank & Weiser [17]. Weitere mathematische Untersuchungen zu Neumann-Schätzern findet man in den Arbeiten von Ainsworth & Oden [3, 4, 5] und in den Arbeiten von Verfürth [144, 145]. Die Erweiterung auf komplexere Fragestellungen der Struktur- und Strömungsmechanik werden in Arbeiten von Gallimard, Ladèveze & Pelle [56, 57], Ladèveze & Moes [80], Stein & Ohnimus [133] und Brink & Stein [28] betrachtet.

Wie nachfolgend erläutert wird, spielen die Gleichgewichtsbedingungen der im allgemeinen C^{-1} -kontinuierlichen Randterme eine entscheidende Rolle. Diese Randterme entsprechen dem Fluß über die Elementkanten. Unabhängig von der Entwicklung von Fehlerschätzern
wurde schon in den Siebziger Jahren versucht, mit Hilfe von Berechnungen im Anschluß an eine Finite-Element-Analyse (*Postprocessing*) aus den unphysikalischen Sprüngen der Flußterme kontinuierliche Verläufe dieser Größen zu berechnen, vgl. *Stein & Ahmad* [130, 131].

Ausgangspunkt der Fehlerabschätzung bildet wiederum die schwache Form der Fehlergleichung (3.3):

$$a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{v}) = a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) - a(\boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}) = l(\boldsymbol{v}) - a(\boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}) \qquad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}.$$

Als nächstes wird nun versucht, die Sprunganteile der Residuenanteile über die Elementkanten so zu verteilen, daß o.g. Gleichung in einer Summation über die einzelnen Elemente zu lösen ist. Dazu werden neue approximierte Randspannungsvektoren t_T gesucht:

$$\boldsymbol{t}_T \approx \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h)_T \cdot \boldsymbol{n}_T$$
 auf ∂T . (3.27)

Die approximierten Randspannungsvektoren t_T erfüllen das Gleichgewicht auf einer gemeinsamen Kante ∂T zwischen zwei benachbarten Finiten Elementen T_i und T_j . Dies bedeutet, daß der Sprunganteil verschwinden soll:

$$\llbracket \boldsymbol{t}_T \rrbracket = \boldsymbol{0} \qquad \text{auf } \partial T_i \cap \partial T_j. \tag{3.28}$$

Falls eine Kante eines Finiten Elementes mit einem *Neumann*-Rand zusammenfällt, sollen die approximierten Randspannungsvektoren mit den vorgeschriebenen Randdaten übereinstimmen:

$$\boldsymbol{t}_T = \bar{\boldsymbol{t}} \qquad \text{auf } \partial T_i \cap \Gamma_N. \tag{3.29}$$

Für die schwache Form der einzelnen Randspannungsanteile gilt also:

$$\int_{\Gamma_N} \bar{\boldsymbol{t}} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\boldsymbol{a} = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial T} \boldsymbol{t}_T \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\boldsymbol{a}. \tag{3.30}$$

Damit läßt sich die schwache Form der Fehlergleichung als Summe einzelner elementabhängiger Größen darstellen:

$$a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{v}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \left\{ l_T(\boldsymbol{v}) - a_T(\boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}) + \int_{\partial T} \boldsymbol{t}_T \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}a \right\} - \int_{\Gamma_N} \bar{\boldsymbol{t}} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}a$$

$$= \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \left\{ (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{v})_T - a_T(\boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}) + \int_{\partial T} \boldsymbol{t}_T \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}a \right\}$$
(3.31)

Gleichung (3.31) setzt sich dabei aus zwei Anteilen zusammen. Die ersten beiden Summanden beschreiben ausschließlich elementabhängige Größen im Inneren des Elementes, der dritte Summand beschreibt den Fluß über die Elementkante.

Führt man die Summation über alle Elemente noch nicht durch, so läßt sich die lokale, elementweise Formulierung von Gl. (3.31) angeben. Die Lösung dieses Problemes wird im folgenden mit dem lokalen Fehler ϑ_T bezeichnet:

$$a_T(\boldsymbol{\vartheta}_T, \boldsymbol{v}) = (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{v})_T - a_T(\boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}) + \int_{\partial T} \boldsymbol{t}_T \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}a \qquad (3.32)$$

Im weiteren wird davon ausgegangen, daß das Problem (3.32) eine Lösung besitzt. Dies führt auf eine Kompatibilitätsbedingung an die zu bestimmenden Randspannungsvektoren t_T . Physikalisch bedeutet dies nichts anderes, als daß die Elementinnenresiduen mit den Randspannungen des Elementes im Gleichgewicht stehen, siehe Abbildung 3.2. Setzt man Gleichung (3.32) in Gleichung (3.31) ein, erhält man ein Beziehung zwischen dem Gesamtfehler \boldsymbol{e} und der Summe der lokal berechenbaren Fehler $\boldsymbol{\vartheta}_T$:

$$a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{v}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} a_T(\boldsymbol{\vartheta}_T, \boldsymbol{v}).$$
(3.33)

Eine direkte Folgerung dieser Darstellung ist die obere Schrankeneigenschaft des Fehlers. Durch Anwenden der *Cauchy-Schwarz*-Ungleichung auf Gleichung (3.33) ergibt sich:

$$a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{v}) \leq \sum_{T \in \mathcal{T}_h} |||\boldsymbol{\vartheta}_T|||_T |||\boldsymbol{v}|||_T.$$
(3.34)

Wählt man nun wieder als Testfunktion den Fehler e, so folgt:

$$a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{e}) = |||\boldsymbol{e}|||^2 \le \sum_{T \in \mathcal{T}_h} |||\boldsymbol{\vartheta}_T|||_T |||\boldsymbol{e}|||_T.$$
(3.35)

Durch nochmaliges Anwenden der *Cauchy-Schwarz*-Ungleichung folgt direkt die Schrankeneigenschaft:

$$|||\boldsymbol{e}|||^{2} \leq \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} |||\boldsymbol{\vartheta}_{T}|||_{T}^{2} \right\}^{1/2} \underbrace{\left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} |||\boldsymbol{e}|||_{T}^{2} \right\}^{1/2}}_{= |||\boldsymbol{e}|||}$$

$$\leq \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} |||\boldsymbol{\vartheta}_{T}|||_{T}^{2}.$$
(3.36)
(3.37)

$$t_T$$

Abbildung 3.2: Lokales Randwertproblem mit Randspannungen t_T im Gleichgewicht

Damit läßt sich der elementabhängige Fehlerindikator $\eta_{N,T}$ definieren:

$$\eta_{N,T} := |||\boldsymbol{\vartheta}_T|||_T. \tag{3.38}$$

Der globale Fehlerindikator η_N lautet dann:

$$\eta_N := \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_{N,T}^2 \right\}^{1/2}.$$
(3.39)

Unter der Voraussetzung, daß man das lokale Randwertproblem für ϑ_T in jedem Element $T \in \mathcal{T}_h$ gelöst hat, ist der Fehlerindikator η_N nun berechenbar.

Bemerkung:

Es wird noch einmal darauf hingewiesen, daß die obere Schranke des Fehlers in der Energienorm nur unter den getroffenen Annahmen für die Randspannungen t_T gilt. Die Randspannungen sind deshalb so bestimmen, daß sie mit den Elementinnenresiduen im Gleichgewicht stehen.

Für den Fall, daß die approximierten Randspannungen den exakten kontinuierlichen Randspannungen entsprechen, erhält man den exakten Fehler. In diesem Grenzfall ist der Effektivitätsindex identisch Eins, und der Fehlerschätzer ist asymptotisch exakt. Je schlechter allerdings die Randspannungen approximiert werden, desto mehr wird der Fehler überschätzt. Die Qualität dieses Fehlerschätzers hängt also direkt mit der Qualität der approximierten Randspannungen zusammen. Es ist damit offensichtlich, daß man an Algorithmen interessiert ist, welche die exakten Randspannungen möglichst gut approximieren.

Im weiteren wird nun *eine* Möglichkeit erläutert, mit der man direkt aus einer bereits vorliegenden Finite-Element-Lösung approximierte Randspannungen t_T bestimmen kann. Die Gleichgewichtsbedingung eines einzelnen Elementes läßt sich in der folgenden Form angeben, siehe Abbildung 3.2:

$$\int_{\partial T} \boldsymbol{t}_T \, \mathrm{d}a = -\int_T (\underbrace{\boldsymbol{f} + \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h)}_{\operatorname{Res}_T}) \, \mathrm{d}v, \qquad (3.40)$$

$$\llbracket \boldsymbol{t}_T \rrbracket = \boldsymbol{0} \qquad \text{auf } \partial T_i \cap \partial T_j, \qquad (3.41)$$

$$\boldsymbol{t}_T = \boldsymbol{\bar{t}} \qquad \text{auf} \quad \partial T \cap \boldsymbol{\Gamma}_N, \qquad (3.42)$$

wobe
i T_i und T_j zwei benachbarte Finite Elemente mit einer gemeins
amen Kante darstellen.

Gleichung (3.40) beschreibt den Gleichgewichtszustand zwischen den Randspannungen und den Elementinnenresiduen Res_T . Die nachfolgenden Gleichungen (3.41) bzw. (3.42)fordern, daß die Sprunganteile auf einer gemeinsamen Kante zweier benachbarter Elemente verschwinden bzw. daß die vorgegebenen Kräfte auf dem *Neumann*-Rand exakt erfüllt werden.

Ziel ist es nun, die zu approximierenden Größen t_T so zu bestimmen, daß die Gleichungen (3.40) - (3.42) erfüllt sind. Der dazu notwendige numerische Aufwand soll möglichst minimal sein, d. h. globale numerische Berechnungen auf dem Gesamtgebiet Ω gilt es zu vermeiden. Im weiteren werden die fiktiven Knotenkräfte \hat{p}_T eingeführt, die aus der Finite-Element-Analyse bereits vorliegen. Die fiktiven Knotenkräfte sind energetisch zu den diskreten Knotenverschiebungen \hat{u} konjugiert und drücken das Gleichgewicht eines Elements in diskreter Form aus:

$$\sum_{i=1}^{nodes} \hat{\boldsymbol{p}}_T^i \cdot \hat{\boldsymbol{v}}_i = a_T(\boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}_h) - \int_T \boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{v}_h \, \mathrm{d}v.$$
(3.43)

Mit der lokalen Gleichgewichtsaussage Gl. (3.40) - (3.42) für das einzelne Element erhält man damit die folgende diskretisierte schwache Form des Gleichgewichts, siehe auch *Stein* & *Ohnimus* [134], *Ainsworth* & *Oden* [4, 6] und :

$$\sum_{i=1}^{nodes} \hat{\boldsymbol{p}}_T^i \cdot \hat{\boldsymbol{v}}_i = \int_{\partial T} \boldsymbol{t}_{T,h} \cdot \boldsymbol{v}_h \, \mathrm{d}a.$$
(3.44)

Die Randspannungen $t_{T,h}$ auf einer Kante ∂T eines Elements $T \subset \mathbb{R}^2$ sowie die diskretisierten Testfunktionen v_h sind dabei wie folgt parametrisiert:

$$\boldsymbol{t}_{T,h} = \sum_{j=1}^{nodes} \bar{\boldsymbol{\phi}}_j \, \hat{\boldsymbol{t}}_T^j, \qquad (3.45)$$

$$\boldsymbol{v}_h = \sum_{i=1}^{nodes} \boldsymbol{\phi}^i \, \hat{\boldsymbol{v}}_i. \tag{3.46}$$

Die diskreten Kräfte \hat{t}_T^j bzw. die virtuellen Verschiebungen \hat{v}_i sind an den Stützstellen der Polynome der gewählten Ansatzfunktionen $\bar{\phi}_j$ und ϕ^i definiert. $\bar{\phi}_j$ bzw. ϕ^i werden dabei als biorthonormale Ansatzfunktionen, siehe (C.3), aus demselben Ansatzraum \mathcal{V}_h gewählt, so daß die folgende Orthogonalitätsbedingung erfüllt wird:



Abbildung 3.3: Lokales Randwertproblem mit konsistenten Knotenkräften $\hat{\boldsymbol{p}}_T(N_i)$

$$\int_{T} \boldsymbol{\phi}^{i} \, \bar{\boldsymbol{\phi}}_{j} \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} = \delta^{i}_{j}. \tag{3.47}$$

Setzt man die gewählten Ansätze (3.45) - (3.46) in in die Gleichgewichtsbedingung (3.44)ein, erhält man ein algebraisches Gleichungssystem. Dieses Gleichungssystem zur Bestimmung der unbekannten diskreten Randspannungsvektoren \hat{t}_T kann infolge der biorthogonalen Ansatzfunktionen ϕ bzw. $\hat{\phi}$ unter Einhaltung der Kompatibilitätsbedingung (3.28)und (3.41) im folgenden für einen Knotenpatch $\tilde{\mathcal{P}}$ gelöst werden, siehe Abbildung 3.4. Der Knotenpatch $\tilde{\mathcal{P}}$ zur Bestimmung dieser Randspannungsvektoren am Knoten \bar{N} ist dabei gemäß Abbildung 3.4 definiert:

$$\tilde{\mathcal{P}} := \bigcup_{\mathcal{N}(T) \cap \mathcal{N}(\bar{N}) \neq \emptyset} T.$$
(3.48)

Wertet man für den in Abbildung 3.4 dargestellten Patch \mathcal{P} mit fünf Elementen T_i , $i = 1, \ldots, 5$ das aus Gl. (3.44) resultierende Gleichungssystem knotenweise aus, d. h. hier am Knoten \bar{N} , so erhält man⁴.

$$\hat{\boldsymbol{t}}_{\partial T_1 \cap \partial T_2} - \hat{\boldsymbol{t}}_{\partial T_5 \cap \partial T_1} = \hat{\boldsymbol{p}}_{T_1},$$

$$\hat{\boldsymbol{t}}_{\partial T_2 \cap \partial T_3} - \hat{\boldsymbol{t}}_{\partial T_1 \cap \partial T_2} = \hat{\boldsymbol{p}}_{T_2},$$

$$\hat{\boldsymbol{t}}_{\partial T_3 \cap \partial T_4} - \hat{\boldsymbol{t}}_{\partial T_2 \cap \partial T_3} = \hat{\boldsymbol{p}}_{T_3},$$

$$\hat{\boldsymbol{t}}_{\partial T_4 \cap \partial T_5} - \hat{\boldsymbol{t}}_{\partial T_3 \cap \partial T_4} = \hat{\boldsymbol{p}}_{T_4},$$

$$\hat{\boldsymbol{t}}_{\partial T_5 \cap \partial T_1} - \hat{\boldsymbol{t}}_{\partial T_4 \cap \partial T_5} = \hat{\boldsymbol{p}}_{T_4}.$$

$$(3.49)$$

bzw. in matrizieller Darstellung:

$$\begin{bmatrix}
1 & & -1 \\
-1 & 1 & & \\
& -1 & 1 & \\
& & -1 & 1 & \\
& & & -1 & 1 & \\
& & & & -1 & 1 & \\
& & & & & 1 & \\
\end{bmatrix}
\underbrace{\begin{pmatrix}
\hat{t}_{\partial T_1 \cap \partial T_2} \\
\hat{t}_{\partial T_2 \cap \partial T_3} \\
\hat{t}_{\partial T_3 \cap \partial T_4} \\
\hat{t}_{\partial T_4 \cap \partial T_5} \\
\hat{t}_{\partial T_5 \cap \partial T_1}
\end{bmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix}
\hat{p}_{T_1} \\
\hat{p}_{T_2} \\
\hat{p}_{T_3} \\
\hat{p}_{T_4} \\
\hat{p}_{T_5}
\end{bmatrix}}_{\hat{p}}.$$
(3.50)

Ein solcher Knotenpatch $\tilde{\mathcal{P}}$ ist für alle Knoten $N \in \mathcal{N}$ des Finite-Element-Netzes auszuwerten um die diskreten Randspannungsvektoren \hat{t}_T zu bestimmen. Nachdem die diskreten Randspannungsvektoren \hat{t}_T berechnet sind kann mittels der gewählten Ansätze (3.45) die lokale (elementweise) Fehlergleichung (3.32) diskretisiert werden und der Diskretisierungsfehler numerisch berechnet werden.

Bemerkung:

Das lokale, algebraische Gleichungssystem (3.50) ist nicht regulär (det ($\mathbf{T}^T \mathbf{T}$) = 0). Für die numerische Lösung des Problems werden also noch weitere Gleichungen benötigt. Dem

⁴Die diskreten Randspannungsvektoren sind gemäß der Kante ∂T , auf der sie definiert sind bezeichnet. Damit ist z. B. $\hat{t}_{\partial T_1 \cap \partial T_2}$ der Randspannungsvektor auf der gemeinsamen Kante der Elemente T_1 und T_2 am betrachteten Knoten \bar{N} , siehe Abbildung 3.4.

Vorschlag von Stein & Ohnimus [134] bzw. Ainsworth & Oden [4, 6] folgend, kann für zweidimensionale Probleme ein Fehlerquadrat-Minimum-Funktional als zusätzliche Gleichung hinzugenommen werden:

$$\frac{1}{2} \sum_{T_i \in \tilde{\mathcal{P}}} \left(\hat{p}_T^i - \sum_{\partial T_i^j \cap \partial T \neq \emptyset} \hat{t}_T^j \right) \longmapsto \text{ min.}$$
(3.51)

Damit können die zu approximierten Randspannungen $t_{T,h}$ aus der diskreten Lösung \hat{t}_T mit Hilfe von Gleichung (3.45) bestimmt werden.

Bemerkung:

In der Arbeit von Rehle [120] wurden ähnliche Überlegungen zur Auswertung der fiktiven Knotenkräfte angestellt und direkt zur Entwicklung eines Fehlerindikators herangezogen. Ausgegagen wird hierbei vom diskreten Kräftegleichgewicht am Knoten \bar{N} eines Elementpatches $\tilde{\mathcal{P}}$ der fiktiven Knotenkräfte \hat{p}_T und des diskreten Knotenlastvektors \hat{f} (\hat{f} beinhaltet alle Oberflächen- und Volumenkräfte in diskreter Form):

$$\sum_{\mathcal{N}(T)\cap\mathcal{N}(\bar{N})\neq\emptyset} \hat{\boldsymbol{p}}_{T} = \hat{\boldsymbol{f}}.$$
(3.52)

Durch eine Neuparametrisierung der Finite-Element-Spannungen $\sigma(u_h)$ auf der Kante des



Abbildung 3.4: Knotenpatch $\tilde{\mathcal{P}}$ zur Bestimmung der diskreten Kräfte \hat{t}_T im Knoten \bar{N}

Elementes ∂T kann elementweise ein Randspannungsvektor $t_{T,h}$ approximiert werden:

$$\boldsymbol{t}_{T,h} = \sum_{i=1}^{nodes \, auf \, \partial T} \boldsymbol{\phi}^{i} \, \boldsymbol{\hat{t}}_{T}^{i} \quad \text{mit} \qquad \underbrace{\boldsymbol{\hat{t}}_{T}^{i} = \int_{\partial T_{i}} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}) \cdot \boldsymbol{n} \, \mathrm{d}a}_{\text{Resultierende Kräfte auf } \partial T_{i} \subset \partial T} \quad (3.53)$$

Die Auswertung des Gleichgewichts am Knoten \overline{N} des Elementpatches \mathcal{P} liefert direkt ein Fehlermaß, das als Fehlerindikator herangezogen wird:

$$\hat{\operatorname{Res}} = \left[\sum_{\mathcal{N}(T)\cap\mathcal{N}(\bar{N})\neq\emptyset} \hat{\boldsymbol{t}}_T\right] + \hat{\boldsymbol{f}}, \quad \operatorname{mit} \quad \eta_T := C \sum_{i=1}^{nodes \, auf \, T_i} \frac{A_{T_i}}{A_{\tilde{\mathcal{P}}}} \, \hat{\operatorname{Res}}_i. \tag{3.54}$$

Die Größe A_{T_i} ist die Fläche des Elementes T_i und $A_{\tilde{\mathcal{P}}}$ die Fläche des betrachteten Knotenpatches $\tilde{\mathcal{P}}$. C ist eine Konstante.

Bemerkung:

Im Rahmen der Arbeit von Rehle [120] wird allerdings nicht weiter auf die Erfüllung einer Kompatibilitätsbedingung für die Randspannungsvektoren t_T eingegangen, sodaß der lokale Fehlerindikator (3.53) nur von der Neuparametrisierung der Randspannungen (3.52) und der Art der Fehlerverteilung (3.54) bezüglich der Elementgeometrie abhängt. Durch die weiterhin diskontinuierlichen Randspannungsvektoren $t_{T,h}$ auf einer gemeinsamen Kante zweier benachbarter Elemente T_i und T_j kann auch keine lokale (elemenweise) Fehlergleichung (3.32) betrachtet werden.

3.1.3 Globale gradientenbasierte Fehlerindikatoren

Neben den bisher vorgestellten residuenbasierten Fehlerschätzern wurde von Zienkiewicz & Zhu [151, 152, 153] ein heuristisch motivierter Fehlerindikator entwickelt. Dieser Fehlerindikator, auch nach den beiden Autoren Z^2 -Indikator genannt, war in der Vergangenheit vorwiegend bei Ingenieuren beliebt und ist dementsprechend weit verbreitet. Erweiterungen findet man unter anderem bei Boroomand & Zienkiewicz [22, 23].

In der jüngeren Zeit wurde der Z^2 -Indikator allerdings auch zunehmend von mathematischer Seite untersucht, vgl. Verfürth [145], Ainsworth & Oden [4], Carstensen [29] oder bezüglich Superkonvergenzeigenschaften von Wahlbin [147] und Hoffmann et al. [67]. Dabei wurde zusammenfassend festgestellt, daß einfache gradientenbasierte Fehlerschätzer dazu neigen, den exakten Fehler für $h \mapsto 0$ zu überschätzen. Der daraus resultierende numerische Mehraufwand kann in praktischen Anwendungen allerdings gerne in Kauf genommen werden, da die numerischen Kosten einfacher gradientenbasierter Methoden gering sind.

Zunächst wird nun ein globaler gradientenbasierter Fehlerschätzer in der Energienorm hergeleitet. Dafür wird angenommen, daß folgende Ungleichung gilt:

$$|||\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*||| \leq C |||\boldsymbol{u}^* - \boldsymbol{u}_h|||, \qquad (3.55)$$

wobei für die Konstante C gilt: $0 \le C < 1$. Für die Energienorm des Fehlers folgt damit:

$$|||m{e}|||^2 = |||m{u}-m{u}_h|||^2$$

$$= (\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h))$$

$$= \int_{\Omega} (\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h)) : \boldsymbol{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h)) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v}.$$
(3.56)

Wendet man nun darauf die Dreiecksungleichung sowie Gl. (3.55) an, dann erhält man die folgende Abschätzung:

$$|||\boldsymbol{e}||| = |||\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{u}^* - \boldsymbol{u}^*||| \\ \leq (1+C) |||\boldsymbol{u}^* - \boldsymbol{u}_h|||.$$
(3.57)

Damit kann ein lokaler Fehlerindikator definiert werden zu:

$$\eta_{Z_2,T} := |||\boldsymbol{u}^* - \boldsymbol{u}_h|||_T = \int_T (\boldsymbol{\varepsilon}^*(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h)) : \boldsymbol{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}^*(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h)) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v}.$$
(3.58)

Die Summe über alle Finiten Elemente ergibt den Gesamtfehler:

$$\eta_{Z_2} := \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_{Z_2, T}^2 \right\}^{1/2}.$$
(3.59)

Mit analogen Argumenten kann ein L_2 -Norm-Fehlerindikator für die Gradienten der Primärvariablen, d. h. in der hier betrachteten Elastizitätstheorie für die Spannungen und Verzerrungen konstruiert werden. Exemplarisch soll dies nochmals für die Abschätzung in der L_2 -Norm der Spannungsgrößen durchgeführt werden. Da die Verzerrungen über das Hookesche Gesetz linear mit den Verzerrungen verknüpft sind, ist das Vorgehen für die Abschätzung in der L_2 -Norm der Verzerrungen analog.

Wie schon in Gleichung (3.55) angenommen, geht man davon aus, daß ein Spannungsfeld σ^* existiert, das folgender Ungleichung genügt:

$$\|\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*\| \le C \|\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}_h\|, \qquad (3.60)$$

wobei $0 \leq C < 1$ gelten soll.

Der L_2 -Norm-Fehler der Spannungen ist wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{e}_{\sigma}\| &:= \|\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_{h}\| \\ &= \|\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_{h} - \boldsymbol{\sigma}^{*} + \boldsymbol{\sigma}^{*}\|. \end{aligned} (3.61)$$

Wendet man nun die Dreiecksungleichung an und setzt die Annahme (3.60) ein, so folgt:

$$\|\boldsymbol{e}_{\sigma}\| \leq \|\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}_h\| + \|\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*\|$$
(3.62)

$$\leq \|\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}_h\| + C \|\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}_h\|$$
(3.63)

$$\leq \underbrace{(1+C)}_{\bar{C} \geq 1} \|\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}_h\|. \tag{3.64}$$

Damit läßt sich wiederum ein Fehlerindikator $\eta_{Z_2,T}^{\sigma}$ definieren, der den Fehler ebenfalls nach oben, also auf der "sicheren Seite" liegend, abschätzt:

$$\eta_{Z_2^{\sigma},T} := \|\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}_h\|_T = \left\{ \int_T (\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}_h) : (\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}_h) \, \mathrm{d}v \right\}^{1/2}.$$
(3.65)

Für den globalen Fehlerindikator als Summe aller elementabhängigen Größen gilt:

$$\eta_{Z_2^{\sigma}} := \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}} (\eta_{Z_2^{\sigma}, T})^2 \right\}^{1/2}.$$
(3.66)

Die obere Schrankeneigenschaft folgt direkt aus Gleichung (3.64), mit $1 \leq \overline{C} < 2$:

$$\|\boldsymbol{e}_{\sigma}\| \leq \bar{C} \,\eta_{Z_{2}^{\sigma},T}.\tag{3.67}$$

Die elementare Frage ist allerdings nun, wie man die Gradientenfelder σ^* und ε^* bestimmen kann, die für die Auswertung der Fehlerindikatoren (3.66) bzw. (3.59) notwendig sind.

Für das betrachtete Problem wurden Ansatzräume aus \mathcal{H}^1 gewählt. Das bedeutet, daß die Gradienten der Primärvariablen elementweise diskontinuierliche Funktionen sind, also Sprünge an den Elementrändern aufweisen können. Da diese Sprungfunktionen physikalisch keinen Sinn machen, greift man zu sogenannten *post-processing*-Methoden, also numerischen Nachlaufberechnungen, um aus den diskreten, elementweise sprungbehafteten Gradientenwerten kontinuierliche, glatte Gradientenfelder zu bestimmen.

Im folgenden werden nun verschiedene Methoden diskutiert, mit denen kontinuierliche Gradientenfelder berechnet werden können. Abschließend wird dann die elementare Frage erörtert, inwiefern diese berechneten Gradientenfelder als die gesuchten Felder σ^* bzw. ε^* identifiziert werden können.

1. Globale L_2 -Projection

Aus den Spannungen σ_h einer FEM-Berechnung wird ein Fehlerquadrat formuliert, das im gesamten Berechnungsgebiet Ω minimiert werden soll, vgl. Oden & Brauchli [103]:

$$\int_{\Omega} (\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}_h)^2 \, \mathrm{d}v \longmapsto \min.$$
(3.68)

Dabei sollen wiederum σ^* die verbesserten, d. h. kontinuierlichen Spannungen darstellen. Die Spannungen σ_h stellen die extrapolierten FEM-Spannungen an den Knoten der Finiten Elemente dar. Das zu lösende algebraische Gleichungssystem, aus dem σ^* bestimmt werden kann, hat dabei die gleiche Größe wie das ursprüngliche Gleichungssystem für die Primärvariable u_h . In praktischen Finite-Element-Simulationen will man diesen hohen zusätzlichen numerischen Aufwand natürlich vermeiden, weshalb dieses Verfahren kaum praktische Relevanz besitzt.

2. Lokale Mittelwertbildung

Mit Hilfe elementweiser, lokaler Polynomansätze werden die zu bestimmenden Grössen an den gemeinsamen Knoten \bar{N} des Knotenpatches $\tilde{\mathcal{P}}$ durch Mittelung festgelegt. Als Polynome können beispielsweise die Standard-Ansatzfunktionen der Primärvariablen verwendet werden. Durch den lokalen Träger der Polynome müssen die extrapolierten Knotenwerte $\hat{\sigma}^i(\boldsymbol{x}_{\bar{N}})$ der Elemente T_i , wobei $i = 1, \ldots, n$, abschließend noch gemittelt werden:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{*}(\boldsymbol{x}_{\bar{N}}) = \frac{1}{n} \left\{ \sum_{i=1}^{n} \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{i}(\boldsymbol{x}_{\bar{N}}) \right\} \quad \text{mit} \quad \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{i}(\boldsymbol{x}_{\bar{N}}) = \sum_{j=1}^{nodes} \boldsymbol{\phi}^{j}(\boldsymbol{x}_{\bar{N}}) \, \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{i}_{j}(\boldsymbol{x}_{\bar{N}}). \tag{3.69}$$

Der Faktor n stellt die Anzahl der Elemente dar, die den Knoten \overline{N} gemeinsam haben. Diese Methode ist hinsichtlich des numerischen Aufwands wesentlich "billiger" als die globale L_2 -Projektion, allerdings verliert man natürlich die Eigenschaft der globalen besten Approximation.

3. Superconvergence Patch Recovery (SPR):

Diese Technik geht in ihrer Anwendung bei adaptiven Finite-Element-Methoden auf die Arbeiten von Zienkiewicz & Zhu [152, 153] zurück. Dabei wird die Existenz superkonvergenter Punkte ausgenutzt, welche seit geraumer Zeit bekannt ist, vgl. Strang & Fix [135] oder Wahlbin [147], aber nur für spezielle Elementgeometrien bewiesen werden kann. Unter Superkonvergenz versteht man die Eigenschaft, daß gewisse (lokale) Punkte in einem Finiten Element mit höherer Konvergenzrate gegen die analytische Lösung konvergieren als die globale . In 2-dimensionalen viereckigen Finiten Elementen, denen Lagrange-Funktionen der Polynomordnung p zugrundeliegen, fallen diese Punkte z. B. mit den Gauß-Legendre-Punkten oder Integrationspunkten (Ortsvektor \mathbf{x}_{GP}) zusammen, vgl. Lesaint & Zlamal [85].

Für die verbesserten (superkonvergenten) Spannungen an einem Knoten wird folgender Polynomansatz gewählt:

$$\boldsymbol{\sigma}^* = \boldsymbol{P}^T \, \boldsymbol{a} \tag{3.70}$$

$$\boldsymbol{P}^{T} = [1, \xi, \eta, \xi \eta, \dots, \xi^{p}, \eta^{p}, \xi^{p} \eta^{p}], \qquad \boldsymbol{a}^{T} = [a_{1}, a_{2}, a_{3}, \dots, a_{m}].$$
(3.71)

Die Polynomordnung p richtet sich dabei nach der Ordnung des gewählten Ansatzes der Primärvariablen u_h . Der Vektor a enthält die zu dem Polynom gehörigen Koeffizienten.

Für das bilineare Element, siehe Abbildung 3.6, sehen die beiden Vektoren wie folgt aus:

$$\mathbf{P}^{T} = [1, \xi, \eta, \xi \eta], \qquad \mathbf{a}^{T} = [a_{1}, a_{2}, a_{3}, a_{4}], \qquad (3.72)$$



Abbildung 3.5: Patch zur Bestimmung der gemittelten Spannung $\hat{\sigma}^*(\boldsymbol{x}_{\bar{N}})$ am Knoten \bar{N}

und

$$\boldsymbol{\sigma}^* = \boldsymbol{P}^T \, \boldsymbol{a} = a_1 + a_2 \, \xi + a_3 \, \eta + a_4 \, \xi \, \eta. \tag{3.73}$$

Die Koeffizienten des Polynoms, zusammengefaßt im Vektor \boldsymbol{a} , lassen sich nun lokal, d. h. auf einem Knotenpatch $\tilde{\mathcal{P}}$ bestimmen, siehe Abbildung 3.6, wobei patchweise das folgende Fehlerfuntional in diskreter Form für jede Komponente $\hat{\sigma}_{ij}(\boldsymbol{x}_{GP}) = \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x}_{GP})$ des Spannungstensors am Gauss-Punkt ausgewertet wird:

$$\sum_{\mathcal{N}(T)\cap\mathcal{N}(\bar{N})\neq\emptyset} (\hat{\sigma}_{ij}(\boldsymbol{x}_{GP}) - \boldsymbol{P}^{T}(\boldsymbol{x}_{GP}) \boldsymbol{a})^{2} \longmapsto \text{ min.}$$
(3.74)

 $\hat{\sigma}_{ij}(\boldsymbol{x}_{GP})$ ist hier der diskrete Wert der Spannungskomponente ij am Gauß-Legendre-Punkt mit dem Ortsvektor \boldsymbol{x}_{GP} . $\boldsymbol{P}^{T}(\boldsymbol{x}_{GP})$ ist der Wert des gewählten Polynoms am Gauß-Punkt mit dem Ortsvektor \boldsymbol{x}_{GP} . Dies führt auf ein zu lösendes algebraisches Gleichungssystem für die zu berechnenden Koeffizienten \boldsymbol{a} :

$$\boldsymbol{M}\,\boldsymbol{a}=\boldsymbol{b}.\tag{3.75}$$

Die Matrix M und der Vektor b haben dabei die folgende Form:

$$\boldsymbol{M} = \sum_{\mathcal{N}(T) \cap \mathcal{N}(\bar{N}) \neq \emptyset} \left(\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}_{GP}) \, \boldsymbol{P}^{T}(\boldsymbol{x}_{GP}) \right), \quad \boldsymbol{b} = \sum_{\mathcal{N}(T) \cap \mathcal{N}(\bar{N}) \neq \emptyset} \left(\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}_{GP}) \, \hat{\sigma}_{ij}(\boldsymbol{x}_{GP}) \right). \quad (3.76)$$

Nach dem Lösen des algebraischen Gleichungssystems (3.75) für die Komponenten \boldsymbol{a} ist der Verlauf $\boldsymbol{\sigma}^* = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{a}$ für den betrachteten Knotenpatch $\tilde{\mathcal{P}}$ bestimmt und die verbesserten (superkonvergenten) Spannungen können am Knoten \bar{N} ausgewertet werden:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^*(\boldsymbol{x}_{\bar{N}}) = \boldsymbol{P}^T(\boldsymbol{x}_{\bar{N}}) \, \boldsymbol{a}. \tag{3.77}$$

Anhand der Abbildung 3.6 läßt sich der geringe numerische Aufwand dieses Verfahrens verdeutlichen. Für den Mittelungsprozeß muß für jeden geglätteten Knotenwert



Abbildung 3.6: Knotenpatch für ein bilineares Vierknotenelement

 $\hat{\sigma}^*$ die Matrix M invertiert werden, deren Rang sich nach der gewählten Ansatzordnung p richtet. Für das in der Abbildung 3.6 gezeigte bilineare Element, siehe auch Gl. (3.72), ist dies eine 4 × 4-Matrix, deren Inverse natürlich für alle Tensorkomponenten σ_{ii}^* identisch ist.

3.2 Zielorientierte oder lokale Fehlerschätzer

Den bisher vorgestellten "klassischen" Fehlerschätzern ist allen die Bestimmung globaler Stabilitätskonstanten gemein. Begnügt man sich mit Abschätzungen in der Energienorm, so kann man dabei auf Auswertungen elliptischer Regularitätsaussagen zurückgreifen. Es wurde dabei gezeigt, daß im Falle von Energienormabschätzungen die globale Stabilitätskonstante $C_s = 1$ (bis auf Parameter) ist.

Nun möchte man sich allerdings nicht mit Energienormfehlerschätzern zufriedengeben. Häufig ist man bei Ingenieurfragestellungen an der Qualität der numerischen Berechnung ganz bestimmter Größen interessiert. In der numerischen Berechnung von Tragstrukturen im Ingenieurbau stellt sich neben Fragen der Tragsicherheit z. B. auch häufig die Frage nach der Gebrauchstauglichkeit. Unter der Gebrauchstauglichkeit wird unter anderem die Einhaltung gewisser Verschiebungs- oder Dehnungstoleranzen verstanden. Ein Beispiel findet man im Eurocode 2 (EC 2), Teil 1 [45], in dem eine Verformungsbegrenzung für Bauteile im Hochbau gefordert wird. Die berechnete Durchbiegung eines Bauteils ist dort auf $u_{max} = l/250$ begrenzt. Die Abmessung l steht für die Stützweite des Bauteils. Möchte man nun ein Fehlerkriterium für diese Fragestellung formulieren, so liefert sicherlich die Verschiebungsnorm eine bessere Aussage als eine Energienorm. In der numerischen Simulation der o.g. Problemstellung im Rahmen einer adaptiven Finite-Element-Berechnung ist die Konsequenz, daß man auch den Diskretisierungsfehler der zu kontrollierenden Verschiebungsgröße mißt. Da *a priori* oftmals die Stelle der maximalen Verschiebung wenigstens näherungsweise bekannt ist, wird man sich sicherlich auf ein bestimmtes Teilgebiet, wenn nicht sogar auf eine ganz bestimmte Stelle im Gebiet beschränken können.

Solche Fehlerschätzer, die man auch problembasierte Fehlerschätzer nennen könnte, haben aber den Nachteil, daß sich die Stabilitätskonstante C_s nicht mehr analytisch finden läßt. Die grundlegende Idee ist nun, daß man neben dem ursprünglichen Problem, dem *primalen Problem*, noch ein weiteres Problem formuliert, das *duale Problem*, welches man dann ebenfalls numerisch löst. Durch die Gewichtung der Residuen des primalen Problems mit dem Fehler des dualen Problems erhält man dann eine Fehlerabschäztung frei von globalen Stabilitätskonstanten.

Die Idee, zur Fehlerabschätzung ein duales Hilfsproblem zu formulieren, ist dabei nicht neu, sondern geht auf die Idee von Aubin & Nitsche [10] zurück. Nitsches Trick wird allgemein verwendet, um *a priori*-Fehleraussagen zu treffen. Diese Idee wurde von Johnson et al. [74, 75, 53, 76] aufgegriffen und auf die *a posteriori*-Fehlerabschätzung angewandt. Rannacher et al. [19, 20, 116] entwickelten die Methode weiter und wendeten sie auf verschiedene Rand- und Anfangsrandwertprobleme an.

Erweiterungen dieser dualen Methoden zur Fehlerabschätzung nichtlinearer Problemstellungen findet man auch in Suttmeier [137], Rannacher & Suttmeier [115, 117, 118, 119], Cirak [34], Cirak & Ramm [36, 37], Steeb & Ramm [128], Steeb, Maute & Ramm [127] und Larsson, Runesson & Hansbo [82]. Adaptive Methoden mit dualen Techniken angewandt auf Probleme der linearen Strukturdynamik findet man in den Arbeiten von Schleupen & Ramm [122] und Maute [93].

3.2.1 Allgemeine Motivation

Den bisher vorgestellten Fehlerschätzern war die Eigenschaft gemein, den Diskretisierungsfehler in der Energienorm abzuschätzen. Des weiteren resultiert daraus eine Netzverfeinerungsstrategie, die das Finite-Element-Netz in dem Sinne optimiert, daß der Diskretisierungsfehler in jedem einzelnen Finiten Element eine vorgegebene Toleranzschranke nicht überschreitet. Netzoptimierungsstrategien dieser Art werden im folgenden auch als *globale* Verfahren bezeichnet. Demzufolge werden die auf dem Verfeinerungsindikator basierenden Fehlerschätzer auch als *globale Fehlerschätzer* bezeichnet.

Aus der Sicht praktischer Ingenieuranwendungen widerspricht diese Optimierungsstrategie allerdings dem Ziel vieler numerischer Simulationen. Das o.g. klassische Beispiel aus dem Ingenieurbereich sollte dies verdeutlichen. Untersucht werden soll, ob die maximale Verschiebung eines Punktes des betrachteten Problems unter einem Lastfall oder einer Lastfallkombination eine in der entsprechenden Norm zugelassene Verschiebungsvorgabe einhält. Um diese numerische Berechnung möglichst exakt durchzuführen, benötigt man aber ein Finite-Element-Netz, welches bezüglich dieser gesuchten Verschiebungsgröße optimiert ist.

Netzverfeinerungsindikatoren, die solche Netze konstruieren können, werden im folgenden als *zielorientiert* bezeichnet. Dementsprechend bezeichnet man die zugrundeliegenden Fehlerschätzer als *zielorientierte* oder *gewichtete Fehlerschätzer*. Zielorientierte Fehlerschätzer können äußerst flexibel konstruiert werden. Sie können, wie durch das gezeigte Beispiel motiviert, das Netz bezüglich lokaler Größe optimieren. *Lokale* Fehlerschätzer sind also als ein Spezialfall zielorientierter Fehlerschätzer anzusehen.

Neben der Abschätzung lokaler Größen, welche aus skalarwertigen, aber auch aus Komponenten vektor- oder tensorwertiger Größen bestehen können, hat man nun die Möglichkeit, Größen sowohl in einem Teilgebiet des betrachteten Problems als auch im Gesamtgebiet zu untersuchen. Ein bekannter Fehlerschätzer, der damit auch in die Klasse zielgerichteter Fehlerschätzer fällt, ist der Fehlerschätzer in der L_2 -Norm der Verschiebungen. Weiterhin kann der klassische globale, explizite residuenbasierte Fehlerschätzer in der Energienorm als Sonderfall zielorientierter Fehlerschätzer interpretiert werden.

3.2.2 Zielorientierte, residuenbasierte Fehlerabschätzung

Die grundsätzliche Konstruktion zielorientierter Fehlerschätzer basiert auf einer universellen Idee, die im folgenden gezeigt wird. Sie ist allgemeiner Natur und läßt sich auf verschiedene Typen partieller Differentialgleichungen anwenden (elliptischer, parabolischer und hyperbolischer Art). Allerdings entspricht dieses Konzept im Falle der linearen Elastizitätstheorie auch dem aus der klassischen Mechanik bekannten *Reziprozitätstheorem* von *Betti-Rayleigh*, siehe *Cirak* [34]. Der einfacheren Anschauung wegen wird nun ein zielorientierter Fehlerschätzer zuerst auf diese Art und Weise hergeleitet, bevor später das Vorgehen verallgemeinert dargestellt wird.

Im weiteren geht man wieder von den Gleichungen des linear-elastischen Randwertproblems (2.25)-(2.32) aus. In diesem Fall allerdings soll der Körper nacheinander zwei verschiedenen Lastfällen f, \bar{t} und j, \bar{k} ausgesetzt sein, Abbildung (3.7). Die beiden Lastfälle werden im folgenden als primaler (p) und als dualer Lastfall (\hat{d}) bezeichnet. Nach Aufbringen des primalen Lastfalls (p) gilt für die externe (virtuelle) Arbeit oder die Linearform des Problems:

$$l^{p}(\boldsymbol{u}^{p}) = (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{u}^{p})_{\Omega} + (\bar{\boldsymbol{t}}, \boldsymbol{u}^{p})_{\Gamma_{N}^{p}}$$

$$(3.78)$$

wobei u^p der Zustandsvektor der Verschiebungsgrößen des ersten oder primalen Lastfalls ist. Nun wendet man das Superpositionsgesetz an und superponiert den ersten Lastfall p mit dem zweiten oder dualen Lastfall @. Mit dem Zustandsvektor u^d der Verschiebungsgrößen des zweiten oder dualen Lastfalls folgt damit für die externe Arbeit:

$$l^{d}(\boldsymbol{u}^{d}) = (\boldsymbol{j}, \boldsymbol{u}^{d})_{\Omega} + (\bar{\boldsymbol{k}}, \boldsymbol{u}^{d})_{\Gamma_{N}^{d}} + (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{u}^{d})_{\Omega} + (\bar{\boldsymbol{t}}, \boldsymbol{u}^{d})_{\Gamma_{N}^{p}}, \qquad (3.79)$$

$$l^{tot}(\boldsymbol{u}) = l^p(\boldsymbol{u}^p) + l^d(\boldsymbol{u}^d).$$
(3.80)

Ändert man nun die Reihenfolge der Belastung und bringt als erstes den Lastfall (a) auf, so resultiert daraus:

$$\bar{l}^{d}(\boldsymbol{u}^{d}) = (\boldsymbol{j}, \boldsymbol{u}^{d})_{\Omega} + (\bar{\boldsymbol{k}}, \boldsymbol{u}^{d})_{\Gamma_{N}^{d}}.$$
(3.81)

Anschließend wird ebenfalls wieder Lastfall (p) aufgebracht, während man den Lastfall (d) konstant hält:

$$\bar{l}^{p}(\boldsymbol{u}^{p}) = (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{u}^{p})_{\Omega} + (\bar{\boldsymbol{t}}, \boldsymbol{u}^{p})_{\Gamma_{N}^{p}} + (\boldsymbol{j}, \boldsymbol{u}^{p})_{\Omega} + (\bar{\boldsymbol{k}}, \boldsymbol{u}^{p})_{\Gamma_{N}^{d}},$$
(3.82)

$$\bar{l}^{tot}(\boldsymbol{u}) = \bar{l}^{d}(\boldsymbol{u}^{d}) + \bar{l}^{p}(\boldsymbol{u}^{p}).$$
(3.83)

Infolge der Superpositionseigenschaften darf die Belastungsreihenfolge keinen Einfluß auf die Gesamtarbeit haben, so daß gelten muß:

$$\bar{l}^{tot}(\boldsymbol{u}) \stackrel{!}{=} l^{tot}(\boldsymbol{u}). \tag{3.84}$$



Abbildung 3.7: Körper unter zwei Lastfällen, Satz von Betti & Rayleigh

Setzt man in Gleichung (3.84) die Beziehungen (3.80) sowie (3.83) ein, dann folgt eine Beziehung, welche als das *Reziprozitätstheorem* von Betti & Rayleigh bekannt ist.

$$(\boldsymbol{f}, \boldsymbol{u}^d)_{\Omega} + (\bar{\boldsymbol{t}}, \boldsymbol{u}^d)_{\Gamma_N^p} = (\boldsymbol{j}, \boldsymbol{u}^p)_{\Omega} + (\bar{\boldsymbol{k}}, \boldsymbol{u}^p)_{\Gamma_N^d}.$$
(3.85)

Diese Beziehung zwischen dem *primalen Problem*, d. h. der Belastung des Systems mit dem Lastfall (p), und dem *dualen Problem*, also der Belastung des Systems mit Lastfall (a), läßt sich sehr gut zur Konstruktion eines zielorientierten Fehlerschätzers ausnutzen:

$$\sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T \operatorname{Res}_T(\boldsymbol{u}_h^p) \cdot \boldsymbol{u}^d \, \mathrm{d}v + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E \operatorname{Res}_E(\boldsymbol{u}_h^p) \cdot \boldsymbol{u}^d \, \mathrm{d}a = (\boldsymbol{j}, \boldsymbol{e})_{\Omega} + (\bar{\boldsymbol{k}}, \boldsymbol{e})_{\Gamma_N^d}.$$
(3.86)

Vergleicht man die Gleichungen (3.85) und (3.86), so kann man erkennen, daß die Lastterme des primalen Problems f bzw. \bar{t} nun so gewählt werden, daß sie den Residuen des primalen Problems mit den entsprechenden Fehlern e entsprechen, vgl. Gl. (3.7) und Gl. (3.8).

Die Identifikation der starken Form der Fehlergleichung (3.7) bzw. (3.8) mit dem primalen Problem ist dieser Aussage formal identisch. Die Lösung des primalen Problems ist nun der gesuchte Fehler e selber. Die Belastung des dualen Problems j wird entsprechend des zu kontrollierenden Fehlers bzw. der zu kontrollierenden Fehlernorm gewählt. Die Lösung des dualen Problems u^d übernimmt die Rolle einer Einfluß- oder Gewichtsfunktion. Die Residuen des primalen Problems werden dabei zielorientiert gewichtet, d. h. abhängig von der Wahl der Belastung des dualen Problems.

Durch die flexible Wahl der Belastung des dualen Problems und die dadurch resultierende Filterfunktion ist man nun in der Lage, eine große Bandbreite an Fehlerschätzern zu formulieren. Neben globalen L_2 -Norm-Schätzern (für Verschiebungen, aber auch für sekundäre Größen wie Spannungen oder Verzerrungen) lassen sich auch lokale Fehlerschätzer für Primär- und Sekundärvariablen konstruieren. Geht man von einer regulären oder regularisierten dualen Belastung aus, so daß die Lösung \mathbf{u}^d im gesamten Gebiet Ω existiert, lassen sich auch Fehler von Punktgrößen abschätzen. Aber auch der klassische explizite residuenbasierte Fehlerschätzer in der Energienorm von Babuška & Rheinboldt [12] kann als zielorientierter Fehlerschätzer interpretiert werden.

In diesem Zusammenhang ist es wichtig, die Gemeinsamkeit aller folgenden Techniken zu erwähnen, in der die unbekannte kontinuierliche Lösung des dualen Problems u^d durch eine numerische Näherungslösung approximiert wird.

Bevor auf die Techniken der zielorientierten Fehlerabschätzung im speziellen eingegangen werden soll, wird ein alternativer, formaler Zugang zur zielorientierten Fehlerabschätzung diskutiert. Diese weitere Technik gewinnt vor allem unter dem Gesichtspunkt komplexerer Randwertprobleme, welche nichtlinear oder nicht-selbstadjungiert sein können, an Bedeutung. Wichtig zu erwähnen ist noch, daß hierfür die Gültigkeit des Superpositionsprinzips nicht benötigt wird. Auch die partielle Differentialgleichung, die das duale Problem beschreibt, kann sich im folgenden von der Gleichung des primalen Problems grundsätzlich unterscheiden.

Aus Gründen der Allgemeingültigkeit soll eine Operatorenschreibweise benutzt werden. Das primale Problem läßt sich dann wie folgt darstellen, wobei hier und im folgenden auf den hochgestellten Index p verzichtet wird. Wenn also von den Verschiebungen \boldsymbol{u} die Rede ist, soll immer das Verschiebungsfeld des primalen Problems gemeint sein:

$$-\operatorname{div}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f} \qquad \text{in }\Omega. \tag{3.87}$$

Eingeführt wird ein duales Problem, welches im Gebiet Ω durch folgende partielle Differentialgleichung beschrieben werden kann:

$$\boldsymbol{L}^{\star} \boldsymbol{u}^{d} = \boldsymbol{j} \qquad \text{in } \Omega. \tag{3.88}$$

Hierin ist L^* der Differentialoperator des dualen Problems, welcher auf die Primärvariable u^d des dualen Problems angewandt wird.

Die Methode, zur Fehlerabschätzung duale Hilfsprobleme heranzuziehen ist allerdings nicht neu sondern schon seit längerer Zeit bekannt, siehe Aubin [10]. Interessant ist auch, daß sich ähnliche Überlegungen in der klassischen mathematischen Finite-Element-Literatur, Strang & Fix [135], Oden & Reddy [104], aber auch in der klassischen Ingenieurliteratur, Tottenham [140] finden.

Eine Übertragung auf *a posteriori*-Fehlerschätzer sucht man allerdings vergeblich.

Zwischen dem dualen Problem (3.87) und dem primalen Problem (3.88) soll folgende energetische Äquivalenz bestehen:

$$(\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}^d) \stackrel{!}{=} (\boldsymbol{L}^{\star}\,\boldsymbol{u}^d,\boldsymbol{u}). \tag{3.89}$$

Des weiteren gilt unter Ausnutzung partieller Integration, des $Gau\beta$ schen Satzes und des Cauchy-Theorems:

$$(\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}^{d}) = -\int_{\Omega} \operatorname{div}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{u}^{d} \, \mathrm{d}v$$

$$= \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}^{d}) \, \mathrm{d}v - \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{u}^{d} \, \mathrm{d}a$$

$$= -\int_{\Omega} \boldsymbol{u} \cdot \operatorname{div}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^{d}) \, \mathrm{d}v + \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^{d}) \cdot \boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{u} \, \mathrm{d}a - \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{u}^{d} \, \mathrm{d}a$$

$$\stackrel{!}{=} (\boldsymbol{L}^{*}\,\boldsymbol{u}^{d},\boldsymbol{u}). \qquad (3.90)$$

Wobei $\partial \Omega = \Gamma_N \cup \Gamma_D$ und $\Gamma_N \equiv \Gamma_N^p \equiv \Gamma_N^d$ bzw. $\Gamma_D \equiv \Gamma_D^p \equiv \Gamma_D^d$. Desweiteren gilt $\boldsymbol{u} = \bar{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{0}$ und $\boldsymbol{u}^d = \boldsymbol{0}$ aud dem Dirichlet-Rand Γ_D . Nachdem die Primärvariablen \boldsymbol{u} des primalen Problems isoliert sind, kann der Differentialoperator \boldsymbol{L}^* spezifiziert werden:

$$\boldsymbol{L}^{\star} \boldsymbol{u}^{d} = -\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^{d}) \qquad \text{in } \Omega.$$
(3.91)

Wählt man nun noch die Spannungsrandbedingungen k auf dem Neumann-Rand und setzt die oben getroffenen homogenen Verschiebungsrandbedingungen auf dem Dirichlet-Rand ein, so kann man das duale Randwertproblem vollständig angeben:

$$-\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^d) = \boldsymbol{j} \quad \text{in} \quad \Omega,$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^d) \cdot \boldsymbol{n} = \bar{\boldsymbol{k}} \quad \text{auf} \quad \Gamma_N,$$

$$\boldsymbol{u}^d = \boldsymbol{0} \quad \text{auf} \quad \Gamma_D.$$
 (3.92)

 $^{^5}$ Generell kann diese Darstellung für beliebige Probleme verwendet werden. Bei gemischten Randwertproblemen oder zeitabhängigen Anfangsrandwertproblemen kann der Differential
operator L bzw. L^* dann in Matrizenform dargestellt werden.

Durch Multiplikation des dualen Randwertproblems (3.92) mit dem Fehler $e = u - u_h$ und anschließender Integration über das Gebiet Ω folgt

$$(\boldsymbol{L}^{\star} \boldsymbol{u}^{d}, \boldsymbol{e}) = (\boldsymbol{e}, \boldsymbol{j})_{\Omega} + (\boldsymbol{e}, \bar{\boldsymbol{k}})_{\Gamma_{N}} =: (\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]).$$
(3.93)

Entsprechend folgt für das primale Problem nach partieller Integration, Gleichung (3.4) - (3.8):

$$(\boldsymbol{L} \boldsymbol{e}, \boldsymbol{u}^d) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T \operatorname{Res}_T(\boldsymbol{u}_h) \cdot \boldsymbol{u}^d \, \mathrm{d}v + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E \operatorname{Res}_E(\boldsymbol{u}_h) \cdot \boldsymbol{u}^d \, \mathrm{d}a.$$
(3.94)

Durch Ausnutzung der Äquivalenzbeziehung (3.89) ist Gleichung (3.93) identisch mit Gleichung (3.94). Gleichsetzen der beiden Beziehungen liefert den Ausdruck für den Fehler:

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T \operatorname{Res}_T(\boldsymbol{u}_h) \cdot \boldsymbol{u}^d \, \mathrm{d}v + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E \operatorname{Res}_E(\boldsymbol{u}_h) \cdot \boldsymbol{u}^d \, \mathrm{d}a.$$
(3.95)

Vergleicht man das Resultat (3.95) mit der Fehlerbeziehung (3.86), die über das Reziprozitätstheorem hergeleitet wurde so erkennt man die Übereinstimmung.

Mit den beiden hier vorgestellten Methoden hat man nun ein anschauliches Werkzeug an der Hand, um auch für komplexe Randwertprobleme die entsprechenden dualen Hilfsprobleme abzuleiten und zielorientierte Fehlerschätzer zu formulieren.

Die Belastung j bzw. \bar{k} des dualen Problems stellt für die zu kontrollierende Fehlergröße eine Art Filterfunktion dar. Die spezielle Wahl der Belastungsfunktion ist also abhängig von der gewünschten Fehlerkontrolle bzw. von der gewählten Fehlernorm.

Im folgenden soll auf einige spezielle Funktionen j bzw. \bar{k} eingegangen werden, welche in praktischen adaptiven Berechnungen eine wichtige Rolle spielen.

Grundsätzlich wird die duale Norm $\|\cdot\|^*$ skaliert, so daß gilt:

$$\|\boldsymbol{j}\|^{\star} = 1$$
 bzw. $\|\boldsymbol{k}\|^{\star} = 1.$ (3.96)

Die Norm des Fehlers wird über das Produkt des Fehlers und der Belastungsfunktion beschrieben:

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]) = \int_{\Omega} \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{j} \, \mathrm{d}v + \int_{\Gamma_N} \boldsymbol{e} \cdot \bar{\boldsymbol{k}} \, \mathrm{d}a.$$
 (3.97)

Damit folgt die Belastungsfunktion f für einige spezielle Fehlernormen:

1. Fehlerschätzer in der L_2 -Norm der Verschiebungen

$$\|\boldsymbol{e}\| = \sqrt{\int_{\Omega} \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{e} \, \mathrm{d}v} \stackrel{!}{=} \int_{\Omega} \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{j} \, \mathrm{d}v = (\boldsymbol{e}, \boldsymbol{j}) \qquad \Longrightarrow \qquad \boldsymbol{j} = \frac{\boldsymbol{e}}{\|\boldsymbol{e}\|} \qquad (3.98)$$

Man erkennt die Abhängigkeit der Belastungsfunktion vom Fehler, wodurch die Fehlergleichung zu einem nichtlinearen Problem wird. In praktischen Fehlerabschätzungen der linearen und der nichtlinearen Strukturmechanik spielt diese Tatsache allerdings eine untergeordnete Bedeutung. Durch die Normierung der Belastungsfunktion $\|\boldsymbol{j}\|^* = 1$ ist nur die Verteilung des Fehlers von Bedeutung. Im Rahmen

⁶Analog kann die Belastungsfunktion \bar{k} auf dem Neumann-Rand definiert werden, auf die der Übersichtlichkeit halber an dieser Stelle verzichtet wird.

eines adaptiven Prozesses, in dem die optimale Finite-Element-Diskretisierung auf iterative Weise gefunden werden soll, kann deshalb als Ausgangsbelastungsfunktion des dualen Problems die Fehlerverteilung eines klassischen expliziten residuenbasierten Schätzers verwendet werden.

2. Punktweise oder lokale Fehlerschätzer

$$|\boldsymbol{e}(\bar{\boldsymbol{x}})| = (\boldsymbol{e}, \delta(\bar{\boldsymbol{x}})) \stackrel{!}{=} (\boldsymbol{e}, \boldsymbol{j}) \qquad \Longrightarrow \qquad \boldsymbol{j} = \delta(\bar{\boldsymbol{x}}) \tag{3.99}$$

Falls man an der Fehlerkontrolle eines einzelnen Punkt-Wertes interessiert ist, besteht die Belastungsfunktion aus einer *Dirac*-Delta-Funktion. Diese nimmt am kontrollierten Punkt den Wert Unendlich an und verschwindet an jeglichen anderen Punkten im betrachteten Gebiet. Im Rahmen numerischer Berechnungen muß die *Dirac*-Delta-Funktion regularisiert werden, so daß die Lösung des Problems beschränkt ist und die kontinuierliche Lösung keine Singularitäten aufweist. Im Rahmen einer Finite-Element-Berechnung kann dies durch die Wahl geeigneter Funktionen $\bar{\delta}(\bar{x})$ geschehen, siehe Abbildung 3.8. Im angegebenen Beispiel wurde folgende Belastungsfunktion gewählt:

$$\bar{\delta}(\bar{\boldsymbol{x}}) = \left(1 - \left(\frac{\hat{x}}{h_i}\right)^2\right) \left(1 - \left(\frac{\hat{y}}{h_i}\right)^2\right), \qquad (3.100)$$

Die Belastungsfunktion $\bar{\delta}(\bar{x})$ ist dabei nur auf einem Elementpatch $\hat{\mathcal{P}}$ definiert, zu dem alle Finiten Elemente mit einem Knoten in \bar{x} gehören. Für die Koordinaten \hat{x}, \hat{y} gilt damit:

$$\mathcal{P} = \{ (\hat{x}, \hat{y}) : -h_i \le \hat{x} \le h_i; -h_i \le \hat{y} \le h_i \}.$$
(3.101)

Ein möglicher anderer Weg zur Regularisierung des Fehlerfunktionals (e, j) wird in den Arbeiten von Oden & Reddy [104], Prudhomme & Oden [113] und Ainsworth & Oden [5] beschrieben. Da das grundsätzliche Problem der punktweisen



Abbildung 3.8: Mögliche regularisierte Dirac-Delta-Funktion

Fehlerabschätzung das nicht-beschränkte Fehlerfunktional (e, j) ist, wird dort im Gegensatz zu o.g. Methode vorgeschlagen, den möglichen Raum der Verschiebungen direkt zu beschränken. Dies kann durch ein lokales "Verschmieren" bzw. Glätten der Verschiebungen geschehen. Aus physikalischer Sicht ist ein solches Glätten der Verschiebungsgrößen in der Strukturmechanik für duktile Materialien auch im Rahmen einer materiell linearen Theorie sinnvoll, da Spannungsumlagerungen in der Nähe von singulären Punkten immer stattfinden.

Eine mathematische Beschreibung "verschmierter" Verschiebungsgrössen ist mit Hilfe einer abklingenden Exponentialfunktion $\rho_{\epsilon}(\boldsymbol{x})$ möglich, vgl. Oden & Reddy [104].

Das duale Verschiebungsfeld lautet somit:

$$\boldsymbol{u}^{d}(\bar{\boldsymbol{x}}) = \int_{\Omega} \rho_{\epsilon}(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}) \, \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v}.$$
(3.102)

Die Exponentialfunktion $\rho_{\epsilon}(\boldsymbol{x})$ ist in einem Gebiet mit Radius $\epsilon > 0$ ungleich Null:

$$\rho_{\epsilon}(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} C \exp \frac{-1}{|\boldsymbol{x}|^2 - \epsilon^2} & \text{für } |\boldsymbol{x}| < \epsilon, \\ 0 & \text{für } |\boldsymbol{x}| \ge \epsilon. \end{cases}$$
(3.103)

Die Konstante C hängt von der Größe des Gebietes, also dem Radius ϵ ab, in dem das Verschiebungsfeld geglättet werden soll. Sie ist so zu wählen, daß $\rho_{\epsilon}(\boldsymbol{x})$ im integralen Sinne in diesem Bereich identisch Eins ist, d. h. $\int \rho_{\epsilon}(\boldsymbol{x}) \, dv = 1$.

3. Integrale Fehlerschätzer

Natürlich läßt sich die Belastungsfunktion j auch so wählen, daß ein Fehlerfunktional auf einem Teilgebiet $\overline{\Omega}$ des Gesamtgebietes Ω kontrolliert werden kann.

$$\|\boldsymbol{e}\|_{\bar{\Omega}} = \sqrt{\int_{\bar{\Omega}} \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{e} \, \mathrm{d}v} \stackrel{!}{=} \int_{\Omega} \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{j} \, \mathrm{d}v = (\boldsymbol{e}, \boldsymbol{j}) \qquad \Longrightarrow \qquad \boldsymbol{j} = \frac{\boldsymbol{e}_{\bar{\Omega}}}{\|\boldsymbol{e}\|_{\bar{\Omega}}} \qquad (3.104)$$

Auch hier ist die Belastung wieder abhängig von dem Fehler e. Mit analoger Argumentation wie unter Punkt 1 kann eine approximierte Eingangsverteilung des Diskretisierungsfehlers wiederum aus einer globalen, z. B. aus einer expliziten residuenbasierten Fehlerabschätzung bestimmt werden.

Mittels solcher *integraler gewichteter* Fehlerschätzer lassen sich z. B. Verschiebungsfehler entlang eines Schnittes einer Hochbauplatte oder Spannungswerte entlang eines Ringintegales zur Berechnung von Spannungsintensitätsfaktoren in der linearen Bruchmechanik, aber auch Verzerrungsgrössen in einem Teilgebiet abschätzen. Gerade in Ingenieuranwendungen, wo häufig nur Interesse an Teilproblemen besteht, sind integrale Fehlermaße dieser Art sehr effizient einzusetzen.

Im folgenden wird jetzt, dem Vorgehen nach analog zur Entwicklung globaler expliziter residuenbasierter Fehlerschätzer, die *lokale Form der Fehlergleichung* (3.95) ebenfalls abgeschätzt. Auch hier ist zu bemerken, daß es grundsätzlich wieder möglich ist, die kontinuierliche Gleichung (3.95) durch Wahl geeigneter endlich-dimensionaler Ansatzräume numerisch zu lösen. Im Unterschied zur *globalen Form der Fehlergleichung* (3.6) müssen allerdings Ansätze für die duale Lösungsvariable \boldsymbol{u}^d gewählt werden. Es ist wiederum nötig, vgl. Abschnitt 3.1.1, die Ansatzräume hierarchisch zu erweitern, was zu erhöhtem numerischen Aufwand führt, und der wird im allgemeinen nicht in Kauf genommen.

Zur Fehlerabschätzung kann man nun die *Galerkin*-Orthogonalität für das duale Problem ausnutzen und in die lokale Form der Fehlergleichung (3.95) einsetzen:

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T \operatorname{Res}_T(\boldsymbol{u}_h) \cdot (\boldsymbol{u}^d - \boldsymbol{u}_h^d) \, \mathrm{d}v + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E \operatorname{Res}_E(\boldsymbol{u}_h) \cdot (\boldsymbol{u}^d - \boldsymbol{u}_h^d) \, \mathrm{d}a.$$
(3.105)

Durch Einführen einer Quasi-Interpolierenden für die duale Variable \boldsymbol{u}_{h}^{d}

$$\Pi_h: \mathcal{V} \longmapsto \mathcal{V}_h, \quad \text{mit} \quad \Pi_h \, \boldsymbol{u}^d \in \mathcal{V}_h \tag{3.106}$$

und Ausnutzen der Cauchy-Schwarz-Ungleichung für Integrale erhält man:

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]) \leq \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \|\operatorname{Res}_T(\boldsymbol{u}_h)\| \| (\boldsymbol{u}^d - \Pi_h \boldsymbol{u}^d)\| + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \|\operatorname{Res}_E(\boldsymbol{u}_h)\| \| (\boldsymbol{u}^d - \Pi_h \boldsymbol{u}^d)\|.$$
(3.107)

Durch die Anwendung der eingeführten Interpolationsabschätzungen läßt sich nun der L_2 -Norm-Interpolationsfehler durch Gradienten zweiter Ordnung der kontinuierlichen dualen Lösung \boldsymbol{u}^d ausdrücken, dabei gilt generell die Regularitätsanforderung an die kontinuierliche Lösung des dualen Problems $\boldsymbol{u}^d \in \mathcal{H}^2(\Omega)$. Die kontinuierliche Lösung \boldsymbol{u}^d liegt allerdings i. a. nicht vor, sodaß das duale Problem numerisch gelöst werden muß. Die Interpolationsabschätzung wird dabei ebenfalls für die berechnete numerische Lösung \boldsymbol{u}_h^d in geeigneter Art und Weise durchgeführt, siehe Abbildung 3.9. Dabei werden die folgenden Interpolationsabschätzungen ausgenutzt, vgl. Johnson & Hansbo [75], Ciarlet [33], Becker & Rannacher [19]:

$$\|\boldsymbol{u}^{d} - \Pi_{h}\boldsymbol{u}^{d}\|_{T} \leq C_{i,1}h_{T}^{2}\|\nabla^{2}\boldsymbol{u}^{d}\|_{\tilde{T}} \approx C_{i,1}h_{T}^{2}\|\nabla^{2}\boldsymbol{u}_{d,h}\|_{\tilde{T}}, \qquad (3.108)$$

$$\|\boldsymbol{u}^{d} - \Pi_{h}\boldsymbol{u}^{d}\|_{E} \leq C_{i,2}h_{E}^{3/2}\|\nabla^{2}\boldsymbol{u}^{d}\|_{\tilde{E}} \approx C_{i,2}h_{E}^{3/2}\|\nabla^{2}\boldsymbol{u}_{d,h}\|_{\tilde{E}}.$$
 (3.109)

Des weiteren muß eine Stabilitätsabschätzung für das kontinuierliche duale Problem gelten, vgl. Johnson & Hansbo [75]:

$$\|\nabla^2 \boldsymbol{u}^d\|_{\Omega} \le C_s \|[\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]\|.$$
(3.110)

Die Konstante C_s in der Stabilitätsabschätzung (3.110) des dualen Problems hängt wiederum vom Typ der partiellen Differentialgleichung und dem betrachteten Randwertproblem ab. Im Unterschied zu dem Vorgehen in Abschnitt 3.1.1 wird nun allerdings auf eine analytische Auswertungen der Beziehung (3.110) verzichtet. Stattdessen soll das duale Problem numerisch, nämlich ebenfalls mittels Finiter Elemente, gelöst werden. Daran anschließend werden auch die Interpolationsabschätzungen (3.108) und (3.109) numerisch berechnet. Setzt man die numerisch berechneten Gradienten zweiter Ordnung in die Abschätzung der lokalen Fehlergleichung (3.105) ein, erhält man eine Ungleichung, die auf der rechten Seite ausschließlich bekannte Größen enthält und somit quantitativ ausgewertet werden kann:

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]) \leq \sum_{T \in \mathcal{T}_h} C_{i,1} h_T^2 \|\operatorname{Res}_T(\boldsymbol{u}_h)\| \|\nabla^2 \boldsymbol{u}_h^d\|_{\tilde{T}} + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} C_{i,2} h_E^{3/2} \|\operatorname{Res}_E(\boldsymbol{u}_h)\| \|\nabla^2 \boldsymbol{u}_h^d\|_{\tilde{E}}.$$
(3.111)

Möchte man die Ungleichung (3.111) in adaptiven Finite-Element-Programmen numerisch auswerten, bietet sich eine Darstellung an, in der die Sprunganteile über die Elementkanten auf die einzelnen Elemente verteilt werden. Die Sprunganteile des Fehlers können dann elementweise berechnet werden, und man benötigt keine topologischen Beziehungen zwischen Kanten- und Elementfeldern. Hier wird davon ausgegangen, daß die Sprunganteile gleichmäßig auf die benachbarten Elemente verteilt werden, so daß sich die Ungleichung (3.111) wie folgt ausdrücken läßt:

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]) \leq \sum_{T \in \mathcal{T}_h} C_{i,1} h_T^2 \|\operatorname{Res}_T(\boldsymbol{u}_h)\| \|\nabla^2 \boldsymbol{u}_h^d\|_{\tilde{T}} + \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \sum_{E \subset T} \frac{1}{2} C_{i,2} h_E^{3/2} \|\operatorname{Res}_E(\boldsymbol{u}_h)\| \|\nabla^2 \boldsymbol{u}_h^d\|_{\tilde{E}}.$$

$$(3.112)$$

Damit läßt sich ein lokaler elementweiser Fehlerindikator definieren?

$$\eta_{GO,T} := C_{i,1}h_T^2 \|\operatorname{Res}_T(\boldsymbol{u}_h)\| \|\nabla^2 \boldsymbol{u}_h^d\|_{\tilde{T}} + \sum_{E \subset T} \frac{1}{2} C_{i,2}h_E^{3/2} \|\operatorname{Res}_E(\boldsymbol{u}_h)\| \|\nabla^2 \boldsymbol{u}_h^d\|_{\tilde{E}}.$$
 (3.113)

Faßt man die Residuenanteile im Inneren der Elemente und die Sprunganteile der Residuen zusammen, kann man den lokalen Fehlerindikator anschaulich als das Produkt von Residuen und den dazugehörigen Gewichten darstellen:

$$\eta_{GO,T} :=$$
 Residuenanteile \times Gewichte. (3.114)

Die Summation des lokalen Fehlerindikators (3.113) über alle Finiten Elemente ergibt abschließend den gesamten Fehlerindikator des betrachteten Gebietes:

$$\eta_{GO} := \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_{GO,T}.$$
(3.115)

Infolge der verwendeten Konstruktionstechnik existiert somit eine obere Schranke für den Fehler:

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \boldsymbol{k}]) \le C_{i,3} \eta_{GO}, \quad \text{mit} \quad C_{i,3} = \max\{C_{i,1}, C_{i,2}\}.$$
 (3.116)

Numerische Berechnung der Gradienten 2. Ordnung des dualen Problems

In der Entwicklung des hier vorgestellten zielorientierten Fehlerschätzers wurden die Interpolationsabschätzungen (3.108) und (3.109) verwendet, welche die zweiten Gradienten der dualen Lösung u^d benötigen.

Um die entwickelten Fehlerindikatoren auch für Verschiebungselemente mit linearen Ansatzfunktionen verwenden zu können, müssen die aus der numerischen Berechnung explizit nicht-existenten Gradienten zweiter Ordnung aus den vorhandenen Lösungsvariablen \boldsymbol{u}_h^d numerisch bestimmt werden. Vorschläge zur Berechnung der benötigten Gradienten in Bezug auf Fehlerschätzer findet man z. B. in den Arbeiten von Becker & Rannacher [19] und Rannacher & Suttmeier [116]. In den genannten Arbeiten wurden die benötigten Gradienten mittels Auswertung eines Differenzenquotienten numerisch bestimmt, siehe Abbildung 3.9. Stützstellen des Differenzenquotienten sind dabei die Mittelpunkte der Elemente um das betrachtete Finite Element.

⁷Der Index $_{GO}$ steht für den zielgerichteten Fehlerschätzer (<u>G</u>oal-<u>O</u>riented).

Möchte man das Konzept auf zweidimensionale Problemstellungen erweitern, ist dies für reguläre FEM-Netze problemlos möglich. Die Adaption an irreguläre FEM-Netze ist allerdings mit einigen Schwierigkeiten verbunden. Beispielsweise kann die Wahl der Stützstellen zur Berechnung der Richtungsableitungen nicht ohne weiteres in die Elementmittelpunkte verlegt werden.

Um im Rahmen eines möglichst allgemeinen Konzeptes auch mit freivernetzten Gebieten arbeiten zu können, wird das genannte Konzept nun erweitert. Das Vorgehen kann dabei in zwei Schritte unterteilt werden. Zuerst wird aus der Lösung \boldsymbol{u}_h^d ein C^0 -kontinuierliches Gradientenfeld $\nabla^* \boldsymbol{u}_h^d$ bestimmt. Dies kann mittels der in Abschnitt 3.1.3 beschriebenen Verfahren erreicht werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde vor allem eine einfache Extrapolation der Gradienten an die Knotenpunkte und anschließender Glättung mit Erfolg angewandt. Im zweiten Schritt kann elementweise aus dem C^0 -kontinuierlichen Gradientenfeld der Gradient zweiter Ordnung $\nabla^{*,2}\boldsymbol{u}_h^d$ im Mittelpunkt des Elementes bestimmt werden. Die elementweise konstante L_2 Norm wird abschließend mittels 1-Punkt-Gauß-Integration berechnet.

Neben der breiteren Anwendbarkeit dieser Methode, z. B. bei freivernetzten Problemen, spricht auch die elementweise Auswertbarkeit für die Anwendung des Verfahrens. Aus algorithmischen Gesichtspunkten ist dieses Verfahren bei der Anwendung lokaler L_2 -Projekton eine rein lokale Methode, damit numerisch sehr günstig und einfach in bestehende Finite-Element-Programme zu implementieren.

Anhand einer einfachen eindimensionalen Analyse linearer Elemente soll das Vorgehen nochmals erläutert werden. Hierbei soll für das Element (i) der Länge h_i der Gradient zweiter Ordnung im Elementmittelpunkt bestimmt werden.

1. Direkte Methode mittels Differenzenquotienten 2. Ordnung

Der Gradient zweiter Ordnung läßt sich im Mittelpunkt des Elementes direkt aus den Gradienten der Lösung in den benachbarten Elementen berechnen, vgl. *Becker* & *Rannacher* [19] und *Rannacher & Suttmeier* [116]:

$$|\nabla^{2}\boldsymbol{u}_{h}^{d}| = \frac{1}{2} \left| \left(\frac{\nabla \boldsymbol{u}_{h}^{d}(\boldsymbol{x}_{i}) - \nabla \boldsymbol{u}_{h}^{d}(\boldsymbol{x}_{i-1})}{\frac{1}{2}(h_{i} + h_{i-1})} \right) + \left(\frac{\nabla \boldsymbol{u}_{h}^{d}(\boldsymbol{x}_{i+1}) - \nabla \boldsymbol{u}_{h}^{d}(\boldsymbol{x}_{i})}{\frac{1}{2}(h_{i+1} + h_{i})} \right) \right|.$$
 (3.117)

2. Indirekte Methode mittels C^0 -kontinuierlichen Gradientenfelder

Wie oben beschrieben soll diese Methode in zwei Schritte unterteilt werden. Zuerst werden die C^0 -kontinuierlichen Gradientenfelder bestimmt, beispielsweise mittels einfacher Glättungsalgorithmen, lokaler L_2 -Projektion oder der SPR-Methode von Zienkiewicz & Zhu [152, 153]:

$$|\nabla^* \boldsymbol{u}_h^d(i^-)| = \frac{1}{2} \left| \left(\nabla \boldsymbol{u}_h^d(\boldsymbol{x}_i) \right) + \left(\nabla \boldsymbol{u}_h^d(\boldsymbol{x}_{i-1}) \right) \right|, \qquad (3.118)$$

$$|\nabla^* \boldsymbol{u}_h^d(i^+)| = \frac{1}{2} \left| \left(\nabla \boldsymbol{u}_h^d(\boldsymbol{x}_i) \right) + \left(\nabla \boldsymbol{u}_h^d(\boldsymbol{x}_{i+1}) \right) \right|.$$
(3.119)

Im zweiten Schritt werden aus den C^0 -kontinuierlichen Gradienten die Gradienten zweiter Ordnung berechnet:

$$|\nabla^{*,2}\boldsymbol{u}_{h}^{d}| = \frac{1}{h_{i}} \left| \nabla^{*}\boldsymbol{u}_{h}^{d}(i^{+}) - \nabla^{*}\boldsymbol{u}_{h}^{d}(i^{-}) \right|.$$
(3.120)

3.2.3 Zielorientierte, gradientenbasierte Fehlerabschätzung

Im vorangegangenen Abschnitt wurde ein zielorientierter residualer Fehlerschätzer basierend auf einem dualen Hilfsproblem hergeleitet. Nun wird mittels glättungsbasierten Methoden ein zielorientierter Fehlerindikator entwickelt, der als gewichtete bzw. lokale Erweiterung des klassischen globalen gradientenbasierten Fehlerindikators von Zienkiewicz & Zhu, [151, 152, 153] betrachtet werden kann.

Analog zu dem zielorientierten residuenbasierten Ansatz des vorangegangenen Abschnitts wird auch hier von der lokalen Form der Fehlergleichung ausgegangen. Dabei nutzt man den folgenden Satz aus:

Satz: Die Bilinearform des Fehlers läßt sich in Abhängigkeit des Fehlers des primalen und des dualen Problems darstellen als:

$$a(\boldsymbol{e}^{d}, \boldsymbol{e}) = (\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]). \tag{3.121}$$

Beweis: Die schwache Form des dualen Problems läßt sich angeben mit:

$$a(\boldsymbol{u}^d, \boldsymbol{v}) = ([\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}], \boldsymbol{v}) \qquad \forall \, \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}.$$
 (3.122)



Abbildung 3.9: Numerische Berechnung von Gradienten zweiter Ordnung

Wählt man nun in Gl. (3.122) den Fehler des primalen Problems als Testfunktion des dualen Problems, also $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h = \boldsymbol{e}$, dann folgt:

$$a(\boldsymbol{u}^d, \boldsymbol{e}) = ([\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}], \boldsymbol{e}). \tag{3.123}$$

Unter Zuhilfenahme der Galerkin-Orthogonalität des dualen Problems folgt dann:

$$a(\boldsymbol{u}^{d} - \boldsymbol{u}_{h}^{d}, \boldsymbol{e}) = a(\boldsymbol{e}^{d}, \boldsymbol{e}) = ([\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}], \boldsymbol{e}) \quad \Box \quad (3.124)$$

Desweiteren wird im folgenden die Existenz zweier Ungleichungen angenommen. Qualitativ sagen die getroffenen Annahmen (3.125) und (3.126) aus, daß sowohl eine "verbesserte" duale Lösung $\sigma^*(u^d)$ als auch eine "verbesserte" primale Lösung $\varepsilon^*(u)$ existiert. Dies kann zur Kontruktion eines Fehlerindikators verwendet werden:

$$\left(\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^d) - \boldsymbol{\sigma}^*(\boldsymbol{u}^d), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h)\right) \leq C_1 \left(\boldsymbol{\sigma}^*(\boldsymbol{u}^d) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h^d), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h)\right), \ C_1 \ll 1, \ (3.125)$$

$$\left(\boldsymbol{\sigma}^{*}(\boldsymbol{u}^{d}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}^{d}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}^{*}(\boldsymbol{u})\right) \leq C_{2} \left(\boldsymbol{\sigma}^{*}(\boldsymbol{u}^{d}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}^{d}), \boldsymbol{\varepsilon}^{*}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_{h})\right), C_{2} \ll 1.$$
(3.126)

Mit der lokalen Form der Fehlergleichung (3.121) und unter Anwendung der getroffenen Annahmen (3.125) und (3.126) erhält man die folgende Abschätzung für die zu kontrollierende Fehlergröße:

$$(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{j}) = a(\boldsymbol{u}^{d} - \boldsymbol{u}_{h}^{d}, \boldsymbol{e})$$

$$= (\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^{d}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}^{d}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_{h}))$$

$$= (\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^{d}) - \boldsymbol{\sigma}^{*}(\boldsymbol{u}^{d}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_{h})) + (\boldsymbol{\sigma}^{*}(\boldsymbol{u}^{d}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}^{d}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_{h}))$$

$$\leq (1 + C_{1}) (\boldsymbol{\sigma}^{*}(\boldsymbol{u}^{d}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}^{d}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_{h}))$$

$$\leq (1 + C_{1}) (\boldsymbol{\sigma}^{*}(\boldsymbol{u}^{d}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}^{d}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}^{*}(\boldsymbol{u})) + (1 + C_{1}) (\boldsymbol{\sigma}^{*}(\boldsymbol{u}^{d}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}^{d}), (\boldsymbol{\varepsilon}^{*}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_{h}))$$

$$\leq (1 + C_{1} + C_{2} + C_{1}C_{2}) (\boldsymbol{\sigma}^{*}(\boldsymbol{u}^{d}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}^{d}), \boldsymbol{\varepsilon}^{*}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_{h})). \quad (3.127)$$

Unter der getroffenen Voraussetzung, daß die Ungleichungen (3.125) und (3.126) existieren, kann ein lokaler Fehlerindikator definiert werden als:

$$\eta_{Z_2,GO,T} := \int_T (\boldsymbol{\sigma}^*(\boldsymbol{u}^d) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h^d)) : (\boldsymbol{\varepsilon}^*(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h)) \, \mathrm{d}v.$$
(3.128)

Auch hier ist in Analogie zu dem zielorientierten residuenbasierten Fehlerschätzer (3.113) die Aufteilung in Fehler des primalen Problems und in Fehler des dualen Problems – den Gewichten – möglich:

 $\eta_{Z_2,GO,T} :=$ Gewichte × Fehler des primalen Problems. (3.129)

Der globale Fehlerindikator ergibt sich wiederum als Summe der lokalen elementbezogenen Indikatoren:

$$\eta_{Z_2,GO} := \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_{Z_2,GO,T}.$$
(3.130)

Die approximierten Spannungs- und Verzerrungsfelder $\sigma^*(\boldsymbol{u}^d)$ und $\boldsymbol{\varepsilon}^*(\boldsymbol{u})$ können in Nachlaufrechnungen mittels Glättungsalgorithmen, lokaler bzw. globaler L_2 -Projektion oder der SPR-Methode bestimmt werden, siehe Abschnitt 3.1.3. Der große Vorteil dieses energienormbasierten Indikators liegt in der sehr einfachen Implementierung in bestehende adaptive Finite-Element-Programme. Geht man davon aus, daß der o.g. Algorithmus zur Berechnung der Spannungs- und Verzerrungsfelder $\sigma^*(\boldsymbol{u}^d)$ und $\boldsymbol{\varepsilon}^*(\boldsymbol{u})$ vorhanden ist, dann muß für das linear-elastische Problem nur eine weitere rechte Seite des Gleichungssystems, der duale Lastfall, aufgestellt werden und in die abgespeicherte dreieckszerlegte Steifigkeitsmatrix rückwärts eingesetzt werden⁸. Die Spannungsfehler des dualen Problems und die Verzerrungsfehler des primalen Problems, oder natürlich auch umgekehrt, lassen sich anschließend lokal auf Ebene einzelner Finiter Elemente auswerten.

Trotz der oben angeführten Punkte ist die Interpretation lokaler Energienormfehler, also des Fehlers der Energie in einem Teilgebiet des betrachteten Problems, schwierig. Einen relativen Energienormfehler könnte man beispielsweise technisch ohne Probleme konstruieren, indem man die Fehlerenergie relativ zur Gesamtenergie im jeweiligen Teilgebiet betrachtet. Die praktische physikalische Aussage dieses Wertes ist dagegen fraglich. Diese berechnete Fehlergröße lässt zwar eingeschränkt qualitative Rückschlüsse auf die sekundären Größen zu, z. B. auf Spannungen und Verzerrungen, eine quantitative Übertragung ist dagegen im allgemeinen nicht möglich. Dies wird besonders deutlich, wenn man die später vorgestellten numerischen Beispiele betrachtet. Versteht man die berechnete Fehlergröße allerdings nur als einen Indikator für eine weitere Netzverfeinerung im Rahmen eines adaptiven Finite-Element-Prozesses, so kann damit durchaus eine qualitative Verbesserung der kontrollierten Größen im betrachteten Teilgebiet erreicht werden. Allerdings leidet darunter die Effizienz des Verfahrens, was ebenfalls in den später vorgestellten numerischen Beispielen ersichtlich wird.

Des weiteren ist zu bemerken, daß sich der energienormbasierte Fehlerindikator (3.130)leicht in einen L_2 -Norm-Indikator in Spannungs- oder Verzerrungsgrößen umformulieren läßt. Die konzeptionelle Idee, welche hinter der Entwicklung dieses Fehlerindikators steckt, entspricht der vorherigen; allerdings müssen die getroffenen Annahmen Gl. (3.125) und (3.126) entsprechend der Fehlernorm nun für Spannungen bzw. Verzerrungen umformuliert werden:

$$\left(\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^d) - \boldsymbol{\sigma}^*(\boldsymbol{u}^d), \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h)\right) \leq C_1\left(\boldsymbol{\sigma}^*(\boldsymbol{u}^d) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h^d), \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h)\right), \ C_1 \ll 1, (3.131)$$

$$\left(\boldsymbol{\sigma}^{*}(\boldsymbol{u}^{d}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}^{d}), \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\sigma}^{*}(\boldsymbol{u})\right) \leq C_{2}\left(\boldsymbol{\sigma}^{*}(\boldsymbol{u}^{d}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}^{d}), \boldsymbol{\sigma}^{*}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h})\right), C_{2} \ll 1. \quad (3.132)$$

Entsprechend dem Vorgehen in der Abschätzung (3.127) folgt daraus ein lokaler Spannungs- bzw. Verzerrungsindikator:

$$\eta_{Z_2^{\sigma},GO,T} := \int_T (\boldsymbol{\sigma}^*(\boldsymbol{u}^d) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h^d)) : (\boldsymbol{\sigma}^*(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h)) \, \mathrm{d}v.$$
(3.133)

⁸Dies setzt natürlich voraus, daß ein *direkter* Gleichungslöser verwendet wird. Setzt man bei großen Gleichungssystemen allerdings effizientere (z. B. *iterative*) Löser ein, so erfordert auch die duale Lösung einen weiteren iterativen Lösungsprozess. Dadurch wird der numerische Mehraufwand durch die Fehlerabschätzung enorm gesteigert.

Die Summe der lokalen elementbezogenen Indikatoren ergibt den globalen Indikator für den Spannungs- bzw. Verzerrungsfehler:

$$\eta_{Z_2^{\sigma},GO} := \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_{Z_2^{\sigma},GO,T}.$$
(3.134)

3.2.4 Zielorientierte Fehlerabschätzung in der Energienorm

Im Gegensatz zu den bislang vorgestellten zielorientierten Fehlerschätzern, mit Ausnahme des Energienormschätzers im vorangegangenen Abschnitt, wurde sowohl das betrachtete Fehlerfunktional $(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}])$ als auch die kontrollierte Fehlernorm neu formuliert. Das Ergebnis waren Fehlerschätzer in problemspezifischen Normen.

In diesem Abschnitt wird gezeigt, daß auch mit Hilfe der klassischen energienormbasierten Fehlerschätzer zielorientierte bzw. lokale Fehlerschätzer entwickelt werden können. Die Grundlage bildet wiederum die lokale Form der Fehlergleichung, formuliert in der Bilinearform des Fehlers, vgl. Satz (3.121):

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \boldsymbol{k}]) = a(\boldsymbol{e}^d, \boldsymbol{e}). \tag{3.135}$$

Durch einfache Umformung läßt sich die lokale Form der Fehlergleichung in den Energienormen des primalen und dualen Problems ausdrücken:

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]) = a(\boldsymbol{e}^d, \boldsymbol{e}) = |||\boldsymbol{e}^d||| \, |||\boldsymbol{e}||| \, \cos\varphi.$$
(3.136)

Der Kosinus des Winkels φ zwischen dem Energienormfehler des dualen und primalen Problems läßt sich leicht nach oben hin abschätzen. Durch die Wahl lokaler Ansatzfunktionen können die beiden Energienormen als Summe der Energienormen der einzelnen Finiten Elemente dargestellt werden. Damit folgt eine numerisch leicht auswertbare Darstellung der Linearform des Fehlers:

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]) = |||\boldsymbol{e}^{d}||| \, |||\boldsymbol{e}||| \, \cos \varphi \le \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} |||\boldsymbol{e}^{d}||| \, |||\boldsymbol{e}|||.$$
(3.137)

Die in Gl. (3.137) auftretenden Energienormen lassen sich nun mit den vorgestellten, klassischen Energienormschätzern Gl. (3.66), (3.24) auswerten:

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]) \leq \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_{E2, GO, T} := \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_T^d \eta_T.$$
(3.138)

Auf Ungleichung (3.138) basierende Fehlerschätzer findet man in den Untersuchungen von Babuška et al. [13], Cirak & Ramm [35, 37], Prudhomme & Oden [113], Ainsworth & Oden [5], Ohnimus et al. [106] und Tottenham [140].

Bezüglich der Auswertung der Fehlergleichung (3.136) sind die Überlegungen in den Arbeiten von *Prudhomme & Oden* [113] und *Ohnimus et al.* [106] interessant. Darin wird durch eine zusätzliche Betrachtung weiterer lokaler Hilfsprobleme eine schärfere Fehlerabschätzung mit oberen und unteren Fehlerschranken ermöglicht.

Im Gegensatz zu der Abschätzung (3.137) mittels der *Cauchy-Schwarz*-Ungleichung kann die Parallelogrammidentität für symmetrische Bilinearformen auch direkt auf Gleichung (3.135) angewandt werden:

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]) = a(\boldsymbol{e}^d, \boldsymbol{e}) = \frac{1}{4} |||\alpha \, \boldsymbol{e} + \frac{1}{\alpha} \, \boldsymbol{e}^d|||^2 - \frac{1}{4} |||\alpha \, \boldsymbol{e} - \frac{1}{\alpha} \, \boldsymbol{e}^d|||^2.$$
(3.139)

Die Konstante α in Gl. (3.139) wird größer als Null gewählt. Im weiteren wird angenommen, daß die folgenden oberen und unteren Abschätzungen η_{low}^+ , η_{up}^+ , η_{low}^- und $\eta_{up}^$ existieren, so daß folgende Ungleichungen erfüllt sind:

$$\eta_{low}^+ \leq |||\alpha \boldsymbol{e} + \frac{1}{\alpha} \boldsymbol{e}^d||| \leq \eta_{up}^+, \qquad (3.140)$$

$$\eta_{low}^{-} \leq |||\alpha \, \boldsymbol{e} - \frac{1}{\alpha} \, \boldsymbol{e}^{d}||| \leq \eta_{up}^{-}.$$
(3.141)

Falls die Ungleichungen (3.140) und (3.141) erfüllt sind, folgt mit Gleichung (3.139) eine Darstellung des kontrollierten Fehlers, der unteren und oberen Schrankeneigenschaften standhält:

$$\frac{1}{4}(\eta_{low}^{+})^{2} - \frac{1}{4}(\eta_{up}^{-})^{2} \leq (\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}]) \leq \frac{1}{4}(\eta_{up}^{+})^{2} - \frac{1}{4}(\eta_{low}^{-})^{2}.$$
(3.142)

Folgt man den Ausführungen von Prudhomme & Oden [113], so läßt sich die Ungleichung (3.142) mit den bereits bekannten globalen impliziten residuenbasierten Fehlerschätzern auswerten. Diese wendet man nun sowohl auf das primale Problem mit dem Feld der Primärvariablen \boldsymbol{u}_h als auch auf das duale Problem mit den Verschiebungen \boldsymbol{u}_h^d an. Für die schwachen Formen der Fehlergleichungen gilt:

$$a(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{v}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} a(\boldsymbol{\vartheta}_T, \boldsymbol{v})_T \qquad \forall \, \boldsymbol{v} \in \mathcal{V},$$
 (3.143)

$$a(\boldsymbol{e}^{d},\boldsymbol{v}) = \sum_{T\in\mathcal{T}_{h}} a(\boldsymbol{\vartheta}_{T}^{d},\boldsymbol{v})_{T} \qquad \forall \, \boldsymbol{v}\in\mathcal{V}, \qquad (3.144)$$

mit den Lösungen der lokalen Subprobleme $\boldsymbol{\vartheta}_T, \boldsymbol{\vartheta}_T^d : T \in \mathcal{T}_h$ für das primale und duale Problem, siehe Gl. (3.32).

Da sich die einzelnen schwachen Formen der Fehlergleichungen additiv in einzelne Subprobleme zerlegen lassen, folgt daraus schließlich, daß auch Linearkombinationen davon der genannten Aufteilung genügen:

$$a(\alpha \,\boldsymbol{e} + \frac{1}{\alpha} \,\boldsymbol{e}^d, \boldsymbol{v}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} a(\alpha \,\boldsymbol{\vartheta}_T + \frac{\boldsymbol{\vartheta}_T^d}{\alpha}, \boldsymbol{v})_T \qquad \forall \, \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}, \quad (3.145)$$

$$a(\alpha \,\boldsymbol{e} - \frac{1}{\alpha} \,\boldsymbol{e}^d, \boldsymbol{v}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} a(\alpha \,\boldsymbol{\vartheta}_T - \frac{\boldsymbol{\vartheta}_T^d}{\alpha}, \boldsymbol{v})_T \qquad \forall \, \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}.$$
(3.146)

Auf die Gleichungen (3.145) sowie (3.146) läßt sich zuerst die Cauchy-Schwarz-Ungleichung für Integrale

$$|a(\alpha \boldsymbol{e} \pm \frac{1}{\alpha} \boldsymbol{e}^{d}, \boldsymbol{v})| \leq \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} |||\alpha \boldsymbol{\vartheta}_{T} \pm \frac{\boldsymbol{\vartheta}_{T}^{d}}{\alpha} |||_{T} |||\boldsymbol{v}|||_{T}$$
(3.147)

und anschließend die Cauchy-Schwarz-Ungleichung für endliche Summen anwenden:

$$|a(\alpha \boldsymbol{e} \pm \frac{1}{\alpha} \boldsymbol{e}^{d}, \boldsymbol{v})| \leq \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} |||\alpha \boldsymbol{\vartheta}_{T} \pm \frac{\boldsymbol{\vartheta}_{T}^{d}}{\alpha}|||_{T}^{2} \right\}^{1/2} |||\boldsymbol{v}|||.$$
(3.148)

Wählt man für die Testfunktionen nun die gewichtete Kombination des Fehlers, mit der man anschließend sowohl die rechte als auch linke Seite der Ungleichung kürzen kann, so erhält man als Ergebnis die bislang nur angenommene Existenz der oberen Schranken (3.140) und (3.141):

$$|||\alpha \boldsymbol{e} + \frac{1}{\alpha} \boldsymbol{e}^d|||^2 \leq \sum_{T \in \mathcal{T}_h} |||\alpha \boldsymbol{\vartheta}_T + \frac{\boldsymbol{\vartheta}_T^d}{\alpha}|||_T^2 := (\eta_{up}^+)^2, \qquad (3.149)$$

$$|||\alpha \boldsymbol{e} - \frac{1}{\alpha} \boldsymbol{e}^{d}|||^{2} \leq \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} |||\alpha \boldsymbol{\vartheta}_{T} - \frac{\boldsymbol{\vartheta}_{T}^{d}}{\alpha}|||_{T}^{2} := (\eta_{up}^{-})^{2}.$$
(3.150)

Dem Vorschlag von Ainsworth & Oden [5] folgend, läßt sich der Skalierungsparameter α aus einem Quotienten der Lösungen der lokalen Probleme für das primale und duale Problem bestimmen. Aus der Forderung

$$\sum_{T \in \mathcal{T}_h} |||\alpha \,\boldsymbol{\vartheta}_T|||^2 \stackrel{!}{=} \sum_{T \in \mathcal{T}_h} |||\frac{1}{\alpha} \,\boldsymbol{\vartheta}_T^d|||^2 \tag{3.151}$$

folgt

$$\alpha^4 = \frac{\sum_{T \in \mathcal{T}_h} |||\boldsymbol{\vartheta}_T|||^2}{\sum_{T \in \mathcal{T}_h} |||\boldsymbol{\vartheta}_T|||^2}.$$
(3.152)

Die noch fehlenden unteren Schranken lassen sich aus einer einfachen Überlegung an der gewichteten schwachen Form der Fehlergleichung bestimmen. Durch Anwendung der *Cauchy-Schwarz*-Ungleichung erkennt man, daß sich die Energienorm des gewichteten Fehlers nach unten abschätzen läßt:

$$|||\alpha \boldsymbol{e} + \frac{1}{\alpha} \boldsymbol{e}^{d}||| \geq \frac{a(\alpha \boldsymbol{e} + \frac{\boldsymbol{e}^{d}}{\alpha}, \boldsymbol{\xi})}{|||\boldsymbol{\xi}|||}, \qquad (3.153)$$

$$|||\alpha \boldsymbol{e} - \frac{1}{\alpha} \boldsymbol{e}^{d}||| \geq \frac{a(\alpha \boldsymbol{e} - \frac{\boldsymbol{e}^{d}}{\alpha}, \boldsymbol{\xi})}{|||\boldsymbol{\xi}|||}.$$
(3.154)

Der Term auf der rechten Seite der Abschätzung (3.153) und (3.154) stellt die kontinuierliche schwache Form der Fehlergleichung dar, welche wieder mit lokalen Hilfsproblemen für jede Funktion $\boldsymbol{\xi} \in \mathcal{V}$ mit $\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}$ gelöst werden kann. Sowohl der Zähler als auch der Nenner auf der rechten Seite der Ungleichung können numerisch ausgewertet werden. Die unteren Schranken η_{low}^+ und η_{low}^- sind damit berechenbar.

3.2.5 Ein einfacher zielorientierter Fehlerindikator

Im vorangegangen Abschnitt wurde gezeigt, daß mit Hilfe bekannter globaler energienormbasierter Fehlerschätzer die Kontrolle ausgewählter Größen im Gesamtgebiet Ω , aber auch in Teilgebieten $\overline{\Omega}$ möglich ist. Wichtig zu erwähnen ist, daß diese Fehlerkontrolle nicht nur qualitativer Natur ist, sondern auch quantitativ meßbar ist. Der meßbare Fehler in der Energienorm läßt sich sowohl nach oben als auch nach unten hin abschätzen. Es ist natürlich offensichtlich, daß eine Fehlerkontrolle mittels oberer und unterer Schrankeneigenschaften die Lösung verschiedenster Hilfsprobleme erfordert, welche, abhängig vom Typ des betrachteten Problems, den numerischen Aufwand sehr stark erhöhen können. Neben der numerischen Lösung des dualen Problems sind noch die lokalen Hilfsprobleme für die oberen Schranken (3.149) und (3.150) und die unteren Schranken (3.153) und (3.154) zu lösen. Obwohl es sich dabei um lokale Probleme, d. h. Probleme auf einem Patch von Elementen oder auf einem einzelnen Finiten Element handelt, ist der Aufwand zur Bestimmung im Gleichgewicht stehender Randspannungen bei der Wahl lokaler Neumann-Probleme nicht zu vernachlässigen.

Aus diesem Grund wird nochmals auf eine weitere mögliche, aus numerischer Sicht weniger aufwendige Auswertung der Gleichung (3.136) mit den klassischen energienormbasierten Fehlerschätzern hingewiesen, vgl. (3.138):

$$(oldsymbol{e}, [oldsymbol{j}; oldsymbol{ar{k}}]) \leq \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_{E2, GO, T} := \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_T^d \, \eta_T.$$

Durch die Anwendung der Cauchy-Schwarz-Ungleichung ist nicht zu erwarten, daß die oberen Schrankeneigenschaften des Fehlerschätzer $\eta_{E2,GO}$ für beliebige globale Energienormschätzer η bzw. η^d sehr scharf sind. Auf diesen Punkt wird später auch in den numerischen Beispielen noch einmal gezielt eingegangen werden. Dies ist allerdings, wie auch im vorangegangenen Abschnitt gezeigt, durch eine andere technische Auswertung der Gleichung (3.136) und die gezielte Wahl geeigneter Schätzer leicht zu verbessern.

Der große Vorteil der Auswertung mit Standard-Energienormschätzern steckt in der Flexibilität der Methode. Beispielsweise wurde nach der oben genannten Methode ein zielorientierter Fehlerschätzer für geometrisch nichtlineare Schalenprobleme, vgl. *Cirak* [34], *Cirak* & Ramm [36], aber auch für Plastizitätsprobleme, vgl. *Cirak* & Ramm [37] entwickelt.

Wie schon erwähnt, ist die lokale Kontrolle beliebiger Größen nicht problemlos interpretierbar. Beispielsweise müssen relative Fehlerkriterien in adaptiven Finite-Element-Rechnungen reformuliert werden, damit sinnvolle Netzverfeinerungsstrategien möglich werden. Diese Problematik wird allerdings in diesem Abschnitt nicht weiter vertieft, vielmehr wird auf das entsprechende Kapitel in dieser Arbeit verwiesen.

3.3 Zusammenfassung

Nachdem in diesem Kapitel die klassischen globalen Energienormschätzer entwickelt und beschrieben wurden, folgte eine umfassende Erweiterung auf lokale oder allgemeiner ausgedrückt auf zielorientierte Fehlerschätzer. Es wurde hierbei versucht, ein möglichst allgemeines Konzept zu entwickeln, welches auf verschiedenste physikalische Probleme mit unterschiedlichsten Typen partieller Differentialgleichungen erweiterbar ist.

Zum Abschluß dieses Kapitels werden in einer zusammenfassenden Übersicht die entwickelten globalen Fehlerschätzer den lokalen oder zielorientierten Fehlerschätzern gegenübergestellt, siehe Tabelle (3.1).

Abschließend wird noch eine Beurteilung der vorgestellten Fehlerindikatoren vorgenommen, siehe Tabelle (3.2) und (3.3). Die vergebenene Beurteilung erfolgt hierbei in fünf Stufen:

 $(-) - [(\text{sehr}) \text{ gering}] \longrightarrow \circ [\text{durchschnittlich}] \longrightarrow (+) + [(\text{sehr}) \text{ hoch}].$

Diese Bewertung hat ausschließlich phänomenologischen Charakter und ist durch die praktische Erfahrung in numerischen Experimenten geprägt. Diese Beurteilung hängt aus die-

	Globale Fehlerkontrolle	zielorientierte Fehlerkontrolle (zusätzl. Berechnung von \boldsymbol{u}_h^d)
Explizit	$\frac{\text{Gl. } (\textbf{3.24}):}{ \boldsymbol{e} ^2} = (\text{Res}(\boldsymbol{u}_h), \boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_h)$	$\frac{\text{Gl. } (3.115):}{ \boldsymbol{e}(\bar{\boldsymbol{x}}) = (\text{Res}(\boldsymbol{u}_h), \boldsymbol{u}^d - \boldsymbol{u}_h^d)}$
Implizit	$\begin{array}{l} \underline{\mathrm{Gl.}\ (\textbf{3.39}):}\\ \boldsymbol{e} ^2 = (\mathrm{Res}(\boldsymbol{u}_h), \boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_h)\\ + \ \mathrm{lokales}\ \mathrm{RWP}\ \mathrm{für}\ \boldsymbol{u} \ \rightarrow \ \boldsymbol{\vartheta}_T \end{array}$	$\begin{array}{l} \displaystyle \frac{\text{Gl. }(\textbf{3.142}):}{ \boldsymbol{e}(\bar{\boldsymbol{x}}) = (\text{Res}(\boldsymbol{u}_h), \boldsymbol{u}^d - \boldsymbol{u}_h^d) \\ + \text{ lokales RWP für } \boldsymbol{u}^d \ \rightarrow \ \boldsymbol{\vartheta}_T^d \end{array}$
Gradienten- basiert	$egin{aligned} rac{ ext{Gl. (3.59):}}{ m{e} ^2}pprox \ (m{\sigma}^*(m{u})-m{\sigma}(m{u}_h),m{\epsilon}^*(m{u})-m{\epsilon}(m{u}_h)) \end{aligned}$	$ \begin{array}{l} \displaystyle \frac{\mathrm{Gl.} \; (3.130):}{ \boldsymbol{e}(\bar{\boldsymbol{x}}) \approx} \\ \displaystyle (\boldsymbol{\sigma}^*(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h), \boldsymbol{\epsilon}^*(\boldsymbol{u}^d) - \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{u}_h^d)) \end{array} $

Tabelle 3.1: Übersicht globaler und zielorientierter Fehlerschätzer

	Numerischer Aufwand	Flexibilität	Effizienz
Explizite Fehlerindikatoren		_	+
Implizite Fehlerindikatoren	0	0	+ +
Gradientenbasierte Fehlerindikatoren	_	0	0

Tabelle 3.2: Bewertung der globalen Fehlerkontrolle

sem Grund auch stark von algorithmischen "Details" ab, die im Rahmen der hier vorliegenden Arbeit erläutert werden.

Bewertet wird der numerische Aufwand, der allein für die Fehlerabschätzung eines numerischen Problems notwendig ist. Nicht berücksichtigt wird die notwendige Abschätzung der Interpolationskonstanten C_i . Diese Abschätzung ist unabhängig vom betrachteten Randwertproblem, siehe Gl. (3.18).

Einen weiteren Punkt stellt die Bewertung der Effizienz der untersuchten Indikatoren bezüglich des Effektivitsindexes Θ dar, siehe Gl. (3.25).

Des weiteren wird die Flexibilität des zugrundeliegenden Konzeptes der Fehlerabschätzung bewertet. Hierbei spielt also weniger der Fehlerschätzer selber, als das zugrundeliegende mathematische Konzept der Herleitung eine Rolle. Beurteilt werden soll dies trotz allem, da hiermit z. B. die Erweiterbarkeit des Konzeptes auf hyperbolische oder parabolische partielle Differentialgleichungen bewertet wird.

Grundsätzlich läßt sich in den Tabellen (3.2) und (3.3) erkennen, daß im Vergleich zu einer globalen Fehlerkontrolle der numerische Aufwand einer zielorientierten Fehlerkontrolle höher ist. Alle zielorientierte Fehlerschätzer haben die Eigenschaft, daß ein globales duales

	Numerischer Aufwand	Flexibilität	Effizienz
Residuenbasierte Fehlerkontrolle			
Gl. (3.115)	+	+ +	+ +
Gradientenbasierte Fehlerindikatoren			
Gl. (<mark>3.130</mark>)	+	+	+
Fehlerkontrolle in der Energienorm			
nach Cirak Gl. (3.138)	o (+)	0	_
nach Prudhomme & Oden Gl. (3.142)	+ +	0	+ +

Tabelle 3.3: Bewertung der zielorientierten Fehlerkontrolle

Problem numerisch zu lösen ist. Falls direkte Gleichungslöser verwendet werden, muß für selbst-adjungierte Randwertprobleme das System nur für einen weiteren Lastfall – den dualen Lastfall – gelöst werden. Das erfordert natürlich entsprechenden Kernspeicher zur Abspeicherung der triangulisierten Steifigkeitsmatrix des primalen Problems. Verwendet man iterative Gleichungslöser versagt ein solches Vorgehen, und das duale Gleichungssystem ist entsprechend dem primalen Problem zu behandeln.

Werden implizite globale oder zielorientierte Fehlerschätzer, siehe Gl. (3.39) oder (3.142), verwendet, steigt der numerische Aufwand verglichen mit einem expliziten Vorgehen nochmals, da desweiteren zwei lokale Teilprobleme auf einem Elementpatch zu lösen sind.

Abschließend bleibt zu sagen, daß man trotz des erhöhten numerischen Aufwands mit einem zielorientierten Fehlerindikator ein äußerst flexibles Werkzeug an der Hand hat, mit dem es möglich ist, das adaptive Verfahren bezüglich beliebiger lokaler und globaler Fehlermaße effizient zu steuern.

Kapitel 4

Fehlerabschätzung für das nichtlineare Anfangsrandwertproblem

Im aktuellen Kapitel werden die für die lineare Elastizititätstheorie entwickelten lokalen bzw. zielorientierten Methoden der Fehlerabschätzung auf materiell nichtlineare Anfangsrandwertprobleme übertragen.

Nachdem der kontinuums-thermodynamische Rahmen bereitgestellt ist, werden in einem allgemein gehaltenen Vorgehen adaptive Finite-Element-Methoden zur Fehlerabschätzung im Tangentialraum vorgestellt. Den Ausgangspunkt der Fehlerabschätzung bildet wiederum eine schwache Form der Fehlergleichung und eine entsprechende Formulierung eines (linearisierten) dualen Problems. Anschließend wird eine Erweiterung dieses Konzeptes diskutiert, indem eine gekoppelte Raum-Zeit-Fehlerbetrachtung für die vorgestellten Materialklassen vorgenommen wird.

4.1 Die Prandtl-Reuss-Plastizität

Eine große Klasse von Materialien zeigt auch bei kleinen Deformationen ausgeprägtes nichtlineares Verhalten. Metallische Werkstoffe, wie z. B. Aluminium oder Stahl, aber auch viele kohäsive Reibungsmaterialien wie Beton oder geotechnische Materialien, lassen eine Beschreibung mittels eines phänomenologischen elasto-plastischen Materialmodells zu. In der Plastizitätstheorie wird davon ausgegangen, daß plastisches Fließen ein irreversibler Prozeß ist, der durch ein externes Verzerrungsfeld und interne Variablen, nämlich den plastischen Verzerrungen und weiteren Verfestigungsparametern, beschrieben werden kann.

Im Gegensatz zur Viskoplastizität spielt dabei die Belastungsgeschwindigkeit keine Rolle. In diesem Sinne ist das klassische *Prandtl-Reuss*-Plastizitätsmodell eine ratenunabhängige Materialformulierung.

Für einen weiteren Einblick in die Plastizitätstheorie sei z. B. auf die Arbeiten von Nádai [100], Hill [64], Prager [112], Lemaître & Chaboche [84], Lubliner [88] und Miehe [94] verwiesen. Im folgenden soll das Modell der Prandtl-Reuss-Plastizität angegeben werden.

Die Verzerrungsraten lassen sich additiv in einen elastischen und plastischen Anteil zerlegen. Die Gesamtverzerrungen ε entsprechen dem symmetrischen Anteil des Verschiebungsgradienten:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{el} + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl} \qquad \text{in} \qquad \Omega, \tag{4.1}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^{sym} \boldsymbol{u}$$
 in Ω . (4.2)

Das Anfangsrandwertproblem der ratenabhängigen *Prandtl-Reuss*-Plastizität setzt sich aus der Impulsbilanz im Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, n = 2, 3, siehe auch Gleichungen (2.25) - (2.34),

$$-\operatorname{div}\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{f} \quad \text{in} \quad \Omega \times T, \tag{4.3}$$

und den Verschiebungsrandbedingungen \bar{u} auf dem Dirichlet-Rand Γ_D bzw. den Spannungsrandbedingungen \bar{t} auf dem Neumann-Rand Γ_N zusammen, vgl. Abbildung 2.2:

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{\bar{u}} \quad \text{auf} \quad \Gamma_D \times T, \quad (4.4)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = \bar{\boldsymbol{t}}$$
 auf $\Gamma_N \times T$. (4.5)

Die externe primäre Größe dieses Problems ist die Verschiebung \boldsymbol{u} . Das Raum-Zeit-Gebiet $\Omega \times T$ bzw. $\Gamma_{N,D} \times T$ in dem der Prozeß abläuft, wird durch das räumliche Gebiet Ω mit dem Rand $\partial \Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ und dem zeitlichen Gebiet $T = [t_0, \bar{t}]$ aufgespannt. Der thermodynamische Prozeß wird durch den symmetrischen Anteil des Gradienten von $\boldsymbol{u} \longrightarrow \boldsymbol{\varepsilon}$ und den weiteren internen Variablen gesteuert. Das hier beschriebene Modell beschränkt sich auf eine isotrope Verfestigung, das heißt eine mögliche Aufweitung der Fließfläche. Damit setzt sich der Satz der internen Variablen aus den plastischen Verzerrungen $\boldsymbol{\varepsilon}^{pl}$ und der skalaren plastischen Vergleichsverzerrung α , welche die isotrope Verfestigung beschreibt, zusammen.

Zur weiteren Beschreibung des Modells werden Evolutionsgleichungen für diese internen Größen benötigt:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl} = f(\boldsymbol{\sigma}) \qquad \text{in} \qquad \Omega \times T,$$
(4.6)

$$\dot{\alpha} = f(\phi) \qquad \text{in} \qquad \Omega \times T.$$
 (4.7)

Zu diesem Zeitpunkt werden die Evolutionsgleichungen der Verzerrungsgrösen ε^{pl} und α nur insofern spezifiziert, als daß sie über eine Funktion einer energetisch dualen Größe bestimmt werden. Damit stellt ϕ eine skalarwertige (Fließ-)Spannung dar.

Anfangsbedingungen zum Zeitpunkt $t = t_0$ für die plastischen Verzerrungen ε^{pl} und die plastischen Vergleichsverzerrungen α vervollständigen das Anfangsrandwertproblem:

$$\left.\boldsymbol{\varepsilon}^{pl}\right|_{t=0} = \mathbf{0} \qquad \text{bei} \quad \Omega \times t_0, \tag{4.8}$$

$$\alpha|_{t=0} = 0 \qquad \text{bei} \qquad \Omega \times t_0. \tag{4.9}$$

Eine Bestimmungsgleichung für die *Cauchy*-Spannung σ sowie Restriktionen für die internen Variablen ε^{pl} und α erhält man durch eine Auswertung der Entropieungleichung in Form der *Clausius-Duhem*-Ungleichung (2.24):

$$\mathcal{D} := \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \dot{\Psi} \ge 0. \tag{4.10}$$

Die freie Helmholtz-Energie $\Psi = \hat{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}, \alpha)$ kann für das vorgestelle Plastizitätsmodell im Rahmen einer Konstitutivannahme additiv in zwei Anteile zerlegt werden. Der erste Anteil $\hat{\Psi}^{ext}(\boldsymbol{\varepsilon}^{el})$ hängt dabei von dem elastischen Anteil der Verzerrungen ab. Der zweite Anteil $\hat{\Psi}^{int}(\alpha)$ ist durch die (isotrope) Verfestigung charakterisiert:

$$\Psi = \hat{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}, \alpha) = \hat{\Psi}^{ext}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}) + \hat{\Psi}^{int}(\alpha).$$
(4.11)

Die Rate der freien Helmholtz-Energie ergibt sich zu:

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \varepsilon} : \dot{\varepsilon} + \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \varepsilon^{pl}} : \dot{\varepsilon}^{pl} + \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \alpha} \dot{\alpha}.$$
(4.12)

Setzt man die Rate der freien Energie Ψ in die Clausius-Duhem-Ungleichung ein, so erhält man:

$$\mathcal{D} = \underbrace{\left[\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}\right]}_{(\mathbf{I})} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \underbrace{\left[\frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}}\right]}_{(\mathbf{II})} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl} - \underbrace{\left[\frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \boldsymbol{\alpha}}\right]}_{(\mathbf{III})} \dot{\boldsymbol{\alpha}} \ge 0.$$
(4.13)

Gemäß der Argumentation nach Coleman & Noll [40] und Coleman & Gurtin [39] resultiert daraus die Spannung σ sowie Restriktionen für die Evolutionsgleichungen in Form einer verbleibenden Restungleichung.

Der Klammerausdruck (I) muß für sich verschwinden. Dies liefert eine Bedingung für die Spannung:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \hat{\Psi}^{ext}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^{pl})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}) = \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^{el}.$$
(4.14)

C stellt den vierstufigen Elastizitätstensor dar, siehe Gl. (2.37). Nach Auswertung der partiellen Ableitung des zweiten Ausdrucks (II) erkennt man, daß dieser den bestimmten Spannungen σ (4.14) entspricht¹.

Der dritte Ausdruck (III) enthält mit der Ableitung der freien Energie nach der internen Variablen α die energetisch konjugierte Größe zur internen Variablen. Sie wird damit als interne Spannung bzw. Fließspannung ϕ eingeführt:

$$\phi := \frac{\partial \hat{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}, \alpha)}{\partial \alpha}.$$
(4.15)

Damit kann die Restungleichung in Form der *Dissipationsungleichung* formuliert werden. Die (innere) *plastische Dissipation* \mathcal{D}^{pl} darf dabei während des gesamten Prozeßverlaufs niemals negativ werden:

$$\mathcal{D}^{pl} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl} - \phi \, \dot{\alpha} \ge 0. \tag{4.16}$$

Im Rahmen des betrachteten Stoffgesetzes wird von einer nichtlinearen isotropen Verfestigungsfunktion ausgegangen. Die freien Energiefunktionen $\hat{\Psi}^{ext}$ und $\hat{\Psi}^{int}$ lassen sich

¹Hierbei wird von der konstitutiv vorgenommenen Annahme der additiven Zerlegung der freien Energie, Gl. (4.11) $\Psi = \hat{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}, \alpha) = \hat{\Psi}^{ext}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}) + \hat{\Psi}^{int}(\alpha)$, Gebrauch gemacht.

somit näher spezifizieren, wobei die additive Zerlegung der Prozeßvariablen $\varepsilon = \varepsilon^{el} + \varepsilon^{pl}$ ausgenutzt wird:

$$\hat{\Psi}^{ext}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}) = \frac{1}{2} \lambda \left(\operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{pl} \right) \right)^2 + \mu \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{pl} \right)^2, \tag{4.17}$$

$$\hat{\Psi}^{int}(\alpha) = \frac{1}{2}h\,\alpha^2 + (\sigma_{\infty} - \sigma_0)\left\{\alpha + \frac{1}{\omega}\left(\exp\left(-\omega\,\alpha\right) - 1\right)\right\}.$$
(4.18)

Das hier betrachtete Stoffgesetz enthält also sechs unabhängige Materialparameter. Die beiden elastischen Konstanten, hier die zwei Lamé-Konstanten λ und μ , beschreiben die Grundelastizität.

Das inelastische Materialverhalten wird durch die folgenden Parameter beschrieben: h ist der lineare Verfestigungsmodul, σ_0 die Anfangsfließspannung, σ_{∞} die Sättigungsspannung und ω der Verfestigungsexponent.

Der Satz interner Variablen enthält hier nur die plastischen Verzerrungen ε^{pl} und die interne skalare Variable α , die das isotrope Verfestigungsverhalten beschreibt und physikalisch eine skalare plastische Vergleichsverzerrung darstellt. Kinematische Verfestigung ist im Rahmen des *Prager-Ziegler*-Gesetzes, siehe *Simo & Hughes* [125], problemlos hinzuzufügen. Der Satz der internen Variablen, die die Verfestigung beschreiben, muß dann um eine weitere vektorwertige interne Variable β erweitert werden, die das Zentrum der Fließfläche beschreibt. Die interne Variable β wird auch als *back stress* oder "Rückspannung" bezeichnet.

Die Fließfunktion läßt sich als Differenz eines internen und eines externen Anteils darstellen. Der externe Anteil wird durch eine Vergleichsspannung $\Phi^{ext}(\boldsymbol{\sigma})$ beschrieben. Die Fließfunktion $\Phi^{int}(\phi(\alpha))$ stellt den internen Anteil dar:

$$\Phi = \Phi(\boldsymbol{\sigma}, \phi) = \Phi^{ext}(\boldsymbol{\sigma}) - \Phi^{int}(\phi).$$
(4.19)

Für eine isotrope nichtlineare Verfestigung läßt sich der interne und externe Anteil der Fließfunktion weiter spezifizieren. Im Rahmen dieser Arbeit wird dabei eine Von Mises-Fließfunktion [95] angenommen, die von der zweiten Invarianten des Spannungsdeviators abhängig ist:

$$\Phi^{ext}(\boldsymbol{\sigma}) = \|\operatorname{dev}\boldsymbol{\sigma}\|, \tag{4.20}$$

$$\Phi^{int}(\phi) = \sqrt{\frac{2}{3}} \left\{ \sigma_0 + h \alpha + (\sigma_\infty - \sigma_0)(1 - \exp(-\omega \alpha)) \right\}.$$
(4.21)

Im Rahmen des hier vorgestellten assoziierten *Prandtl-Reuss*-Plastizitätsmodells wird zur Auswertung der Dissipationsungleichung auf das *Postulat vom Maximum der plastischen Dissipation* zurückgegriffen². Die Auswertung der Dissipationsungleichung mit Hilfe dieses

² Man spricht von assoziierter Plastizität, wenn das plastische Potential mit der Fließfunktion Φ zusammenfällt. Die Fließrichtung entspricht dann genau einer Normalen auf die Fließfläche. Im Rahmen phänomenologischer Beobachtungen konnte festgestellt werden, daß für metallische Werkstoffe assoziierte Plastizitätsmodelle besonders gut zutreffen. Das Druck- und Zugverhalten metallischer Werkstoffe ist nahezu identisch, so daß sich für Fließfunktionen druckunabhängige Formulierungen wie das Tresca-Modell oder die nur von der zweiten Invarianten des Spannungsdeviators abhängige Von Mises-Fließfläche anbieten [95].
mathematischen Konzeptes ermöglicht die Konstruktion der Konstitutivgleichungen auf natürliche Weise:

$$\max_{(\boldsymbol{\tau},p)\in\mathcal{E}} \mathcal{D}^{pl}(\boldsymbol{\tau},p;\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl},\dot{\alpha}) \longrightarrow \mathcal{D}^{pl}(\boldsymbol{\sigma},\phi;\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl},\dot{\alpha}).$$
(4.22)

Das Postulat vom Maximum der plastischen Dissipation besagt, daß unter allen zulässigen Spannungen $(\boldsymbol{\tau}, p)$, die Spannungen $(\boldsymbol{\sigma}, \phi)$ den aktuellen Spannungszustand darstellen, welche die plastische Dissipation maximieren. Damit gilt:

 $\boldsymbol{\sigma}: \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl} - \phi \, \dot{\boldsymbol{\alpha}} \ge \boldsymbol{\tau}: \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl} - p \, \dot{\boldsymbol{\alpha}} \qquad \forall \, (\boldsymbol{\tau}, p) \in \mathcal{E}, \qquad \mathcal{E}:=\{\{\boldsymbol{\tau}, p\}: \Phi(\boldsymbol{\tau}, p) \le 0\}.$ (4.23)

 \mathcal{E} stellt den Raum aller zulässigen Spannungszustände $\{\tau, p\}$ dar, welche die Fließbedingung nicht verletzen. Aus dem Postulat des Maximums der plastischen Dissipation resultieren die beiden folgenden Eigenschaften:

- 1. Die plastischen Verzerrungen $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl}$ stehen senkrecht auf der Fließfläche, die durch die Fließfunktion Φ beschrieben wird. Diese Eigenschaft wird auch als Normalenregel bezeichnet, siehe Abbildung (4.1).
- 2. Der Raum der zulässigen Spannungen \mathcal{E} stellt ein konvexes Gebiet dar, Beweis siehe Han & Reddy [62, Kap. 4.1.].

Das beschränkte nichtlineare Optimierungsproblem mit der Fließbedingung als Nebenbedingung wird durch ein Lagrange-Verfahren gelöst, vgl. Luenberger [89], Simo & Hughes [125]. Als Lagrange-Multiplikator (auch als plastischer Multiplikator bezeichnet) wird $\dot{\lambda}$ eingeführt. Der plastische Multiplikator beschreibt den Betrag des plastischen Fließens. Die Lagrange-Funktion läßt sich somit abhängig von den zulässigen Spannungen und den dazu dualen bzw. energetisch konjugierten Variablen angeben:

$$\mathcal{L}^{pl}(\boldsymbol{\tau}, p, \dot{\lambda}; \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl}, \dot{\alpha}) = -\boldsymbol{\tau} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl} + p \, \dot{\alpha} + \dot{\lambda} \, \Phi(\boldsymbol{\tau}, p) \longrightarrow \text{stat.}$$
(4.24)

Die notwendige Bedingung für die Stationarität der Lagrange-Funktion ist das Verschwinden der partiellen Ableitungen. Daraus erhält man sowohl die Evolutionsgleichungen für



Abbildung 4.1: Postulat vom Maximum der plastischen Dissipation (ohne Verfestigung)

die plastischen Verzerrungen als auch die Evolutionsgleichungen für die interne Variable α :

$$\frac{\partial \mathcal{L}^{pl}(\boldsymbol{\tau}, p, \dot{\lambda}; \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl}, \dot{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\tau}} = -\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl} + \dot{\lambda} \frac{\partial \Phi^{ext}(\boldsymbol{\tau})}{\partial \boldsymbol{\tau}} = 0, \qquad (4.25)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}^{pl}(\boldsymbol{\tau}, p, \dot{\lambda}; \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl}, \dot{\alpha})}{\partial p} = \dot{\alpha} + \dot{\lambda} \frac{\partial \Phi^{int}(p)}{\partial p} = 0$$
(4.26)

mit den Karush-Kuhn-Tucker-Nebenbedingungen

$$\dot{\lambda} \ge 0, \qquad \Phi(\boldsymbol{\sigma}, \phi) \le 0, \qquad \dot{\lambda} \Phi(\boldsymbol{\sigma}, \phi) = 0$$

$$(4.27)$$

und der Konsistenzbedingung:

$$\dot{\Phi}\dot{\lambda} = 0. \tag{4.28}$$

Die Evolutionsgleichung der Rate der plastischen Verzerrungen $\dot{\varepsilon}^{pl}$ wird in der hier behandelten Form der assoziierten Plastizität auch als Normalenregel bezeichnet:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl} = \dot{\lambda} \frac{\partial \Phi^{ext}(\boldsymbol{\sigma})}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \dot{\lambda} \boldsymbol{n}.$$
(4.29)

Dabei gibt der Normalenvektor³ n die Richtung des plastischen Fließens an, die immer senkrecht zur Fließfläche ist, siehe Abbildung (4.1).

Wertet man die Evolutionsgleichung der Fließspannung $\phi(\alpha)$ aus, so erhält man den isotropen Verfestigungsmodul H:

$$\dot{\phi} = \frac{\partial \Phi^{int}}{\partial \alpha} \dot{\alpha} = H \dot{\alpha} \tag{4.30}$$

³Gemäß Abbildung (4.1) gibt der Normalenvektor \boldsymbol{n} bei der Projektion in die σ_1 - σ_2 Ebene die Richtung des plastischen Fließens an.



Abbildung 4.2: Nichtlineares isotropes Verfestigungsverhalten im 1-dim Zugversuch

Die Auswertung der Konsistenzbedingung (4.28) liefert direkt eine Beziehung für den plastischen Multiplikator $\dot{\lambda}$:

$$\dot{\lambda} = \frac{\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} : \boldsymbol{C} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}{\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} : \boldsymbol{C} : \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} + \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} H \frac{\partial \Phi}{\partial \phi}}.$$
(4.31)

Damit läßt sich nach etwas Umformung die elastoplastische Tangente C_{ep}^{tan} angeben:⁴

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{C} : \left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl} \right) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{C} - \frac{\boldsymbol{C} : \frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \otimes \boldsymbol{C} : \frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{\sigma}}}{\frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \boldsymbol{C} : \frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{\sigma}} + \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} H \frac{\partial \Phi}{\partial \phi}} \end{bmatrix} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{C}_{ep}^{tan} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}.$$
(4.32)

4.2 Die Perzyna-Viskoplastizität

In diesem Abschnitt wird nun eine ratenabhängige Materialformulierung betrachtet, die als Verallgemeinerung der ratenunabhängigen Materialformulierung verstanden werden kann. Ein viskoplastisches Verhalten eines Materials kann damit als eine Kombination eines viskosen und eines plastischen Materialverhaltens angesehen werden. Das rheologische Bingham-Modell, siehe Duvaut & Lions [47], kann damit mit einer Parallelschaltung eines Dämpferelementes (η) und eines plastischen Reibungselements (σ_0) und nachfolgender Reihenschaltung einer linear-elastischen Feder (E) aufgebaut werden, siehe Abbildung 4.3.

Als Sonderfall enthält das viskoplastische Materialmodell im Falle sehr geringer Belastungsgeschwindigkeiten das plastische Modell. Abhängig von der Belastungsgeschwindigkeit werden dabei nun auch Spannungszustände außerhalb der Fließfläche zugelassen, sogenannte Überspannungen. Viskoplastische Materialmodelle mit einer Fließfläche gehen auf die Arbeiten von *Perzyna* [109, 110, 111] zurück. Weitere wichtige Betrachtungen dazu

⁴Im Rahmen von Finite-Element-Methoden werden endliche Zeit- bzw. Lastschritte $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$ verwendet. Um dabei eine quadratische Konvergenz des Verschiebungsupdates im Rahmen eines Newton-Raphson-Verfahrens zu erhalten ist eine konsistente Linearisierung der Konstitutivgleichungen vorzunehmen. Aus dem totalen Differential bezüglich des Verschiebungsinkrements $\Delta u = u^{t_{n+1}} - u^{t_n}$ erhält man dann als Resultat der Linearisierung die algorithmische (elastoplastische) Materialtangente zum Zeitpunkt t_{n+1} . Für weitere Bemerkungen hierzu, sei z. B. auf Simo & Hughes [125] verwiesen.



Abbildung 4.3: Rheologisches Modell eines elasto-viskoplastischen Materials

findet man z. B. in den Arbeiten von Lemaître & Chaboche [84], Maugin [92] und Haupt [63].

Die Herleitung des Anfangsrandwertproblems folgt in weiten Teilen der ratenunabhängigen *Prandtl-Reuss*-Plastizität. Analog zur Plastizität können die Verzerrungen in einen Anteil elastischer Verzerrungen ε^{el} sowie einen Anteil viskoplastischer Verzerrungen ε^{vp} zerlegt werden:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^{el} + \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}. \tag{4.33}$$

Es wird ebenso von einer assoziierten Form ausgegangen, so daß zur Bestimmung der Evolutionsgleichungen wieder auf das *Postulat vom Maximum der plastischen Dissipation* zurückgegriffen werden kann:

$$\boldsymbol{\sigma}: \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} - \phi \,\dot{\boldsymbol{\alpha}} \ge \boldsymbol{\tau}: \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} - p \,\dot{\boldsymbol{\alpha}} \qquad \forall \left\{ \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}; \phi, p \right\} \in \mathcal{S}, \qquad \mathcal{S}:= L^2(\Omega, \mathbb{R}^{n \times n}). \tag{4.34}$$

Der zulässige Raum der Spannungen S ist im Unterschied zur Plastizität nicht mehr beschränkt, so daß die möglichen Überspannungen σ jegliche Werte in L^2 annehmen können.

Die Ungleichung (4.34) wird nun allerdings nicht mehr im Rahmen eines Optimierungsproblems mit Nebenbedingung gelöst, sondern approximativ mit Hilfe einer *Penalty*-Methode:

$$\max_{(\boldsymbol{\tau},p)\in\mathcal{S}} \mathcal{D}^{vp}(\boldsymbol{\tau},p;\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp},\dot{\alpha}) \longrightarrow \mathcal{D}^{vp}(\boldsymbol{\sigma},\phi;\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp},\dot{\alpha}).$$
(4.35)

Die Penalty-Funktion \mathcal{P}^{vp} kann man damit wie folgt angeben:

$$\mathcal{P}^{vp}(\boldsymbol{\tau}, p; \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp}, \dot{\alpha}) = -\boldsymbol{\tau} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} + p \, \dot{\alpha} + \frac{1}{2 \, \eta} \left[\bar{\Phi}^+(\boldsymbol{\tau}, p) \right]^2 \longrightarrow \text{stat.}$$
(4.36)

 $\overline{\Phi}^+$ stellt eine nichtlineare *Überspannungsfunktion* dar, die wie folgt definiert ist:

$$\bar{\Phi}^{+} = \langle \Phi \rangle = \begin{cases} \Phi(\boldsymbol{\tau}, p) & \text{für } \Phi(\boldsymbol{\tau}, p) > 0, \\ 0 & \text{für } \Phi(\boldsymbol{\tau}, p) \le 0. \end{cases}$$
(4.37)

Durch Auswertung der notwendigen Bedingung für die Stationarität der *Penalty-Funktion* erhält man schließlich die Evolutionsgleichungen für die viskoplastischen Verzerrungen $\dot{\varepsilon}^{vp}$ und die interne Variable $\dot{\alpha}$:

$$\frac{\partial \mathcal{P}^{vp}(\boldsymbol{\tau}, p, ; \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp}, \dot{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\tau}} = -\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} + \frac{1}{\eta} \bar{\Phi}^{+} \frac{\partial \Phi^{ext}(\boldsymbol{\tau})}{\partial \boldsymbol{\tau}} = 0, \qquad (4.38)$$

$$\frac{\partial \mathcal{P}^{vp}(\boldsymbol{\tau}, p, ; \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl}, \dot{\alpha})}{\partial p} = \dot{\alpha} + \frac{1}{\eta} \bar{\Phi}^{+} \frac{\partial \Phi^{int}(p)}{\partial p} = 0.$$
(4.39)

Der Penalty-Parameter $\eta \in]0, \infty[$ wird als Materialparameter identifiziert, der die Viskosität des Prozesses beschreibt. Der Unterschied zur ratenunabhängigen Prandtl-Reuss-Plastizität ist, wie hier offensichtlich wird, sehr gering und betrifft vor allem den plastischen Multiplikator $\dot{\lambda}$. Dieser wird nun direkt über eine Evolutionsgleichung bestimmt, siehe Gl. (4.38) und (4.39):

$$\dot{\lambda} := \frac{1}{\eta} \bar{\Phi}^+ = \frac{1}{\eta} \langle \Phi \rangle.$$
(4.40)

Der Betrag des viskoplastischen Fließens wird analog zur Plastizität durch den plastischen Multiplikator $\dot{\lambda}$ beschrieben. Die Richtung des Fließens gibt auch in der assoziierten Viskoplastizität eine Normale auf die Fließfläche an:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = \frac{1}{\eta} \bar{\Phi}^+ \frac{\partial \Phi^{ext}(\boldsymbol{\tau})}{\partial \boldsymbol{\tau}} = \frac{1}{\eta} \langle \Phi \rangle \ \frac{\partial \Phi^{ext}(\boldsymbol{\tau})}{\partial \boldsymbol{\tau}} := \dot{\lambda} \boldsymbol{n}. \tag{4.41}$$

Die Macaulay-Klammern sind dabei gemäß Gl. (4.37) definiert. Anstatt den Karush-Kuhn-Tucker-Nebenbedingungen im Falle der Plastizität – einem Optimierungsproblem mit Nebenbedingung – beschreibt die Überspannungsfunktion $\bar{\Phi}^+$ das viskoplastische Fließen.

Die Evolutionsgleichung (4.41) für die viskoplastische Verzerrung kann weiter ausgewertet werden:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = \frac{1}{\eta} \left\langle \Phi \right\rangle \frac{\partial \Phi^{ext}(\boldsymbol{\tau})}{\partial \boldsymbol{\tau}} = \frac{1}{\eta} \left\langle \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma} - \Phi^{int}(\phi) \frac{\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}}{\|\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}\|} \right\rangle = \frac{\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma} - \Pi \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}}{\eta}.$$
(4.42)

Mit der Projektion $\Pi \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}$:

$$\Pi \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma} = \begin{cases} \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma} & \forall \quad \Phi(\boldsymbol{\sigma}, \phi) \leq 0, \\ \Phi^{int}(\phi) \frac{\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}}{\|\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}\|} & \forall \quad \Phi(\boldsymbol{\sigma}, \phi) > 0. \end{cases}$$
(4.43)

Bemerkung:

Im Rahmen des hier betrachteten Überspannungsmodells vom Perzyna-Typ wird für die Penalty-Funktion $\overline{\Phi}^+$ eine nichtlineare Funktion gewählt, siehe Gl. (4.37). Eine andere Möglichkeit, nichtlineare Viskoplastizitätsmodelle zu motivieren, besteht darin, eine lineare Fließfunktion und eine nichtlineare Penalty-Funktion zu wählen, vgl. Haupt [63]. Für die Penalty-Funktion wird dann ein Potenz-Ansatz gewählt:

$$\bar{\bar{\Phi}} = \frac{1}{1+m} \left[\Phi^+ \right]^{1+m}$$
 (4.44)

Aus einem solchen Ansatz resultiert dann eine nichtlineare Evolutionsgleichung in der internen Variablen α für die viskoplastischen Verzerrungen $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp}$:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = \frac{1}{\eta} \left[\Phi^+ \right]^m \frac{\partial \Phi^{ext}(\boldsymbol{\tau})}{\partial \boldsymbol{\tau}} = \frac{1}{\eta} \left\langle \Phi \right\rangle^m \frac{\partial \Phi^{ext}(\boldsymbol{\tau})}{\partial \boldsymbol{\tau}} \tag{4.45}$$

Für den plastischen Multiplikator gilt somit:

$$\dot{\lambda} := \frac{1}{\eta} \langle \Phi \rangle^m \tag{4.46}$$

Zur Bestimmung des plastischen Multiplikators λ aus den Evolutionsgleichungen (4.40) und (4.46) muß somit eine nichtlineare Gleichung am Materialpunkt gelöst werden. Dies geschicht im Rahmen des hier umgesetzten Modells wiederum mit einem lokalen Newton-Raphson-Verfahren. In der Formulierung (4.44) ist der gewählte Exponent m ein weiterer Materialparameter, der es erlaubt, das gewählte Materialmodell z. B. für metalische Werkstoffe besser an Versuchsdaten anzupassen.

4.2.1 Einfluß der Belastungsgeschwindigkeit

Für eine nichtlineare isotrope Fließfunktion im Rahmen des hier vorgestellten Viskoplastizitätsmodells wird die Ratenabhängigkeit des Modells an einem einfachen Beispiel demonstriert. Betrachtet wird der quasi-statische Fall; Trägheitsterme werden infolgedessen vernachlässigt.

Untersucht wird das eindimensionale Zugverhalten. Das Materialmodell basiert auf einer exponentiellen Entfestigungsfunktion sowie einer Von Mises-Fließfläche, siehe Gl. (4.20) und (4.21).

In Abbildung (4.4) kann man erkennen, daß das Materialverhalten für eine unterschiedliche Belastungsgeschwindigkeit \bar{v} stark variiert. Damit wird der viskose oder zeitabhängige Effekt der Viskoplastizität deutlich sichtbar.

Betrachtet man den Grenzfall einer sehr langsamen Belastungsgeschwindigkeit des Prozesses, so verliert die Viskosität η des Materials seinen Einfluß. In diesem Fall strebt die *Relaxationszeit* $\bar{\tau} \propto \eta$ des Materials gegen Null: $\bar{\tau} \mapsto 0$. Das bedeutet, daß die viskosen Überspannungen verschwinden und das Viskoplastizitätsmodell für die betrachtete Viskosität $\eta \mapsto 0$ gegen den ratenunabhängigen Grenzfall strebt.

Bemerkung:

Im Rahmen der *Penalty*-Formulierung läßt sich die Konvergenz der ratenabhängigen Viskoplastizität gegen die ratenunabhängige Plastizität dadurch anschaulich verdeutlichen, als daß für $\eta \mapsto 0$ die Nebenbedingung des Plastizitätsmodells $\Phi(\boldsymbol{\sigma}, \phi)$ voll aktiv ist, siehe Gl. (4.27).

4.3 Schwache Form der Plastizität

Im folgenden Abschnitt werden im Rahmen der bereits vorgestellten Kontinuums-Thermodynamik die Variationsungleichungen der Plastizität hergeleitet. Diese bilden den Ausgangspunkt für Existenzbetrachtungen sowie für gemischte Finite-Element-Formulierungen. Weitere Ausführungen zur Existenz von Lösungen und Ansätze zu gemischten Formulierungen findet man z. B. in den Arbeiten von Johnson [71, 72, 73], Duvaut & Lions [47],



Abbildung 4.4: Ratenabhängiges, nichtlineares Entfestigungsverhalten im Zugversuch

Nečas & Hlaváček [102], Hlaváček et al. [65], Temam [139] sowie umfassend in Han & Reddy [62].

Für die variationelle Formulierung werden die folgenden Sobolev- bzw. Hilbert-Räume der Testfunktionen v und τ benötigt:

$$\begin{array}{lll} \mathcal{H}^0 & := & L^2(\Omega, \mathbb{R}^n), \qquad \mathcal{S} := L^2(\Omega, \mathbb{R}^{n \times n}), \\ \mathcal{S}^{div} & := & \left\{ \boldsymbol{\tau} \in \mathcal{S}, \; \left\{ p, \operatorname{div} \boldsymbol{\tau} \right\} \in \mathcal{H}^0 \right\}, \\ \mathcal{V} & := & \left\{ \boldsymbol{v} \in \mathcal{H}^1(\Omega, \mathbb{R}^n), \; \boldsymbol{v} = 0 \; \operatorname{auf} \Gamma_D \right\}. \end{array}$$

Des weiteren wird der Raum \mathcal{E} der Spannungen $\{\sigma, \tau; \phi, p\}$, welche die Fließbedingung erfüllen, eingeführt:

$$\mathcal{E} := \Pi \mathcal{S} = \{\{\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\sigma}\} \in \mathcal{S}, \ \{\phi, p\} \in \mathcal{H}^0, \ \Phi(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}; \phi, p) \leq 0\}.$$

Ausgangspunkt der Betrachtung bildet das Postulat vom Maximum der plastischen Dissipation, welches nun nicht mehr lokal am materiellen Punkt, sondern im integralen Sinne erfüllt wird:

$$\int_{\Omega} \left(\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl} - \phi \, \dot{\alpha} \right) \, \mathrm{d}v \ge \int_{\Omega} \left(\boldsymbol{\tau} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl} - p \, \dot{\alpha} \right) \, \mathrm{d}v, \tag{4.47}$$

beziehungsweise in abgekürzter Form:

$$(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\tau}, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl}) - (\phi - p, \dot{\alpha}) \ge 0, \qquad \forall \{\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}; \phi, p\} \in \mathcal{E}.$$
(4.48)

In der Ungleichung (4.48) kann nun die Rate der plastischen Verzerrung durch die Differenz der Gesamtverzerrungen und der elastischen Verzerrungen ersetzt werden: $\dot{\varepsilon}^{pl} = \dot{\varepsilon} - \dot{\varepsilon}^{el}$. Des weiteren kann Gleichung (4.14) zur Ermittlung der Spannungsrate ausgenutzt werden. Damit ergibt sich:

$$\underbrace{(\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\tau},\dot{\boldsymbol{\varepsilon}})}_{(\mathbf{I})} - (\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\tau},\boldsymbol{C}^{-1}:\dot{\boldsymbol{\sigma}}) - (\phi-p,\dot{\alpha}) \ge 0.$$
(4.49)

Durch Einführen der Verschiebungsrate $\dot{\boldsymbol{u}} = \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}$ und Anwendung partieller Integration auf den markierten Term (I) erhält man nach Addition der Impulsbilanz (2.38) die *dual*gemischte Formulierung der Plastizität:

Die *primal-gemischte Formulierung* erhält man, indem man in Gleichung (4.49) keine partielle Integration durchführt, sondern direkt die schwache Form der Impulsbilanz addiert:

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{C}^{-1} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}) - (\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\sigma}, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) + (p - \phi, \dot{\alpha}) &\geq 0 & \forall \{\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}; \phi, p\} \in \mathcal{E}, \\ (4.51) \\ a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) &= (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{v}) + (\bar{\boldsymbol{t}}, \boldsymbol{v})_{\Gamma_N} & \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}, \boldsymbol{u} \in \mathcal{U}. \end{aligned}$$

Die Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ resultiert aus der schwachen Form des Gleichgewichts:

$$a(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} = \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v}. \tag{4.52}$$

4.3.1 Viskose Regularisierung

Durch Einführung einer *Regularisierung* der Variationsungleichungen wird eine regularisierte nichtlineare Variationsgleichung erreicht⁵.

Aus mechanischer Sicht entspricht dies einer viskosen bzw. viskoplastischen Regularisierung der ratenunabhängigen Gleichungen des Plastizitätsmodells. In allgemeinen ver- und entfestigenden Materialformulierungen spielt diese Regularisierungstechnik eine wichtige Rolle. Betrachtet man die inkrementellen Differentialgleichungen der ratenunabhängigen Formulierung, so geht mit einem entfestigenden Materialverhalten ein Verlust der Elliptizität einher. Im Rahmen einer viskoplastischen Regularisierung bleiben aber nun die partiellen Differentialgleichungen des Anfangsrandwertproblems auch für entfestigendes Materialverhalten gutgestellt. Die Entfestigung findet zumeist in schmalen Versagenszonen statt. Diese *Lokalisierungszonen* zeichnen sich durch eine hohe Konzentration an Deformationen aus. Typische Beispiele dafür sind in metallischen Werkstoffen die *Lüders*-Bänder oder in Geomaterialien die Gleitzonen eines Böschungsbruchs.

Diskretisiert man das zu untersuchende Problem nun mit Finiten Elementen, so bedeutet dies, daß Lokalisierungszonen eine von der Netz-Diskretisierung unabhängige Breite haben müssen. Diese Breite der Lokalisierungszone hängt ausschließlich von der Mikrostruktur des betrachteten Materials ab und damit von einem weiteren (internen) Längenparameter l_i . Dies motiviert alternativ zur Viskoplastizität weitere Regularisierungstechniken, wie z. B. erweiterte Kontinuumstheorien (mikropolare, mikromorphe Kontinua), vgl. Eringen [55], gradientenerweiterte Kontinuumsmethoden, vgl. Aifantis [2], oder nicht-lokale Kontinua, vgl. Eringen [54]. In dieser Arbeit wurden diese Techniken allerdings nicht weiter beleuchtet.

Die regularisierte primal-gemischte Formulierung, erhält man, indem die additive Zerlegung der Verzerrungen (4.33) mit einer Testfunktion $\tau \in S$ multipliziert wird und über das Gebiet Ω des betrachteten Körpers \mathcal{B} integriert wird:

$$(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \boldsymbol{\tau}) = (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{el}, \boldsymbol{\tau}) + (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp}, \boldsymbol{\tau}).$$
(4.53)

Durch Einsetzen der Rate der Spannungen (4.14) und Ausnutzen der Evolutionsgleichung der viskoplastischen Verzerrungen in Form der eingeführten Projektion (4.43) ergibt sich:

$$(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \boldsymbol{\tau}) = (\boldsymbol{C}^{-1} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}, \boldsymbol{\tau}) + \frac{1}{\eta} (\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma} - \Pi \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}).$$
 (4.54)

⁵ Durch eine geeignete Linearisierung der daraus resultierenden diskretisierten nichtlinearen schwachen Formulierung kann eine Lösung mittels eines Newton-Raphson-Verfahrens im Rahmen eines Finite-Element-Programmes erfolgen.

Die Zweifeldformulierung, also die *regularisierte primal-gemischte Formulierung* erhält man durch Addition der schwachen Form der Impulsbilanz:

$$(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{C}^{-1} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) = -\frac{1}{\eta} (\boldsymbol{\tau}, \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma} - \Pi \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}), \quad \forall \{\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}; \boldsymbol{\phi}, p\} \in \mathcal{S},$$

$$a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{v}) + (\bar{\boldsymbol{t}}, \boldsymbol{v})_{\Gamma_N}, \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}, \boldsymbol{u} \in \mathcal{U}.$$

$$(4.55)$$

Die regularisierte primale Formulierung, d. h. die reine Verschiebungsformulierung ergibt sich, indem man die kinematischen Gleichungen einschließlich der Evolutionsgleichung für die viskosen Verzerrungen im Rahmen einer Kollokationsmethode nach einer entsprechenden Diskretierung in räumlicher Richtung am Materialpunkt exakt bzw. stark erfüllt. Dies entspricht dem gewöhnlichen Vorgehen im Rahmen von Finite-Element-Methoden:

$$(\Pi \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v})) = (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{v}) + (\bar{\boldsymbol{t}}, \boldsymbol{v})_{\Gamma_N}, \quad \forall \ \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}, \boldsymbol{u} \in \mathcal{U}.$$
(4.56)

4.3.2 Semi-diskrete schwache Formulierungen

Ausgangspunkt für weitere Betrachtungen bildet die regularisierte primal-gemischte Variationsgleichung (4.55). Im folgenden wird zuerst eine klassische Diskretisierung der Zweifeldformulierung im Rahmen eines Finite-Differenzen-Verfahrens in zeitlicher Richtung durchgeführt. Dies geschieht ausschließlich lokal, d. h. auf Materialpunktebene. Für eine Umsetzung in einem Finite-Element-Programm bedeutet dies, daß die Evolutionsgleichungen am Integrations- oder *Gauß*-Punkt gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung darstellen und lokal integriert werden können. Nachdem die diskrete Spannungsantwort zu einem vorgegebenen Zeitschritt berechnet worden ist, können dann global im Rahmen eines Finite-Element-Ansatzes die daraus resultierenden linearisierten Gleichungen mit Hilfe eines Newton-Raphson-Verfahrens gelöst werden.

Der betrachtete Zeitbereich I wird nun in endliche Zeitinkremente $I_n := [t_n, t_{n+1}]$ unterteilt. Die Zeitdauer eines Zeitinkrementes I_n ist damit ebenfalls festgelegt: $|I_n| := \Delta t_n = t_{n+1} - t_n$. Die regularisierte primal-gemischte Formulierung läßt sich damit in integraler Form über einem Zeitschritt I_n darstellen als:

$$\int_{I_n} (\boldsymbol{C}^{-1} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\varepsilon}(\dot{\boldsymbol{u}}), \boldsymbol{\tau}) \, \mathrm{d}t = -\int_{I_n} \frac{1}{\eta} (\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma} - \Pi \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}) \, \mathrm{d}t,$$

$$\int_{I_n} a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}t = \int_{I_n} (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}t + \int_{I_n} (\bar{\boldsymbol{t}}, \boldsymbol{v})_{\Gamma_N} \, \mathrm{d}t.$$
(4.57)

Durch Anwendung des impliziten *Euler*-Rückwärts-Integrationsverfahrens – hier dargestellt in allgemeiner Form für die Koordinate \boldsymbol{x} eines Massepunktes – mit:

$$\boldsymbol{x}^{t_{n+1}} = \boldsymbol{x}^{t_n} + \int_{I_n} \dot{\boldsymbol{x}}(t) \, \mathrm{d}t \qquad \text{und} \quad \int_{I_n} \dot{\boldsymbol{x}}(t) \, \mathrm{d}t = \Delta t_n \, \dot{\boldsymbol{x}}(t_{n+1}) \tag{4.58}$$

erhält man eine semi-diskrete Form der Zweifeldformulierung, d. h. eine kontinuierliche schwache Formulierung im Ort und eine diskretisierte Formulierung in der Zeit:

$$(\boldsymbol{C}^{-1}:(\boldsymbol{\sigma}^{t_{n+1}}-\boldsymbol{\sigma}^{t_n}),\boldsymbol{\tau}) - (\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}^{t_{n+1}})-\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}^{t_n}),\boldsymbol{\tau}) = -\frac{\Delta t_n}{\eta}(\operatorname{dev}\boldsymbol{\sigma}^{t_{n+1}}-\Pi\operatorname{dev}\boldsymbol{\sigma}^{t_{n+1}},\boldsymbol{\tau}),$$

$$(4.59)$$

$$\Delta t_n(\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^{t_{n+1}}),\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v})) = \Delta t_n(\boldsymbol{f}^{t_{n+1}},\boldsymbol{v}) + \Delta t_n(\bar{\boldsymbol{t}}^{t_{n+1}},\boldsymbol{v}).$$

Eliminiert man in Gleichung (4.59) die Spannungen, dann erhält man eine inkrementelle nichtlineare schwache Form in den Verschiebungen $\boldsymbol{u}^{t_{n+1}}$. Dies hat zur Folge, daß in der schwachen Form der Impulsbilanz, Gl. (4.60) eine zulässige Spannung $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^{t_{n+1}}) \in \mathcal{E}$ zu verwenden ist, welche die Konstitutivbeziehungen Gl. (4.42) und (4.43) sowie der Zerlegung der Verzerrungsraten Gl. (4.1) am Integrationspunkt stark erfüllen. Diese Formulierung wurde in der vorliegenden Arbeit im Rahmen einer Finite-Element-Diskretisierung numerisch umgesetzt:

$$(\Pi \boldsymbol{C}^{t_{n+1}} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}^{t_{n+1}}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v})) = (\boldsymbol{f}^{t_{n+1}}, \boldsymbol{v}) + (\boldsymbol{\bar{t}}^{t_{n+1}}, \boldsymbol{v}) \qquad \forall \, \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}, \boldsymbol{u}^{t_{n+1}} \in \mathcal{U}.$$
(4.60)

Die Projektion $\prod C^{t_{n+1}}$: $\varepsilon(u^{t_{n+1}})$ ergibt sich dann aus den Konstitutivbeziehungen Gl. (4.42) und (4.43)

$$\boldsymbol{C}: \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{C}: \left[\frac{1}{\eta} (\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma} - \Pi \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma})\right]$$
(4.61)

und einer zeitlichen Integration über das Zeitintervall I_n sowie einer Diskretisierung mittels des Euler-Rückwärts-Verfahrens:

$$\Pi \boldsymbol{C}^{t_{n+1}} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}^{t_{n+1}}) := \boldsymbol{C}^{t_{n+1}} : \boldsymbol{\varepsilon}^{t_n} + \boldsymbol{\sigma}^{t_{n+1}} - \boldsymbol{\sigma}^{t_n} + \Delta t_n \boldsymbol{C}^{t_{n+1}} : \left[\frac{1}{\eta} (\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}^{t_{n+1}} - \Pi \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}^{t_n})\right].$$

$$(4.62)$$

Für den ratenunabhängigen Grenzfall $\eta \longrightarrow 0$, also den Grenzfall der *Prandtl-Reuss*-Plastizität (Überspannungen werden durch den Penalty-Term "bestraft"), gilt damit die zeitdiskretisierte primal-gemischte Formulierung:

$$(\boldsymbol{C}^{-1}:(\boldsymbol{\sigma}^{t_{n+1}}-\boldsymbol{\sigma}^{t_n}),\boldsymbol{\tau})-(\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}^{t_{n+1}})-\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}^{t_n}),\boldsymbol{\tau})\geq 0 \qquad \forall \ \{\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\tau}\}\in\mathcal{E},$$

$$(4.63)$$

$$\Delta t_n(\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^{t_{n+1}}),\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}))=\Delta t_n(\boldsymbol{f}^{t_{n+1}},\boldsymbol{v})+\Delta t_n(\bar{\boldsymbol{t}}^{t_{n+1}},\boldsymbol{v}) \qquad \forall \ \boldsymbol{v}\in\mathcal{V}, \boldsymbol{u}^{t_{n+1}}\in\mathcal{U}.$$

Bemerkung:

Betrachtet man die nicht-regularisierte primal-gemischte Form der ratenunabhängigen *Prandtl*-Reuss-Plastizität (4.63), so entspricht die inkrementelle variationelle Formulierung einer *Hencky*-Formulierung für das betrachtete Zeitintervall.

Dies wird deutlich, wenn man für die nicht-pfadabhängige *Hencky*-Plastizität – auch als Deformationstheorie bezeichnet – die primal-gemischte Formulierung betrachtet:

$$(\boldsymbol{C}^{-1}:\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}),\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{\sigma}) \geq 0 \qquad \forall \{\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\tau}\} \in \mathcal{E},$$

$$(\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}),\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v})) = (\boldsymbol{f},\boldsymbol{v}) + (\bar{\boldsymbol{t}},\boldsymbol{v}) \qquad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}, \boldsymbol{u} \in \mathcal{U}.$$
(4.64)

Führt man nun eine Integration über das Zeitintervall I_n durch, resultieren daraus ebenfalls die inkrementellen variationellen Gleichungen (4.63), was die vorherige Behauptung belegt.

Durch die Beschränkung auf den Raum der zulässigen Spannungen $\mathcal{E} = \Pi \mathcal{S}$ läßt sich die Spannung σ ebenfalls als eine Projektion in diesen Raum darstellen. Somit kann das *Hencky*-Problem in Form einer gemischten nichtlinearen Variationsgleichung angegeben werden:

$$(\boldsymbol{\sigma} - \Pi \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}), \boldsymbol{\tau}) = 0 \qquad \forall \{\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}\} \in \mathcal{S},$$

$$(\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v})) = (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{v}) + (\bar{\boldsymbol{t}}, \boldsymbol{v}) \qquad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}, \boldsymbol{u} \in \mathcal{U}.$$

$$(4.65)$$

Eliminiert man die Spannungen, so erhält man eine reine Verschiebungsformulierung:

$$(\Pi \boldsymbol{C}:\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}),\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v})) = (\boldsymbol{f},\boldsymbol{v}) + (\bar{\boldsymbol{t}},\boldsymbol{v}) \qquad \forall \boldsymbol{v}\in\mathcal{V}, \boldsymbol{u}\in\mathcal{U}.$$
(4.66)

Nach einer Integration über das Zeitintervall I_n erhält man:

$$(\Pi \boldsymbol{C}^{t_{n+1}} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}^{t_{n+1}}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v})) = (\boldsymbol{f}^{t_{n+1}}, \boldsymbol{v}) + (\boldsymbol{\bar{t}}^{t_{n+1}}, \boldsymbol{v}) \qquad \forall \, \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}, \boldsymbol{u}^{t_{n+1}} \in \mathcal{U}.$$
(4.67)

Dies entspricht genau der inkrementellen variationellen Formulierung für das regularisierte Problem, siehe Gl. (4.60).

4.4 Abschätzung des Fehlers der Ortsdiskretisierung

Aus der zeitlichen Diskretisierung der primal-gemischten Formulierung der Prandtl-Reuss-Plastizität und der regularisierten primal-gemischten Formulierung der Perzyna-Viskoplastizität konnte gezeigt werden, daß diese Probleme sich auf eine nichtlineare schwache Form vom pfadunabhängigen Hencky-Typ auf einem Zeitintervall I_n reduzieren lassen. Das motiviert eine separate Fehlerabschätzung für jedes Zeitinkrement I_n . Diese Annahme wäre, wie im vorangegangen Abschnitt im Rahmen der Zeitdiskretisierung gezeigt, exakt, falls die Eingangsgrößen \boldsymbol{u}^{t_n} und $\boldsymbol{\sigma}^{t_n}$ exakte Werte annehmen.

Der im folgenden vorgenommenen Fehlerabschätzung liegt damit die Annahme zugrunde, daß der Fehler dieser Eingangsgrößen klein ist.

Durch die hier vorgenommene Raum-Zeit-Entkopplung kann somit nur ein additiver Fehlerzuwachs von einem Schritt zum nächsten Lastschritt berücksichtigt werden. Die Interaktion des Fehlers des Zeitintervalls I_{n-1} mit dem Fehler im Intervall I_n bleibt damit unberücksichtigt. Somit müssen bei einer numerischen Analyse die Last- beziehungsweise Zeitschritte genügend klein gewählt werden, um diesen Fehler *a priori* klein zu halten. Durch die vorgenommenen numerischen Experimente kann gezeigt werden (siehe Kapitel 5 "Numerische Beispiele"), daß mit diesem Vorgehen sehr gute Resultate erzielt werden können.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die regularisierte Verschiebungsformulierung der *Perzyna*-Viskoplastizität sowie der nicht-regularisierten *Prandtl-Reuss*-Plastizität numerisch umgesetzt. Zur Konstruktion eines *a posteriori*-Fehlerschätzers wird nun von der zeitdiskretisierten schwachen Formulierung (4.60) ausgegangen:

$$(\Pi \boldsymbol{C}^{t_{n+1}} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}^{t_{n+1}}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v})) = (\boldsymbol{f}^{t_{n+1}}, \boldsymbol{v}) + (\bar{\boldsymbol{t}}^{t_{n+1}}, \boldsymbol{v}) \qquad \forall \, \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}, \boldsymbol{u}^{t_{n+1}} \in \mathcal{U}.$$
(4.68)

Der Fehler in einem betrachteten Zeitinkrement wird als Differenz der kontinuierlichen und der diskretisierten Lösung definiert als:

$$e^{t_{n+1}} := u^{t_{n+1}} - u^{t_{n+1}}_h. \tag{4.69}$$

Durch die Wahl endlich dimensionaler Test- und Ansatzfunktionen $\boldsymbol{v}_h \in \mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$ beziehungsweise $\boldsymbol{u}_h \in \mathcal{U}_h \subset \mathcal{U}$ erhält man das Finite-Element-Problem:

"Finde eine Finite-Element-Lösung $\boldsymbol{u}_h^{t_{n+1}} \in \mathcal{U}_h \subset \mathcal{U}$ für alle $\boldsymbol{v}_h \in \mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$, so daß gilt:"

$$(\Pi \boldsymbol{C}^{t_{n+1}} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h^{t_{n+1}}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}_h)) = (\boldsymbol{f}^{t_{n+1}}, \boldsymbol{v}_h) + (\bar{\boldsymbol{t}}^{t_{n+1}}, \boldsymbol{v}_h).$$
(4.70)

Die Subtraktion der diskreten Form (4.70) von der kontinuierlichen Formulierung (4.68) im betrachteten Zeitinkrement I_n liefert mit der Definition des Fehlers (4.69) eine nichtlineare Galerkin-Orthogonalität:

$$(\Pi \boldsymbol{C}^{t_{n+1}} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{e}^{t_{n+1}}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}_h)) = 0.$$
(4.71)

Des weiteren wird nun eine inkrementelle Semilinearform $\hat{a}(\cdot, \cdot)$ eingeführt⁶. Für diese soll gelten:

$$\hat{a}(\boldsymbol{u}^{t_{n+1}}, \boldsymbol{v}) := (\Pi \boldsymbol{C}^{t_{n+1}} : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}^{t_{n+1}}), \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v})).$$
(4.72)

Für die Volumen- und Oberflächenlasten wird analog dazu eine inkrementelle Linearform $\hat{l}(\cdot)$ definiert:

$$\hat{l}(\boldsymbol{v}) := (\boldsymbol{f}^{t_{n+1}}, \boldsymbol{v}) + (\boldsymbol{\bar{t}}^{t_{n+1}}, \boldsymbol{v}).$$
(4.73)

Damit läßt sich das Finite-Element-Problem eines Zeitinkrementes wie folgt angeben:

$$\hat{a}(\boldsymbol{u}_{h}^{t_{n+1}},\boldsymbol{v}_{h}) = \hat{l}(\boldsymbol{v}_{h}), \qquad \boldsymbol{u}_{h}^{t_{n+1}} \in \mathcal{U}_{h} \subset \mathcal{U}, \ \boldsymbol{v}_{h} \in \mathcal{V}_{h} \subset \mathcal{V}.$$
 (4.74)

Dieses Problem kann nach einer Linearisierung

$$\hat{b}(\tilde{\boldsymbol{u}}_{h}^{t_{n+1}},\boldsymbol{v}_{h}) := \ln\left(\hat{a}(\tilde{\boldsymbol{u}}_{h}^{t_{n+1}},\boldsymbol{v}_{h})\right) \qquad \tilde{\boldsymbol{u}}_{h}^{t_{n+1}} \in \mathcal{U}_{h} \subset \mathcal{U}, \ \boldsymbol{v}_{h} \in \mathcal{V}_{h} \subset \mathcal{V}$$
(4.75)

im Rahmen eines Newton-Rapson-Verfahrens gelöst werden.

Nun kann auf dieses linearisierte Finite-Element-Problem Gl. (4.75) eines Zeitinkrementes I_n die duale Methode der Fehlerkontrolle, siehe Kapitel 3, angewandt werden. Das entsprechende linearisierte duale Problem ist daher identisch mit dem primalen Problem.

Exemplarisch wird nun für eine residuenbasierte Abschätzung ein Fehlerindikator konstruiert. Gradientenbasierte bzw. energienormbasierte Methoden folgen analog den Ausführungen des dritten Kapitels.

Mit dem analog zu Gl. (4.75) linearisierten Fehler $\tilde{e}^{t_{n+1}}$ eines Zeitinkrementes folgt mit der Standardargumentation (3.89) und (3.93):

$$(\boldsymbol{j}^{t_{n+1}}, \tilde{\boldsymbol{e}}^{t_{n+1}}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T \operatorname{Res}_T(\tilde{\boldsymbol{u}}_h^{t_{n+1}}) \cdot \tilde{\boldsymbol{u}}^{d, t_{n+1}} \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E \operatorname{Res}_E(\tilde{\boldsymbol{u}}_h^{t_{n+1}}) \cdot \tilde{\boldsymbol{u}}^{d, t_{n+1}} \, \mathrm{d}\boldsymbol{a}.$$

$$(4.76)$$

Mittels der linearisierten Form der *Galerkin*-Orthogonalität für das duale Problem folgt:

$$(\boldsymbol{j}^{t_{n+1}}, \tilde{\boldsymbol{e}}^{t_{n+1}}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T \operatorname{Res}_T(\tilde{\boldsymbol{u}}_h^{t_{n+1}}) \cdot (\tilde{\boldsymbol{u}}^{d,t_{n+1}} - \tilde{\boldsymbol{u}}_h^{d,t_{n+1}}) \, \mathrm{d}v + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \int_E \operatorname{Res}_E(\tilde{\boldsymbol{u}}_h^{t_{n+1}}) \cdot (\tilde{\boldsymbol{u}}^{d,t_{n+1}} - \tilde{\boldsymbol{u}}_h^{d,t_{n+1}}) \, \mathrm{d}a.$$

$$(4.77)$$

⁶Die Semilinearform $\hat{a}(\cdot, \cdot)$ ist nichtlinear im ersten Argument und linear in der Testfunktion v. Das erste Argument stellt hier die nichtlineare Projektion bzw. die Materialantwort dar, siehe Gl. (4.43).

Durch die Einführung der Interpolierenden für die duale Variable $\tilde{u}_h^{d,t_{n+1}}$ in einem Zeitschritt I_n und mit der Anwendung der Cauchy-Schwarz-Ungleichung für Integrale erhält man:

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{j}^{t_{n+1}}, \tilde{\boldsymbol{e}}^{t_{n+1}}) &\leq \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \| \operatorname{Res}_T(\tilde{\boldsymbol{u}}_h^{t_{n+1}}) \| \| (\tilde{\boldsymbol{u}}^{d,t_{n+1}} - \Pi_h \, \tilde{\boldsymbol{u}}^{d,t_{n+1}}) \| \\ &+ \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \| \operatorname{Res}_E(\tilde{\boldsymbol{u}}_h^{t_{n+1}}) \| \| (\tilde{\boldsymbol{u}}^{d,t_{n+1}} - \Pi_h \, \tilde{\boldsymbol{u}}^{d,t_{n+1}}) \|. \end{aligned}$$

$$(4.78)$$

Für die Interpolationsabschätzungen können, wie in Kapitel 2 beschrieben, wieder Differenzenquotienten zweiter Ordnung numerisch ausgewertet werden, siehe Gl. (3.108), (3.109) und Gl. (3.120).

Damit folgt für den Fehler nun elementweise ausgedrückt:

$$(\boldsymbol{j}^{t_{n+1}}, \tilde{\boldsymbol{e}}^{t_{n+1}}) \leq \sum_{T \in \mathcal{T}_h} C_{i,1} h_T^2 \| \operatorname{Res}_T(\tilde{\boldsymbol{u}}_h^{t_{n+1}}) \| \| \nabla^2 \tilde{\boldsymbol{u}}_h^{d,t_{n+1}} \|_{\tilde{T}} + \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \sum_{E \subset T} \frac{1}{2} C_{i,2} h_E^{3/2} \| \operatorname{Res}_E(\tilde{\boldsymbol{u}}_h^{t_{n+1}}) \| \| \nabla^2 \tilde{\boldsymbol{u}}_h^{d,t_{n+1}} \|_{\tilde{E}}.$$

$$(4.79)$$

Damit kann ein lokaler elementweise Fehlerindikator in einem Zeitinkrement I_n definiert werden:

$$\eta_{GO,lin,T}^{t_{n+1}} := C_{i,1} h_T^2 \|\operatorname{Res}_T(\tilde{\boldsymbol{u}}_h^{t_{n+1}})\| \|\nabla^2 \tilde{\boldsymbol{u}}_h^{d,t_{n+1}}\|_{\tilde{T}} + \sum_{E \subset T} \frac{1}{2} C_{i,2} h_E^{3/2} \|\operatorname{Res}_E(\tilde{\boldsymbol{u}}_h^{t_{n+1}})\| \|\nabla^2 \tilde{\boldsymbol{u}}_h^{D,t_{n+1}}\|_{\tilde{E}}.$$

$$(4.80)$$

Die Summation über alle Elemente ergibt den Fehlerindikator im gesamten betrachteten Gebiet $\Omega \times I_n$:

$$\eta_{GO,lin}^{t_{n+1}} := \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_{GO,lin,T}^{t_{n+1}}.$$
(4.81)

Den Fehlerindikator im gesamten Zeitbereich $I = \sum_{n=1}^{m} I_n$ erhält man durch Summation über alle Zeitinkremente I_n :

$$\eta_{GO,lin} := \sum_{I_n} \eta_{GO,lin}^{t_{n+1}}.$$
(4.82)

4.5 Gekoppelte Fehlerabschätzung in Ort und Zeit

Alternativ zu der vorgestellten Formulierung mit Finiten Elementen im Ort und einem Finite-Differenzen-Verfahren in der Zeit kann das betrachtete Anfangsrandwertproblem auch mit einer Galerkin-Methode in Raum und Zeit formuliert werden. Zwei grundsätzlich zu unterscheidende Galerkin-Methoden für die zeitliche Diskretisierung bieten sich hierzu an: die kontinuierliche und die diskontinuierliche Galerkin-Methode in der Zeit. Diese sind in der Literatur vorwiegend unter der englischsprachigen Bezeichnung "continuous-Galerkin method, cG(m) - cG(n)" bzw. "discontinuous-Galerkin method, cG(m) - dG(n)" verwendet. Dabei bezeichnet m und n den Polynomgrad der Ansatzfunktionen im Ort bzw. in der Zeit. Für die nachfolgenden Fehlerabschätzungen bieten sich die diskontinuierlichen Galerkin-Verfahren an, da sowohl die Ansatzfunktionen für die Lösungsvariablen $\{u, \sigma\}$ als auch für die Testfunktionen $\{v, \tau\}$ aus demselben Funktionenraum gewählt werden können. Man kann daher auch von einem Bubnov-Galerkin-Verfahren sprechen. Demgegenüber werden beim kontinuierlichen Galerkin-Verfahren die Ansatz- und Testfunktionen aus unterschiedlichen Funktionenräumen gewählt, das Verfahren kann somit als ein Petrov-Galerkin-Verfahren interpertiert werden (z. B. werden bei einer cG(1)-Approximation für Systeme von Differentialgleichungen erster Ordnung in der Zeit lineare Ansatzfunktionen und konstante Testfunktionen gewählt), siehe Eriksson et al. [51, 52].

Ansätze zur gekoppelten Raum-Zeit-Fehlerabschätzung für materiell nichtlineare Probleme der Plastizität und Viskoplastizität findet man in der Literatur sehr wenig. Die beiden Arbeiten, welche sich mit einer Raum-Zeit-Kopplung für diese Problemklasse beschäftigen, berücksichtigen eine sehr einfache Materialklasse; in der Arbeit von *Rannacher & Suttmeier* [119] wird ebenso wie in der Arbeit von *Larsson et al.* [82] ideale Plastizität ohne Verfestigung berücksichtigt. Ebenso fehlt eine Einordnung in die Kontinuums-Thermodynamik, was die Erweiterung auf komplexere Materialklassen, z. B. Modelle zur Beschreibung von Reibungsmaterialen der Geotechnik oder erweiterte Kontinuumstheorien, erschwert.

Aus methodischer Sicht ist das hier vorgestellte Verfahren den Methoden zur Fehlerabschätzung gekoppelter Raum-Zeit-Probleme, z. B. bei strukturdynamischen Problemen oder bei Problemen der Wärmeleitung ähnlich. Hierzu sei z. B. auf die Arbeiten von Eriksson et al. [52], Bangerth & Rannacher [15], Bangerth [14], Cirak [34], Schleupen & Ramm [122] sowie Maute [93] verwiesen.

Im Rahmen dieser Arbeit soll versucht werden, anhand der *Perzyna*-Viskoplastizität mit nichtlinearer-exponentieller Ver- bzw. Entfestigung einen allgemein gehaltenen Zugang zur Raum-Zeit-Fehlerabschätzung aufzuzeigen.

4.5.1 Raum-Zeit-Galerkin-Formulierungen

Ausgangspunkt bildet das Anfangsrandwertproblem der *Perzyna*-Viskoplastizität, welches nocheinmal vollständig angegeben werden soll:

Skalare Funktionen:	Ψ	=	$\hat{\Psi}^{ext}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}) + \hat{\Psi}^{int}(\alpha)$	in	$\Omega \times T$	
	Φ	=	$\hat{\Phi}^{ext}(\boldsymbol{\sigma}) + \hat{\Phi}^{int}(\phi)$	in	$\Omega \times T$	
Impulsbilanz:	$-{ m div}oldsymbol{\sigma}$	=	f	in	$\Omega \times T$	
Kinematik:	$oldsymbol{arepsilon}(oldsymbol{u})$	=	$ abla^{sym}oldsymbol{u}$	in	$\Omega \times T$	
	$\dot{arepsilon}$	=	$\dot{oldsymbol{arepsilon}}^{el}+\dot{oldsymbol{arepsilon}}^{vp}$	in	$\Omega \times T$	
Konstitutivgl.:	σ	=	$\frac{\partial \hat{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon},\boldsymbol{\varepsilon}^{vp},\alpha)}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}$	in	$\Omega \times T$	
	ϕ	=	$\frac{\partial \hat{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon},\boldsymbol{\varepsilon}^{vp},\alpha)}{\partial \alpha}$	in	$\Omega \times T$	(4.83)
Evolutionsgl.:	$\dot{oldsymbol{arepsilon}}^{vp}$	=	$rac{1}{\eta}\left\langle \Phi ight angle rac{\partial \Phi}{\partial oldsymbol{\sigma}}$	in	$\Omega \times T$	(4.00)
	\dot{lpha}	=	$-rac{1}{\eta}\left\langle \Phi ight angle rac{\partial\Phi}{\partial\phi}$	in	$\Omega \times T$	

Randbedingungen:	$\pmb{\sigma}\cdot \pmb{n}$	=	\overline{t}	auf	$\Gamma_N \times T$
	$oldsymbol{u}$	=	$ar{u}$	auf	$\Gamma_D \times T$
Anfangsbedingungen:	$oldsymbol{\sigma} _{t=0}$	=	$ar{oldsymbol{\sigma}}(\cdot,t_0)$	bei	$\Omega \times t_0$
	$oldsymbol{u}ert_{t=0}$	=	$ar{oldsymbol{u}}(\cdot,t_0)$	bei	$\Omega \times t_0$

Entsprechend der Herleitung in den vorangegangenen Abschnitten folgt damit die kontinuierliche schwache Form in Raum und Zeit:

$$\int_{I} (\boldsymbol{C}^{-1} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\varepsilon}(\dot{\boldsymbol{u}}), \boldsymbol{\tau}) \, \mathrm{d}t = \int_{I} -\frac{1}{\eta} (\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma} - \Pi \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}) \, \mathrm{d}t,$$

$$\int_{I} (\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v})) \, \mathrm{d}t = \int_{I} (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}t + \int_{I} (\bar{\boldsymbol{t}}, \boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}t.$$
(4.84)

sowie die (gewichtete) schwache Form der Anfangsbedingung für die Spannung zum Zeitpunkt $t = t_0$?

$$\left(\boldsymbol{C}^{-1}:\left(\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x},t_{0})-\bar{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x},t_{0})\right),\boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{x},t_{0})\right)=0.$$
(4.85)

Durch die Wahl diskontinuierlicher Test- und Ansatzfunktionen $\boldsymbol{\sigma}(\cdot, t), \boldsymbol{\tau}(\cdot, t)$ bzw. $\boldsymbol{u}(\cdot, t), \boldsymbol{v}(\cdot, t)$ in der Zeit kann die schwache Form additiv in einzelne Zeitschritte $I = \sum_{n=1}^{m} I_n$ zerlegt werden.⁸ Durch die Diskontinuität der Funktionen in zeitlicher Richtung entstehen Sprunganteile in der Zeit, welche als Anfangsbedingungen der einzelnen Zeitschritte I_n interpretiert werden können. Die vorgenommene Gewichtung erlaubt es, daß die schwache Form der Sprünge zu der ersten Gleichung, siehe (4.86), addiert werden können. Für die schwache Form in einem Zeitschritt I_n gilt damit im Rahmen eines diskontinuierlichen-Galerkin-Verfahrens:

$$(\boldsymbol{C}^{-1}: [\![\boldsymbol{\sigma}(\cdot, t_n)]\!], \boldsymbol{\tau}) + \int_{I_n} (\boldsymbol{C}^{-1}: \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\varepsilon}(\dot{\boldsymbol{u}}), \boldsymbol{\tau}) \, \mathrm{d}t = \int_{I_n} -\frac{1}{\eta} (\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma} - \Pi \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}) \, \mathrm{d}t, \quad (4.86)$$

$$\int_{I_n} (\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v})) \, \mathrm{d}t = \int_{I_n} (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}t + \int_{I_n} (\bar{\boldsymbol{t}}, \boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}t. \quad (4.87)$$

Mit den Sprungbedingungen, siehe Abbildung 4.5

$$\llbracket \boldsymbol{\sigma}(\cdot, t_n) \rrbracket := \boldsymbol{\sigma}(\cdot, t_n^+) - \boldsymbol{\sigma}(\cdot, t_n^-)$$
(4.88)

und den Definitionen:

$$\boldsymbol{\sigma}(\cdot, t_n^+) = \lim_{\Delta t \to 0^+} \boldsymbol{\sigma}(\cdot, t_n + \Delta t_n),$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\cdot, t_n^-) = \lim_{\Delta t \to 0^-} \boldsymbol{\sigma}(\cdot, t_n + \Delta t_n).$$
(4.89)

⁷Die 2. Anfangsbedingung für die Verschiebung kann aus einer Gleichgewichtsbetrachtung zum Ausgangszeitpunkt $t = t_0$, d. h. aus einer algebraischen Gleichung bezüglich der Zeit, bestimmt werden.

⁸Aus algorithmischer Sicht unterscheidet sich dabei das kontinuierliche vom diskontinuierlichen Galerkin-Verfahren in der Zeit nur unwesentlich, da auch beim cG-Verfahren das algebraische Gleichungssystem auf einem Zeitintervall I_n gelöst werden kann. Einzig die Stetigkeitsanforderungen, an die in zeitlicher Richtung kontinuierlichen Ansaätze, verlangen im Rahmen eines cG-Verfahrens nach einer Modifikation des resultiernden Gleichungssystems.

Durch die Wahl endlich-dimensionaler Ansatzfunktionen, z. B. einer cG(2)-cG(1)-dG(0)-Methode mit quadratischen Ansätzen für die Verschiebungen und linearen Ansätzen für die Spannungen im Ort sowie konstanten Ansätzen für die Verschiebungen und Spannungen in zeitlicher Richtung, erhält man das Finite-Element-Problem:

"Finde eine Finite-Element-Lösung \boldsymbol{u}_h und $\boldsymbol{\sigma}_h$, so daß gilt:"

$$(\boldsymbol{C}^{-1}: \llbracket \boldsymbol{\sigma}_h(\cdot, t_n) \rrbracket, \boldsymbol{\tau}) + \int_{I_n} (\boldsymbol{C}^{-1}: \dot{\boldsymbol{\sigma}}_h - \boldsymbol{\varepsilon}(\dot{\boldsymbol{u}}_h), \boldsymbol{\tau}_h) \, \mathrm{d}t = \int_{I_n} -\frac{1}{\eta} (\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}_h - \Pi \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}_h, \boldsymbol{\tau}_h) \, \mathrm{d}t,$$
$$\int_{I_n} (\boldsymbol{\sigma}_h, \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}_h)) \, \mathrm{d}t = \int_{I_n} (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{v}_h) \, \mathrm{d}t + \int_{I_n} (\bar{\boldsymbol{t}}, \boldsymbol{v}_h) \, \mathrm{d}t.$$

Mittels der Definition der Fehler

$$\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{u}} \coloneqq \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h \quad \text{und} \quad \boldsymbol{e}_{\sigma} = \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_h$$

$$(4.90)$$

erhält man die fundamentale Galerkin-Orthogonalität:

$$(\boldsymbol{C}^{-1} : \llbracket \boldsymbol{e}_{\sigma}(\cdot, t_{n}) \rrbracket, \boldsymbol{\tau}) + \int_{I_{n}} (\boldsymbol{C}^{-1} : \dot{\boldsymbol{e}}_{\sigma} - \boldsymbol{\varepsilon}(\dot{\boldsymbol{e}}_{u}), \boldsymbol{\tau}_{h}) \, \mathrm{d}t = \int_{I_{n}} -\frac{1}{\eta} (\operatorname{dev} \boldsymbol{e}_{\sigma} - \Pi \operatorname{dev} \boldsymbol{e}_{\sigma}, \boldsymbol{\tau}_{h}) \, \mathrm{d}t,$$

$$(4.91)$$

$$\int_{I_{n}} (\boldsymbol{e}_{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{v}_{h})) \, \mathrm{d}t = 0.$$

Setzt man die diskrete Finite-Element-Lösung in die starke Form des Anfangsrandwertproblems ein, so ergibt sich eine Definition der Residuenanteile:

$$\operatorname{Res}_{T}(\boldsymbol{u}_{h}) := \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{h} + \boldsymbol{f}, \qquad \forall T \in \mathcal{T}_{h}, \qquad (4.92)$$

$$\operatorname{Res}_{T}(\boldsymbol{\sigma}_{h}) := \boldsymbol{C}^{-1} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{h} - \boldsymbol{\varepsilon}(\dot{\boldsymbol{u}}_{h}) + \frac{1}{\eta} (\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}_{h} - \Pi \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}_{h}), \quad \forall T \in \mathcal{T}_{h}, \quad (4.93)$$



Abbildung 4.5: Diskontinuierlicher Ansatz für die Spannung $\boldsymbol{\sigma}(\,\cdot\,,t)$

$$\operatorname{Res}_{E}(\boldsymbol{u}_{h}) := \begin{cases} \llbracket \boldsymbol{\sigma}_{h} \cdot \boldsymbol{n} \rrbracket, & \forall E \in \mathcal{E}_{h,\Omega}, \\ \bar{\boldsymbol{t}} - \boldsymbol{\sigma}_{h} \cdot \boldsymbol{n}, & \forall E \in \mathcal{E}_{h,\Gamma_{N}}, \\ \boldsymbol{0}, & \forall E \in \mathcal{E}_{h,\Gamma_{D}}, \end{cases}$$
(4.94)

$$\operatorname{Res}_{E}(\boldsymbol{\sigma}_{h}) := [\![\boldsymbol{C}^{-1}:\boldsymbol{\sigma}_{h}(\cdot,t_{n})]\!], \qquad \forall E \in \mathcal{E}_{h,I_{n}}. \quad (4.95)$$

Der Residuenanteil $\operatorname{Res}_E(\boldsymbol{\sigma}_h) \ \forall E \in \mathcal{E}_{h,I_n}$ beschreibt dabei den Sprunganteil in zeitlicher Richtung.

Die Abschätzung des zielorientierten Diskretisierungsfehlers erfolgt mittels dualer Methoden. Analog zu den vorgestellten zielorientierten Methoden in Kapitel 3 wird dazu eine energetische Äquivalenz zwischen dem primalen und dem dualen Problem betrachtet:

$$(\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}^d) \stackrel{!}{=} (\boldsymbol{L}^{\star}\,\boldsymbol{\varphi}^d,\boldsymbol{\varphi}), \tag{4.96}$$

wobei die Vektoren φ die primalen Lösungsvariablen und φ^d die dualen Lösungsvariablen darstellen:

$$\varphi = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u} \\ \boldsymbol{\sigma} \end{bmatrix}$$
 und $\varphi^d = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}^d \\ \boldsymbol{\sigma}^d \end{bmatrix}$. (4.97)

Aus der Beziehung (4.96) kann der Satz der Differentialoperatoren, also das Anfangsrandwertproblem des dualen Problems, mittels partieller Integration in Raum und Zeit bestimmt werden. Nach einigen Umformungen gelangt man zu dem dualen Anfangsrandwertproblem in starker Form:

$$-\boldsymbol{C}^{-1}: \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{d} - \boldsymbol{\varepsilon}(\dot{\boldsymbol{u}}^{d}) = -\frac{1}{\eta} (\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{d} - \tilde{\Pi} \, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{d}) \quad \text{in} \quad \Omega \times T,$$

$$-\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}^{d} = \boldsymbol{j} \qquad \qquad \text{in} \quad \Omega \times T,$$

$$\boldsymbol{u}^{d} = \boldsymbol{0} \qquad \qquad \text{auf} \quad \Gamma_{D} \times T,$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{d} \cdot \boldsymbol{n} = \bar{\boldsymbol{k}} \qquad \qquad \text{auf} \quad \Gamma_{N} \times T,$$

$$\boldsymbol{C}^{-1}: \boldsymbol{\sigma}^{d}|_{t=\bar{t}} = \bar{\boldsymbol{l}}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{t}) \qquad \qquad \text{bei} \quad \Omega(\bar{\boldsymbol{x}}) \times \bar{t}.$$

(4.98)

Dies stellt ein "Rückwärtsproblem" in zeitlicher Richtung dar, wie man an dem Vorzeichenwechsel im ersten Term der linken Seite von Gl. (4.98a) erkennt. Die rechte Seite des dualen Problems, d. h. die Volumenkräfte j bzw. die Randspannungen \bar{k} und die Anfangsbedingung $\bar{j}(\bar{x}, \bar{t})$ werden dem zu kontrollierenden Fehlerfunktional angepasst, siehe Kapitel 3.2. Bei Verwendung eines Stoffgesetzes mit denselben Konstitutivgleichungen wie für das primale Problem ist der duale Projektionsoperator Π identisch mit dem primalen Operator Π . Für die Spannungen $\tilde{\sigma}^d$ werden dann wie im primalen Problem die Deviatorspannungen eingesetzt. Damit gilt:

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^d = \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma} \quad \text{und} \quad \tilde{\Pi} = \Pi.$$
 (4.99)

Man erkennt in Gl. (4.98), daß das duale Problem infolge der nicht-selbstadjungierten Differentialoperatoren nicht mit dem primalen Problem identisch ist:

$$\boldsymbol{L} \neq \boldsymbol{L}^{\star}.\tag{4.100}$$

Für weitere Ausführungen zu nicht-selbstadjungierten Randwertproblemen sei auch auf Cirak [34], Maute [93], Steeb, Cirak & Ramm [126] und Steeb, Maute & Ramm [127] verwiesen.

Das duale Problem beginnt dementsprechend zu einem Zeitpunkt $t = \bar{t}$ und läuft rückwärts bis zu dem Zeitpunkt t = 0, an dem das primale Problem beginnt. Die Anfangsbedingung $\bar{l}(\bar{x}, \bar{t})$ bzw. die Lastterme j, \bar{k} werden wiederum so skaliert, daß die duale Norm identisch Eins ist:

$$\|[j; \bar{k}; \bar{l}(\bar{x}, \bar{t})]\| = 1.$$
 (4.101)

Durch die Wahl einer geeigneten Belastung bzw. Anfangsbedingung hat man damit auch bei der gekoppelten Raum-Zeit-Fehlerabschätzung wieder die Möglichkeit, die Fehlernorm festzulegen. Beispielsweise kann der Energienormfehler zu einem Zeitpunkt $t = \bar{t}$ im Gebiet Ω mittels folgender Anfangsbedingung $\bar{l}(\boldsymbol{x}, \bar{t})$ abgeschätzt werden:

$$\bar{\boldsymbol{l}}(\boldsymbol{x},\bar{t}) = \frac{\boldsymbol{C}^{-1}(\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\sigma}_h)|_{\bar{t}}}{\|\boldsymbol{C}^{-1}(\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\sigma}_h)|_{\bar{t}}\|}.$$
(4.102)

Andere Fehlernormen sind natürlich entsprechend den Vorschlägen für das linear-elastische Randwertproblem im vorangegangenen Kapitel ebenso möglich, siehe Gl. (3.98), (3.99) und Gl. (3.104).

Nutzt man nun eine Dualitätsbeziehung, siehe Gl. (3.93) bei linear-elastischen Problemen und Gl. (4.96), zwischen dem Anfangsrandwertproblem des Fehlers des primalen Problems und dem dualen Anfangsrandwertproblem, so gelangt man zu der lokalen oder zielorientierten Form der Fehlergleichung in schwacher Form:

$$(\boldsymbol{e}^{u,\sigma}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}; \bar{\boldsymbol{l}}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{t}})]) = (\boldsymbol{L} \, \boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{e}), \boldsymbol{\varphi}^d) \tag{4.103}$$

Mit Hilfe des Aubin-Nitsche-Tricks formuliert sich damit die Dualitätsbeziehung für das Anfangsrandwertproblem der Perzyna-Viskoplastizität:

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \bar{\boldsymbol{k}}; \bar{\boldsymbol{l}}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{t}})]) = \sum_{n=1}^{m} \left[\sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} \int_{I_{n}} \int_{T} \operatorname{Res}_{T}^{\sigma} : \boldsymbol{\sigma}^{d} \, \mathrm{d}v \, \mathrm{d}t \right. \\ \left. + \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} \int_{I_{n}} \int_{T} \operatorname{Res}_{T}^{u} \cdot \boldsymbol{u}^{d} \, \mathrm{d}v \, \mathrm{d}t \right. \\ \left. + \sum_{E \in \mathcal{E}_{h}} \int_{I_{n}} \int_{E} \operatorname{Res}_{E}^{u} \cdot \boldsymbol{u}^{d} \, \mathrm{d}a \, \mathrm{d}t \right.$$

$$\left. + \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} \int_{T} \operatorname{Res}_{E,I_{n}}^{\sigma} : \boldsymbol{\sigma}^{d} \, \mathrm{d}v \right]$$

$$(4.104)$$

Wobei in Gl. (4.104) im Gegensatz zur Abschätzung für den quasistatischen Fall die Residuen nun noch über die einzelnen Zeitintervalle I_n mit n = 1, ..., m aufzusummieren sind. Mit der Standard-Argumentation kann auf Gl. (4.104) die Galerkin-Orthogonalität für das duale Problem angewendet werden:

$$(\boldsymbol{e}, [\boldsymbol{j}; \boldsymbol{\bar{k}}; \boldsymbol{\bar{l}}(\boldsymbol{\bar{x}}, \boldsymbol{\bar{t}});]) = \sum_{n=1}^{m} \left[\sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} \int_{I_{n}} \int_{T} \operatorname{Res}_{T}^{\sigma} : (\boldsymbol{\sigma}^{d} - \boldsymbol{\sigma}_{h}^{d}) \, \mathrm{d}v \, \mathrm{d}t \right. \\ \left. + \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} \int_{I_{n}} \int_{T} \operatorname{Res}_{T}^{u} \cdot (\boldsymbol{u}^{d} - \boldsymbol{u}_{h}^{d}) \, \mathrm{d}v \, \mathrm{d}t \right. \\ \left. + \sum_{E \in \mathcal{E}_{h}} \int_{I_{n}} \int_{E} \operatorname{Res}_{E}^{u} \cdot (\boldsymbol{u}^{d} - \boldsymbol{u}_{h}^{d}) \, \mathrm{d}a \, \mathrm{d}t \right.$$

$$\left. + \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} \int_{T} \operatorname{Res}_{E,I_{n}}^{\sigma} : (\boldsymbol{\sigma}^{d} - \boldsymbol{\sigma}_{h}^{d}) \, \mathrm{d}v \right]$$

$$(4.105)$$

Diese Fehlergleichung für das vorab festgelegte Fehlerfunktional $(e, [j; \bar{k}; \bar{l}(\bar{x}, \bar{t})])$ kann natürlich wieder numerisch gelöst werden. Der numerische Aufwand, der zur Lösung der Fehlergleichung aufgewendet werden muß, ist allerdings sehr hoch, da infolge der Optimalität des *Galerkin*-Verfahrens das duale Rückwärtsproblem mit derselben Diskretisierung wie das primale Problem auf dem gesamten Zeitintervall $\bar{t} \longrightarrow t = 0$ gelöst werden muß. Zusätzlich muß zur Bestimmung des dualen Fehleranteils eine Vergleichslösung mit einer feineren Diskretisierung numerisch berechnet werden. Dieser sehr hohe numerische Aufwand ist i. a. natürlich nicht zu rechtfertigen.

Deshalb bietet es sich wieder an, die schwache Form der Fehlergleichung (4.104) bzw. (4.105) wie im vorangegangenen Kapitel abzuschätzen. Der hohe numerische Aufwand, also die Lösung des diskretisierten dualen Rückwärtsproblems im gesamten Raum-Zeit-Gebiet, bleibt allerdings erhalten.

Kapitel 5

Nichtlineare adaptive Finite-Element-Methoden

Im folgenden Kapitel werden die adaptiven Methoden bereitgestellt, die für ein nichtlineares adaptives Konzept in einem Finite-Element-Programm benötigt werden. Um möglichst komplexe Gebiete mit Finiten Elementen beschreiben zu können, wird dabei von einer freien Vernetzung des Problems ausgegangen. Neben einem leistungsfähigen Netzgenerator, der auf einer Netzdichtefunktion basiert, werden Methoden des effizienten Datentransfers von Knoten- und Gauß-Punktwerten diskutiert.

Des weiteren wird in einem nichtlinearen Gesamtkonzept die Einbettung der einzelnen Methoden in den adaptiven Algorithmus vorgestellt.

5.1 Adaptive Finite-Element-Methoden

In diesem Abschnitt wird auf die einzelnen numerischen Aspekte der adaptiven Netzgenerierung innerhalb einer Finite-Element-Analyse eingegangen.

Eine Anpassung der Finite-Element-Diskretisierung an berechnete oder abgeschätzte Fehlerverteilungen kann grundsätzlich auf unterschiedliche Weise durchgeführt werden:

• *h*-Adaptivität

Im Rahmen einer Diskretisierungsanpassung wird die charakteristische Elementgröße h_T , siehe Gl. (3.15), an die lokale Fehlerverteilung η_T angepaßt. Die Ansatzordnung p der Finiten Elemente wird nicht verändert.

• *p*-Adaptivität

Hierbei wird der Polynomgrad p der Ansatzordnung der Finiten Elemente an die lokale Fehlerverteilung η_T angepaßt. Die charakteristische Elementgröße h_T wird nicht angepaßt. Für weitere Ausführungen sei z. B. auf die Arbeiten von Szabó & Babuška [138], Schwab [123], Düster & Rank [46] und Rank et al. [114] verwiesen.

• *hp*-Adaptivität

Hierbei werden sowohl die charakteristische Elementgröße h_T als auch der Polynomgrad p an die lokale Fehlerverteilung η_T angepaßt. Arbeiten zur hp-Adaptivität

finden sich z. B. bei Ainsworth & Senior [7], Demkowicz et al. [41, 42] und Schwab [123].

• r-Adaptivität

Im Rahmen der *r*-Adaptivität werden die Knoten und damit die globalen Freiheitsgrade im Gesamtgebiet \mathcal{T}_h so angeordnet, daß sie der lokalen Verteilung η_T des Diskretsierungsfehlers entsprechen.

• *d*- und *m*-Adaptivität

Hierunter wird die Dimensions- und die Modelladaptivität verstanden. Adaptiert wird in der Dimensionsadaptivität die gewählte Raumdimension des modellierten Problems. Darunter kann z. B. der Übergang von einer zwei- zu einer dreidimensionalen Betrachtung verstanden werden.

In der Modelladaptiviät wird das gewählte mechanische Modell an den Modellierungsfehler angepaßt. Bei der Betrachtung von zwei-dimensionalen biegebeanspruchten *Reissner-Mindlin*-Plattentragwerken kann dies im Randschichtbereich z. B. einen Übergang auf die drei-dimensionale Theorie bedeuten. Eine Einführung in die *d*und *m*-Adaptivität findet sich z. B. in den Arbeiten von *Ohnimus* [105] und *Stein* & *Ohnimus* [132].

In dieser Arbeit werden nur h-adaptive Finite-Element-Methoden näher untersucht. Konzeptionell lassen sich allerdings die grundsätzlichen Überlegungen der Fehlerabschätzung der Kapitel 2 und 3 auch auf hp- und p-adaptive Verfahren übertragen.

5.2 Strategien der adaptiven Netzgenerierung

Innerhalb eines adaptiven Finite-Element-Konzepts werden Netzgenerierungsmethoden benötigt, die mit möglichst minimalem numerischen Aufwand die Vorgaben der Fehlerindikatoren an das zu generierende Netz umsetzen. Andererseits müssen die Algorithmen so flexibel sein, daß sie diese Vorgaben auch für komplex berandete Problemgebiete umsetzen können.

Zwei grundsätzlich zu unterscheidende Konzepte der Netzgenerierung erfüllen diese Ansprüche, wobei jedes Verfahren gewisse Vor- und Nachteile aufweist:

- Reguläre Netzgenerierungstechniken mit hierarchischen Verfeinerungsmethoden.
- Freivernetzer mit Wiedervernetzungsstrategien in jedem adaptiven Schritt.

Bevor eine Netzverfeinerung vorgenommen werden kann, müssen die berechneten beziehungsweise abgeschätzten Fehler η_T noch weiter nachbearbeitet werden.

Die lokal verteilten absoluten Fehlerwerte η_T werden im Rahmen einer numerischen Umsetzung zu Beginn der Netzgenerierung in dimensionslose Größen ξ_T transformiert, indem sie durch die vorgegebene Fehlertoleranz TOL geteilt werden. Damit erhält man die gewichteten Fehlermaße ξ_T :

$$\xi_T := \frac{\eta_T}{TOL}.\tag{5.1}$$

Der gewichtete Gesamtfehler berechnet sich wieder durch Summation über alle Elemente $T \in \mathcal{T}_h$:

$$\xi = \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \xi_T^2 \right\}^{1/2}.$$
(5.2)

5.2.1 Beschreibung der Dichtefunktion

Die Netzdichtefunktion $r_T(\xi)$ dient als Verbindungselement zwischen Fehlerabschätzung und Netzgenerierung. Sie wird als eine Funktion beschrieben, welche die lokale Elementgröße eines alten Elementes und die entsprechende Größe eines neuen Elementes verknüpft Die Größe eines alten und eines neuen Elementes wird durch die charakteristische Elementlänge h_E respektive \tilde{h}_E ausgedrückt, siehe Gl. (3.15):

$$r_T(\xi_T) := \frac{\tilde{h}_E}{h_E}.$$
(5.3)

Die Dichtefunktion ist also eine Funktion des lokalen Fehlerindikators ξ_T . Der Quotient zwischen neuer und alter Elementgröße aus Gl. (5.3) gibt somit an, ob ein Element verfeinert oder vergröbert wird:

$$r_T(\xi_T) \text{ mit } \begin{cases} r_T < 1 & \text{Verfeinerung des Elementes,} \\ r_T = 1 & \text{Elementgröße bleibt erhalten.} \\ r_T > 1 & \text{Vergröberung des Elementes.} \end{cases}$$
(5.4)

Im folgenden wird nun die Frage diskutiert, wie aus einer gegebenen lokalen Fehlerverteilung $\xi_T(\eta_T)$ eine solche Dichtefunktion bestimmt werden kann.

Zur weiteren Beschreibung von Dichtefunktionen sowie Details sei auf die folgenden Arbeiten verwiesen: Zienkiewicz & Zhu [151], Oñate & Bugeda [101], Ladèveze, Pelle & Rouget [81], Li & Bettes [86] und Ammann [9].

5.2.2 Netzoptimalitätskriterien

Eine adaptive Finite-Element-Methode kann als ein beschränktes Optimierungsproblem mit Nebenbedingung für das zugrundeliegende Netz der vorgenommenen Diskretisierung aufgefaßt werden.

Dementsprechend kann von einem "optimalen Netz" gesprochen werden, falls einer der beiden folgenden Punkte zutrifft, siehe auch *Ellsiepen* [48]:

1. Das Finite-Element-Netz ist optimal, wenn mit einer geringstmöglichen Anzahl an Freiheitsgraden (DOF) der geschätzte Fehler $\eta < TOL$ ist. Damit läßt sich ein beschränktes Optimierungsproblem mit Nebenbedingung formulieren. Die Stationarität der folgenden Lagrange-Funktion $\mathcal{L}(DOF)$ wird gesucht

$$\mathcal{L}(DOF) \longrightarrow \text{stat.}$$
 (5.5)

mit der Nebenbedingung:

$$\eta \le TOL. \tag{5.6}$$

2. Das Finite-Element-Problem ist optimal, wenn bei einer gegebenen Anzahl von Freiheitsgraden max(DOF) eine Lösung mit geringstmöglichem Fehler η erzielt wird. Damit ist die Stationarität der Lagrange-Funktion $\mathcal{L}(\eta)$ gesucht:

$$\mathcal{L}(\eta) \longrightarrow \text{stat.}$$
 (5.7)

Die Nebenbedingung für dieses Stationaritätsproblem lautet:

$$DOF \le \max(DOF).$$
 (5.8)

Je nach dem betrachteten Anwendungsproblem kann dabei das eine oder andere der beiden vorgestellten Optimierungsprobleme gelöst werden. Die Lösung erfolgt dabei durch Netzverfeinerung auf iterativer Weise, wobei man sich dabei eine weitere (gewünschte) Eigenschaft der lokalen Fehlerverteilung η_T in den einzelnen Finiten Elementen zunutze macht. Diese Eigenschaft geht davon aus, daß im gesuchten Optimum der Diskretisierungsfehler η_T in allen Elementen bezüglich der betrachteten Fehlernorm gleich sein soll.

Eine Reformulierung des Netzoptimierungsproblems lautet damit: "Finde ein neues, möglichst optimales Finite-Element-Netz $\tilde{\mathcal{T}}_h$ für das

1. bei einer globalen Fehlerabschätzung (für die Fehlerindikatoren η , Gl. (3.24), η_{Z_2} , Gl. (3.59) und $\eta_{Z_2^{\sigma}}$, Gl. (3.66)) gilt:

$$\tilde{\eta} = \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \tilde{\eta}_T^2 \right\}^{1/2} \approx TOL.$$
(5.9)

2. bei einer lokalen oder zielorientierten Fehlerabschätzung (für die Fehlerindikatoren η_{GO} , Gl. (3.115), $\eta_{Z_2,GO}$, Gl. (3.130) und $\eta_{Z_2^{\sigma},GO}$, Gl. (3.134)) gilt:

$$\tilde{\eta} = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \tilde{\eta}_T \approx TOL.$$
 (5.10)

Diese Unterscheidung des Fehlers $\tilde{\eta}$ ist ein Resultat der unterschiedlichen Techniken der Fehlerabschätzung. Bei den (residuenbasierten) globalen Fehlerschätzern wird die *Cauchy-Schwarz*-Ungleichung zweimal angewendet. Damit ergibt sich der Gesamtfehler aus der Wurzel der Summe der elementweisen Fehler η_T . Bei der zielorientierten Fehlerabschätzung hingegen werden die elementweisen Fehler η_T direkt aufsummiert.

Mit dem vorgestellten Optimierungsproblem können nun direkt Kriterien für die zu bestimmende Netzdichtefunktion r_T formuliert werden. Bei bekannter Fehlerverteilung η_T hat man somit mehrere Möglichkeiten, das Netzoptimierungsproblem zu lösen:

1. Gleichverteilung des Fehlers

Im Rahmen dieser Netzdichtefunktion wird von dem elementweisen Fehler η_T ausgegangen. Für die Dichtefunktion r_T muß ebenfalls zwischen einer globalen und einer zielorientierten Fehlerabschätzung unterschieden werden.

(a) *Globale Fehlerabschätzung* bezüglich Gl. (5.9):

Der Netzgenerator zielt hierbei darauf ab, die lokalen Fehler η_T gleichmäßig zu verteilen. Das heißt, das Finite-Element-Netz wird solange modifiziert, bis jedes neue Element $\tilde{T} \in \tilde{\mathcal{T}}_h$ im Rahmen einer gegebenen Toleranz TOL denselben Fehler $\tilde{\eta}_T$ besitzt:

$$\tilde{\eta}_T = \frac{TOL}{\sqrt{\tilde{n}_T}}, \quad \forall \tilde{T} \in \tilde{\mathcal{T}}_h.$$
(5.11)

Dabei stellt \tilde{n}_T die Gesamtanzahl aller Elemente $\tilde{T} \in \tilde{\mathcal{T}}_h$ im neuen Netz $\tilde{\mathcal{T}}_h$ dar. Aus *a-priori*-Abschätzungen für den Fehler in der Energienorm erhält man Aussagen, die den Energienormfehler gegen die charakteristische Elementgröße h_E abhängig vom gewählten Polynomgrad p abschätzen. Dadurch lassen sich folgende näherungsweise gültigen Aussagen für die lokalen Fehler η_T treffen:

$$\eta_T \approx C h_E^p \quad \text{und} \quad \tilde{\eta}_T \approx C \tilde{h}_E^p.$$
 (5.12)

C ist eine von der Elementgröße h unabhängige Konstante. Unter der Verwendung der Definition der Netzdichte (5.3) folgt damit:

$$r_T = \frac{\tilde{h}_E}{h_E} = \left\{\frac{\tilde{\eta}_T}{\eta_T}\right\}^{1/p} = \left\{\frac{TOL}{\sqrt{\tilde{n}_T}\,\eta_T}\right\}^{1/p}.$$
(5.13)

Damit erhält man eine Netzdichtefunktion, die in Abhängigkeit einer vorgegebenen Anzahl von neuen Elementen \tilde{n}_T aus der aktuellen Fehlerverteilung η_T berechenbar ist. Da \tilde{n}_T von der Qualität der Verfeinerung des Netzgenerators abhängt, muß die Fehlergleichverteilung auf iterativem Weg in mehreren Schritten erfolgen.

(b) Lokale oder zielorientierte Fehlerabschätzung bezüglich Gl. (5.10):

Eine Gleichverteilung des Fehlers $\tilde{\eta}$ bedeutet, daß nach Auswertung der Fehlersumme (5.10) der neue elementweise Fehler η_T in einem Element $\tilde{T} \in \tilde{\mathcal{T}}_h$ sich wie folgt berechnet:

$$\tilde{\eta}_T = \frac{TOL}{\tilde{n}_T}, \quad \forall \tilde{T} \in \tilde{\mathcal{T}}_h.$$
(5.14)

Unter der Annahme einer *a-priori*-Abschätzung nach Gl. (5.12) resultiert daraus die Netzdichtefunktion r_T :

$$r_T = \frac{\tilde{h}_E}{h_E} = \left\{\frac{\tilde{\eta}_T}{\eta_T}\right\}^{1/p} = \left\{\frac{TOL}{\tilde{n}_T \eta_T}\right\}^{1/p}.$$
(5.15)

2. "Fixed-Fraction" -Strategie

In jedem adaptiven Verfeinerungsschritt werden die Elemente $T \in \mathcal{T}_h$ ihrer Fehlergröße η_T nach geordnet. Anschließend wird eine bestimmte Anzahl n_r oder ein vorgegebener Prozentsatz aller Elemente mit dem größten Fehler zur Verfeinerung markiert. Entsprechend wird eine vorgegebene Anzahl n_c von Elementen mit dem kleinsten Fehler vergröbert.

$$r_T(\xi) := \begin{cases} 2 & n_c \text{ aller Elemente werden vergröbert,} \\ 1/2 & n_r \text{ aller Elemente werden verfeinert,} \\ 1 & \text{Elementgröße wird nicht verändert.} \end{cases}$$
(5.16)

Bemerkung:

Es darauf hingewiesen, daß die "Fixed-Fraction" -Strategie in der in Gl. (5.16) beschriebenen Form sich für eine hierarchische Netzverfeinerung anbietet. Dabei wird zuerst jede Kante eines zu verfeinernden viereckigen Elementes halbiert. Anschließend wird die Kompatibilität der C^0 -kontinuierlichen Knoten-Verschiebungen durch Übergangselemente wiederhergestellt, siehe Abbildung 5.3 und 5.4.

Allerdings kann eine Auswertung der Dichtefunktion nach der "Fixed-Fraction" - Strategie auch für eine Wiedervernetzungsstrategie verwendet werden, siehe Abbildung 5.1.

Insbesondere im Rahmen inelastischer Problemstellungen wurde die "Fixed-Fraction" -Strategie in den untersuchten numerischen Beispielen erfolgreich eingesetzt. Durch eine festgelegte Vorgabe der Anzahl zu verfeinernder respektive zu vergröbernder Elemente konnte eine sehr effiziente und stabile Wiedervernetzung auch im postkritischen Bereich erreicht werden.

5.2.3 Wiedervernetzungsstrategie

Als erstes Verfahren soll die freie Vernetzung der Gebiete kombiniert mit einer Wiedervernetzungsstrategie angesprochen werden. Dieser Methode ist die größtmögliche Flexibilität mit der Anwendungsmöglichkeit auf zwei-, aber auch dreidimensionale Gebiete zuzusprechen. Bekannte Methoden zur Freivernetzung zweidimensionaler Gebiete sind unter anderen die *Delaunay*-Triangulierer und sogenannte "Advancing Front" -Techniken. Die Basis der Freivernetzung des Rechengebietes bildet der nach der "Advancing Front" -Technik arbeitende Netzgenerator FREEM des Finite-Element-Programmsystems **CARAT**, siehe Abbildung 5.2. FREEM wurde am Institut für Baustatik der Universität Stuttgart entwickelt, siehe *Rehle* [120, 121], und ist als Weiterentwicklung der Arbeiten von *Peraire et al.* [108] und *Lo* [87] zu verstehen. Im Rahmen dieser Arbeit wird nicht auf die Netzgenerierung als solche eingegangen, sondern nur das prinzipielle Vorgehen erläutert, um die



Abbildung 5.1: "Fixed-Fraction" -Dichtefunktion

Einbettung des Netzgenerators in das adaptive Gesamtkonzept zu erläutern. Für Details zur Netzgenerierung sei auf die o.g. Arbeiten verwiesen.

Der Netzgenerator ist in der Lage, sowohl homogene als auch adaptiv verfeinerte Finite Elemente Netze für zweidimensionale Probleme zu generieren. Mittels geeigneter Projektionsmethoden können mit FREEM aber auch gekrümmte Strukturen (z. B. Schalen) vernetzt werden.

Durch die sequentiell ablaufende Vernetzungsstrategie wird das betrachtete Gebiet Ω zuerst mit Dreieckselementen nach der "Advancing Front" -Technik generiert. Im Anschluß daran werden benachbarte Dreieckselemente zu Viereckselementen vereinigt. Dies ist nicht für alle Dreieckselemente möglich, so daß einige Dreiecke verbleiben. Die verbleibenden Dreiecke werden anschließend in drei Vierecke und die Viereckselemente in vier Vierecke weiter unterteilt. Eine Netzglättungsroutine im Anschluß sichert eine verbesserte Qualität des reinen Vierecksnetzes.

Somit kann der Netzgenerator FREEM also zur Generierung dreiecksförmiger Finiter Elemente (3-, 6- und 9-knotig) und viereckiger Finiter Elemente (4-, 8-, 9- und 16-knotig) in **CRAT**verwendet werden. Die Netzgröße der generierten Finiten Elemente richtet sich nach einer vorgegebenen Netzdichtefunktion $r_T(\xi)$. Das heißt, daß die Größe jedes einzelnen Finiten Elementes durch eine gezielte Größenvorgabe bei der Freivernetzung bestimmt werden kann. Damit ist die Netzdichtefunktion als das Koppelelement zwischen dem Netzgenerator und dem Fehlerschätzer zu betrachten.

Allerdings wird in einem adaptiven Finite-Element-Programm nicht direkt aus dem lokalen Fehlerindikator η_T die kontinuierliche Netzdichtefunktion $r_T(\xi)$ berechnet. Vielmehr werden die elementweise errechneten lokalen Fehlergrößen zuerst auf die Knoten eines Hintergrundnetzes projiziert. Generell könnte das Hintergrundnetz ein beliebiges Netz sein. In der Praxis bietet sich z. B. im zweidimensionalen Fall ein Netz aus bilinearen Elementen mit C^0 kontinuierlichen Lagrange-Ansätzen an. Die tatsächliche Geometrie des betrachteten Körpers $\mathcal{B} \longmapsto \Omega$ braucht mit diesem Hintergrund nicht abgebildet zu werden.

Während des Vernetzungsprozesses kann mit den Knotendaten auf dem Hintergrundnetz dann für jeden beliebigen neu zu generierenden Finite-Element-Knoten mittels lokaler



Abbildung 5.2: "Advancing Front" -Netzgenerator nach Peraire [108]

Interpolation mit den Standard-Ansätzen, vgl. Gl. (2.59), die neue Position des Knotens im aktuellen Netz berechnet werden. Für weitere Details, z. B. bezüglich ökonomischer Datenstrukturen und einer effizienten Datenverwaltung, sei auf die Arbeiten von *Rehle* [120] und *Ellsiepen* [48] verwiesen.

5.2.4 Hierarchische Netzverfeinerung

Ausgangspunkt einer hierarchischen Netzverfeinerung ist im allgemeinen ein homogenes und regulär aufgebautes Finite-Element-Netz. Unter homogen wird dabei verstanden, daß die Netzdichtefunktion der Ausgangsdiskretisierung konstant für alle Elemente ist. Geometrisch regulär bedeutet, daß der kleinste Winkel eines Vierecks von Null weg beschränkt ist, also eine Schranke für das Aspektverhältnis $\frac{h_T}{\rho_T}$ existiert. Im Rahmen dieser Arbeit konzentriert sich die Betrachtung der Netzgenerierung im fol-

Im Rahmen dieser Arbeit konzentriert sich die Betrachtung der Netzgenerierung im folgenden auf Vierecksnetze, da ausschließlich mit Viereckselementen gearbeitet wurde. Sinngemäß lassen sich allerdings die weiteren Überlegungen auch auf Dreiecksnetze übertragen. Dazu sei z. B. auf die Arbeiten von *Bank* [16], *Mitchell* [96] und *Bey* [21] verwiesen.

Die Betrachtung von dreidimensionalen Problemen ist ebenfalls nicht Gegenstand dieser Arbeit.

Folgt man den Abbildungen 5.3 und 5.4, so ergibt eine Auswertung der berechneten Netzdichtefunktion, hier am Beispiel der "Fixed Fraction" -Strategie, für das eingefärbte Element T_i einen Wert $r_{T_i} = 2$. Das heißt, daß das betrachtete Element T_i durch eine Halbierung der Elementkanten in vier neue Elemente $\tilde{T} \in \tilde{T}_h$ zerlegt wird.

Neben der Generierung dieser vier neuen Elemente stellt sich nun die Frage nach der Kompatibilität der diskreten Knotenverschiebungen $\tilde{\hat{u}}_h$ im betrachteten Elementpatch. Um die C^0 -Kontinuität der Verschiebungen der neuen Elemente $\tilde{\mathcal{T}}_h$ mit den angrenzenden nicht-verfeinerten Elementen zu gewährleisten, bieten sich zwei verschiedene Methoden der Netzgenerierung an. Diese werden nun im folgenden diskutiert.

1. Verfeinerung mit hängenden Knoten

Innerhalb einer hierarchischen Netzverfeinerung bietet diese Strategie gegenüber dem Konzept der Übergangselemente den Vorteil, daß sich die Anzahl der neu zu generierenden Elemente $\tilde{T} \in \tilde{T}_h$ exakt an den Vorgaben der Netzdichtefunktion orientiert. Dieses Verfeinerungskonzept ist in diesem Sinne bezüglich der Anzahl der zu generierenden Elemente als optimal anzusehen. Desweiteren weicht die Elementgeometrie im Gegensatz zu den Übergangselementen weit weniger von der für Viereckselementen optimalen quadratischen Elementgeometrie ab.

Bemerkung:

Der Begriff des "hängenden Knotens" ist unter Umständen irreführend und ist durch die rein geometrische Anschauung des Finite-Element-Netzes geprägt, siehe Abbildung 5.3. Der Knoten $\tilde{N}_i \in \tilde{\mathcal{N}}_h$ hat nach einer vorgenommenen Verfeinerung keinen entsprechenden "Partner" im benachbarten Element \tilde{T}_j . Die diskreten Knotenverschiebungen $\tilde{\hat{u}}_{\tilde{N}_i}$ des Knotens \tilde{N}_i sind dabei allerdings im Rahmen einer konsistenten Finite-Element-Formulierung in einem weiteren Schritt an die Verschiebungen des Elementes \tilde{T}_j zu koppeln.

Dafür kommen mehrere grundsätzlich verschiedene Verfahren in Frage:

(a) Eine direkte Koppelung des Freiheitsgrades $\hat{u}_{\tilde{N}_i}$ kann dadurch erreicht werden, daß diese Verschiebung in Abhängigkeit der Knotenverschiebung der entsprechenden Kante des Elementes T_j ausgedrückt wird.

$$\tilde{\hat{\boldsymbol{u}}}_{\tilde{N}_i} = f(\tilde{\hat{\boldsymbol{u}}}_{N_i^1}, \tilde{\hat{\boldsymbol{u}}}_{N_i^2})$$

Die Auswertung erfolgt durch die lokalen Ansatzfunktionen des Elementes T_j . Die Anzahl der globalen Systemfreiheitsgrade wird dabei reduziert um das Produkt der Anzahl der lokalen Knotenfreiheitsgrade multipliziert mit der Anzahl der inkonsistenten Knoten.

(b) Eine weitere Möglichkeit besteht darin, im zweiten Schritt, siehe Abbildung 5.3, ein fünf-knotiges Übergangselement zu generieren. Entlang der Kante des inkonsistenten Knotens wird für das Element \tilde{T}_j ein fünfter Knoten eingeführt. Das bedeutet für eine Elementformulierung eine weitere polynomiale Stützstelle der gewählten Ansatzfunktion. Damit wird ein quadratischer Ansatz entlang dieser Elementkante des Elementes \tilde{T}_j gewählt.

Die Anzahl der globalen System-Freiheitsgrade wird damit durch die Kopplung nicht reduziert. Der höhere numerische Aufwand bedingt auf der anderen Seite durch eine höhere Ansatzordnung p bzw. eine entsprechende h-adaptive Netzverfeinerung entlang der betrachteten Kante natürlich auch eine verbesserte numerische Lösung.

Weitere Möglichkeiten der Kopplung dieser Freiheitsgrade, z. B. durch erweiterte schwache Formulierungen oder Penalty-Methoden, sind denkbar. Eine einfache numerische Umsetzbarkeit in einem Finite-Element-Programm ist bei der Auswahl einer Methode dabei von nicht zu unterschätzender Bedeutung.

2. Verfeinerung mit Übergangselementen

Die Verfeinerung mit Übergangselementen ist schematisch in Abbildung 5.4 dargestellt. Um die inkonsistenten Knoten des zweiten Schrittes kompatibel an nicht zu verfeinernde Elemente anzubinden, erfolgt eine Aufteilung eines Viereckelementes in



Abbildung 5.3: Verfeinerungsstrategie mit "hängenden Knoten"

drei "temporäre" Viereckselemente. Dadurch ist es möglich, in einem dritten Schritt wieder ein konsistentes Finite-Element-Netz zu konstruieren.

Bemerkung:

Die Übergangselemente haben deshalb nur "temporären" Charakter, da sie im Falle einer weiteren Verfeinerungsstufe in einem späteren adaptiven Schritt nicht direkt weiter verfeinert werden. Vielmehr wird ausgehend von dem zweiten Schritt in Abbildung 5.4 eine hierarchische Unterteilung aller an \tilde{T} angrenzenden Elemente vorgenommen. Somit grenzen drei Verfeinerungsstufen aneinander, die wiederum in einem dritten Schritt durch "temporäre" Übergangselemente konsistent miteinander zu verbinden sind.

5.3 Aspekte nichtlinearer adaptiver Finiter Elemente

Im Rahmen zeitabhängiger oder nichtlinearer Probleme spielt die adaptive Verfeinerungsstrategie entlang des Belastungspfades eine entscheidende Rolle, siehe auch *Maute* [93]. Grundsätzlich sind hierbei zwei verschiedene Konzepte zu unterscheiden, die im folgenden weiter betrachtet werden sollen.

• Raum-Zeit-gekoppelte Fehlerbetrachtung

Die zeitabhängigen beziehungsweise quasizeitabhängigen nichtlinearen Anfangsrandwertprobleme der *Perzyna*-Viskoplastizität und der *Prandtl-Reuss*-Plastizität erfordern grundsätzlich eine Betrachtung des gesamten Diskretisierungsfehlers. Dieser Diskretisierungsfehler hängt allerdings sowohl von der räumlichen als auch der zeitlichen numerischen Approximationsgenauigkeit ab. In Kapitel 3 wurde eine Möglichkeit der gekoppelten Fehlerabschätzung vorgestellt, die es ermöglicht, diesen Diskretisierungsfehler zu betrachten. Hierbei wurde von einer Finite-Element-Diskretisierung der entsprechenden schwachen Formulierungen ausgegangen.

Grundsätzlich kann mit dem daraus gewonnenen Fehlerindikator $\eta(\boldsymbol{x}, t)$ und den vorgestellten Netzdichtefunktionen r_T das Finite-Element-Netz bei Überschreiten einer



Abbildung 5.4: Verfeinerungsstrategie mit Übergangselementen

globalen Fehlertoleranz $TOL(\boldsymbol{x}, t)$ isotrop verfeinert werden. Isotrop heißt hierbei, daß die charakteristische Elementlänge eines Finiten Elementes $h_E(\boldsymbol{x}, t)$ in allen "Richtungen" gleichmäßig angepaßt wird. Für die Netzdichtefunktion folgt damit:

$$r_T(\xi(\eta)) := rac{ ilde{h}_E(oldsymbol{x},t)}{h_E(oldsymbol{x},t)}.$$

Inwieweit eine solche erweiterte Dichtefunktion zu einer ökonomischen Diskretisierung führt, bedarf einer numerischen Untersuchung. Hierbei ist grundsätzlich zu erwähnen, daß dem Autor keine adaptiven Verfahren bekannt sind, die eine solche Strategie im Rahmen materiell nichtlinearer Finite-Element-Formulierungen angewandt haben. Diese Problematik stellt damit ein aktuell offenes Forschungsgebiet dar und wurde auch im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter beleuchtet.

• Entkoppelte Betrachtung der Raum- und Zeitfehler

Durch eine vorgenommene linearisierte Fehlerbetrachtung im Tangentialraum eines fixierten Zeitpunktes erhält man eine Entkopplung zwischen räumlichem und zeitlichem Fehler. Dies hat zur Folge, daß eine gegenseitige Fehlerbeeinflussung von räumlichem und zeitlichem Fehler im Laufe des adaptiven Prozesses unberücksichtigt bleibt. Vorhandene Raum-Zeit-Akkumulationsfehler haben also keinen Einfluß auf das adaptiv zu verfeinernde Finite-Element-Netz. Die adaptive Verfeinerung kann somit anisotrop in räumlicher und zeitlicher Richtung erfolgen. Durch die unterschiedlichen Diskretisierungsmethoden in Raum und Zeit wird auch der Fehler heuristisch in einen räumlichen und einen zeitlichen Anteil zerlegt:

$$\eta(\boldsymbol{x},t) \approx \eta(\boldsymbol{x}) + \eta(t).$$

Die Adaption des räumlichen Netzes $\mathcal{T}_h \longrightarrow \mathcal{T}_h$ basiert damit ausschließlich auf einem Fehlerindikator $\eta(\boldsymbol{x})$, siehe Kapitel 3. Die räumlich isotrope Dichtefunktion r_T basiert also auf der charakteristischen Elementlänge $h_E(\boldsymbol{x})$:

$$r_T(\xi(\eta)) := rac{ ilde{h}_E(oldsymbol{x})}{h_E(oldsymbol{x})}$$

Die zeitliche Verfeinerung erfolgt im Rahmen dieser Arbeit rein phänomenologisch ohne Fehlerkontrolle. Für mögliche Fehlerkontrollen bei gewöhnlichen Differentialgleichungen sei z. B. auf die Arbeiten von *Ellsiepen* [48] und *Ehlers & Ellsiepen* [49] verwiesen.

Im weiteren wird nun ausschließlich die numerisch umgesetzte, entkoppelte adaptive Verfeinerung weiter betrachtet.

5.3.1 Das algorithmische Gesamtkonzept

Die Basis des adaptiven Prozesses bildet eine im allgemeinen homogene Ausgangsdiskretisierung, falls keine *a priori* Kenntnisse über eine zu verfeinernde Diskretierung in einem Teilgebiet $\overline{\Omega} \subset \Omega$ existieren.

Durch eine inkrementelle Betrachtung des nichtlinearen Anfangsrandwertproblems im Gesamtzeitgebiet I erfolgt für jeden Zeitschritt I_n , mit $I = \sum_{n=1}^{m} I_n$ eine Fehlerabschätzung der linearisierten Gleichungen. Diese Fehlerabschätzung erfolgt allerdings unter der Annahme, daß die diskretisierte schwache Form der Impulsbilanz erfüllt ist. Dies ist erst dann der Fall, wenn im Rahmen eines Newton-Raphson-Verfahrens die Ungleichgewichtskräfte f_n^{res} zum Zeitpunkt I_n minimiert sind.

Die Einbettung der adaptiven Finite-Element-Methode in einen nichtlinearen Prozeß ist in Abbildung 5.5 schematisch dargestellt.

Als sehr wichtig für die Stabilität des Verfahrens hat sich insbesondere die Gleichgewichtsiteration nach einer Netzverfeinerung herausgestellt. Diese Gleichgewichtsiteration wird notwendig, da durch die Transformation der internen Variablen $\boldsymbol{\varepsilon}_n^{pl}$ und α_n sowie dem externen Verschiebungsfeld \boldsymbol{u}_n die Impulsbilanz verletzt wird. Eine Transformation dieser Größen von einem aktuellen Netz \mathcal{T}_h auf ein neues Netz $\tilde{\mathcal{T}}_h$ ist somit als eine Störung des inkrementellen Gleichgewichts aufzufassen und muß dementsprechend numerisch behandelt werden. Die Ungleichgewichtskräfte $\tilde{\boldsymbol{f}}_n^{res}$ zum Zeitpunkt I_n des neuen Netzes $\tilde{\mathcal{T}}_h$ müssen somit ein weiteres Mal minimiert werden, solange bis ein Abbruchkriterium erreicht wird, siehe Gl. (2.71).



Abbildung 5.5: Algorithmus der adaptiven nichtlinearen Netzverfeinerung

5.3.2 Zielorientierte Fehlermethoden – das duale Problem

Die Fehlerabschätzung mittels dualer Methoden erfordert außerdem eine numerische Betrachtung eines weiteren linearisierten Randwertproblems. Die Fehlerabschätzung im Ort für das Gebiet Ω zu einem Zeitpunkt I_n führt auf ein linearisiertes duales Randwertproblem, das dem primalen Problem bis auf den Fehler entspricht, siehe Abschnitt 3.4. Das heißt, daß die Tangentensteifigkeitsmatrix $\boldsymbol{K}_n^{tan}(\boldsymbol{u}_h)$ eines Gleichgewichtszustandes des primalen Problems der Steifigkeitsmatrix $\boldsymbol{K}_n^{tan}(\boldsymbol{u}_h^D)$ des dualen Problems entspricht. Die numerische Lösung des dualen Randwertproblems reduziert sich damit auf die Aufstellung des dualen Lastvektors \boldsymbol{j}_n und anschließendes Rückwärtseinsetzen in die triangulisiert abzuspeichernde Tangentensteifigkeitsmatrix $\boldsymbol{K}_n^{tan}(\boldsymbol{u}_h)$.

Bemerkung:

Die Raum-Zeit-entkoppelte Fehlerabschätzung mittels dualer Methoden für linearisierte Probleme ist aus numerischer Sicht somit ein extrem günstiges Verfahren. Der numerische Aufwand zur Lösung des dualen Randwertproblems ist praktisch im Laufe einer nichtlinearen Analyse zu vernachlässigen.

Ganz anders verhalten sich die Fehlerschätzer zur Ermittlung des gekoppelten Raum-Zeitfehlers, siehe Abschnitt 3.5f. Das duale Anfangsrandwertproblem ist im Rahmen der betrachteten nicht-selbstadjungierten Methode mit dem primalen Anfangsrandwertproblem nicht identisch, sondern stellt ein Rückwärtsproblem in zeitlicher Richtung dar. Das heißt, daß für eine reine Fehlerabschätzung ohne adaptive Netzverfeinerung das nichtlineare duale Anfangsrandwertproblem im gesamten Zeitbereich numerisch gelöst werden muß.

Dies bedeutet bei einer identischen Netzdiskretisierung des primalen und dualen Problems einen doppelten numerischer Aufwand, verglichen mit einer Analyse ohne Fehlerabschätzung. Offen bleibt zudem die Frage, was im Rahmen einer adaptiven Verfeinerung (in Ort und Zeit) an Aufwand zu betreiben ist. Dies wird sicherlich komplett neue adaptive Strategien benötigen, damit eine Raum-Zeit gekoppelte Betrachtung überhaupt ökonomisch durchzuführen ist.

5.3.3 Transformation der diskreten Größen

Im Rahmen einer inkrementellen, adaptiven Finite-Element-Analyse mit plastischen oder viskoplastischen Materialmodellen werden während der numerischen Berechnung die linearisierten schwachen Formen auf verschiedenen Finite-Element-Netzen gelöst. Die Residuen der internen und externen Kräfte werden dabei mit Hilfe eines globalen Newton-Raphson-Verfahrens minimiert. Für die Formulierung der dazu notwendigen Tangentensteifigkeitsmatrix \mathbf{K}^{tan} müssen dabei an den Integrationspunkten die Spannungen $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}, \boldsymbol{q}(\alpha, \ldots))$ berechnet werden. Das bedeutet, daß für eine Gleichgewichtsbetrachtung sowohl die Knotengrößen $\boldsymbol{u} \longrightarrow \nabla^{sym} \boldsymbol{u} = \boldsymbol{\varepsilon}$ als auch die pfadabhängigen (internen) Größen $\{\boldsymbol{\varepsilon}^{pl}, \boldsymbol{q}(\alpha, \ldots)\}$ an den Material- beziehungsweise an den Integrationspunkten vorliegen müssen.

Ist nun eine globale Fehlertoleranz $\eta \geq TOL$ überschritten, wird entweder durch hierarchische Verfeinerung das Finite-Element-Netz verbessert oder durch Neuvernetzung ein neues Netz erzeugt, siehe Abschnitt 4.2.3 und 4.2.4. Damit besteht die Aufgabe, den kompletten Satz der prozßbestimmenden diskreten Größen { $\hat{u}, \hat{\varepsilon}^{pl}, \hat{q}(\hat{\alpha}, ...)$ } vom alten auf das neugenerierte Finite-Element-Netz zu transformieren.

Die Anforderungen an die zu formulierenden Transformationsalgorithmen sehen dabei wie folgt aus:

- Der numerische *Fehler* durch die Transformation muß minimal sein. Das bedeutet, daß beispielsweise durch die Netztransformation die plastischen Verzerrungen nicht in elastische Gebiete transportiert werden sollten.
- Der numerische Aufwand der Netztransformation sollte minimal sein. Das bedeutet, daß intelligente Datenstrukturen benötigt werden, um den Suchaufwand der Finite-Element-Knoten der zu transformierenden Größen so gering wie möglich zu halten.

Nachdem der Satz der externen und internen Variablen auf den Knoten und an den Integrationspunkten des neuen Netzes \mathcal{T}_h vorliegt, müssen die durch die Netztransformation entstandenen Ungleichgewichtskräfte $\tilde{\boldsymbol{f}}^{res}$ minimiert werden. Aus algorithmischer Sicht ist dabei zu beachten, daß die externen und internen Variablen des alten Netzes erst, nachdem die Gleichgewichtsiteration erfolgreich beendet wurde *und* die Diskretisierungsfehler $\tilde{\eta}$ des neuen Netzes $\tilde{\mathcal{T}}_h$ die vorgegebene Fehlertoleranz *TOL* unterschritten haben, gelöscht werden dürfen. Dann darf der "Update" der internen und externen Variablen für diesen Zeitschritt stattfinden.

Transformation der externen Variablen der Knoten

Grundsätzlich ist das Vorgehen der numerischen Transformation der externen Variablen (z. B. der Verschiebungen) an den Finite-Element-Knoten von der Verfeinerungsstrategie abhängig. Im folgenden wird diese Transformation für eine hierarchische Netzverfeinerung und eine Wiedervernetzungsstrategie erläutert.

1. Hierarchische Netzverfeinerung

Die zu transformierenden Knotenverschiebungen können mittels der gewählten Finite-Element-Ansatzfunktionen, Gl. (2.59), von einem alten Netz \mathcal{T}_h auf das neue Netz $\tilde{\mathcal{T}}_h$ transformiert werden. Die lokalen Koordinaten des Knotens im neugenerierten Netz sind nach dem Algorithmus in Abschnitt 4.2.4 bekannt. Für die lokalen Koordinaten eines neuen Knoten im (zweidimensionalen) Parameterraum $\xi \times \eta$ eines alten Finiten Elementes $T \in \mathcal{T}_h$ gilt:

$$\widetilde{\hat{x}}(\widetilde{\hat{\xi}},\widetilde{\hat{\eta}}) \quad \text{mit} \quad -1 \le (\widetilde{\hat{\xi}},\widetilde{\hat{\eta}}) \le 1.$$
(5.17)

Damit gilt für die Knotenverschiebung $\tilde{\hat{u}}$ in einem Element des neuen Netzes $\tilde{T} \in \tilde{\mathcal{T}}_h$, siehe Abbildung 5.6:

$$\tilde{\hat{\boldsymbol{u}}}(\tilde{\hat{\boldsymbol{x}}}) = \sum_{i=1}^{nodes} \boldsymbol{\phi}^i(\tilde{\hat{\boldsymbol{x}}}) \, \hat{\boldsymbol{u}}_i.$$
(5.18)

2. Wiedervernetzungsstrategie

Grundsätzlich kann hier entsprechend dem obigen Vorgehen verfahren werden. Der algorithmische Mehraufwand im Falle der Wiedervernetzung besteht darin, daß *a priori* nicht bekannt ist, in welchem Element des alten Netzes $T \in \mathcal{T}_h$ sich der neugenerierte Knoten befindet. Dadurch sind die lokalen Koordinaten dieses Knotens natürlich ebenso unbekannt. Diese müssen zuerst im Rahmen eines intelligenten Algorithmus aufgefunden werden. Dazu eignet sich der Aufbau eines sogenannten *Quadtree*. Für den Aufbau von *Quadtree*-Datenstrukturen sei z. B. auf die Arbeit von Krause & Rank [78] verwiesen. Verglichen mit einem naiven Suchalgorithmus kann der numerische Aufwand von $\mathcal{O}(n_T \cdot \tilde{n}_N)$ auf $\mathcal{O}((n_T + \tilde{n}_N) \log n_T)$ reduziert werden, siehe Ellsiepen [48]. Hierin bezeichnet n_T und n_N die Element- beziehungsweise die Knotenanzahl des alten Netzes. Mit \tilde{n}_N wird die Anzahl der Knoten des neuen Netzes $\tilde{\mathcal{T}}_h$ bezeichnet.

Nachdem das Element des alten Netzes, in dem sich der neue Knoten befindet, aufgefunden wurde, können direkt die lokalen Koordinaten $\tilde{\hat{x}}$ des Knotens berechnet werden. Damit kann entsprechend dem unter 1. beschriebenen Vorgehen weiter verfahren werden.

Transformation der internen Variablen der Gauß-Punkte

Im Rahmen der beschriebenen Integrationsverfahren der Evolutionsgleichungen mittels eines impliziten Einschrittverfahrens (*Euler*-Rückwärts) werden die internen Variablen an den Integrations- bzw. *Gauß*-Punkten der Finiten Elemente ausgewertet. Das heißt, daß für einen neuen Zeitschritt die internen Variablen des alten Zeitschrittes benötigt werden.

Für weitere Transformationstechniken, z. B. im Rahmen einer expliziten Zeitintegration für nichtlineare dynamische Prozesse, sei auf die Arbeiten von Gee [58] und Erhart [50] verwiesen.

Der Satz der prozeßbestimmenden internen Variablen muß damit bei einer adaptiven Verfeinerung wiederum auf die entsprechenden Gauß-Punkte des neuen Netzes $\tilde{\mathcal{T}}_h$ abgebildet werden.

Im Unterschied zu den C^0 -kontinuierlichen Knotenverschiebungen liegt allerdings *a priori* nun kein globales Feld der internen Variablen vor. Dies liegt ebenfalls in der Auswertung der Evolutionsgleichungen mittels Finiter Differenzen begründet. Insofern entspricht diese Auswertung einer Kollokationsmethode, d. h. die Auswertung an den *Gauß*-Punkten erfolgt punktweise exakt.





Vielmehr liegen diese Größen nur diskret d. h. punktweise im Gebiet $\Omega \mapsto \mathcal{T}_h$ vor. Im Rahmen dieser Arbeit werden nun mehrere Schritte unternommen, um aus diesen Größen ein globales C^0 -kontinuierliches Feld interner Variablen zu konstruieren.¹ Die Projektion der internen Variablen wird nun exemplarisch für die plastische Verzerrung $\hat{\varepsilon}^{pl}(\boldsymbol{x}_{GP})$ am *Gauß*-Punkt durchgeführt. Analog ist im Falle isotroper Verfestigung mit der skalaren Größe $\hat{\alpha}$ bzw. bei kinematischer Verfestigung mit dem "back stress" -Vektor zu verfahren. Die einzelnen Schritte lauten dabei wie folgt, siehe auch Abbildung 5.7:

1. Die Werte an den *Gauß*-Punkten der Finiten Elemente werden mit den Ansatzfunktionen der Verschiebungen an die Knotenpunkte der Finiten Elemente extrapoliert, siehe Abbildung 5.7:²

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{pl}(\boldsymbol{x}_N) = \sum_{j=1}^{n_{GauB}} \tilde{\boldsymbol{\phi}}^j(\boldsymbol{x}_N) \, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_j^{pl}(\boldsymbol{x}_{GP}).$$
(5.19)

Hierin bezeichnet der Ortsvektor \boldsymbol{x}_N die Koordinaten des Finite-Element-Knotens N und der Ortsvektor \boldsymbol{x}_{GP} die Koordinaten des Gauß-Punktes. $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pl}(\boldsymbol{x}_{GP})$ bezeichnet die plastischen Verzerrungen am Gauß-Punkt. Die Ansatzfunktionen $\tilde{\boldsymbol{\phi}}^j$ zur Extrapolation der Werte an den Gauß-Punkten auf die Knoten der Finiten Elemente sind im Anhang C beschrieben, vgl. (C.5).

 Die diskontinuierlichen Werte an den Größen werden im folgenden mit Standard-Verfahren geglättet, vgl. Abschnitt 2.1.3, Gl. (3.68), Gl. (3.69) und Gl. (3.70)ff.

$$\hat{\varepsilon}^{pl} \longrightarrow \hat{\varepsilon}^{*,pl}
\hat{\alpha} \longrightarrow \hat{\alpha}^{*}$$
(5.20)

²Alternativ zur Gl. (5.19) kann auch eine Transformation der Gauß-Punkt Werte an die Finite-Element-Knoten in den Standardbasisfunktionen ϕ^{j} formuliert werden.



Abbildung 5.7: Technik zur Transformation interner Variablen

¹Die Transformation der Variablen erfolgt in dieser Arbeit ausgehend von C^0 -kontinuierlichen Feldern, da in numerischen Experimenten festgestellt wurde, daß die direkte Transformation von sprungbehafteten Größen zu größeren Transformationsfehlern führt. Des weiteren können aus algorithmischer Sicht für jegliche C^0 -kontinuierlichen Felder dieselben Such- und Projektionsalgorithmen verwendet werden.
Damit liegen C^0 -kontinuierliche Felder der internen Variablen mit den Stützstellen an den Finite-Element-Knoten vor. Die Projektion auf die *Gauß*-Punkte des neuen Finite-Element-Netzes kann im Anschluß nun analog zur Projektion der Knotenverschiebungen stattfinden.

Für Alternativvorschläge zur Projektion interner Variablen sei z. B. auf die Arbeiten von Habraken & Cescetto [61], Lee & Bathe [83], Ortiz & Quigly [107] und Hochard et al. [66] verwiesen.

Kapitel 6

Numerische Beispielrechnungen

In den Kapiteln 3 und 4 wurden sowohl globale Fehlerschätzer als auch verschiedene lokale oder zielorientierte Fehlerschätzer für das Modellproblem der linearen Elastizität und für die materiell nichtlinearen Anfangsrandwertprobleme der Prandtl-Reuss-Plastizität und Perzyna-Viskoplastizität diskutiert. Wie schon bei der Herleitung der einzelnen Fehlerschätzer bzw. Fehlerindikatoren angemerkt, genügen diese Fehlerschätzer mehr oder weniger scharfen Schrankeneigenschaften. Im Falle der gradientenbasierten Indikatoren kann für den allgemeinen Fall beliebig verzerrter Finite-Element-Netze im allgemeinen keinerlei Schrankeneigenschaft mehr garantiert werden.

Im Rahmen numerischer Beispiele sollen nun die Schrankeneigenschaften für verschiedene vorgestellte Fehlerschätzer aufgezeigt und der Einsatz in adaptiven Finite-Element-Programmen diskutiert werden.



Abbildung 6.1: Kurze Kragscheibe

6.1 Linear-elastische Beispiele

6.1.1 Kragscheibe

Das erste numerische Beispiel beschreibt eine gedrungene eingespannte Kragscheibe unter einer vertikalen Randbelastung. Er wird im Rahmen eines zweidimensionalen Scheibenmodells mit ebenem Verzerrungszustand numerisch untersucht. Bei diesem einfachen Modellproblem werden die Randspannungen σ_{xx} an der Lagerung der Scheibenunter- und oberseite für einen linear-elastischen Werkstoff singulär. Eine numerische Berechnung wird sich im Rahmen einer adaptiven Rechnung dieser Singularität annehmen und im Rahmen einer globalen Fehlerkontrolle die Netze an diesen Stellen verdichten.

Dieses Problem wurde in den Arbeiten von Ainsworth et al. [8] und Johnson & Hansbo [75] analysiert. Die exakte (globale) Energienorm des normierten Problems wird in diesen Arbeiten dimensionslos angegeben als $|||\boldsymbol{u}||| = 1.37977453$. Die angegebenen Geometrieund Werkstoffkenngrößen sind in diesem Beispiel ebenfalls als normierte Größen zu verstehen.

Um die Leistungsfähigkeit der lokalen Fehlerschätzer zu demonstrieren, wird nun der Fehler $|e(u_y(A))|$ der lokalen Verschiebungsgröße u_y im Punkt A kontrolliert. Eine analytische Referenzlösung ist dafür unbekannt, so daß mittels einer nicht-adaptiven numerischen Finite-Element-Berechnung auf einem sehr feinen Netz mit 58 060 Freiheitsgraden mit unterintegrierten Q2-Verschiebungselementen eine numerische Referenzlösung erstellt wird. Für diese Berechnung beträgt die numerische Energienorm des Problems $|||u_h||| =$ 1.3794663. Der globale relative Energienormfehler beträgt also lediglich noch 0.02%. Die vertikale Verschiebung $u_y(A)$ errechnet sich bei dieser Analyse zu $u_y(A) = 2.875323$. Sowohl diese berechnete Vertikalverschiebung als auch die zugehörige Energienorm werden für dieses Beispiel als eine (numerische) Referenzlösung gewählt.

Die Notwendigkeit von Schrankeneigenschaften der Fehlerschätzer soll mit Hilfe dieses ersten numerischen Beispiels belegt werden. Ziel ist die Berechnung der Verschiebung $u_y(A)$ mittels vorgegebener Fehlertoleranz. Dieses Ziel soll mit möglichst minimalem numerischen Aufwand erreicht werden. Die Effektivität des Fehlerschätzers wird infolgedessen mittels des Effektivitätsindexes gemessen. Dieser wird für die Vertikalverschiebung $u_y(A)$



Abbildung 6.2: Effektivitätsindex für Fehler der vertikalen Verschiebung $u_y(A)$

wie folgt berechnet:

$$\Theta_{loc} := \frac{\eta_{est}(u_y(A))}{\eta_{exakt}(u_y(A))}.$$
(6.1)

Der relative geschätzte Fehler berechnet sich zu:

$$\eta_{est}^{rel} := \frac{\eta_{est}}{|u_y(A)|_{exakt}}.$$
(6.2)

Im Rahmen dieses Beispiels wird der globale explizite residuenbasierte Fehlerschätzer η^{rel} nach Babuška & Rheinboldt [12], siehe Gl. (3.24), mit den lokalen residuenbasierten Fehlerschätzern η^{rel}_{GO} , siehe Gl. (3.115) und $\eta^{rel}_{E2,GO}$ nach Cirak [34], siehe Gl. (3.138), verglichen. Die dazu notwendige Berechnung der Gradienten 2. Ordnung erfolgte numerisch mittels der vorgestellten indirekten Methode, siehe Gl. (3.118) - (3.120). Desweiteren wird für die adaptive Finite-Element-Berechnung mittels des lokalen residuenbasierten Fehlerschätzers η^{rel}_{GO} eine unterschiedliche Art der Lastaufbringung im dualen Randwertproblem untersucht (Die Belastung im Falle des Fehlerschätzers $\eta^{rel}_{E2,GO}$ wurde regularisert).

Globaler residuenbasierter Indikator				Lokaler energienormbasierter Indikator			
DOF	$u_y(A)$	η^{rel}	Θ_{loc}	DOF	$u_y(A)$	$\eta^{rel}_{E2,GO}$	Θ_{loc}
40	2.6547531	.2341059	1.061	40	2.6547531	.2482863	1.125
64	2.7257944	.2087090	1.395	76	2.7120161	.2442351	1.495
100	2.7734396	.1807045	1.773	136	2.7908441	.1663535	1.969
180	2.8255209	.1361402	2.733	224	2.8326558	.1267448	2.970
332	2.8454657	.1053319	3.527	408	2.8445889	.1117553	3.636
536	2.8551464	.0878985	4.356	620	2.8585836	.0925649	5.529
880	2.8659968	.0705119	7.560	1004	2.8658244	.0694204	7.308
1432	2.8689481	.0601530	9.435	1564	2.8706627	.0545548	11.706
2232	2.8722679	.0462280	15.131	2584	2.8729124	.0426050	17.673
3520	2.8739167	.0373527	26.560	4200	2.8742422	.0334248	30.924

Lokaler residuenbasierter Indikator, unreg.				Lokaler residuenbasierter Indikator, reg.				
DOF	$u_y(A)$	η_{GO}^{rel}	Θ_{loc}	DOF	$u_y(A)$	η_{GO}^{rel}	Θ_{loc}	
40	2.6547531	.8179835	3.708	76	2.7120161	.6288438	3.850	
68	2.7064120	.8779322	5.197	136	2.7716852	.3014500	2.908	
124	2.7756231	.4422357	4.435	204	2.8085392	.1511241	2.262	
204	2.8193629	.1804761	3.225	320	2.8439109	.0740401	2.357	
348	2.8382046	.0952146	2.565	484	2.8560977	.0397418	2.067	
572	2.8542478	.0477640	2.266	692	2.8620294	.0263303	1.980	
744	2.8620877	.0302462	2.285	1016	2.8672759	.0153445	1.906	
1072	2.8661238	.0189271	2.057	1528	2.8686556	.0095953	1.439	
1656	2.8690458	.0104404	1.663	2240	2.8719159	.0047620	1.397	
2312	2.8719444	.0059368	1.757	3260	2.8730852	.0028922	1.292	
3428	2.8728837	.0035611	1.459	4756	2.8742025	.0015829	1.412	

Tabelle 6.1: Lokaler Fehler und Effektivitätsindex der vertikalen Verschiebung $u_y(A)$



Abbildung 6.3: Geschätzter Fehler der vertikalen Verschiebung $u_y(A)$



Abbildung 6.4: Kurze Kragscheibe: Finite-Element-Netze bei DOF ≈ 2000

In der regularisierten Variante der adaptiven Berechung wird die duale Belastung so aufgebracht, so daß keine singuläre Spannung im Punkt A verursacht wird. Dazu wird die Belastung in einem kleinen Gebiet um den Punkt A verteilt aufgebracht, gemäß Gl. (3.100). Die duale Norm $|j(\bar{x})|$ wird dazu ebenfalls auf "Eins" skaliert. Der zugrundeliegende Fehlerindikator wird mit η_{GO}^{rel} bezeichnet. Dieser Methode werden nicht-regularisierte Lastterme in einer weiteren Untersuchung gegenübergestellt. In der kontinuierlichen dualen Lösung existieren daher singuläre Spannungskomponenten am betrachteten Punkt A. Das Ziel dieses Vergleichs ist eine Bewertung nicht-regularisierter dualer Probleme hinsichtlich der Fehlerabschätzung von punktuellen Größen. Die Bezeichnung η_{GO}^{rel} steht für den nicht-regularisierten lokalen Fehlerindikator. Wie man in Tabelle 6.1 und in Abbildung 6.3 deutlich erkennen kann, wird die Verschiebung $u_y(A)$ im Rahmen eines adaptiven Prozesses durch Verfeinerungsindikatoren, basierend auf einem beliebigen der drei untersuchten Fehlerindikatoren, annähernd gleich gut abgebildet. Wählt man also in einem adaptiven Finite-Element-Programm eine der vier untersuchten Strategien der Fehlerkontrolle aus, so kommt man bei nahezu identischem Rechenaufwand an qualitativ identische Lösungen.



Abbildung 6.5: Kurze Kragscheibe: Finite Elemente Netze bei DOF ≈ 5000

Ganz anders verhält es sich bei dem ebenfalls betrachteten Effektivitätsindex $\Theta(\eta)$. Für die beiden lokalen expliziten residuenbasierten Fehlerschätzer erhalten wir im Laufe des adaptiven Prozesses einen Effektivitätsindex, welcher zwischen eins und zwei liegt.

Die regularisierte Methode liefert dabei einen etwas besseren Effektivitätsindex. Man kann jedoch erkennen, daß für das betrachtete Randwertproblem der approximative Charakter der Finiten Elemente ausreicht, um eine genügend reguläre Lösung für den integralen Fehler im Gesamtgebiet zu erzeugen.

Dem gegenüber steht der Effektivitätindex Θ der energienormbasierten Fehlerindikatoren η_T^{rel} und $\eta_{E2,GO}^{rel}$. Der Effektivitätsindex divergiert im Laufe der Berechnung, bzw. er wird sehr groß. Das bedeutet, daß der Diskretisierungsfehler des betrachteten Problems mit diesen beiden Methoden sehr stark überschätzt wird. Gibt der Benutzer des adaptiven Finite-Element-Programmes eine Toleranzschranke des Fehlers *a priori* vor, so wird diese Schranke erst für sehr viel mehr Freiheitsgrade als in den beiden anderen Fällen erreicht. Für eine effektive adaptive Methode für zielgerichtete Probleme sind diese beiden Indikatoren für dieses Beispiel also nicht zu gebrauchen.

Dieses Beispiel zeigt, daß Schrankeneigenschaften von Fehlerschätzern im Rahmen von praxistauglichen adaptiven Finite-Element-Programmen eine sehr wichtige Rolle spielen. Der (im allgemeinen unbekannte) relative lokale Diskretisierungsfehler kann als praxistaugliches Abbruchkriterium nur durch Fehlerschätzer mit Schrankeneigenschaften effizient erfaßt werden. Sind Schrankeneigenschaften nicht vorhanden, so sind diese Methoden für einen praktischen Einsatz bei der Berechnung komplexer Randwertprobleme des Ingenieurwesens aus Gründen der nicht vorhandenen Effizienz nicht zu gebrauchen.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß Abbruchkriterien aus Fehlerindikatoren nur dann sinnvoll sind, wenn gleiche Normen bzw. Fehlermaße betrachtet werden.

6.1.2 L-Scheibe mit Aussparungen

Das zweite numerische Beispiel zeigt eine dünne Scheibe unter einer Zugbelastung mit quadratischen Aussparungen und einem vorgegebenen Riß. Es wurde mit einem Scheibenmodell unter einem ebenem Spannungszustand mit linear-elastischem Materialverhalten modelliert. Aus Symmetriegründen kann in der numerischen Simulation die Berechnung



Abbildung 6.6: L-Scheibe mit Aussparungen und Riß; FEM-Problem und Ersatzsystem

am Viertelsystem erfolgen, siehe Abbildung 6.6.

Die Singularitäten an der Rißspitze und an den Ecken der Aussparungen sind bewußt als rechte Winkel modelliert (und nicht ausgerundet), da diese in praktischen Ingenieurproblemen ebenso auftreten und dementsprechend einen bedeutenden Einfluß auf die numerische Simulation linear-elastischer Problemstellungen haben (z. B. bei ideal spröden Materialen wie Glas), siehe Abbildung 6.7.

Nachdem im ersten numerischen Beispiel die Effizienz von lokalen Fehlerschätzern anhand des Effektivitätsindexes Θ untersucht wurde, wird im zweiten Beispiel der generelle Unterschied der adaptiven FEM-Strategien mit zielorientierten und globalen Fehlerschätzern durch die Betrachtung der Fehlernormen der kontrollierten Größen herausgearbeitet. Im Vordergrund der Betrachtung dieses Beispiels soll also die Qualität der kontrollierten Größe stehen.

Ein Maß der Güte des Fehlerschätzers stellt dabei wiederum der numerische Aufwand (gemessen in der Anzahl der notwendigen Freiheitsgrade, DOF) dar.

Im Rahmen dieses Beispiels wird dabei eine L_1 -Norm sekundärer Größen in einem Teilgebiet $\overline{\Omega} \subset \Omega$ des Problems untersucht werden. Es soll die L_1 -Fehlernorm der Spannung $|\boldsymbol{e}_{\sigma}|_{\overline{\Omega}}$ im Schnitt $\overline{A} - \overline{A}$ minimiert werden:

$$|\sigma_{xx} - \sigma_{xx,h}|_{\bar{\Omega}} = |e_{\sigma}|_{\bar{\Omega}} \longrightarrow \min.$$

In dem betrachteten linear-elastischen Modellproblem ist dies eine interessante Fragestellung, da für das vorliegende System aus Gleichgewichtsgründen die resultierende Normalkraft $N_x^{\bar{\Omega}} = \int_{\bar{\Omega}} \sigma_{xx} \, da$ im Schnitt $\bar{A} - \bar{A}$ identisch Null ist. Dies stellt damit eine analytische



Abbildung 6.7: L-Scheibe mit Aussparungen und Riß

Lösung für das Problem dar:

$$N_x^{\bar{\Omega}} := \int_{\bar{A}}^{\bar{A}} \sigma_{xx} \, \mathrm{d}a = |\sigma_{xx}|_{\bar{\Omega}} \equiv 0.$$

Aufgrund der Zuverlässigkeit und Effizienz des residuenbasierten lokalen Fehlerschätzers η_{GO} (siehe Beispiel 1) wird dieser im folgenden mit dem globalen residuenbasierten Fehlerschätzer η nach Babuška & Rheinboldt [12] verglichen.

Die rechte Seite $\mathbf{j}(\bar{x})_{\bar{\Omega}}$ des dualen Problems entspricht dabei der energetisch konjugierten Größe der zu kontrollierenden Fehlergröße $|e_{\sigma}| = N_x^{\bar{\Omega}}$, also einer horizontalen Verschiebung $u_x^d \in \bar{\Omega} \subset \Omega$. Die Funktion der Verschiebung entlang des Schnittes $\bar{A} - \bar{A}$ wird aus den aktuellen Verzerrungsgrößen des primalen Problems abgeschätzt und als konstant entlang des Schnittes $\bar{A} - \bar{A}$ approximiert. Damit ist nur der obere linke Teil der Konstruktion im dualen Lastfall unter Zug belastet. Die numerischen Resultate belegen, daß dies im Rahmen der hier untersuchten Beispiele von ausreichender Genauigkeit ist. Die duale Norm $|\mathbf{j}(\bar{x})_{\bar{\Omega}}|$ wird anschließend auf den Betrag "Eins" skaliert, siehe Gl. (3.96).

Der Fehler des dualen Problems wird mittels Interpolationsabschätzungen für einen Zweite-Ordnung-Differenzenquotienten aus einem C^0 -kontinuierlichen Gradientenfeld erster Ordnung bestimmt. Die Glättung der C^{-1} -kontinuierlichen Gradienten erster Ordnung erfolgt mittels der SPR-Methode.

Nachdem in einer Nachlaufberechnung die elementabhängigen Residuenanteile $||\operatorname{Res}(\boldsymbol{u}_h)||$ des primalen Problems berechnet wurden, erfolgt die numerische Lösung des dualen Randwertproblems. Für das hier betrachtete selbstadjungierte Problem der linearen Elastizität ist dies aus numerischer Sicht äußerst günstig durchzuführen. In die triangulierte Steifigkeitsmatrix des primalen Problems wird der duale Lastfall $\boldsymbol{j}(\bar{x})_{\bar{\Omega}}$ rückwärts eingesetzt. Damit erfolgt die Lösung des dualen Problems entsprechend auf demselben Netz wie das primale Problem.

In den Abbildungen 6.9 und 6.10 kann man erkennen, daß zu Beginn der adaptiven Berechnung bei 434 Freiheitsgraden die Residuenanteile des primalen Problems vorwiegend im Bereich der Rißspitze betragsmäßig hohe Werte annehmen. Die Ecken-Singularitäten der Aussparungen werden durch die Zugbelastung deutlich weniger angeregt.



Abbildung 6.8: Resultierende Normalkraft N_x im Schnitt $\bar{A} - \bar{A}$

Der Fehler $\|\boldsymbol{u}^d - \boldsymbol{u}_h^d\|$ des dualen Problems ist hingegen vorwiegend im Bereich der oberen linken Aussparung hoch, siehe Abbildung 6.9 und 6.10. Dies läßt sich durch eine Betrachtung des dualen Lastfalls erklären. Der aufgebrachte Verschiebungszustand u_x^d im Schnitt $\overline{A} - \overline{A}$ verursacht vorwiegend eine Beanspruchung im oberen linken Tragwerksteil. Diese Belastung verursacht Deformationen, welche die Eckensingularitäten in der oberen linken Aussparung anregen.

Letztendlich liefert eine elementweise Superposition der Residuenanteile des primalen Problems mit dem Fehler des dualen Problems den zu kontrollierenden Fehler der Spannung $|e_x|_{\bar{\Omega}} = N_x^{\bar{\Omega}}$. Es zeigt sich in den Abbildungen 6.9 und 6.10, daß für dieses Randwertproblem der Einfluß des oberen linken Gebietes des Problems dominant ist. Für die Qualität der resultierenden Normalkraft $N_x^{\bar{\Omega}}$ im Schnitt $\bar{A} - \bar{A}$ ist der Einfluß der Singularität an der Rißspitze von untergeordneter Bedeutung. Dies erklärt anschaulich auch das schlechte Abschneiden der globalen Fehlerkontrolle, welche eben ausschließlich aus den Residuenanteilen des primalen Problems besteht.

Anhand der numerischen Ergebnisse für die resultierende Normalkraft $N_x^{\bar{\Omega}}$, siehe Abbil-



Abbildung 6.9: Residuen $\|\text{Res}(\boldsymbol{u}_h)\|$ und duale Fehlernorm $\|\boldsymbol{u}^d - \boldsymbol{u}_h^d\|$ bei 434 DOF

dung 6.8, kann man erkennen, daß im Rahmen einer Finiten-Element-Methode basierend auf zielorientierten Fehlerschätzern eine kontinuierliche Abnahme des Fehlers der zu kontrollierenden Größe erreicht wird. Wendet man eine Verfeinerungsstrategie mit einem globalen Fehlerschätzer an, kann dies nicht garantiert werden.

Wie man in Abbildung 6.8 erkennt, zeigt die resultierende Normalkraft $N_x^{\bar{\Omega}}$ im Schnitt $\bar{A} - \bar{A}$ ein oszillierendes Verhalten bei fortschreitender Verfeinerung. Eine monotone Konvergenz zur analytischen Lösung kann nicht festgestellt werden. Die Qualität der Ergebnisse der Spannungskomponente σ_{xx} im Schnitt $\bar{A} - \bar{A}$ kann somit nicht garantiert werden. Dieses schlechte Abschneiden des globalen Fehlerschätzers darf nicht weiter verwundern, da die Netzoptimierungsstrategie der globalen Fehlerindikatoren nicht der hier verlangten Optimierungsstrategie entsprechen. Ein praktischer Einsatz globaler Fehlerschätzer oder Fehlerindikatoren für Fehlerkontrollen lokaler Art ist dementsprechend nicht zu empfehlen. Die verwendeten Fehlerindikatoren müssen dementsprechend immer zu den kontrollierten Fehlermaße passen.



Abbildung 6.10: Residuen $\|\text{Res}(\boldsymbol{u}_h)\|$ und duale Fehlernorm $\|\boldsymbol{u}^d - \boldsymbol{u}_h^d\|$ bei 3098 DOF



Abbildung 6.11: Globale vs. Lokale Fehlerkontrolle, FEM-Netze für etwa 5000 DOF

6.2 Beispiel zur Prandtl-Reuss-Plastizität

Das hier vorgestellte nichtlineare Beispiel zur *Prandtl-Reuss*-Plastizität wurde im Rahmen des DFG-Projektes "Adaptive Finite-Element-Verfahren in der angewandten Mechanik" ausführlich diskutiert. Eine Übersicht über die einzelnen Teilprobleme dieses Benchmark-Problems und ein Vergleich der Ergebnisse der Benchmark-Berechnungen von den daran beteiligten Arbeitsgruppen findet man in *Stein et al.* [127]. Im Rahmen dieser Arbeit soll nur ein aussagekräftiges Teilproblem dieses umfangreich untersuchten Benchmarks vorgestellt werden. Eine adaptive Finite-Element-Berechnung einer zyklischen Beanspruchung einer Quadratscheibe mit kreisförmiger Aussparung, modelliert mit einem ebenen Verzerrungszustand, ist Gegenstand der hier vorgenommenen Untersuchung.

Besonders sensitiv aus numerischer Sicht verhalten sich Systeme nahe des Traglastzustandes. Eine geringe Steigerung der aufgebrachten Belastung verursacht große Deformationen des Systems. Eine numerische Simulation stellt damit eine besonders hohe Herausforderung dar. Aus diesem Grund wurde die *Prandtl-Reuss*-Plastizität mit einer *Von Mises*-Fließfläche ohne Verfestigung gewählt.

Die Belastungsgeschichte ist in Abbildung 6.12 dargestellt. Der Laststeigerungsfaktor λ steigert dabei kontinuierlich die aufgebrachte Kraft-Randbedingung am Neumann-Rand 4-5 bis in die Nähe des Traglastzustandes bei $\lambda = 4.50$. Aus Gründen der Symmetrie kann die numerische Simulation wieder an einem Viertel des Systems erfolgen, siehe Abbildung 6.12.

Im Rahmen dieses Problems wird die Leistungsfähigkeit des Fehlerschätzers η_{GO} im Tan-



Abbildung 6.12: DFG-Benchmark-Beispiel: Quadratische Scheibe mit kreisförmigem Loch

gentialraum untersucht. Damit findet die Fehlerkontrolle für das linearisierte primale Problem an einem Gleichgewichtspunkt zu verschiedenen Zeitpunkten t_n statt. Die Lösung des diskretisierten linearisierten dualen Problems erfolgt ebenso zum Zeitpunkt t_n dieses Gleichgewichtszustandes. Damit benötigt man für die Fehlerabschätzung im Rahmen einer nichtlinearen Analyse nur einen geringen numerischen Mehraufwand, da die triangulierte Tangentensteifigkeitsmatrix zur Lösung des linearisierten dualen Problems herangezogen wird. Die numerischen Kosten der Fehlerabschätzung setzen sich damit v. a. aus dem Aufstellen des dualen Lastvektors, einem Rückwärtseinsetzen in die triangulierte Steifigkeitsmatrix und der numerischen Bestimmung der Gradienten höherer Ordnung für die duale Lösung zusammen

Die räumliche Diskretisierung dieses Anfangsrandwertproblems erfolgt mit unterintegrierten 8-knotigen *Serendipity*-Elementen (Q2-Elementen). Versteifungseffekte durch das inkompressible Verhalten im Bereich der plastischen Zonen können damit *a priori* eingeschränkt werden.

Die zeitliche Diskretisierung erfolgt durch eine Unterteilung der Belastungsgeschichte in 63 vorab festgelegte Lastinkremente mittels eines impliziten Euler-Verfahrens. Der zeitliche Diskretisierungsfehler, der von diesen fixierten Lastinkrementen herrührt, soll hier nicht weiter berücksichtigt werden. Raum-Zeit-Akkumulationsfehler bleiben damit ebenfalls unberücksichtigt. Es ist zu bemerken, daß der zeitliche Diskretisierungsfehler bezüglich des endgültigen Resultats bei $t = \bar{t}$ sehr einfach durch eine numerische Verschiebungskontrolle eines Knotens auf dem Neumann-Rand 4-5 minimiert werden kann. Die kontrollierten Verschiebungsinkremente können dann ebenfalls a priori fix sein. Allerdings ist ein exaktes Erreichen des Laststeigerungsfaktors von $\lambda = 4.50$ damit nicht mehr direkt zu gewährleisten. Von der Anwendung eines solchen "Tricks" wurde deshalb im Rahmen dieses Beispiels abgesehen. Die Aufgabe ist nun, für diesen Benchmark den zeitlichen Verlauf der horizontalen Verschiebung u_x des Knotens 2 mit möglichst hoher Genauigkeit zu berechnen. Das duale Problem setzt sich damit aus einer Belastung mit einer regularisierten Einzellast im Knoten 2 und der entsprechend linearisierten Steifigkeitsmatrix zusammen. Wie man in der Last-Verschiebungskurve in Abbildung 6.13 erkennen kann, wird der Verlauf der horizontalen Verschiebung mit einer Fehlerkontrolle im Tangentialraum gegenüber einer numerischen Referenzlösung mit $65536 Q_2/P_1$ -Elementen mit 197633 DOF und 205



Abbildung 6.13: DFG-Benchmark-Beispiel: Last-Verschiebungskurve, λ vs. $u_x(2)$

Lastschritten, siehe Wieners [68], sehr gut berechnet. Analog zu dem linear-elastischen Beispiel liegt der Effektivitätindex zwischen $1 \leq \Theta \leq 2$. Trotz vernachlässigter zeitlicher Akkumulationsfehler konnte die kontrollierte Verschiebungsgröße $u_x(2)$ also sehr gut approximiert werden. Dies erklärt sich in erster Linie durch den speziellen Charakter des betrachteten Anfangsrandwertproblems. Der Beginn der Scherbandbildung, also der plastischen Zone, geht von dem kreisförmigen Loch im Bereich der Knoten 2 und 3 aus und breitet sich etwa diagonal in Richtung des Knotens 5 aus. Die Richtung des Scherbandes ändert sich im Verlauf der Belastungsgeschichte nicht. Das heißt, daß die Bereiche hoher Gradienten und damit großer Sprunganteile in den Residuen von Beginn des adaptiven Prozesses an sehr gut abgebildet werden, wie man z. B. in Abbildung 6.14 in der Verteilung der L_2 -Norm der Residuen gut erkennen kann. Dies trifft insbesondere für den kontrollierten Knoten 2 zu, der zwar eine komplexe Last-Verschiebungsgeschichte aufweist, aber im gesamten Belastungsverlauf in der plastischen Zone liegt.



Abbildung 6.14: DFG-Benchmark-Beispiel: Fehlerverteilung $|e(u_x(2))|$ bei $\lambda = 4.10$

In anderen Anfangsrandwertproblemen der ratenunabhängigen *Prandtl-Reuss*-Plastizität mit komplexerer Geometrie oder einer stark wechselnden Belastungsgeschichte kann dies natürlich zu einem Fehlertransport führen. Dies bedeutet, daß Bereiche mit grošem Diskretierungsfehler (und damit ebenfalls hohen Gradienten in der numerischen Lösung z. B. in den plastischen Verzerrungen) im Laufe der Belastungsgeschichte durch das Gebiet transportiert werden können (*Konvektion des Fehler*). Die adaptiven Strategien müssen diesem Problem dann angepaßt werden. Im Rahmen dieser Untersuchung wurde nach jedem Zeitschritt eine Fehlerkontrolle druchgeführt. Bei Überschreiten der Fehlertolerenz (etwa in jedem 5. Lastschritt) wurde anschließend das Finite-Element-Netz dem Verfeinerungsindikator angepaßt.

Die Abweichung zwischen der Referenzverschiebung und der hier adaptiv berechneten Verschiebung in der Nähe des Traglastzustandes $\lambda = 4.5$, siehe Abbildung 6.13, kann mit der vorher aufgezeigten last-kontrollierten Methode erklärt werden. Der Qualität der Ergebnisse tut dies allerdings keinen Abbruch.

Exemplarisch wird für einen Lastzustand von $\lambda^+ = 4.1$ (im ersten Belastungszyklus),



Abbildung 6.15: DFG-Benchmark-Beispiel: Folge von adaptiv verfeinerten Netzen

die Verteilung der Residuen des primalen Problems und der Fehler des dualen Problems präsentiert, siehe Abbildung 6.14. Es läßt sich erkennen, daß sowohl die Residuen $||\operatorname{Res}(\boldsymbol{u}_h)||$ als auch der duale Fehler $||\boldsymbol{u}^d - \boldsymbol{u}_h^d||$ jeweils im Bereich der plastischen Zone betragsmäßig hohe Werte annehmen. Dies rührt von dem linearisierten dualen Problem im Tangentialraum des primalen Problems her. Die "Steifigkeit" des dualen Problems ist damit vorwiegend im Bereich des Scherbandes gering, wodurch ebenfalls hohe Gradienten in den dualen Verzerrungen zustande kommen. Diese drücken sich in dem dualen Verschiebungsfehler $\boldsymbol{u}^d - \boldsymbol{u}_h^d$ aus. Die Superposition des primalen und dualen Fehleranteils führt schlußendlich zu einer gesamten Fehlerverteilung, die im Bereich der Grenze des Scherbandes hohe Werte annimmt.

Eine Abfolge von Finite-Element-Netzen zu einigen diskreten Zeitpunkten stellt dies noch einmal deutlich dar, siehe Abbildung 6.15. Die adaptiv gesteuerte Neuvernetzungsstrategie läßt dabei in einem adaptiven Schritt eine Verfeinerung von 10% aller Elemente zu. 2% aller Elemente können in einem Schritt vergröbert werden. Eine anschließende Gleichgewichtsbetrachtung stellt sicher, daß die Impulsbilanz nach einem adaptiven Verfeinerungsschritt nicht verletzt wird.

Abschließend wird noch einmal betont, daß die hier vorgenommene Fehlerkontrolle im Tangentialraum mittels dualer Hilfsprobleme ein sehr effizientes Verfahren darstellt. Der numerische Mehraufwand durch die reine Fehlerabschätzung ist in einem nichtlinearen Prozeß fast zu vernachlässigen. Der Mehraufwand des adaptiven Verfahrens reduziert sich auf die Netzgenerierung, den Transfer von externen Variablen \boldsymbol{u}_h an den Knoten und internen Variablen $\boldsymbol{\varepsilon}^{pl}$ und α an den Gauss-Punkten, sowie eine anschließende Gleichgewichtsiteration im Rahmen eines Newton-Raphson-Verfahrens. Die sehr gute Genauigkeit der kontrollierten Größen verglichen mit einer Berechnung auf einem raumfesten Netz rechtfertigt diesen Aufwand.

6.3 Beispiel zur Perzyna-Viskoplastizität

Das vorliegende Beispiel soll die Leistungsfähigkeit des vorgestellten Fehlerschätzers im Tangentialraum auch in einem komplexen Modellproblem belegen. Dafür wird ein auch aus physikalischer Sicht realistischeres Materialmodell als das der idealen *Prandtl-Reuss*-Plastizität gewählt, wenn die materielle Antwort von einer unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeit abhängt zu beschreiben. Dazu wird die *Perzyna*-Viskoplastizität mit einer *Von Mises*-Fließfläche und einer nichtlinearen exponentiellen Fließfunktion gewählt, welche in der Lage ist, entfestigendes Materialverhalten im Rahmen einer vorgegebenen Sättigungsspannung zu beschreiben.

Desweiteren regularisiert das viskose Verhalten das Materialverhalten im sogenannten "Post-Peak" -Bereich (Entfestigungsbereich). Das bedeutet, daß die numerische Lösung netzunabhängig ist, also z. B. die Breite eines Scherbandes nicht von der gewählten Finite-Element-Diskretisierung abhängt.

Das Anfangsrandwertproblem des betrachteten Problems, siehe Abbildung 6.16, wird durch eine vorgegebene Verschiebung des oberen *Dirichlet*-Randes belastet. Die Verschiebung wird im Laufe des quasi-statischen Prozesses durch diskrete Verschiebungsinkremente $\Delta\lambda$ gesteuert. Dieses Modellproblem wird in der hier betrachteten Geometrie in der Arbeit von *Diez*, Arroyo & Huerta [43] ebenfalls untersucht. Die gewählten Materialparameter sind an das von ihnen gewählte Problem angelehnt. Im Gegensatz zu der Arbeit von *Díez et al.* [43] wurde als Penaltyfunktion die Fließfunktion selber gewählt, siehe Gl. (4.42), und nicht eine Formulierung vom *Norton*-Typ.

Die räumliche Diskretisierung des Anfangsrandwertproblems erfolgt mit vierknotigen, vollintegrierten Lagrange-Elementen (Q1-Elemente.)

Die zeitliche Diskretisierung erfolgt durch eine Unterteilung der aufgebrachten Verschiebung in 33 Verschiebungsinkremente. Die Zeitintegration der Evolutionsgleichungen geschieht mit einem impliziten *Euler*-Verfahren.

Die Aufgabe in diesem untersuchten Problem mit nichtlinearem Entfestigungsverhalten, siehe Abbildung 4.4, besteht darin, den Fehler der Verschiebung u_y entlang des Dirichlet-Randes, an dem die Verschiebungsbelastung aufgebracht wird, zu kontrollieren. Im Rahmen eines verschiebungskontrollierten Verfahrens korrespondiert zu diesem Problem eine Fehlerkontrolle der integralen Normalspannungskomponente σ_{yy} dieses Randes. Der duale Lastfall im Rahmen einer dualen Methode der Fehlerkontrolle im Tangentialraum besteht damit aus einer gleichförmig verteilten Belastung entlang dieser Kante. Die duale Norm $|\mathbf{j}(\cdot, \cdot)|$ ist dabei wieder auf "Eins" zu skalieren.

Um die Komplexität des Problems richtig erfassen zu können, wird zuerst eine numerische Referenzlösung auf einem feinen Netz mit 10274 DOF sowie eine Lösung auf einem groben Netz mit 560 DOF erzeugt, siehe Abbildung 6.17. Man kann in der Abbildung 6.17 erkennen, daß die Systemantwort vor Erreichen des "Peaks" auch mit der sehr groben Diskretisierung recht gut approximiert werden kann. Im postkritischen Bereich allerdings



Abbildung 6.16: Scheibe mit kreisförmigem Loch, entfestigendes Materialverhalten

wird die Normalspannung σ_{yy} im Punkt A deutlich überschätzt.

Das Ziel der adaptiven Netzverfeinerung besteht auf der einen Seite nun darin, die Qualität der Last-Verschiebungsgeschichte des Punktes A zu verbessern. Auf der anderen Seite soll mit dem komplexen Materialverhalten im "Post-Peak" -Bereich die gesamte Leistungsfähigkeit des adaptiven Algorithmus demonstriert werden.

In Abbildung 6.18 kann man erkennen, daß sich das Scherband ausgehend von dem kreisförmigen Loch etwa unter einem Winkel von 45° Grad ausbreitet. Die Finite-Element-Netze, die zu den Verläufen der viskoplastischen Vergleichsverzerrungen korrespondieren, belegen, daß auch bei dieser Analyse eine Verfeinerung fast ausschließlich im Bereich der hohen Gradienten der viskoplastischen Verzerrungen stattfindet. Durch den adaptiven Verfeinerungsalgorithmus der hier in einem adaptiven Schritt 10 % aller Finiten Elemente verfeinert und 5 % vergröbert, werden die Gradienten auch im post-kritischen Bereich weiter deutlich aufgelöst. Des weiteren garantiert eine Vergröberungsmöglichkeit eine effiziente Netzneugenerierung, da beispielsweise im Inneren des Scherbandes mit nahezu glatten viskoplastischen Verzerrungen eine Vergröberung ermöglicht wird.

Im Rahmen des betrachteten Beispiels wurden anschließend an den Transfer der internen und externen Variablen eines adaptiven Verfeinerungsschrittes jeweils die neuen Ungleichgewichtskräfte mittels eines Newton-Verfahrens minimiert. Hierzu ist zu bemerken, daß das vorgestellte Verfahren sich äußerst stabil verhälti, was sich z. B. dadurch zeigte, daß auch nach dem Variablentransfer und der damit einhergehenden Störung des Gleichgewichts immer ein neues Gleichgewicht gefunden werden konnte. Auch im "Post-Peak" -Bereich konnte dabei die maximal mögliche quadratische Konvergenz des Newton-Verfahrens bei nahezu allen Zeitschritten beobachtet werden (Konvergenz des Newton-Verfahrens in etwa 5 Iterationsschritten).

Des weiteren zeigt das vorliegende Beispiel deutlich, siehe Abbildung 6.18 und 6.19, daß eine netzabhängige Lösung mittels der hier vorgenommenen viskosen Regularisierung verhindert werden kann.

Wie aus der Abbildung 6.17 deutlich erkennbar wird, kann die zu bestimmende Spannungs-Dehnungs-Beziehung (respektive die aufintegrierte Last-Verschiebungskurve) am



Abbildung 6.17: Last-Verschiebungskurve für die kontrollierte Verschiebung $u_u(A)$



Abbildung 6.18: Entwicklung der viskoplastischen Vergleichsverzerrung

kontrollierten oberen Rand sehr gut approximiert werden. Im Vergleich zur Referenzlösung kann die Normalspannung σ_{yy} nahezu mit identischer Qualität abgebildet werden, wobei das endgültige Finite-Element-Netz mit 3848 DOF nur etwa ein Drittel der Freiheitsgrade der numerischen Referenzlösung aufweist.

Abschließend kann festgestellt werden, daß auch für ein entfestigendes Materialverhalten das Konzept der dualen Fehlerabschätzung mit Erfolg angewendet werden kann. Neben einem zuverlässigen dualen Fehlerschätzer spielt dabei der adaptive Gesamtalgorithmus für die Stabilität des Verfahrens eine entscheidende Rolle. Unter der Stabilität des adaptiven Verfahrens wird hierbei verstanden, daß mithilfe des Fehlerindikators ein neues Finite-Element-Netz gefunden werden kann, für das sich neben den Transferoperatoren auch ein Gleichgewicht mit minimalem numerischem Aufwand finden läßt. Eine Wiedervernetzungsstrategie basierend auf einer modifizierten "Fixed-Fraction" -Methode sichert die Effizienz der Neuvernetzung einschließlich möglicher Netzvergröberung. Der Transfer der *a priori* diskontinuierlichen internen Variablen erfolgt erst nach einer Glättung die-



Abbildung 6.19: Entwicklung der adaptiv verfeinerten FEM-Netze

ser diskontinuierlichen Felder. Essentiell für die globale Stabilität des adaptiven Verfahrens ist die anschließend vorgenommene Gleichgewichtsiteration. Hierzu ist zu bemerken, daß die Materialtangente im Rahmen einer konsistenten Linearisierung am Materialpunkt (Gauss-Punkt) berechnet wird. Ein Update der Tangentensteifigkeitsmatrix im Rahmen eines "echten" Newton-Raphson-Verfahrens findet damit in jedem Newton-Schritt statt. Auch dies scheint ein wichtiger Punkt für die Stabilität des Gesamtalgorithmus zu sein.

Zusammenfassung, Bewertung und Ausblick

Zusammenfassung

Im Rahmen der hier vorliegenden Arbeit wird eine adaptive Finite-Element-Methode basierend auf Dualitätstechniken beschrieben und auf verschiedene Rand- und Anfangsrandwertprobleme der Strukturmechanik angewandt.

Einen wichtigen Aspekt der Arbeit stellt die Entwicklung eines allgemeinen Zugangs zur Konstruktion zielorientierter Fehlerschätzer und Fehlerindikatoren dar. Es wird gezeigt, daß basierend auf einem *Galerkin*-Verfahren die klassischen globalen (Energienorm-)Fehlerschätzer auf duale Fehlerabschätzungsmethoden erweitert werden können. Grundlage dazu bildet der *Aubin-Nitsche*-Trick, der eine energetische Beziehung zwischen dem primalen Ausgangsproblem und dem dualen Hilfsproblem darstellt. Ferner wird eine mechanische Interpretation dieser Beziehung im Rahmen des Reziprozitätstheorems im Sonderfall selbstadjungierter Randwertprobleme aufgezeigt. Damit wird ein allgemeiner Zugang zur Konstruktion geeigneter dualer (Anfangs-)Randwertprobleme geliefert.

Ausgehend von einer Darstellung des Diskretisierungsfehlers in einer starken Formulierung kann anschließend eine Fehlerdarstellung in Form der Residuen des primalen Problems und mittels der fundamentalen *Galerkin*-Orthogonalität in dem Fehler der Primärvariablen des dualen Problems erreicht werden.

In einer Weiterentwicklung kann des weiteren ein gradientenbasierter zielorientierter Fehlerschätzer konstruiert werden. Auch die Technik lokaler *Neumann*-Fehlerabschätzungen bzw. die Abschätzung mittels klassischer Energienormschätzer wird somit in das vorgestellte Konzept integriert.

Die Vorteile des residuenbasierten Ansatzes mit einem Effektivitätsindex nahe "Eins" belegen die Ergebnisse der numerischen Beispiele.

Einen weiteren Aspekt dieser Arbeit stellt die Anwendung der residuenbasierten sowie gradientenbasierten Fehlerabschätzung auf materiell nichtlineare Probleme der *Prandtl-Reuss*-Plastizität sowie der *Perzyna*-Viskoplastizität dar. Im Rahmen einer thermodynamischen Betrachtung wird eine konsistente Umsetzung der linearisierten Fehlerabschätzung im Tangentialraum für die *Perzyna*-Viskoplastizität und für den ratenunabhängigen Grenzfall der *Prandtl-Reuss*-Plastizität gezeigt.

Eine Erweiterung auf eine gekoppelte Abschätzung der räumlichen und zeitlichen Diskretisierungsfehler kann durch eine Betrachtung der regularisierten Variationsungleichungen im Rahmen eines (diskontinuierlichen) *Galerkin*-Verfahrens in Raum und Zeit gegeben werden. Dies eröffnet neue Aspekte, da dies eine Kontrolle der gekoppelten Raum-Zeit-Akkumulationsfehler ermöglicht.

Einen dritten Aspekt dieser Arbeit stellt die Untersuchung adaptiver Gesamtkonzepte im Rahmen nichtlinearer Finite-Element-Analysen dar. Fehlerschätzer und Fehlerindikatoren bilden zwar die grundlegende Basis der Verfeinerungsindikatoren im Rahmen einer Wiedervernetzungsstrategie, allerdings stellt sich noch die Frage nach einer effizienten Netzdichtefunktion, die eine stabile numerische Lösung während einer nichtlinearen Analyse ermöglicht. Durch die Anpassung einer modifizierten "Fixed-Fraction" - Methode an eine Wiedervernetzungsstrategie wird in dieser Arbeit ein Werkzeug bereitgestellt, mit welchem es möglich ist, das Verhältnis von verfeinernden zu vergröbernden Finite Elementen in einem adaptiven Schritt zu steuern. Des weiteren wird in einer allgemeinen Betrachtung die Anbindung weiterer Netzdichtefunktionen an die zielorientierte adaptive Fehlerbetrachtung gegeben. In der Kombination mit Standard-Transferoperatoren zur Projektion externer und interner Variablen von einem alten Finite-Element-Netz auf ein neu generiertes Netz ist damit eine möglichst geringe Abweichung vom Gleichgewichtszustand während eines Verfeinerungsschrittes gewährleistet. Dies ist ein nicht zu unterschätzender Punkt im Rahmen nichtlinearer adaptiver Finite-Element-Analysen. Letztendlich liefert dieses Konzept einen sowohl effizienten als auch stabilen Algorithmus, der durch die nichtlinearen numerischen Beispiele in dieser Arbeit belegt wird.

Bewertung

Die in dieser Arbeit vorgestellten Fehlerschätzer und Fehlerindikatoren ermöglichen eine effiziente numerische Analyse von sowohl linear-elastischen und materiell nichtlinearen ratenunabhängigen als auch ratenabhängigen Problemstellungen im Rahmen eines adaptiven Finite-Element-Programmes. Der Einsatz zielorientierter Fehlerschätzer ermöglicht eine Fehlerkontrolle von lokalen, integralen und globalen Größen.

Dieses allgemeine Konzept, das sich nun nicht mehr auf Fehlerindikatoren basierend auf der Energienorm beschränkt, ermöglicht somit eine Fehlerkontrolle in praxistauglichen Normen von Primär- und Sekundärgrößen. Es bleibt deshalb zu hoffen, daß damit die Akzeptanz der Praxis gegenüber adaptiven Finite-Element-Methoden gesteigert werden kann, da die Fehlernorm zum Beispiel in der Verschiebung eines Punktes für einen Ingenieur quantitativ weit aussagekräftiger ist als eine globale Energienorm des Fehlers.

Dem erhöhten numerischen Mehraufwand adaptiver Finite-Element-Methoden für nichtlineare Problemstellungen steht die quantitativ meßbare Sicherheit der numerischen Ergebnisse gegenüber. Da sich der Mehraufwand bei einer Fehlerabschätzung im Tangentialraum des linearisierten Problems in Grenzen hält, kann dieser ohne weiteres in Kauf genommen werden.

Für einen weiteren praxistauglichen Einsatz der betrachteten Methode stellt sich natürlich die Frage, ob die diskutierten nichtlinearen Problemklassen ausreichend sind. Die hier betrachteten Materialmodelle können nur metallische Materialien bei kleinen Deformationen ausreichend genau abbilden. Eine Erweiterung auf komplexere Materialklassen sowie Finite Deformationen stellt dabei sicherlich einen interessanten und wichtigen Punkt dar. Das hier vorgestellten Konzept der Fehlerabschätzung nichtlinearer Probleme kann für eine Abschätzung im Tangentialraum dazu allerdings leicht ergänzt werden. Die Erweiterung auf Raum-Zeit gekoppelte Methoden befindet sich allerdings erst am Anfang der Untersuchungen und stellt ein aktuell offenes wissenschaftliches Arbeitsgebiet dar.

Ausblick

Für die Weiterentwicklung adaptiver Finite-Element-Methoden, welche auf Dualitätstechniken basieren, bleiben auch im Anschluß an diese Arbeit noch Fragen offen.

Die hier vorgestellte Methode zur gekoppelten Raum-Zeit-Fehlerabschätzung für materiell nichtlineare Probleme im Rahmen eines diskontinuierlichen Finite-Element-Ansatzes in zeitlicher Richtung gilt es numerisch effizient umzusetzen. Neben der Reduktion des dazu notwendigen hohen numerischen Aufwands durch die zu berechnende Lösung eines dualen Rückwärtsproblems in zeitlicher Richtung wird die adaptive Netzverfeinerung noch weiter untersucht werden müssen.

Es bleibt zu hinterfragen, ob eine gleichförmige isotrope Verfeinerung im Raum und Zeit sinnvoll ist, oder ob ein anisotropes Konzept entwickelt werden sollte, das eine getrennte Raum-Zeit-Verfeinerung zuläßt.

Die Erweiterung auf komplexe, zum Beispiel nicht assoziierte Materialmodelle sowie die Erweiterung auf eine geometrisch nichtlineare Theorie finiter Deformationen ist dabei ebenso von Interesse wie die Anwendung zielorientierter Fehlerabschätzungen auf gemischte Elementformulierungen. Gerade der letztgenannte Aspekt ist wichtig, um Versteifungseffekte, die bei Finiten Elementen basierend auf einem Verschiebungsansatz im inkompressiblen Fall auftreten, zuverlässig und effizient zu vermeiden.

Des weiteren stellt sich die Frage nach einer Erweiterung des hier vorgestellten allgemeinen Konzeptes in drei Raumdimensionen. Obwohl seitens der theoretischen Grundlagen der Fehlerabschätzung dazu die notwendigen Methoden bereit gestellt wurden, bleibt zum Beispiel die Frage nach einer freien Vernetzung mittels Hexaeder-Elementen auf Basis einer Dichtefunktion ein offenes Forschungsgebiet.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß diese Arbeit in methodischer Art und Weise die theoretischen Methoden zur Konstruktion zielorientierter Fehlerabschätzungsmethoden für etliche Rand- und Anfangsrandwertprobleme der Strukturmechanik bereitstellt. Mit Hilfe des vorgestellten Konzeptes können die dazu notwendigen dualen Hilfsprobleme konstruiert werden, und eine residuenbasierte Fehlerabschätzung wird damit möglich. In der Anwendung auf die vorgestellten nichtlinearen Probleme konnte die Effizienz und numerische Stabilität der adaptiven Verfahren demonstriert werden. In diesem Sinne ist die vorliegende Arbeit auch als methodische Grundlage für die weitere Entwicklung und Anwendung auf andere Problemklassen der Struktur- und Strömungsmechanik sowie gekoppelter Probleme zu betrachten.

Literaturverzeichnis

- Adams, R. [1975]. Sobolev Spaces. Pure and Applied Mathematics. Academic Press, Boston-New York.
- [2] Aifantis, E. [1984]. 'On the microstructural origin of certain inelastic models.' J. Eng. Mat. Tech., 106, pp. 326–330.
- [3] Ainsworth, M. & J. Oden [1993]. 'A posteriori error estimators for second order elliptic systems. Part II: An optimal order process for calculating self equilibrating fluxes.' Comp. Math. Appl., 26, pp. 75–87.
- [4] Ainsworth, M. & J. Oden [1997]. 'A posteriori error estimation in finite element analysis.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 142, pp. 1–88.
- [5] Ainsworth, M. & J. Oden [2000]. A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis. Pure and Applied Mathematics. John Wiley & Sons, Chichester.
- [6] Ainsworth, M. & J. Oden [2000]. A posteriori error estimation in finite element analysis. John Wiley & Sons, Chichester.
- [7] Ainsworth, M. & B. Senior [1997]. 'Aspects of an adaptive hp-finite element method: Adaptive strategy, conforming approximation and efficient solvers.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 150, pp. 65–87.
- [8] Ainsworth, M., J. Zhu, A. Craig & O. Zienkiewicz [1989]. 'Analysis of the Zienkiewicz-Zhu *a-posteriori* error estimator in the finite element methods.' Int. J. Numer. Meth. Eng., 28, pp. 2161–2174.
- [9] Ammann, M. [1998]. Wiedervernetzungsstrategien und Datentransfer in der adaptiven FEM. Diplomarbeit, Institut f
 ür Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl II, Universität Stuttgart.
- [10] Aubin, J. [1967]. 'Behaviour of the error of the approximate solutions of boundaryvalue problems for linear elliptic operators by Galerkin's and finite difference methods.' Annali della Scuola Normale di Pisa, 11.
- [11] Babuška, I. & A. Miller [1987]. 'A feedback finite element method with a posteriori error estimation: Part I. The finite element method and some basic properties of the a posteriori error estimator.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 61, pp. 1–40.
- [12] Babuška, I. & W. Rheinboldt [1978]. 'Error estimates for adaptive finite element computations.' SIAM J. Numer. Anal., 15, pp. 736–754.

- [13] Babuška, I., T. Strouboulis, S. Gangaraj & C. Upadhyay [1997]. 'Pollution error in the *h*-version of the finite element method and the local quality of the recovered derivatives.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 140, pp. 1–37.
- [14] Bangerth, W. [1998]. Adaptive Finite-Elemente-Methoden zur Lösung der Wellengleichung mit Anwendung in der Physik der Sonne. Diplomarbeit, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Heidelberg.
- [15] Bangerth, W. & R. Rannacher [1999]. 'Finite element approximation of the acoustic wave equation: Error control and mesh adaptation.' East-West J. Numer. Math., 7, pp. 263–282.
- [16] Bank, R. [1994]. A Software Package for Solving Elliptic Partial Differential Equations, User's Guide 7.0, Bd. 15 aus Frontiers in Applied Mathematics. SIAM, Philadelphia.
- [17] Bank, R. & A. Weiser [1985]. 'Some a posteriori error estimators for elliptic partial differential equations.' Math. Comp., 44, pp. 283–301.
- [18] Bathe, K.-J. [1990]. Finite-Elemente-Methoden. Springer-Verlag, Berlin.
- [19] Becker, R. & R. Rannacher [1996]. 'A feed-back approach to error control in finite element methods.' East-West J. Numer. Math., 4, pp. 237–264.
- [20] Becker, R. & R. Rannacher [1996]. 'Weighted a posteriori error control in FE methods.' Technical Report 96–01, Institut f
 ür angewandte Mathematik, Universit
 ät Heidelberg, SFB 359.
- [21] Bey, J. [1998]. Finite-Volumen- und Mehrgitter-Verfahren f
 ür elliptische Randwertprobleme. B. G. Teubner, Stuttgart.
- [22] Boroomand, B. & O. Zienkiewicz [1997]. 'An improved REP recovery and the effectivity robustness test.' Int. J. Numer. Meth. Eng., 40, pp. 3247–3277.
- [23] Boroomand, B. & O. Zienkiewicz [1997]. 'Recovery by equilibrium in patches (RPE).' Int. J. Numer. Meth. Eng., 40, pp. 137–164.
- [24] Braess, D. [1997]. Finite Elemente. Springer-Verlag, Berlin.
- [25] Braess, D., O. Klass, R. Niekamp, E. Stein & F. Wobschal [1995]. 'Error indicators for mixed finite elements in 2-dimensional linear elasticity.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 127, pp. 345–356.
- [26] Brenner, S. & L. Scott [1994]. The Mathematical Theory of Finite Element Methods. Texts in Applied Mathematics. Springer-Verlag, Berlin.
- [27] Brezzi, F. & M. Fortin [1991]. Mixed and Hybrid Finite Element Methods. Springer Series in Computational Mathematics. Springer-Verlag, Berlin.
- [28] Brink, U. & E. Stein [1998]. 'A posteriori error estimation in large-strain elasticity using equilibrated local Neumann problems.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 161, pp. 77–101.

- [29] Carstensen, C. & S. Funken [1999]. 'Averaging technique for FE-a posteriori error control in elasticity. Part I: Conforming FEM.' Technical Report 99–14, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Berichtsreihe des Mathematischen Seminars Kiel.
- [30] Chadwick, P. [1976]. Continuum Mechanics. George Allen & Unwin, London.
- [31] Ciarlet, P. [1978]. The Finite Element Method for Elliptic Problems. North-Holland, Amsterdam.
- [32] Ciarlet, P. [1988]. Three-Dimensional Elasticity. Mathematical Elasticity. North-Holland, Amsterdam.
- [33] Ciarlet, P. [1991]. 'Basic error estimates for elliptic problems.' In Finite Element Methods (Part 1), Bd. II aus Handbook of Numerical Analysis. North-Holland, Amsterdam.
- [34] Cirak, F. [1998]. Adaptive Finite Element Methoden bei der nichtlinearen Analyse von Flächentragwerken. Dissertation, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart.
- [35] Cirak, F. & E. Ramm [1998]. 'A-posteriori error estimation and adaptivity for linear elasticity using the reciprocal theorem.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 156, pp. 351–362.
- [36] Cirak, F. & E. Ramm [1999]. 'A-posteriori error estimation and adaptivity for the finite element method using duality principles.' ZAMM, 79, pp. 139–142.
- [37] Cirak, F. & E. Ramm [2000]. 'A posteriori error estimation and adaptivity for elastoplasticity using the reciprocal theorem.' Int. J. Numer. Meth. Eng., 47, pp. 379–393.
- [38] Clément, P. [1975]. 'Approximation by finite element functions using local regularization.' RAIRO Anal. Numér., 2, pp. 77–84.
- [39] Coleman, B. & M. Gurtin [1967]. 'Thermodynamics with internal variables.' J. Chem. Phys., 47, pp. 597–613.
- [40] Coleman, B. & W. Noll [1963]. 'The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity.' Arch. Rat. Mech. Anal., 13, pp. 167–178.
- [41] Demkowicz, L., J. Oden, W. Rachowicz & O. Hardy [1987]. 'Towards a universal h-p adaptive finite element strategy, Part 1. Constrained approximation and data structure.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 77, pp. 79–112.
- [42] Demkowicz, L., W. Rachowicz & T. Westermann [1987]. 'Towards a universal h-p adaptive finite element strategy, Part 1. A posteriori error estimation.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 77, pp. 113–180.
- [43] Díez, P., M. Arroyo & A. Huerta [2000]. 'Adaptivity based on error estimation for viscoplastic softening materials.' Mech. Coh. Frict. Mat., 5, pp. 87–112.
- [44] Díez, P., J. Egozcue & A. Huerta [1998]. 'A posteriori error estimation for standard finite element analysis.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 163, pp. 141–157.

- [45] [1992]. 'DIN V ENV 1992-1: Eurocode 2: Planung von Stahlbeton- und Spannbetontragwerken.'
- [46] Düster, A. & E. Rank [2001]. 'The p-version of the finite element method compared to an adaptive h-version for the deformation theory of plasticity.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 190, pp. 1925–1935.
- [47] Duvaut, G. & J. Lions [1976]. Inequalities in Mechanics and Physics. A Series of comprehensive Studies in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin.
- [48] Ellsiepen, P. [1999]. Zeit- und ortsadaptive Verfahren angewandt auf Mehrphasenprobleme poröser Medien. Dissertation, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl II, Universität Stuttgart.
- [49] Ellsiepen, P. & W. Ehlers [1998]. 'Adaptive Zeitintegrations-Verfahren für ein elastisch-viskoplastisches Zweiphasenmodell.' ZAMM, 78, pp. 361–362.
- [50] Erhart, T. [1999]. Zur gradientenbasierten Adaptivitt fr transiente Finite Elemente Berechnungen mit grossen Deformationen. Diplomarbeit, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart.
- [51] Eriksson, K., D. Estep, P. Hansbo & C. Johnson [1995]. 'Introduction to adaptive methods for differential equations.' Acta Numerica, pp. 105–158.
- [52] Eriksson, K., D. Estep, P. Hansbo & C. Johnson [1996]. Computational Differential Equations. Cambridge University Press, Cambridge.
- [53] Eriksson, K. & C. Johnson [1991]. 'Adaptive finite element methods for parabolic problems.' SIAM J. Numer. Anal., 28, pp. 43–77.
- [54] Eringen, C. [1972]. 'Nonlocal polar elastic continua.' Int. J. Engng. Sci., 10, pp. 1– 16.
- [55] Eringen, C. [1999]. Microcontinuum Field Theories: Foundations and Solids, Bd. 1. Springer-Verlag, Berlin.
- [56] Gallimard, L., P. Ladèveze & J. Pelle [1996]. 'Error estimation and adaptivity in elastoplasticity.' Int. J. Numer. Meth. Eng., 39, pp. 189–217.
- [57] Gallimard, L., P. Ladèveze & J. Pelle [1997]. 'Error estimation and time-space parameters optimization for FEM non-linear computation.' Computer & Structures, 64, pp. 145–156.
- [58] Gee, M. [1999]. Remeshing' fr Finite Elemente Berechnungen mit grossen Deformationen. Diplomarbeit, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart.
- [59] Green, A. E. & W. Zerna [1954]. Theoretical Elasticity. Oxford University Press, Oxford.
- [60] Gurtin, M. [1981]. An Introduction to Continuum Mechanics for Engineers. Academic Press, Boston-New York.

- [61] Habraken, A. & S. Cescotto [1990]. 'An automatic remeshing technique for finite element simulation of forming processes.' Int. J. Numer. Meth. Eng., 30, pp. 1503– 1525.
- [62] Han, W. & B. Reddy [1999]. Plasticity. Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer-Verlag, Berlin.
- [63] Haupt, P. [2000]. Continuum Mechanics and Theory of Materials. Springer-Verlag, Berlin.
- [64] Hill, R. [1950]. The Mathematical Theory of Plasticity. Clarendon Press, Oxford.
- [65] Hlaváček, I., J. Haslinger, J. Nečas & J. Lovíšek [1988]. Solution of Variational Inequalities in Mechanics. Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, Berlin.
- [66] Hochard, C., D. Peric, M. Dutko & D. R. J. Owen [1995]. 'Transfer operators for evolving meshes in elasto-plasticity.' In Oñate, E. (Hrsg.), Proceedings of 'COM-PLAS IV', CIMNE, Barcelona, Spain.
- [67] Hoffmann, W., A. Schatz, L. Wahlbin & G. Wittum [2001]. 'Assymptotically exact a posteriori estimators for the pointwise gradient error on each element in irregular meshes. Part 1: A smooth problem and globally quasi-uniform meshes.' Math. Comp., 70, pp. 897–909.
- [68] Homepage of DFG-Paketantrag. Adaptive finite element methods in applied mechanics. http://www.ibnm.uni-hannover.de/Forschung/Paketantrag/Benchmark/ benchmark.html.
- [69] Hoppe, R. & B. Wohlmuth [1997]. 'Adaptive multilevel techniques for mixed finite element discretizations of elliptic boundary value problems.' SIAM J. Numer. Anal., 34, pp. 1658–1681.
- [70] Hughes, T. [1987]. The Finite Element Method. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New York.
- [71] Johnson, C. [1975]. 'On finite element methods for plasticity problems.' Numer. Math., 20, pp. 79–84.
- [72] Johnson, C. [1976]. 'Existence theorems for plasticity problems.' J. Math. Pures et Appl., 55, pp. 431–444.
- [73] Johnson, C. [1978]. 'On plasticity with hardening.' Journal of mathematical analysis and Application, 62, pp. 325–336.
- [74] Johnson, C. & P. Hansbo [1991]. 'Adaptive finite element methods for small-strain elasto-plasticity.' In Besdo, D. & E. Stein (Hrsg.), Finite inelastic Deformations -Theory and Applications. Springer-Verlag, Berlin.
- [75] Johnson, C. & P. Hansbo [1991]. 'Adaptive finite element methods in computational mechanics.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 101, pp. 143–181.

- [76] Johnson, C., R. Rannacher & M. Boman [1995]. 'Numerics and hydrodynamics stability: Toward error control in computational fluid dynamics.' SIAM J. Numer. Anal., 32, pp. 1058–1079.
- [77] Kelly, D., J. de S.R. Gago, O. Zienkiewicz & I. Babuška [1983]. 'A posteriori error analysis and adaptive processes in the finite element method: Part I-Error analysis.' Int. J. Numer. Meth. Eng., 19, pp. 1593–1619.
- [78] Krause, R. & E. Rank [1996]. 'A fast algorithm for point-location in a finite element mesh.' Computing, 57, pp. 49–62.
- [79] Ladèveze, P. & D. Leguillon [1983]. 'Error estimate procedure in the finite element method and applications.' SIAM J. Numer. Anal., 20, pp. 485–509.
- [80] Ladèveze, P. & N. Moes [1998]. 'A new a posteriori error estimator for nonlinear time-dependent finite element analysis.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 157, pp. 45–68.
- [81] Ladèveze, P., J. Pelle & P. Rouget [1991]. 'Error estimation and mesh optimization for classical finite elements.' Eng. Comp., 8, pp. 69–80.
- [82] Larsson, F., K. Runesson & P. Hansbo [2001]. 'Computational of goal-oriented a posteriori error measures in space-time finite elements for viscoplasticity.' In Wall, W., K.-U. Bletzinger & K. Schweizerhof (Hrsg.), Proceedings of 'Trends in Computational Structural Mechanics', CIMNE, Barcelona, Spain.
- [83] Lee, N.-S. & K.-J. Bathe [1994]. 'Error indicators and adaptive remeshing in large deformation finite element analysis.' *Finite Elements in Analysis and Design*, 16, pp. 99–139.
- [84] Lemaître, J. & J. Chaboche [1985]. Mécanique des Matériaux Solids. Dunod, Paris.
- [85] Lesaint, P. & M. Zlamal [1979]. 'Superconvergence of the gradients of finite element solution.' RAIRO Anal. Numér., 13, pp. 139–166.
- [86] Li, L.-Y. & P. Bettes [1997]. 'Error estimates and adaptive remeshing techniques in elasto-plasticity.' Int. J. Numer. Meth. Eng., 13, pp. 285–299.
- [87] Lo, S. [1985]. 'A new mesh generation scheme for arbitrary planar domains.' Int. J. Numer. Meth. Eng., 21, pp. 1403–1426.
- [88] Lubliner, J. [1990]. Plasticity Theory. Macmillan Publishing Company, New York.
- [89] Luenberger, D. G. [1984]. Linear and Nonlinear Programming. Addison-Wesly, Baltimore.
- [90] Malvern, L. E. [1969]. Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New York.
- [91] Marsden, J. & T. Hughes [1983]. Mathematical Foundations of Elasticity. Dover Publications, Inc., New York.

- [92] Maugin, G. [1992]. The Thermomechanics of Plasticity and Fracture. Cambridge University Press, Cambridge.
- [93] Maute, A. [2001]. Fehlerkontrolle bei Finite-Element-Methoden in der lineare Strukturdynamik. Dissertation, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart.
- [94] Miehe, C. [1993]. Kanonische Modelle multiplikativer Elasto-Plastizität Thermodynamische Formulierung und Numerische Implementation. Habilitationsschrift, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover, Bericht-Nr. 93/1.
- [95] Mises, R. V. [1882]. 'Über die Darstellung des Spannungszustandes und des Deformationszustandes eines Körperelementes und über die Anwendung derselben in der Festigkeitslehre.' Civilingenieur, 28, pp. 113–156.
- [96] Mitchell, W. [1991]. 'Adaptive refinement for arbitrary finite-element spaces with hierarchical bases.' J. Comp. Appl. Math., 36, pp. 65–78.
- [97] Mücke, R. & J. Whiteman [1995]. 'A posteriori error estimates and adaptivity for finite element solutions in finite elasticity.' Int. J. Numer. Meth. Eng., 38, pp. 775– 795.
- [98] Müller, I. [1979]. Thermodynamik, Die Grundlagen der Materialtheorie. Bertelsmann Universitätsverlag, Düsseldorf.
- [99] Müller, I. & T. Ruggeri [1998]. Rational Extended Thermodynamics. Springer Tracts in Natural Philosophy. Springer-Verlag, Berlin.
- [100] Nádai, A. [1931]. Plasticity. McGraw-Hill Book Company, New York-London.
- [101] nate, E. O. & G. Bugeda [1993]. 'A study of mesh optimality criteria in adaptive finite element analysis.' Eng. Comp., 10, pp. 307–321.
- [102] Nečas, J. & I. Hlaváček [1981]. Mathematical Theory of Elastic and Elasto-Plastic Bodies: An Introduction. Studies in Applied Mechanics. Elsevier, Amsterdam.
- [103] Oden, J. & H. Brauchli [1971]. 'In the calculation of consistent stress distribution in finite element approximations.' Int. J. Numer. Meth. Eng., 3, pp. 317–325.
- [104] Oden, J. & J. Reddy [1976]. An Introduction to the Mathematical Theory of Finite Elements. Pure & Applied Mathematics. John Wiley & Sons, Chichester.
- [105] Ohnimus, S. [1996]. Theorie und Numerik dimensions- und modelladaptiver Finite-Elemente-Methoden von Flächentragwerken. Dissertation, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover.
- [106] Ohnimus, S., E. Stein & E. Walhorn [2001]. 'Local error estimates of FEM for displacements and stresses in linear elasticity by solving local Neumann problems.' *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, **52**, pp. 727–746.
- [107] Ortiz, M. & I. Quigly, J.J. [1991]. 'Adaptive mesh refinement in strain localization problems.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 90, pp. 781–804.

- [108] Peraire, J., M. Vahdati, K. Morgan & O. Zienkiewicz [1987]. 'Adaptive remeshing for compressible flow computations.' J. Comp. Phys., 72, pp. 449–466.
- [109] Perzyna, P. [1963]. 'The constitutive equations for rate sensitive plastic materials.' Quarterly Applied Mathematics, 20, pp. 321–332.
- [110] Perzyna, P. [1966]. 'Fundamental problems in viscoplasticity.' Advances in Applied Mathematics, 9, pp. 243–377.
- [111] Perzyna, P. [1971]. Thermodynamic Theory of Viscoplasticity. Advances in Applied Mechanics. Academic Press, Boston-New York.
- [112] Prager, W. [1955]. Probleme der Plastizitätstheorie. Birkhäuser, Basel-Stuttgart.
- [113] Prudhomme, S. & J. Oden [1999]. 'On goal-oriented error estimation for elliptic problems: application to the control of pointwise error.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 176, pp. 313–331.
- [114] Rank, E., H. Bröcker, A. Düster & M. Rücker [2001]. 'Integrierte Modellierungsund Berechnungssoftware für den konstruktiven Ingenieurbau: Die p-Version und geometrische Elemente.' Bauingenieur, 76, pp. 53–61.
- [115] Rannacher, R. & F.-T. Suttmeier [1997]. 'A feed-back approach to error control in finite element methods.' Comp. Mech., 19, pp. 434–446.
- [116] Rannacher, R. & F.-T. Suttmeier [1997]. 'A feed-back approach to error control in finite element methods: Application to linear elasticity.' Comp. Mech., 19, pp. 434– 446.
- [117] Rannacher, R. & F.-T. Suttmeier [1998]. 'A posteriori error control and mesh adaptation in elasticity and elasto-plasticity.' In Ladèveze, P. & J. T. Oden (Hrsg.), On New Advances in Adaptive Computational Methods in Mechanics. Elsevier, Amsterdam.
- [118] Rannacher, R. & F.-T. Suttmeier [1998]. 'A posteriori error control in finite element methods via duality techniques: Application to perfect plasticity.' Comp. Mech., 21, pp. 123–133.
- [119] Rannacher, R. & F.-T. Suttmeier [1999]. 'A posteriori error estimation and mesh adaption for finite element models in elasto-plasticity.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 176, pp. 333–361.
- [120] Rehle, N. [1996]. Adaptive Finite Elemente Verfahren bei der Analyse von Flächentragwerken. Dissertation, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart.
- [121] Rehle, N. & E. Ramm [1995]. 'Generieren von FE-Netzen für ebene und gekrümmte Flächentragwerke.' Bauingenieur, 70, pp. 357–364.
- [122] Schleupen, A. & E. Ramm [2000]. 'Local and global error estimations in linear structural dynamics.' Comp. Struc., 76, pp. 741–756.

- [123] Schwab, C. [1998]. p- and hp- Finite Element Methods, Theory and Applications in Solid and Fluid Mechanics. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Clarendon Press, Oxford.
- [124] Schwarz, H. [1991]. Methode der finiten Elemente. B. G. Teubner, Stuttgart.
- [125] Simo, J. & T. Hughes [1997]. Computational Inelasticity. Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer-Verlag, Berlin.
- [126] Steeb, H., F. Cirak & E. Ramm [2000]. 'On local error estimators for non-self-adjoint boundary value problems.' ZAMM, pp. 507–508.
- [127] Steeb, H., A. Maute & E. Ramm [2002]. 'Goal-oriented error estimation in solid mechanics.' In Stein, E. (Hrsg.), Error-controlled Adaptive FEMs in Solid Mechanics. John Wiley & Sons, Chichester.
- [128] Steeb, H. & E. Ramm [2000]. 'A general framework for local error estimation applied to material nonlinear problems.' In Oñate, E. (Hrsg.), Proceedings of 'ECCOMAS 2000'. CIMNE, Barcelona, Spain.
- [129] Stegmüller, H., K.-U. Bletzinger & S. Kimmich [1988]. 'Programmsystem CARAT, Eingabebeschreibung und Dokumentation.' Institut für Baustatik. Universität Stuttgart.
- [130] Stein, E. & R. Ahmad [1974]. 'On the stress computation in finite element models based upon displacement approximations.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 4, pp. 81–96.
- [131] Stein, E. & R. Ahmad [1977]. 'An equilibrium method for stress calculation using finite element displacement models.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 10, pp. 175– 198.
- [132] Stein, E. & S. Ohnimus [1997]. 'Coupled model-adaptivity and solution-adaptivity in the finite-element method.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 150, pp. 327–350.
- [133] Stein, E. & S. Ohnimus [1997]. 'Equilibrium method for postprocessing and error estimation in the finite element method.' Comp. Assisted Mechanics and Engineering Sciences, 4, pp. 645–666.
- [134] Stein, E. & S. Ohnimus [1999]. 'Anisotropic discretization- and model-error estimation in solid mechanics by local Neumann problems.' Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 176, pp. 363–385.
- [135] Strang, G. & G. Fix [1973]. An Analysis of the Finite Element Method. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New York.
- [136] Süli, E. & P. Houston [1997]. 'A posteriori error analysis for finite element approximations of hyperbolic problems.' In An Introduction to Recent Developments in Theory and Numerics for Conservation Laws, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, pp. 123–194. Oxford Press, York.

- [137] Suttmeier, F.-T. [1998]. Adaptive Finite Element Approximation of Problems in Elasto-Plasticity Theory. Dissertation, Institut f
 ür Angewandte Mathematik, Universität Heidelberg.
- [138] Szabó, B. & I. Babuška [1991]. Finite Element Analysis. John Wiley & Sons, Chichester.
- [139] Temam, R. [1988]. Mathematical Problems in Plasticity. Modern Applied Mathematics Series. John Wiley & Sons, Chichester.
- [140] Tottenham, H. [1970]. 'Basic principles.' In Tottenham, H. & C. Brebbia (Hrsg.), Finite Element Techniques in Structural Mechanics. Southampton University Press.
- [141] Truesdell, C. [1984]. Rational Thermodynamics. Springer-Verlag, Berlin.
- [142] Truesdell, C. & W. Noll [1965]. 'The non-linear field theories of mechanics.' In Flügge, S. (Hrsg.), Handbuch der Physik, Bd. III/3. Springer-Verlag, Berlin.
- [143] Truesdell, C. & R. Toupin [1960]. 'The classical field theories.' In Flügge, S. (Hrsg.), Handbuch der Physik, Bd. III/1. Springer-Verlag, Berlin.
- [144] Verfürth, R. [1994]. 'A posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques.' J. Comp. Appl. Math., 50, pp. 67–83.
- [145] Verfürth, R. [1995]. A review of a posteriori error estimation and adaptive meshrefinement techniques. Wiley & Sons, B. G. Teubner.
- [146] Verfürth, R. [1998]. 'A posteriori error estimators for convection-diffusion equations.' Numer. Math., 80, pp. 641–663.
- [147] Wahlbin, L. [1995]. Superconvergence in Galerkin Finite Element Methods. Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin.
- [148] Wohlmuth, B. [2001]. Discretization Methods and Iterative Solvers Based on Domain Decomposition. Springer-Verlag, Berlin.
- [149] Zienkiewicz, O. & R.L. Taylor [2000]. The Finite Element Method; Solid Mechanics, Bd. 2. Butterworth-Heinemann, London, 5. Auflage.
- [150] Zienkiewicz, O. & R.L. Taylor [2000]. The Finite Element Method; The Basis, Bd. 1. Butterworth-Heinemann, London, 5. Auflage.
- [151] Zienkiewicz, O. & J. Zhu [1987]. 'A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis.' Int. J. Numer. Meth. Eng., 24, pp. 337–357.
- [152] Zienkiewicz, O. & J. Zhu [1992]. 'The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. Part 1: The recovery technique.' Int. J. Numer. Meth. Eng., 33, pp. 1331–1364.
- [153] Zienkiewicz, O. & J. Zhu [1992]. 'The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. Part 2: Error estimates and adaptivity.' Int. J. Numer. Meth. Eng., 33, pp. 1365–1382.
Anhang A

Notation und Tensorrechnung

Im folgenden Abschnitt werden einige Rechenregeln für skalare, vektorwertige und tensorwertige Größen, die in dieser Arbeit verwendet werden, zusammengestellt.

Notation

Die Komponenten eines Tensors seien im folgenden mit $(\cdot)_{i,\ldots,l}$ bezeichnet. Dann gilt für eine skalare Größe a, eine vektorwertige Größe a, einen zweistufigen Tensor b sowie einen vierstufigen Tensor A:

$$a = a,$$

$$a = a_i e_i,$$

$$b = b_{ij} e_i \otimes e_j,$$

$$A = A_{ijkl} e_i \otimes e_j \otimes e_k \otimes e_l.$$

(A.1)

Hier sind die Basisvektoren mit $e_{i,...,l}$ bezeichnet.

Skalare Produkte

Die auftretenden skalaren Produkte seien durch die Rechenoperationen \cdot , : und :: gekennzeichnet. Die Anzahl der Punkte gibt hierin die Stufe der Verjüngung der Tensoren an:

$$s = \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} = a_i c_i,$$

$$s = \mathbf{b} : \mathbf{d} = b_{ij} d_{ij},$$

$$s = \mathbf{A} :: \mathbf{B} = A_{ijkl} B_{ijkl}.$$
(A.2)

Dyadische Tensorprodukte

Bei einem dyadischen Produkt zweier Tensoren werden sämtliche Basisvektoren dyadisch miteinander verknüpft. Die Tensorstufe des Ergebnistensors entspricht also der Summe der Tensorstufen der Operatoren, wobei unter der Stufe n eines Tensors die Anzahl der Basisvektoren $e_{i,\dots,n}$ versteht.

$$b = a \otimes c = a_i c_j e_i \otimes e_j,$$

$$A = b \otimes d = b_{ij} d_{kl} e_i \otimes e_j \otimes e_k \otimes e_l.$$
(A.3)

Lineare Abbildung und Tensorprodukte

Die lineare Abbildung sowie Tensorprodukte bei denen sich der Ergebnisstensor gegenüber den Tensorstufen der Operatoren reduziert, setzt sich aus einer Kombination einer skalaren und einer dyadischen Verknüpfung der Basisvektoren zusammen:

$$c = A : b = A_{ijkl} b_{kl} e_i \otimes e_j,$$

$$c = a \cdot b = a_{ij} b_{jk} e_i \otimes e_k.$$
(A.4)

Fundamentaltensoren zweiter Stufe

Der Einheitstensor zweiter Stufe bildet einen Vektor \boldsymbol{a} und einen Tensor zweiter Stufe \boldsymbol{b} auf sich selber ab:

$$b = \mathbf{1} \cdot \mathbf{b} = \delta_{ij} \, b_{jk} \, \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_k,$$

$$a = \mathbf{1} \cdot \mathbf{a} = \delta_{ij} \, a_j \, \mathbf{e}_i,$$

$$\mathbf{1} = \delta_{ij} \, \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j.$$

(A.5)

Wobei δ_{ij} das Kronecker-Delta darstellt, mit $\delta_{ij} = 1$ für i = j und $\delta_{ij} = 0$ für $i \neq j$.

Fundamentaltensoren vierter Stufe

Ein symmetrischer vierstufiger Einheitstensor wird zur Symmetrisierung beliebiger zweistufiger Tensoren a verwendet:

$$\boldsymbol{a}^{sym} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{a} + \boldsymbol{a}^{T}) = \boldsymbol{I} : \boldsymbol{a},$$

$$\boldsymbol{I} = \frac{1}{2} \left((\mathbf{1} \otimes \mathbf{1})^{23} + (\mathbf{1} \otimes \mathbf{1})^{13} \right).$$
 (A.6)

Bei der Transposition $(\cdot)^{j^T}$ wird die *i*-te mit der *j*-ten Tensorbasis vertauscht. Damit ist jeder symmetrische Tensor identisch zu seiner Transponierten $\boldsymbol{a}^{sym} = \boldsymbol{a}^{sym,T}$.

Volumetrische-deviatorische Zerlegung

Ein zweistufiger Tensor \boldsymbol{a} läßt sich eindeutig additiv in einen volumetrischen vol (\cdot) und einen deviatorischen Anteil dev (\cdot) zerlegen:

$$\boldsymbol{a} = \operatorname{vol}(\boldsymbol{a}) + \operatorname{dev}(\boldsymbol{a}). \tag{A.7}$$

Dabei gilt:

$$dev(\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{a} - \frac{1}{3} \operatorname{tr}(\boldsymbol{a}) \mathbf{1},$$

$$vol(\boldsymbol{a}) = \frac{1}{3} \operatorname{tr}(\boldsymbol{a}) \mathbf{1},$$

$$\operatorname{tr}(\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{a} : \mathbf{1} = a_{ij} \delta_{ij}.$$
(A.8)

Hier bezeichnet $tr(\cdot)$ die Spur eines zweistufigen Tensors.

Invarianten

Die Invarianten $I_{1,...,3}$ eines zweistufigen Tensors a sind dadurch gekennzeichnet, daß sie unabhängig von einer Änderung der Basisvektoren des Tensors sind. Sie ergeben sich in der folgenden Form:

$$I_{1} = \operatorname{tr}(\boldsymbol{a}),$$

$$I_{2} = \frac{1}{2} ((\operatorname{tr}(\boldsymbol{a}))^{2} - \operatorname{tr}(\boldsymbol{a}^{2})),$$

$$I_{3} = \operatorname{det}(\boldsymbol{a}).$$
(A.9)

Hier bezeichnet det (\cdot) die Determinante des Tensors. Insbesondere bei der Entwicklung von Materialmodellen spielen die Invarianten des Deviators eine wichtige Rolle. Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Von Mises-Fließfunktion betrachtet, durch ihre Abhängigkeit von der zweiten Deviator-Invarianten auch als J_2 -Fließfunktion bezeichnet. Für die zweite Invariante des Deviators gilt:

$$J_2 = \frac{1}{2} \left[(\operatorname{tr} (\operatorname{dev} (\boldsymbol{a})))^2 - \operatorname{tr} (\operatorname{dev} (\boldsymbol{a}))^2 \right].$$
 (A.10)

Norm eines Tensors

Die L_2 -Norm eines Tensors wird im folgenden mit $\|\cdot\|$ bezeichnet. Für die skalarwertige Norm $\|\cdot\|$ gilt:

$$\| \boldsymbol{a} \| := (\boldsymbol{a} : \boldsymbol{a})^{1/2} \ge 0.$$
 (A.11)

Integralsätze

Der Gaußsche Integralsatz erlaubt die Umwandlung von Volumenintegrale in Oberflächenintegrale. Der Normalen-Einheitsvektor ist hierin mit n bezeichnet:

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} \boldsymbol{a} \, \mathrm{d}v = \int_{\partial \Omega} \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{n} \, \mathrm{d}a. \tag{A.12}$$

Im Rahmen der Finite-Element-Methode spielt v. a. der folgende Integralsatz eine entscheidende Rolle:

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} \, \mathrm{d}v = \int_{\Omega} \boldsymbol{a} : \nabla \boldsymbol{b} \, \mathrm{d}v + \int_{\partial \Omega} (\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{b} \, \mathrm{d}a. \tag{A.13}$$

Föppl-Symbol oder Macaulay-Klammern

Im Rahmen dieser Arbeit werden die Macaulay-Klammer
n $\langle\,\cdot\,\rangle$ wie folgt auf ein Argument angewendet:

$$\langle \cdot \rangle := \begin{cases} (\cdot) & \text{für } (\cdot) > 0, \\ 0 & \text{für } (\cdot) \le 0. \end{cases}$$
(A.14)

Anhang B

Sobolev-Räume

In diesem Abschnitt werden einige Begriffe der Funktionalanalysis eingeführt, die im Rahmen dieser Arbeit benötigt werden.

Für eine vollständige Übersicht sei hierzu z. B. auf die Bücher von Adams [1] und bezüglich Finite-Element-Methoden auf die Lehrbücher von Oden & Reddy [104], Brenner & Scott [26] und Braess [24] verwiesen.

Grundlage dieser Arbeit bildet der Funktionenraum $L^2(\Omega)$. Der Funktionenraum $L^2(\Omega)$ besteht aus allen Funktionen $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$, deren Quadrat in Ω Lebesgue-integrierbar ist. Das folgende Integral wird somit als das Lebesgue-Integral bezeichnet:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v}. \tag{B.1}$$

Die dazu assoziierte Norm für $1 \le p \le \infty$ kann damit wie folgt definiert werden:

$$\|\boldsymbol{u}\|_{L^{p}(\Omega)} := \left(\int_{\Omega} |\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})|^{p} \, \mathrm{d}v\right)^{1/p}.$$
 (B.2)

Für den Lebesgue-Raum, mit den (Lebesgue)-meßbaren Funktionen \boldsymbol{u} , gilt damit:

$$L^{p}(\Omega) := \left\{ \boldsymbol{u} : \| \boldsymbol{u} \|_{L^{p}(\Omega)} < \infty \right\}.$$
(B.3)

Damit können einige wichtige Ungleichungen im Rahmen dieses Funktionenraums angewandt werden:

Minkowski-Ungleichung

Für alle $1 \leq p \leq \infty$ und $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in L^p(\Omega)$ gilt:

$$\|\boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}\|_{L^{p}(\Omega)} \leq \|\boldsymbol{u}\|_{L^{p}(\Omega)} + \|\boldsymbol{v}\|_{L^{p}(\Omega)}.$$
(B.4)

Hölder-Ungleichung

Für alle $1 \le p,q \le \infty$ und 1 = 1/p + 1/q mit $\boldsymbol{u} \in L^p(\Omega)$ und $\boldsymbol{v} \in L^q(\Omega)$ und damit $\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v} \in L^1(\Omega)$ gilt:

$$\|\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v}\|_{L^{1}(\Omega)} \leq \|\boldsymbol{u}\|_{L^{p}(\Omega)} \|\boldsymbol{v}\|_{L^{q}(\Omega)}.$$
(B.5)

Cauchy-Schwarz-Ungleichung

Diese Ungleichung stellt einen – sehr wichtigen – Sonderfall der Hölder-Ungleichung für den Fall, daß p = q = 2 mit $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in L^2(\Omega)$ und $\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v} \in L^1(\Omega)$ ist, dar. Es gilt:

$$\int_{\Omega} |\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v}| \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} = |(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})| \le \| \boldsymbol{u} \|_{L^{2}(\Omega)} \| \boldsymbol{v} \|_{L^{2}(\Omega)}.$$
(B.6)

Hilbert-Räume

Existiert ein Skalarprodukt und eine entsprechende Norm, siehe Gl. (B.9)

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} = (\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}), \tag{B.7}$$

so wird der Funktionenraum $L^2(\Omega)$ zu einem Hilbert-Raum $\mathcal{H}^m(\Omega)$.

Definition:

Der Funktionenraum $\mathcal{H}^m(\Omega)$ mit ganzzahligen $m \geq 0$ bezeichnet die Menge aller Funktionen $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in L^2(\Omega)$, welche eine schwache Ableitung in $L^2(\Omega)$ besitzen. Damit folgt die Definition für das Skalarprodukt mit $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in \mathcal{H}^m(\Omega)$

$$(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})_m := \sum_{|\alpha| \le m} (D^{\alpha} \, \boldsymbol{u}, D^{\alpha} \, \boldsymbol{v})$$
 (B.8)

sowie die entsprechende Hilbert-Norm

$$\|\boldsymbol{u}\|_{\mathcal{H}^{m}(\Omega)} := \left(\sum_{|\alpha| \le m} \|D^{\alpha} \, \boldsymbol{u}\|^{2}\right)^{1/2} < \infty \tag{B.9}$$

und *Hilbert*-Seminorm:

$$|\boldsymbol{u}|_{\mathcal{H}^{m}(\Omega)} := \left(\sum_{|\alpha|=m} \|D^{\alpha} \boldsymbol{u}\|^{2}\right)^{1/2} < \infty.$$
(B.10)

Das folgende Schema verdeutlicht die Beziehung einiger wichtiger Funktionenräume:

Im Rahmen der in dieser Arbeit betrachteten Finiten Elemente spielen vor allem die Funktionenräume $\mathcal{H}_0^1(\Omega) \subset \mathcal{H}^1(\Omega)$ eine wichtige Rolle. Für eine Funktion $\boldsymbol{v} \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$ gilt:

$$\mathcal{H}_{0}^{1}(\Omega) = \left\{ \boldsymbol{v} \in \mathcal{H}^{1}(\Omega) : \, \boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \text{ auf } \partial \Omega \right\}.$$
(B.12)

Weitere wichtige Normen

Neben den bereits betrachteten Normen spielt z. B. die Energienorm $||| \cdot |||$ im Rahmen der Finiten Elemente eine wichtige Rolle:

Energienorm

Für die Energienorm eines linear-elastischen Körpers ${\cal B}$ im gesamten betrachteten Gebiet Ω gilt:

$$|||\boldsymbol{u}|||_{\Omega} := \sqrt{a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u})} = \left(\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) : \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{u}) \, \mathrm{d}v\right)^{1/2}.$$
 (B.13)

Für den diskretisierten Körper $\Omega \mapsto \mathcal{T}_h$ kann analog dazu im gesamten Gebiet eine Energienorm definiert werden. Durch endlich-dimensionale Ansatzfunktionen kann die globale Energienorm elementweise, das heißt lokal ausgewertet werden. Damit gilt:

$$|||\boldsymbol{u}_{h}|||_{\Omega} := \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} \int_{T} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_{h}) : \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{u}_{h}) \, \mathrm{d}v \right\}^{1/2},$$

$$= \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} |||\boldsymbol{u}_{h}|||_{T}^{2} \right\}^{1/2}.$$
 (B.14)

Des weiteren gilt für die lokale Energienorm in einem einzelnen Finiten Element:

$$|||\boldsymbol{u}_h|||_T := \left\{ \int_T \left(\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}_h) : \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{u}_h) \, \mathrm{d}v\right) \right\}^{1/2}.$$
 (B.15)

L_2 -Norm der Verschiebungen

Im Rahmen von Fehlerabschätzungen ist beispielsweise eine Kontrolle des Fehlers der Verschiebungen $\boldsymbol{u} \in \overline{\Omega} \subset \Omega$ von Interesse. Für die L_2 -Norm der Verschiebungen gilt entprechend der Definiton der Energienorm:

$$\|\boldsymbol{u}\|_{\Omega} := \sqrt{(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u})} = \left(\int_{\Omega} \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u} \, \mathrm{d} v\right)^{1/2}.$$
 (B.16)

Die Definition diskreter Normen $\|(\cdot)\|_h$ kann entsprechend der Energienorm vorgenommen werden und wird aus diesem Grund nicht näher erläutert.

Koerzivität der Bilinearform

Im folgenden soll die für die residuenbasierte Fehlerabschätzung notwendige Koerzivität (auch als V-Elliptizität bezeichnet) der Bilinearform eines linear-elastischen Körpers \mathcal{B} gezeigt werden. Dadurch wird die Äquivalenz der Energienorm $||| \cdot |||$, siehe Gl. (B.13), und der *Hilbert*-Norm $|| \cdot ||_{\mathcal{H}^1(\Omega)}$ bis auf eine Konstante C bewiesen.

Unter der Voraussetzung homogener Randbedingungen $\boldsymbol{u}|_{\Gamma_D} = \boldsymbol{u}|_{\partial\Omega} = \boldsymbol{0}$ gilt für die Testfunktionen $\boldsymbol{v} \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$ und damit für die L_2 -Norm auf dem Rand $\partial \Omega$ des betrachteten Gebietes Ω :

$$\|\boldsymbol{v}\|_{\partial\Omega} = 0. \tag{B.17}$$

Dann folgt daraus:

$$\|\boldsymbol{v}\|_{\mathcal{H}^{1}(\Omega)}^{2} = \int_{\Omega} (\nabla \boldsymbol{v})^{2} + \boldsymbol{v}^{2} \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} = \|\nabla \boldsymbol{v}\|_{\Omega}^{2} + \|\boldsymbol{v}\|_{\Omega}^{2}.$$
(B.18)

Nutzt man nun eine Poincaré-Friedrichs-Ungleichung aus

$$\|\boldsymbol{v}\|_{\Omega}^{2} \leq C \|\nabla \boldsymbol{v}\|_{\Omega}^{2} \tag{B.19}$$

.

und setzt diese in GL. (B.18) ein

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{v}\|_{\mathcal{H}^{1}(\Omega)}^{2} &\leq \|\nabla\boldsymbol{v}\|_{\Omega}^{2} + C \|\nabla\boldsymbol{v}\|_{\Omega}^{2} \\ &\leq (1+C) \|\nabla\boldsymbol{v}\|_{\Omega}^{2} \\ &\leq (1+C) \tilde{C} |||\boldsymbol{v}|||^{2} = (1+C) \tilde{C} a(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}), \end{aligned}$$
(B.20)

so beweist dies die Koerzivität der Bilinearform $a(\cdot,\cdot)$: $\hfill \Box$

$$\hat{C} \|\boldsymbol{v}\|_{\mathcal{H}^{1}(\Omega)}^{2} \leq |||\boldsymbol{v}|||^{2} = a(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}), \quad \text{mit} \quad \hat{C} = \frac{1}{(1+C)\tilde{C}} > 0.$$
 (B.21)

Anhang C

Eindimensionale Lagrange-Ansatzfunktionen

Im folgenden sollen die eindimensionalen biorthonormalen Ansatzfunktionen vom Lagrange-Typ angeführt werden. Die Ansatzfunktionen ϕ und $\bar{\phi}$ enthalten die kovarianten bzw. kontravarianten Komponenten desselben Ansatzraumes \mathcal{V}_h . Zwischen den Ansatzfunktionen soll die folgende Orthogonalitätsbeziehung gelten:

vischen den Ansatziunktionen son die folgende Ofthogonantatsbezienung geiten.

$$\int_{T} \phi^{i} \,\bar{\phi}_{j} \,\mathrm{d}v = \delta^{i}_{j} \tag{C.1}$$

Biorthonormale Lagrange-Ansatzfunktionen

Ansatzfunktionen für Polynome der Ordnung p = 1, ..., 3 im Intervall [-1, +1]:



$$\phi^1(\xi) = \frac{1}{2}(\xi^2 - \xi), \qquad \qquad \bar{\phi}_1(\xi) = \frac{3}{8}(-2 - 4\xi + 10\xi^2),$$



(C.2)

Für die in dieser Arbeit verwendeten – im Parameterraum $[\xi, \eta]$ – rechteckigen Elemente, können die, für die Parametrisierung mehrdimensionaler Probleme notwendigen, zweibzw. dreidimensionale Ansatzfunktionen direkt aus einem dyadischen Produkt der eindimensionalen Funktionen gewonnen werden, so daß diese nicht explizit aufgefürt werden:

$$\boldsymbol{\phi}(\xi,\eta) = \boldsymbol{\phi}(\xi) \otimes \boldsymbol{\phi}(\eta). \tag{C.3}$$

Ansatzfunktionen zur Extrapolation interner Variablen

Lagrange-Funktionen zur Extrapolation von internen Variablen an den $Gau\beta$ -Punkten auf die Finite-Element-Knoten:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{pl}(\boldsymbol{x}_N) = \sum_{j=1}^{n_{Gaug}} \tilde{\boldsymbol{\phi}}^j(\boldsymbol{x}_N) \, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_j^{pl}(\boldsymbol{x}_{GP}). \tag{C.4}$$

Die Summation erfolgt dabei über alle Gauß-Punkte $j = 1, \ldots, n_{Gau\beta}$ des Elementes. Die Koordinaten eines Finite-Element-Knotens werden mit dem Ortsvektor \boldsymbol{x}_N bezeichnet. Analog werden die Koordinaten der Gauß-Punkte mit dem Ortsvektor \boldsymbol{x}_{GP} bezeichnet.

Damit folgt für die Ansatzfunktionen $\tilde{\phi}^{j}$ für Polynome der Ordnung p = 1, 2:

$$\frac{p=1:}{\tilde{\phi}^{1}(\xi)} = \frac{1}{2}(1-\sqrt{3}\,\xi),
\tilde{\phi}^{2}(\xi) = \frac{1}{2}(1+\sqrt{3}\,\xi).
\frac{p=2:}{\tilde{\phi}^{1}(\xi)} = \frac{1}{6}(5\,\xi^{2}-\sqrt{15}\,\xi),
\tilde{\phi}^{2}(\xi) = \frac{1}{6}(6-10\,\xi),
\tilde{\phi}^{3}(\xi) = \frac{1}{6}(5\,\xi^{2}+\sqrt{15}\,\xi).$$
(C.5)

Die Polynomordnung p der Extrapolationsfunktionen ϕ^j richtet sich nach der Anzahl der *Gauß*-Punkte des Finiten Elementes. Im Falle eines zweidimensionalen Problems mit $n \times n$ *Gauß*-Punkten wird als Extrapolationsfunktion ein Polynom der Ordnung p = n - 1 gewählt.

Lebenslauf

Name:			Holger Karl Steeb
Geburtstag:			31.12.1969
Geburtsort:			Stuttgart
Staatsangehörigkeit:			deutsch
Eltern:			Walter und Marianne Steeb, geb. Stäbler
1976	_	1980	Grundschule Leinfelden-Echterdingen
1980	—	1989	Philipp-Matthäus-Hahn-Gymnasium, Leinfelden-Echterdingen Abschluß: Abitur
05/1989	_	09/1990	Zivildienst im Jugendherbergswerk, Freudenstadt
10/1990	_	09/1995	Studium Bauingenieurwesen an der Universität Stuttgart Abschluß: DiplIng.
10/1995	—	02/1996	Projektingenieur in der Bauunternehmung Steeb, Leinfelden-Echterdingen
03/1996	_	02/2001	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Baustatik der Universität Stuttgart (Prof. DrIng. E. Ramm)
03/2001	_	06/2002	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Mechanik (Bauwesen) der Universität Stuttgart (Prof. DrIng. W. Ehlers)
seit		07/2002	Wissenschaftlicher Assistent am Lehrstuhl für Technische Mechanik der Universität des Saarlandes in Saarbrücken (Prof. DrIng. S. Diebels)

Berichte des Instituts für Baustatik der Universität Stuttgart

74-1	M. Becker, J. Bühler, G. Lang-Lendorff, K. Papailiou, J. M. Sättele: Kontaktkurs EDV im konstruktiven Ingenieurbau.
74-2	G. Werner: Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Ermittelung des Trag- verhaltens biege- und verdrehbeanspruchter Stäbe mit I-Querschnitt.
74-3	K. Tompert: Berechnung kreiszylindrischer Silos auf elastischer Unterlage.
74-4	W. Riehle: Studie über verallgemeinerte Variationsfunktionale und ihre Anwendung bei der Methode der finiten Plattenelemente.
75-1	G. Müller, R. M. Rembold, J. M. Sättele, K. H. Schweizerhof, W. Wissmann: Platten-Theorie, Berechnung, Bemessung. Teil I.
75-2	G. Müller: Numerische Behandlung der Kirchhoffschen und Reissnerschen Plattentheorie nach einer diskreten und erweiterten Trefftz-Methode.
75-3	E. A. Castrillón O.: Beitrag zur Berechnung langer dünnwandiger dreizelliger Träger unter Berück- sichtigung der Profilverformung.
76-1	W. Block, G. Eisenbiegler, R. D. Kugler, H. Lieb, G. Müller J. Müller, KH. Reineck, J. Schlaich, KH. Schweizerhof, F. Seible: Platten-Theorie, Berechnung, Bemessung. Teil II.
76-2	E. Ramm: Geometrisch nichtlineare Elastostatik und finite Elemente.
77-1	BM. Sulke: Berechnung dünnwandiger prismatischer Faltwerke mit verformbarem mehr- zelligem Querschnitt.
78-1	F. Fujii: Anwendung der Methode der finiten Elemente auf die Berechnung von Stahlbetonplatten.
79-1	B. Brendel: Geometrisch nichtlineare Elastostabilität.
79-2	H. G. Berg: Tragverhalten und Formfindung versteifter Kuppelschalen über quadrati- schem Grundriß auf Einzelstützen.

79-3	F. W. Bornscheuer, B. Brendel, L. Häfner, E. Ramm, J. M. Sättele: Fallstudien zu Schalentragwerken (in englischer Sprache).
80-1	R. I. del Gaizo: Liegende zylindrische Behälter und Rohre auf Sattellagern endlicher Breite.
80-2	R. W. Rembold: Beitrag zum Tragverhalten ausgewählter Plattentragwerke unter Berücksich- tigung der Reissnerschen Theorie und der Methode der gemischten finiten Elemente.
80-3	J. M. Sättele: Ein finites Elementkonzept zur Berechnung von Platten und Schalen bei stoff- licher und geometrischer Nichtlinearität.
82-1	L. Häfner: Einfluß einer Rundschweißnaht auf die Stabilität und Traglast des axialbela- steten Kreiszylinders.
82-2	K. Schweizerhof: Nichtlineare Berechnung von Tragwerken unter verformungsabhängiger Bela- stung mit finiten Elementen.
82-3	HP. Andrä: Zum Tragverhalten des Auflagerbereichs von Flachdecken.
1 (1983)	P. Osterrieder: Traglastberechnung von räumlichen Stabtragwerken bei großen Verformungen mit finiten Elementen.
2 (1983)	T. A. Kompfner: Ein finites Elementmodell für die geometrisch und physikalisch nichtlineare Berechnung von Stahlbetonschalen
3 (1983)	A. Diack: Beitrag zur Stabilität längsversteifter Kreiszylinderschalen unter Axialdruck.
4 (1984)	A. Burmeister, FW. Bornscheuer, E. Ramm: Traglasten von Kugelbehältern mit Stutzen und Formabweichungen unter In- nendruck und Stützenlängskraft.
5~(1985)	H. Stegmüller: Grenzlastberechnungen flüssigkeitsgefüllter Schalen mit "degenerierten" Schalenelementen.
6 (1987)	A. Burmeister: Dynamische Stabilität nach der Methode der finiten Elemente mit Anwendung auf Kugelschalen.

7 (1987) G. Kammler:

Ein finites Elementmodell zur Berechnung von Trägern und Stützen mit offenem, dünnwandigem Querschnitt unter Berücksichtigung der Interaktion zwischen globalem und lokalem Versagen.

8 (1988) A. Matzenmiller:

Ein rationales Lösungskonzept für geometrisch und physikalisch nichtlineare Strukturberechnungen.

9 (1989) D. Tao:

Die Technik der reduzierten Basis bei nichtlinearen finiten Element-Berechnungen

10 (1989) K. Weimar:

Ein nichtlineares Balkenelement mit Anwendung als Längssteifen axialbelasteter Kreiszylinder.

11 (1990) K.U. Bletzinger:

Formoptimierung von Flächentragwerken.

12 (1990) S. Kimmich:

Strukturoptimierung und Sensibilitätsanalyse mit finiten Elementen.

13 (1991) U. Andelfinger:

Untersuchungen zur Zuverlässigkeit hybrid-gemischter finiter Elemente für Flächentragwerke.

14 (1992) N. Büchter:

Zusammenführung von Degenerationskonzept und Schalentheorie bei endlichen Rotationen.

15 (1992) T. H. Hofmann:

Beitrag zur verfeinerten Balkentheorie.

16 (1994) D. Roehl:

Zur Berechnung von großen elastoplastischen Deformationen bei Flächentragwerken und Kontinua.

17 (1994) R. Reitinger:

Stabilität und Optimierung imperfektionsempfindlicher Tragwerke.

18 (1995) R. Suanno:

Ein dreidimensionales Simulationsmodell für Stahlbeton mit Plastizität und Schädigung.

19 (1995) M. Braun:

Nichtlineare Analysen von geschichteten, elastischen Flächentragwerken.

20 (1996) N. Rehle:

Adaptive Finite Element Verfahren bei der Analyse von Flächentragwerken.

21 (1996)	C. Haußer: Effiziente Dreieckselemente für Flächentragwerke.				
22~(1996)	D. Kuhl: Stabile Zeitintegrationsalgorithmen in der nichtlinearen Elastodynamik dünn- wandiger Tragwerke.				
23 (1998)	H. Schmidts: Zur effizienten Modellierung und Analyse von Hochhaustragwerken.				
24~(1998)	H. Wang: Interaktion des lokalen und globalen Stabilitätsverhaltens dünnwandiger Stäbe.				
25~(1998)	K. Maute: Topologie- und Formoptimierung von dünnwandigen Flächentragwerken.				
26~(1998)	B. Maurer: Karl Culmann und graphische Statik.				
27~(1998)	F. Cirak: Adaptive Finite-Element-Methoden bei der nichtlinearen Analyse von Flächentragwerken.				
28~(1998)	M. Trautz: Zur Entwicklung von Form und Struktur historischer Gewölbe aus der Sicht der Statik.				
29 (1999)	H. Menrath: Numerische Simulation des nichtlinearen Tragverhaltens von Stahlverbundträgern.				
30 (1999)	M. Bischoff: Theorie und Numerik einer dreidimensionalen Schalenformulierung.				
31~(1999)	W. A. Wall: Fluid-Struktur-Interaktion mit stabilisierten Finiten Elementen.				
32~(2000)	E. Kuhl: Numerische Modelle für kohäsive Reibungsmaterialien.				
33 (2001)	A. Maute: Fehlerkontrolle bei Finite-Element-Methoden in der linearen Strukturdynamik.				
34~(2001)	S. Schwarz: Sensitivitätsanalyse und Optimierung bei nichtlinearem Strukturverhalten.				
35~(2001)	A. Haufe: Dreidimensionale Simulation bewehrter Flächentragwerke aus Beton mit der Plastizitätstheorie.				

36 (2001) D. P. Mok:

Partitionierte Lösungsverfahren in der Strukturdynamik und der Fluid-Struktur-Interaktion.