Finite-Element-Ausgleichsmethoden für Kontaktprobleme: Effiziente Löser

Von der Fakultät für Mathematik und Physik der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover

zur Erlangung des Grades

Doktorin der Naturwissenschaften Dr. rer. nat.

genehmigte Dissertation von

Dipl.-Math. Astrid Intas

geboren am 31. Januar 1981 in Uelzen

Referent: Prof. Dr. Gerhard Starke

Koreferent: Prof. Dr. Marc Steinbach

Tag der Promotion: 12. Mai 2010

Danksagung

Ich danke zunächst Herrn Prof. Dr. Gerhard Starke für die geduldige und engagierte Betreuung bei der Entstehung meiner Arbeit. Bei auftretenden Problemen hatte er immer ein offenes Ohr und konnte mir weiterhelfen.

Der Arbeitsgruppe Wissenschaftliches Rechnen danke ich für die gute Zusammenarbeit.

Der deutschen Forschungsgemeinschaft(DFG) gilt mein Dank, dass sie diese Arbeit durch ein Stipendium finanziell unterstützt hat. Den Mitgliedern des Graduiertenkollegs 615 danke ich für die vielen interdisziplinären Diskussionen, die mir gerade im Bereich der Mechanik geholfen haben.

Meinen Eltern, meiner Schwester und meinen Schwiegereltern danke ich, dass sie mich immer bestärkt haben diese Arbeit zu schreiben und mir damit viel Karft gegeben haben.

Zum Schluß bedanke ich mich herzlich bei meinem Mann ohne den diese Arbeit niemals entstanden wäre, da er immer an mich geglaubt hat.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden mathematische Formulierungen zur Beschreibung der Verformung von Körpern, die von äußeren Kräften verursacht werden betrachtet. Dabei wird im Besonderen das Signorini-Kontakt Problem betrachtet. Die numerischen Verfahren zur Lösung der sich ergebenden partiellen Differentialgleichungssysteme werden vorgestellt. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Entwicklung eines effizienten Verfahrens insbesondere im Hinblick auf die Vorkonditionierung.

Zunächst wird für das Signorini Problem eine Finite-Element Least-Squares Formulierung angegeben. Die Verschiebungen ${\bf u}$ werden durch Standard-Elemente, die Spannungen ${\boldsymbol \sigma}$ durch Raviart-Thomas-Elemente approximiert.

Das durch die Diskretisierung entstehende lineare Gleichungssystem hat eine nicht positiv definite Steifigkeitsmatrix A. Um eine positiv definite Matrix zu erhalten wird das System mithilfe der Nullraum-Methode transformiert.

Es ist jedoch wichtig die Randbedingungen des möglichen Kontaktrandes zu berücksichtigen, welcher a priori nicht bekannt ist. Um dies auch effizient umsetzen zu können, wird eine Aktive-Mengen-Strategie angewandt.

Um das Verfahren noch zu verbessern werden unterschiedliche Vorkonditionierer verwendet. Dabei liegt das Hauptaugenmerk auf der Vorkonditionierung nach Hiptmair, hierbei wird eine Basiserweiterung bei den Raviart-Thomas-Elementen vorgenommen. Es werden die divergenzfreien Unterräume hinzugefügt, diese sind bei dem verwendeten Beispiel sehr leicht zu bestimmen.

Die Implementierung der vorgestellten Verfahren zeigt am Beispiel des Hertz'schen Kontaktproblem, dass die Vorkonditionierung von Hiptmair eine starke Reduktion der CG-Schritte bewirkt.

Stichworte: Signorini-Problem, Least-Squares, Aktive-Mengen, Vorkon-ditionierung, Finite-Elemente

Abstract

This thesis deals with mathematical formulations to describe the deformation of bodies caused by external forces. In particular, the Signorini contact problem is observed. The numerical methods for solving the resulting partial differential equations are introduced. The thesis focusses on the development of an efficient method in particularly with regard to the preconditioning.

Initially a finite-element least-squares formulation for the Signorini problem is given. The displacements \mathbf{u} are approximated by standard elements, the stresses $\boldsymbol{\sigma}$ by Raviart-Thomas elements.

The linear equation system resulting from the discretization, has a non-positive definite stiffness matrix A. To obtain a positive definite matrix the system is transformed via the null-space method.

It is important to respect the boundary conditions of the possible contact boundary, which is not known a priori. To implement this efficiently, an active-set strategy will be applied.

Different preconditioners are used to improve the methods. The main focus is on the preconditioning after Hiptmair, which means a basis extension for the Raviart-Thomas elements. The divergence-free subspaces will be added, which can be determined very easily for this example.

Using the example of the Hertz contact problem, the implementation of the presented method shows, that the preconditioning of Hiptmair causes a strong reduction of the CG-steps.

Keywords: Signorini-Problem, Least-Squares, active set, preconditioning, Finite-Elements

Inhaltsverzeichnis

1	Einl	eitung	13
	1.1	Motivation	13
	1.2	Aufbau der Arbeit	1
2	Gru	ndlegende Definitionen und Notationen	17
	2.1	Grundlegendes zu partiellen Differentialgleichungen	1'
	2.2	Optimalitätsbedingungen	20
	2.3	Mechanik	22
3	Gru	ndlagen der Elastizitätstheorie	25
	3.1	Verschiebung und Verzerrung	25
	3.2	Spannungszustand	2
	3.3	Gleichgewichtsbedingungen	30
	3.4	Materialgesetze	3
		3.4.1 Homogenes, isotropes Materialverhalten	32
	3.5	Signorini's Problem	33
4	Mat	thematische Grundlagen	37
	4.1	Lösen linearer Gleichungssysteme	3
		4.1.1 Relaxationsverfahren	3
		4.1.2 Vorkonditionierer	39
	4.2	Least-Squares-Ansatz	41
	4.3	Numerische Optimierung	42
		4.3.1 Das Verfahren der konjugierten Gradienten	42
		4.3.2 Strategie der aktiven Mengen	45
		4.3.3 Nullraum-Methode	49
	4.4	Methode der finiten Elemente	50
		4.4.1 Standard-Elemente	54
		4.4.2 Raviart-Thomas-Elemente	54
5	Leas	st-Squares-Formulierung für das Signorini-Kontaktproblem	57
_	5.1	Der Finite-Element Ansatz	
	5.2	Approximationsgüte	
	5.3	Nullraum-Methode	65

Inhaltsverzeichnis

	5.4	Vorkonditionierung	6
		5.4.1 Hiptmair-Vorkonditionierer	6
6	Nur	nerische Ergebnisse 73	1
	6.1	Hertzsches-Kontakt-Problem	1
	6.2	Ergebnisse für das Hertz-Kontakt-Problem	2
		6.2.1 Splitting assoziierte Vorkonditionierer	5
		6.2.2 Erweitertes System nach Hiptmair	9
		6.2.3 Vergleich der unterschiedlichen Vorkonditionierer 85	2
	6.3	Fazit	4

Symbolverzeichnis

```
betrachtetes Gebiet, offene Menge des \mathbb{R}^n
Ω
Γ
           Rand des betrachteten Gebietes
C^m(\Omega)
           Menge der m-mal stetig differenzierbaren Funktionen
L^2(\Omega)
           Menge der über \Omega quadrat-integrierbaren Funktionen
\|\cdot\|_m
           Sobolev-Norm der Ordnung m
           Dualraum von V
           \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}
\operatorname{div} f
           Deformation
\phi
           Verschiebungen
\mathbf{u}
           Spannungen
\sigma
C
           Cauchy-Greenscher-Verzerrungtensor
E
           Verzerrung
           Verzerrung in linearer Näherung
T
           Cauchyscher Spannungstensor
\Gamma_D
           Dirichlet-Rand
\Gamma_N
           Neumann-Rand
\Gamma_C
           möglicher Kontakt-Rand
\mathcal{T}_h
           Triangulierung von \Omega
\mathcal{P}_k
           Menge der Polynome vom Grad \leq k
\mathcal{RT}_k
           Raviart-Thomas Element der Ordnung k
           Finite-Elemente-Raum für die Verschiebung u
V_h
\Sigma_h
           Finite-Elemente-Raum für die Spannung \sigma
           Basisfunktion von V_h \subset H_0^1(\Omega)
\phi_i
           Basisfunktion von \Sigma_h \subset H(\operatorname{div}, \Omega)
\psi_i
h
           maximaler Gitterabstand
```

1 Einleitung

1.1 Motivation

Die mathematische Modellierung von Vorgängen in der Natur ist von großer Bedeutung für viele Bereiche der Technik. Unter Anwendung mathematischer Abstraktionen entstehen Modelle zur Beschreibung der Abläufe in der Natur. Die Lösung der so entstehenden Gleichungen ist der wichtigste Teil der angewandten Mathematik.

Zur Behandlung der bei der Modellierung entstehenden partiellen Differentialgleichungen wird häufig die Methode der finiten Elemente genutzt. Der entscheidende Schritt dabei ist die Umformulierung der Differentialgleichung und der Darstellung der Aufgabe durch ein endlichdimensionales Gleichungssystem.

Anschaulich betrachtet geht es in dieser Arbeit darum die Verformungen von Gegenständen zu berechnen. Wirken Kräfte auf einen Körper, wird dieser sich nach bestimmten Gesetzmäßigkeiten verformen, es gilt diese Eigenschaften in ein mathematisches Modell zu fassen und zu berechnen.

Die in dieser Arbeit vorgestellten Methoden können verwendet werden, um eine numerische Approximation zu berechnen, wie Gegenstände unter Belastung ihre Form verändern. Als populärstes Beispiel sind die computersimulierten Crash-Tests zu nennen. Aber auch bei der Fertigung von Bauteilen ist es von Bedeutung zu simulieren, wie diese sich unter Krafteinwirkungen verhalten. Dann ist es möglich die Bauteile sowohl in ihrer Form als auch in ihren Materialeigenschaften zu optimieren.

Für den Nutzer solcher Berechnungen ist es nicht nur wichtig, dass die Ergebnisse zuverlässig und möglichst genau sind, sondern auch, dass die Ergbnisse schnell berechnet werden können. Daher ist es wichtig das Modell und die Rechenalgorithmen so zu verbessern, dass man möglichst schnell zu hinreichenden genauen Ergebnissen gelangt.

In dieser Arbeit wird eine Least-Squares Formulierung für das Signorini-Kontakt-Problem betrachtet. Die Idee der Methode der kleinsten Quadrate oder Least-Squares Methode wurde schon im 17. Jahrhundert von Carl Friedrich Gauß entdeckt. Legrende war dann allerdings der erste, der die Least-Squares Methode in einer Publikation erwähnte. Die Anwendung der Least-Squares Methode auf die finiten Elemente wurde dann aber erst in den 1970er Jahren populär. Für einen Überblick über Finite-Element Least-Squares Formulierungen sei auf [BG09] verwiesen.

In jedem Schritt der Finiten-Element Methode muss ein lineares Gleichungssystem gelöst

1 Einleitung

werden. In der Regel ist dies ein Gleichungssystem mit sehr vielen Unbekannten. Je feiner das Gitter, mit dem man das zu simulierende Gebiet überziehen muss, gewählt wird, desto größer ist die Anzahl der Freiheitsgrade. Und damit erhöht sich auch die Zahl der Unbekannten für das lineare Gleichungssystem. Daher ist es bei immer feiner werdendem Gitter wichtig effiziente Lösungsstrategien zu haben.

Ziel dieser Arbeit ist es eine Finte-Element Least-Squares Formulierung für das Signorini-Kontaktproblem anzugeben und zu untersuchen. Dabei werden durch den Finite-Element Ansatz sowohl die Verschiebungen ${\bf u}$ als auch die Spannungen ${\boldsymbol \sigma}$ approximiert. Dabei werden Standard-Elemente und Raviart-Thomas-Elemente als Ansatzräume gewählt.

Die durch den Finite-Element Ansatz entstehende Steifigkeitsmatrix A ist in diesem Fall nicht positiv definit. Für viele Lösungsansätze ist es aber notwendig, dass die Matrix positiv definit ist. Daher wird das Ausgangssystem mithilfe der Nullraum-Methode transformiert, so dass ein System mit positiv definiter Matrix entsteht.

Beim Signorini-Kontaktproblem gibt es Randbedingungen, die nur auf dem Kontaktrand gelten. Bei der Approximation der Verschiebungen und der Spannungen tritt nun das Problem auf, dass der tatsächliche Kontaktrand nicht bekannt ist. Daher wird als Lösungsansatz, die Aktive-Mengen-Strategie gewählt. Bei dieser wird zu Beginn des Verfahrens ein möglicher Kontaktrand festgelegt und im Laufe des Verfahrens dann entsprechend vergrößert oder verkleinert.

Um möglichst effiziente Verfahren zu erhalten werden verschiedene Vorkonditionierungstechniken angewandt. Es wird dabei auf Standardansätze wie Jacobi oder Gauß-Seidel zurückgegriffen aber auch auf Idee von Hiptmair. Bei dieser wird eine Basiserweiterung um die divergenzfreien Unterräume durchgeführt. Der Vergleich der Ergebnisse für die unterschiedlichen Vorkonditionierer zeigt, dass die Erweiterung gemäß Hiptmair eine wesentliche Reduktion der Anzahl der CG-Schritte liefert.

1.2 Aufbau der Arbeit

Diese Arbeit gliedert sich wie folgt:

In Kapitel 2 werden die in späteren Kapiteln benötigten grundlegenden Definitionen und Gleichungen angegeben. Desweiteren werden die Sobolev-Räume eingeführt und die Grundbegriffe Spannung und Dehnung aus der Mechanik werden intuitiv erklärt.

In den beiden folgenden Kapiteln werden allgemein die für diese Arbeit relevanten Abschnitte der Elastizitätstheorie und der numerischen Mathematik zusammengefasst.

Kapitel 3 hat das Ziel das der Arbeit zugrunde liegende Signorini-Problem zu erläutern. Dazu werden zu Beginn zunächst einige grundlegenden Begriffe der Mechanik dargestellt. Wichtig sind in diesem Zusammenhang die Begriffe Verschiebungen, diese werden mit \mathbf{u} bezeichnet, und Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$.

Kapitel 4 erklärt die Grundlagen der Numerischen Mathematik. Zunächst werden Lösungsstrategien für lineare Gleichungssysteme und Vorkonditionierungstechniken vorgestellt. Im weiteren werden einige Grundlagen der Numerischen Optimierung näher erläutert, wie z.B. das CG-Verfahren oder die Aktiven-Mengen-Strategie. Zuletzt wird dann das Grundprinzip der Finiten-Elemente beschrieben.

In Kapitel 5 werden dann die im vorherigen Kapitel vorgestellten numerischen Methoden auf das Signorini-Kontakt Problem angewandt. Der Finite-Element Ansatz approximiert dabei sowohl die Verschiebungen \mathbf{u} mithilfe von Standard-Elementen als auch die Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ mithilfe von Raviart-Thomas-Elementen.

Im Anschluß werden im letzten Abschnitt die numerischen Ergebnisse für das Hertz'sche Kontatkproblem gezeigt. Dabei liegt das Hauptaugenmerk auf dem Vergleich der unterschiedlichen Vorkonditionierer, im speziellen der Vergleich des erweiterten Systems mit dem Originalsystem.

2 Grundlegende Definitionen und Notationen

Im folgenden Kapitel werden die grundlegenden Definitionen, die für das Verständnis dieser Arbeit wichtig sind kurz zusammengefasst. Es handelt sich um Grundlagen, die allgemein bekannt sein sollten. Daher werden die einzelnen Definitionen und Notationen nur kurz genannt und nicht weiter erläutert.

Bemerkung 2.1: In dieser Arbeit wird ein Skalar $a \in \mathbb{R}$ immer in 'Normalschrift' erscheinen, während Vektoren $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ oder Tensoren in **fetter** Schrift gedruckt werden. Für Matritzen $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ werden Großbuchstaben verwendet.

Definition 2.2 (Gradient): Mit $\nabla \mathbf{v}$ bezeichnet man den Gradienten eines Vektors $\mathbf{v} = (v_1, ..., v_n) \in \mathbb{R}^n$. Der Gradient von \mathbf{v} ist dann gegeben durch:

$$\nabla \mathbf{v} = \begin{pmatrix} \frac{\delta v_1}{\delta x_1} & \cdots & \frac{\delta v_n}{\delta x_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\delta v_1}{\delta x_n} & \cdots & \frac{\delta v_n}{\delta x_n} \end{pmatrix}$$

Definition 2.3 (Divergenz): Der Divergenzoperator wird mit div bezeichnet. Die Divergenz eines Vektors $\mathbf{v} = (v_1, ..., v_n) \in \mathbb{R}^n$ ist gegeben durch:

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\delta v_i}{\delta x_i}$$

Die Divergenz eines Tensors $\sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ist zeilenweise gemeint und damit erhält man als Ergebnis einen Vektor im \mathbb{R}^m

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \operatorname{div} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\sigma}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_1 \\ \vdots \\ \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n \frac{\delta \sigma_{1i}}{\delta x_i} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n \frac{\delta \sigma_{mi}}{\delta x_i} \end{bmatrix}$$

2.1 Grundlegendes zu partiellen Differentialgleichungen

Im Folgenden werden grundlegende Definitionen zu partiellen Differentialgleichungen kurz zusammengefasst. Für viele solcher Gleichungen ist es nicht möglich eine geschlossene Lö-

sung anzugeben, mit Hilfe der Finiten-Elementen ist es jedoch meist möglich eine Näherungslösung zu finden.

Als Funktionenräume, in denen diese Näherungslösungen gesucht werden, bieten sich die sogenannten Sobolev-Räume an. Versucht man die Räumem C^n zu verwenden, ergeben sich Schwierigkeiten, da diese Räume nicht abgeschlossen sind, d.h. dass eine Folge aus C^n gegen ein Element konvergiert, welches nicht in C^n enthalten ist.

Da die Räume C^n erweitert werden, spricht man von einer schwachen Lösung. Für die Definition der Sobolevräume, benötigt man zunächst die Definition der schwachen Ableitung.

Definition 2.4 (schwache Ableitung): Es sei $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ mit $\alpha_i \in \mathbb{N}_0$ ein Multi-Index, man setzt $|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3$. Für $u \in C^m(\Omega)$ wird für $|\alpha| \leq m$

$$\partial^{\alpha} u := \frac{\partial^{\alpha_1}}{\partial x_1^{\alpha_1}} \frac{\partial^{\alpha_2}}{\partial x_2^{\alpha_2}} \frac{\partial^{\alpha_3}}{\partial x_3^{\alpha_3}}$$

als schwache Ableitung bezeichnet. Abkürzend wird z.B. für $\alpha = (0, 1, 0)$ ∂_2 geschrieben statt ∂^{α} .

Es bezeichne $\Omega \subset \mathbb{R}^n (n=1,2,3)$ ein beschränktes Gebiet mit dem Rand $\Gamma := \partial \Omega$. Dann wird die Gesamtheit aller meßbaren und zur p-ten Potenz über Ω integrierbaren Funktionen mit

$$L^{p}(\Omega) = \left\{ f : \int_{\Omega} |f(x)|^{p} dx < \infty \right\}$$

bezeichnet und die Norm lautet

$$||u||_{L^p(\Omega)} = \left[\int_{\Omega} |v(x)|^p dx\right]^{1/p}.$$

Im Falle p = 2 gilt dann

$$L^{2}(\Omega) = \left\{ f : \Omega \to \mathbb{R}^{3} \left| \int_{\Omega} \left| f(x) \right|^{2} dx < \infty \right\} \right\}$$

besteht aus allen Funktionen, deren Quadrat über Ω integrierbar ist. Das zu diesem Raum zugehörige Skalarprodukt ist:

$$(u,v)_{0,\Omega} = \int_{\Omega} u(x)v(x) dx.$$

Dieses Skalarprodukt induziert die Norm

$$||u||_{0,\Omega}^2 = (u,u)_{0,\Omega}$$

Definition 2.5: Der Raum $C^m(\Omega)(m \in \mathbb{N})$ wird mit der Norm:

$$\|v\|_{m,\Omega} := \left(\sum_{|\alpha| \le m} \|\partial^{\alpha} v\|_{0,\Omega}^2\right)^{1/2}$$

versehen. Der **Sobolev-Raum** $H^m(\Omega)$ ist die Vervollständigung von $C^m(\Omega)$ bzgl. der Norm $\|\cdot\|_{m,\Omega}$. Die Norm wird mit Sobolev-Norm bezeichnet.

Bemerkung: Mit dem Skalarprodukt

$$(u,v)_{m,\Omega} = \sum_{|\alpha| \le m} \int_{\Omega} \partial^{\alpha} u \, \partial^{\alpha} v \, dx$$

wird $H^m(\Omega)$ zu einem **Hilbert-Raum**.

Definition 2.6 : Es sei V ein Hilbert-Raum. Die Menge der stetigen linearen Funktionale $f:V\to\mathbb{R}$ bildet mit der Norm:

$$||f||_{V'} := \sup_{v \neq 0} \frac{|f(v)|}{||v||}$$

einen Banach-Raum. Dieser Raum wird mit V' bezeichnet und heißt **Dualraum** von V. Für den Wert von $f \in V'$ im Punkt $v \in V$ wird die Schreibweise $\langle f, v \rangle$ verwendet.

Satz 2.7 (Spursatz): Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein beschränktes Lipschitz-Gebiet. Dann gibt es eine beschränkte lineare Abbildung $\gamma: H^1(\Omega) \to L^2(\partial\Omega)$ für die gilt

$$\|\gamma(v)\|_{0,\partial\Omega} \le c \|v\|_{1,\Omega}$$
.

Dann ist $\gamma(v) = v|_{\partial\Omega}$ für alle $v \in H^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$.

Ist eine Spurabbildung $\gamma: H^1(\Omega) \to L^2(\Gamma)$ gegeben, kann man einen Funktionenraum über dem Rand $\Gamma = \partial \Omega$ definieren. Von großer Bedeutung ist dabei der Raum

$$H^{1/2} = \left\{ w \in L^2(\Gamma) : \text{ es existiert ein } v \in H^1(\Omega) \text{mit } w = \gamma v \right\}$$

die dazugehörige Norm ist gegeben durch

$$\|w\|_{H^{1/2}(\Gamma)} = \inf \left\{ \|v\|_{H^1(\Omega)} : v \in H^1(\Omega), w = \gamma v \right\}.$$

Der zu $H^{1/2}(\Gamma)$ gehörige Dualraum wird mit $H^{-1/2}(\Gamma)$ bezeichnet.

Man definiert:

$$C_0^m \ := \ \{u \in C^m(\Omega) \ : \ u = 0 \ \textit{au}\beta\textit{erhalb der kompakten Menge} \ \Omega\}$$

Definition 2.8: Die Vervollständigung von $C_0^m(\Omega)$ bzgl. der Sobolev-Norm $\|\cdot\|_{m,\Omega}$ wird mit $H_0^m(\Omega)$ bezeichnet.

Definition 2.9 : Es sei V ein Hilbert-Raum. Die Bilinearform $a:V\times V\to\mathbb{R}$ heißt **stetig**, falls

$$|a(u,v)| \le C_S ||u||_V ||v||_V$$
 für alle $u,v \in V$

mit einer Konstanten C_S .

Die Bilinearform heißt V-elliptisch oder koerziv, falls

$$a(v,v) \ge C_E \|v\|_V^2$$
 für alle $v \in V$

mit einer Konstanten $C_E > 0$.

Satz 2.10 (*Lax-Milgram*): Es sei V ein Hilbertraum. Die Bilinearform $a:V\times V\to \mathbb{R}$ sei symmetrisch, stetig in V und V-elliptisch. Desweiteren sei $F:V\to \mathbb{R}$ ein stetiges lineares Funktional, d.h.

$$|F(v)| \le C_F ||v||_V$$
 für alle $v \in V$

mit einer Konstanten C_F . Dann gibt es eine eindeutige Lösung $u \in V$, für die gilt

$$a(u, v) = F(v)$$
 für alle $v \in V$.

Diese minimiert den Ausdruck

$$J(v) = \frac{1}{2}a(v,v) - F(v)$$

unter allen $v \in V$.

2.2 Optimalitätsbedingungen

In diesem Abschnitt werden kurz die wichtigsten Definitionen, Sätze und Eigenschaften von Optimierungsproblemen zusammengefasst.

Definition 2.11: Unter einem lokalen Minimum versteht man einen Punkt $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$, für den $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ in einer Umgebung von \mathbf{x}^* gilt.

Satz 2.12 :(notwendige Bedingung 1. Ordnung) Ist \mathbf{x}^* ein lokales Minimum von f und ist f stetig differenzierbar in einer Umgebung von \mathbf{x}^* , dann gilt $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$.

Satz 2.13:(notwendige Bedingung 2. Ordnung) Ist \mathbf{x}^* ein lokales Minimum von f und ist die Hesse-Matrix $\nabla^2 f$ stetig in einer Umgebung von \mathbf{x}^* , dann gilt $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$ und $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ positiv semidefinit.

Satz 2.14 :(hinreichende Bedingung 2. Ordnung) Ist die Hesse-Matrix $\nabla^2 f$ stetig in einer Umgebung von \mathbf{x}^* mit $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$ und ist $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ positiv definit, dann ist \mathbf{x}^* ein strenges lokales Minimum.

Das am häufigsten auftretende Problem ist die Minimierung einer Funktion $f(\mathbf{x})$, dabei muss das Minimum weiteren Bedingungen genügen, den sogenannten Nebenbedingungen.

Im Folgenden wird dann auch von einem solchen Problem ausgegangen:

 $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x})$ unter den Nebenbedingungen

$$c_i(\mathbf{x}) = 0 , i \in I_G$$
 (MuN)
 $c_i(\mathbf{x}) \ge 0 , i \in I_U$

Dabei bezeichnen die Mengen I_G und I_U die Indexmengen für die Gleichungs- bzw. Ungleichungsnebenbedingungen.

Es sei

$$G = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : c_i(\mathbf{x}) = 0 \text{ für } i \in I_G, c_i(\mathbf{x}) \ge 0 \text{ für } i \in I_U \}$$

die Menge der zulässigen Punkte für das Problem (MuN).

Definition 2.15: Unter der lokalen Lösung eines Minimierungsproblems unter Nebenbedingungen (MuN), versteht man einen Punkt $\mathbf{x}^* \in G$, für den $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ für alle $x \in K(\mathbf{x}^*) \cap G$ mit einer Umgebung $K(\mathbf{x}^*)$ von \mathbf{x}^* gilt.

Die zu (MuN) gehörige Lagrange-Funktion ist gegeben durch:

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) - \sum_{i \in I_G \cup I_U} \lambda_i c_i(\mathbf{x})$$

Desweiteren definiert man die Menge der aktiven Indizes:

$$I_A(\mathbf{x}) = I_G \cup \{i \in I_U : c_i(\mathbf{x}) = 0\}$$

Definition 2.16: Zu einem gegebenem Punkt \mathbf{x}^* sei $I_A(\mathbf{x}^*)$ die Menge der aktiven Indizes. Ist die Menge der zu den aktiven Nebenbedingungen gehörigen Gradienten

$$\{\nabla c_i(\mathbf{x}^*): i \in I_A(\mathbf{x}^*)\}$$

linear unabhängig, so erfüllt \mathbf{x}^* die LICQ-Bedingung.

Satz 2.17 : Es sei \mathbf{x}^* eine lokale Lösung des Minimierungsproblems (MuN) und \mathbf{x}^* erfülle die LICQ-Bedingung. Dann existiert ein Vektor von Lagrange-Multiplikatoren λ^* , so dass folgende Bedingungen erfüllt sind:

$$\nabla_x L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = 0$$

$$c_i(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{für alle } i \in I_G$$

$$c_i(\mathbf{x}) \ge 0 \quad \text{für alle } i \in I_U$$

$$\boldsymbol{\lambda}^* \ge 0 \quad \text{für alle } i \in I_U$$

$$\boldsymbol{\lambda}^* c_i(\mathbf{x}^*) = 0 \quad \text{für alle } i \in I_G \cup I_U$$

$$(KKT)$$

Die Bedingungen werden als Karush-Kuhn-Tucker (KKT)-Bedingungen bezeichnet.

2 Grundlegende Definitionen und Notationen

Im Fall einer quadratischen Minimierung unter Gleichungsnebenbedingungen

$$\min_{\mathbf{x}} \frac{1}{2} \mathbf{x}^T G \mathbf{x} + \mathbf{x}^T c \text{ unter den Nebenbedingungen}$$
$$A \mathbf{x} = \mathbf{b},$$

ergeben sich die KKT-Bedingungen zu:

$$\begin{pmatrix} G & -A^T \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}^* \\ \boldsymbol{\lambda}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{c} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix} .$$

Das bedeutet, dass eine Lösung \mathbf{x}^* diesem System genügen muss.

2.3 Mechanik

In diesem Abschnitt sollen nun zwei grundlegende Begriffe - Spannung und Dehnung - der Mechanik kurz erklärt werden. Dabei geht es darum einen intuitiven Eindruck von diesen Begriffen zu vermitteln.

Spannung

Durch eine äußere Belastung auf einen Stab, es wird z.B. mit einer Kraft F an dem Stab gezogen, werden innere Kräfte verursacht. Um diese bestimmen zu können wird ein Schnitt durch den Stab betrachtet. Die in der Schnittfläche wirkenden inneren Kräfte sind Flächenkräfte und werden als Spannungen bezeichnet.

Wählt man einen zur Stabachse senkrechten Schnitt s-s, wie in Abbildung 2.1a + b zu sehen, werden die auftretenden Spannungen mit σ bezeichnet. Sie stehen senkrecht zur Schnittfläche und werden daher auch Normalspannungen genannt.

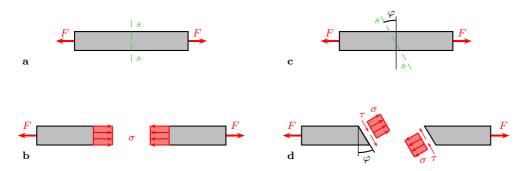


Abbildung 2.1: Spannungen in einem Stab

Im weiteren wählt man den Schnitt nicht senkrecht zur Stabachse, sondern in einer um den Winkel φ gedrehten Richtung, siehe Abbildung 2.1c + d. Die Spannungen wirken

dann auf der Schnittfläche, die Spannungen können in eine Komponente σ normal und eine Komponente τ tangential zur Schnittfläche zerlegt werden. Die Tangentialkomponente wird auch Schubspannung genannt.

Dehnung

Es werden die Verformungen eines elastischen Stabes betrachtet. Es wird ein Stab mit konstanter Querschnittsfläche betrachtet, der eine konstante Länge l hat. Wirkt an den Enden eine Zugkraft, dann verlängert er sich um Δl , siehe Abbildung 2.2. Es ist offensichtlich, dass

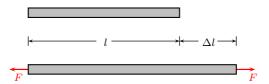


Abbildung 2.2: Dehnung eines Stabes mit konstantem ε

es zweckmäßig ist, nicht nur die Verlängerung Δl zu betrachten, sondern das Verhältnis der Längenänderung zur Ausgangslänge zu betrachten:

$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l}$$

Dabei wird ε als *Dehnung* bezeichnet. Die obige Definition gilt nur, wenn ε über die gesamte Stablänge konstant ist. Hat ein Stab eine veränderliche Querschnittsfläche oder wirken Volumenkräfte längs der Stabachse, kann die Dehnung vom Ort abhängen. Im diesem Fall gelangt man zu einer Definition der örtlichen Dehnung, indem man statt des gesamten Stabes nur ein Stabelement betrachtet, siehe Abbildung 2.3. Dieses Element hat die Stablänge

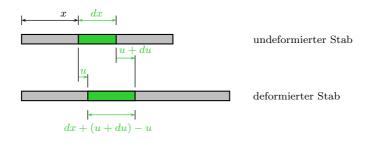


Abbildung 2.3: Dehnung eines Stabes mit variablem ε

dx, seine linke Querschnittsfläche befindet sich an der Stelle x, die rechte an der Stelle x+dx. Wird der Stab deformiert, werden die Querschnittsflächen verschoben, diese Verschiebung bezeichnet man mit u. Die Verschiebung hängt vom Ort des Querschnitts ab, daher gilt u=u(x). Verschiebt sich der linke Querschnitt um u, dann verschiebt sich der rechte um u+du. Die Länge des Elements beträgt im belasteten Stab dx+(u+du)-u=dx+du.

2 Grundlegende Definitionen und Notationen

Damit ist das Verhältnis der Längenänderung zur ursprünglichen Länge und damit die örtliche Dehnung gegeben durch

$$\varepsilon(x) = \frac{du}{dx}.$$

Ist die Verschiebung u(x) bekannt, kann die Dehnung $\varepsilon(x)$ durch Differenzieren berechnet werden. Ist hingegen die Dehnung $\varepsilon(x)$ bekannt erhält man die Verschiebung durch Integrieren.

3 Grundlagen der Elastizitätstheorie

In der Elastizitätstheorie betrachtet man den Zustand von Köpern unter der Einwirkung von Kräften. Insbesondere werden Spannungen und Verzerrungen betrachtet, die durch Deformationen entstehen.

Die wesentlichen Bestandteile der Elastizitätstheorie sind die Kinematik, die Gleichgewichtsbedingungen und die Materialgesetze. Die folgenden Abschnitte dieses Kapitels und insbesondere die Abbildungen sind an [Mech1], [Mech2], [Mech3] und [Mech4] angelehnt, für genauere Erklärungen sei darauf verwiesen.

3.1 Verschiebung und Verzerrung

Bei der Deformation eines Körpers spielen die kinematischen Größen Verschiebung u und die Dehnung $\varepsilon = du/dx$ eine Rolle. Nun ist es entscheidend wie man mithilfe dieser Größen die Verformung beschreiben kann. Dazu betrachtet man eine ebene Scheibe, wie in Abbildung 3.1 zu sehen. Wird diese Scheibe durch eine Normalspannung σ belastet, erfährt der Punkt P eine Verschiebung \mathbf{u} in eine neue Lage P'. Der Verschiebungsvektor \mathbf{u} ist ortsabhängig, daher ändern sich bei den Teiloberflächen 1 und 2 die Seitenlängen und die Winkel.

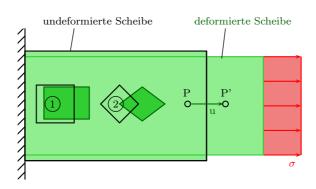


Abbildung 3.1: Verformung einer Scheibe

Man betrachtet gemäß Abbildung 3.2 einen Körper K in seinem undeformierten Ausgangzustand. Dieser wird durch ein Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ beschrieben. Ein beliebiger Punkt P dieses Körpers ist durch $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3) \in \Omega$ beschrieben. Wirken nun Kräfte auf den Körper, so wird dieser sich verformen und in den Körper K' übergehen. Der Punkt P er-

3 Grundlagen der Elastizitätstheorie

fährt dabei eine Verschiebung **u** und der Punkt befindet sich im deformierten Zustand am Ort P'. Dieser ist druch den Ortsvektor $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ festgelegt. Damit gilt insgesamt

$$\mathbf{x} - \mathbf{X} = \mathbf{u}$$
 $bzw.$ $x_i - X_i = u_i$

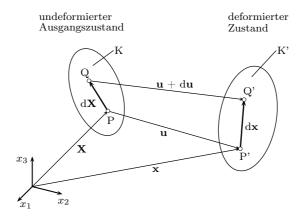


Abbildung 3.2: Verzerrungszustand

Es sei Ω eine Referenzkonfiguration eines Körpers. Es ist Ω die Teilmenge des \mathbb{R}^3 , die der Körper im spannungsfreien Zustand einnimmt. Der aktuelle Zustand des Körpers wird durch eine Abbildung $\phi: \Omega \to \mathbb{R}^3$ beschrieben. $\phi(x)$ beschreibt also den Ort des Punktes, der sich im Referenzzustand am Ort x befindet. Zusätzlich setzt man:

$$\phi = id + u \tag{3.1}$$

Man bezeichnet u als Verschiebung.

Definition 3.18: Es ist ϕ eine **Deformation**, wenn

$$det(\nabla \phi) > 0$$

gilt. Dabei ist $\nabla \phi$ der **Deformationsgradient**, dieser besitzt folgende Matrixschreibweise:

$$\nabla \phi = \begin{pmatrix} \frac{\delta \phi_1}{\delta x_1} & \frac{\delta \phi_1}{\delta x_2} & \frac{\delta \phi_1}{\delta x_3} \\ \frac{\delta \phi_2}{\delta x_1} & \frac{\delta \phi_2}{\delta x_2} & \frac{\delta \phi_2}{\delta x_3} \\ \frac{\delta \phi_3}{\delta x_1} & \frac{\delta \phi_3}{\delta x_2} & \frac{\delta \phi_3}{\delta x_3} \end{pmatrix}$$

Für die lokale Änderung der Länge ist folgende Matrix verantwortlich:

$$C := \nabla \phi^T \nabla \phi \tag{3.2}$$

C heißt Cauchy-Greenscher Verzerrungstensor. Durch

$$E := \frac{1}{2}(C - I)$$

wird eine Abweichung von der Identität definiert, diese wird als **Verzerrung** bezeichnet. Häufig wird für C und E die Matrixdarstellung benutzt, es ist offensichtlich, dass es sich bei beiden um symmetrische Matrizen handelt. Durch Einsetzen von (3.1) in (3.2) erhält man:

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\delta u_i}{\delta x_j} + \frac{\delta u_j}{\delta x_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{k} \frac{\delta u_i}{\delta x_k} \frac{\delta u_j}{\delta x_k}$$
 (3.3)

In der linearen Theorie können die quadratischen Terme vernachlässigt werden. Es ergibt sich als Näherung die symmetrische Ableitung

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{ij} := \frac{1}{2} \left(\frac{\delta u_i}{\delta x_j} + \frac{\delta u_j}{\delta x_i} \right)$$

d.h.

$$\varepsilon(\mathbf{u}) = \frac{(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)}{2} \tag{3.4}$$

3.2 Spannungszustand

Es wird ein Körper betrachtet, der beliebig belastet ist, zum Beipiel durch Einzelkräfte \mathbf{F}_i und Flächenlasten \mathbf{p} , siehe Abbildung 3.3a. Betrachtet man einen Schnitt s - s durch diesen Körper, sind die inneren Kräfte (Spannungen) über die gesamte Fläche A verteilt. Die Spannungen sind im allgemeinen über der Schnittfläche veränderlich.

Daher werden die Spannungen in einem beliebigen Punkt P der Schnittfläche definiert.

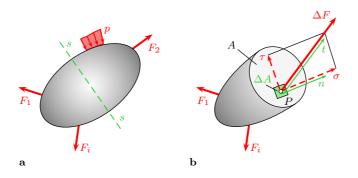


Abbildung 3.3: Spannungen in einem Körper

Auf ein Flächenelement ΔA , in dem der Punkt P enthalten ist, wirkt eine Kraft ΔF , wie in Abbildung 3.3b zu sehen ist. Durch den Quotienten $\Delta F/\Delta A$ (Kraft pro Fläche) wird die mittlere Spannung für das Flächenelement definiert. Geht man davon aus, dass für den

3 Grundlagen der Elastizitätstheorie

Grenzübergang $\Delta A \to 0$ das Verhältnis $\Delta F/\Delta A$ gegen einen endlichen Wert strebt. Dann ist der Spannungsvektor im Punkt P eines Schnittes definiert als:

$$\mathbf{t} = \lim_{\Delta A \to 0} \frac{\Delta F}{\Delta A} = \frac{dF}{dA}$$

dabei ist ΔF die Kraft, die auf die Fläche ΔA wirkt. Der Spannungsvektor hängt von der Orientierung des Schnittes ab, diese ist durch den Normaleneinheitsvektor \mathbf{n} gegeben: $\mathbf{t} = \mathbf{t}(\mathbf{n})$. Man kann \mathbf{t} in eine Komponente $\boldsymbol{\sigma}$ senkrecht zur Schnittfläche und einen tangentialen Anteil $\boldsymbol{\tau}$ zerlegen. Die erste Komponente heißt Normalspannung, die zweite Schubspannung.

Der Spannungszustand in einem Punkt P ist durch \mathbf{t} noch nicht ausreichend beschrieben. Legt man durch P Schnitte in verschiedenen Richtungen, so wirken dort entsprechend der unterschiedlichen Orientierung der Flächenelemente unterschiedliche Schnittkräfte. Der Spannungszustand in einem Punkt P kann durch die drei Spannungsvektoren in drei senkrecht aufeinander stehenden Schnittflächen festgelegt werden. Zeckmäßig werden diese Schnittflächen als die Koordinatenebenen eines kartesischen Koordinatensystems aufgefasst. Zur Veranschaulichung denkt man sich die Schnittflächen als Seitenflächen eines infinititesimalen Quaders mit den Kantenlängen dx, dy und dz in der Umgebung von P, Abbildung 3.4.

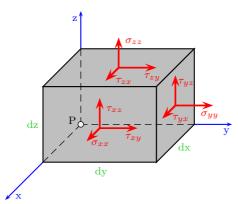


Abbildung 3.4: Spannungen in drei senkrechten Schnitten

Der Spannungstensor σ ist durch die Spannungsvektoren in drei senkrecht aufeinanderstehenden Schnitten gegeben. Wählt man diese Schnitte senkrecht zu den Achsen eines x, y, z - Koordinatensystems ergibt sich σ zu:

$$oldsymbol{\sigma} = \left(egin{array}{ccc} \sigma_{xx} & au_{xy} & au_{xz} \ au_{yx} & \sigma_{yy} & au_{yz} \ au_{zx} & au_{zy} & \sigma_{zz} \end{array}
ight)$$

Aufgrund des Momentengleichgewichts ist der Spannungstensor symmetrisch: $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, $\tau_{yz} = \tau_{zy}$, $\tau_{zx} = \tau_{xz}$. Zur Vereinfachung wird die Indexschreibweise verwendet, hierbei werden die kartesischen Koordianten statt mit x, y, z mit x_1, x_2, x_3 bezeichnet, die Richtungen

werden dann nur noch durch die Indizes 1,2,3 gekennzeichnet. Damit ergibt sich der Spannungtensor:

$$m{\sigma} = \left(egin{array}{ccc} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{array}
ight)$$

Dabei wird zwischen Normalspannung und Schubspannung nur druch die Indizes unterschieden. Gleiche Indizes kennzeichnen Normalspannung, ungleiche Schubspannung. Der Spannungstensor σ ist symmetrisch, dies bedeutet $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$

Bei Kenntnis des Spannungstensors kann der Spannungsvektor für jede beliebige Schnittrichtung berechnet werden. Dazu betrachtet man den Gleichgewichtszustand am infinitesimalen Tetraeder, der in Abbildung 3.5 zu sehen ist, die Flächen dA haben eine beliebige durch n_i gegebene Orientierung. Daher kann man allgemein schreiben:

$$dA_i = dAn_i$$
.

Die Gleichgewichtsbedingungen in x_1, x_2 und x_3 Richtungen lauten dann

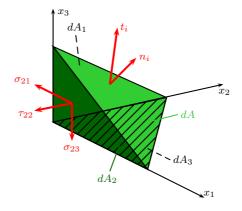


Abbildung 3.5: Infinitesimaler Tetraeder

$$t_1 dA = \sigma_{11} dA_1 + \sigma_{21} dA_2 + \sigma_{31} dA_3$$

$$t_2 dA = \sigma_{12} dA_1 + \sigma_{22} dA_2 + \sigma_{32} dA_3$$

$$t_3 dA = \sigma_{13} dA_1 + \sigma_{23} dA_2 + \sigma_{33} dA_3$$

zusammengefasst ergibt sich

$$t_1 = \sigma_{11}n_1 + \sigma_{21}n_2 + \sigma_{31}n_3$$

$$t_2 = \sigma_{12}n_1 + \sigma_{22}n_2 + \sigma_{32}n_3$$

$$t_3 = \sigma_{13}n_1 + \sigma_{23}n_2 + \sigma_{33}n_3$$

Diese Gleichungen kann man mithilfe der Indexschreibweise und der Summationskonvention schreiben:

$$t_i = \sigma_{ij} n_j$$
 bzw. $\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}$ (3.5)

3 Grundlagen der Elastizitätstheorie

Diese Beziehung wird als Cauchysche Formel bezeichnet. Damit ist bei gegebenem Spannungstensor σ_{ij} , jedem Normalvektor n_i ein Spannungsvektor t_i zugeordnet, d.h. der Spannungszustand ist durch σ vollständig bestimmt.

3.3 Gleichgewichtsbedingungen

Man unterscheidet zwei Arten von Kräften, die auf einen Körper wirken können:

- 1. flächenhaft verteilt wirkende Kräfte, sogenannte Oberflächenkräfte
- 2. volumenhaft verteilt wirkende Kräfte, sogenannte Volumenkräfte.

Das zentrale Axiom der Mechanik besagt, dass sich in einem Gleichgewichtszustand alle Kräfte zu null aufaddieren. Zu den Kräften zählen dabei sowohl die Volumenkräfte als auch die Oberflächenkräfte. Die Formulierung der Gleichgewichtsbedingungen erfolgt durch ein aus dem Körper geschnittenes endliches Teilvolumen V mit der Oberfläche A, wie in Abbildung 3.6 zu sehen. Dieses Teilvolumen wird durch die Volumenkraft f_i und die Oberflächenbelastung (Spannungsvektor) t_i belastet. Damit der Körper sich im Gleichgewicht

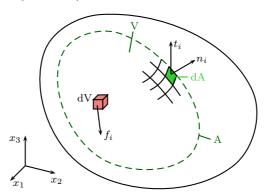


Abbildung 3.6: Volumenelement

befindet, muss die Summe der äußeren Kräfte verschwinden:

$$\int_{A} t_{i} dA + \int_{V} f_{i} dV = 0, \tag{3.6}$$

Mit der Cauchyschen Formel (3.5) folgt daraus:

$$\int_{A} \sigma_{ij} n_j dA + \int_{V} f_i dV = 0, \qquad (3.7)$$

Das Oberflächenintegral lässt sich mithilfe des Gaußschen Satzes in ein Volumenintegral umwandeln. Für eine einfachere Schreibweise werden die partiellen Ableitungen einer Funktion nach x_i symbolisch durch den Index i hinter einem Komma gekennzeichnet. Dann gilt:

$$\int_{A} \sigma_{ij} n_{j} dA = \int_{V} \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_{j}} dV = \int_{V} \sigma_{ji,j} dV$$

Durch Zusammenfassen der Volumenintegrale erhält man

$$\int_{V} (\sigma_{ij,j} + f_i) dV = 0.$$

Diese Gleichung kann für ein beliebiges Volumen V nur dann erfüllt sein, wenn der Integrand verschwindet:

$$\sigma_{ij,j} + f_i = 0$$

Damit ist der Körper im Gleichgewicht, wenn gilt:

$$\operatorname{div}\boldsymbol{\sigma} + f = 0$$

3.4 Materialgesetze

Das mechanische Verhalten eines bestimmten Materials wird durch ein sogenanntes Stoffgesetz beschrieben. Durch dieses werden die Spannungen und Verzerrungen miteinander verknüpft. Verhält sich ein Material in allen Punkten gleich, so nennt man es homogen, andernfalls inhomogen. Sind die Eigenschaften des Materials von der Richtung unabhängig, so spricht man von isotropen Material. Bei anisotropen Material sind die Eigenschaften abhängig von der Richtung.

Ist die Spannung unabhängig von der Deformationsgeschichte, damit ist sie ebenfalls unabhängig von der Zeit, wird ein solches Verhalten elastisches Materialverhalten genannt. Übertragen auf den dreiachsigen Fall bedeutet dies, dass einem Verzerrungszustand eindeutig ein Spannungszustand zugeordnet ist: $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(\varepsilon_{kl})$.

Meist besteht ein linearer Zusammenhang zwischen Spannungen und Verzerrungen, im einachsigen Fall wird dieser durch das Hookesche Gesetz

$$\sigma = E\varepsilon$$

beschrieben, dabei wird E als Elastizitätsmodul bezeichnet. Im dreidimensionalen kann die lineare Beziehung mithilfe der Summenvereinbarung folgendermaßen beschrieben werden:

$$\sigma_{ij} = E_{ijkl} \varepsilon_{kl} \tag{3.8}$$

Es gilt also beispielsweise für die erste Komponente σ_{11}

$$\sigma_{11} = E_{1111}\varepsilon_{11} + E_{1112}\varepsilon_{12} + E_{1113}\varepsilon_{13} + E_{1121}\varepsilon_{21} + E_{1122}\varepsilon_{22} + E_{1123}\varepsilon_{23} + E_{1131}\varepsilon_{31} + E_{1132}\varepsilon_{32} + E_{1133}\varepsilon_{33}$$
(3.9)

Man bezeichnet E_{ijkl} als Elastizitätstensor und seine 81 Komponenten als Elastizitätskonstanten. Bedenkt man nun, dass der Verzerrungs- und der Spannungstensor symetrisch sind, erhält man, dass auch bei E_{ijkl} die Indizes i, j bzw. k, l vertauscht werden können

 $E_{ijkl} = E_{jikl} = E_{jilk} = E_{jilk}$. Damit besitzt der Elastizitätstensor nur 36 unterschiedliche Komponenten, leicht zu erkennen ist dies wenn man (3.9) vereinfacht

$$\sigma_{11} = a_{11}\varepsilon_{11} + a_{12}\varepsilon_{22} + a_{13}\varepsilon_{33} + 2a_{14}\varepsilon_{23} + 2a_{15}\varepsilon_{31} + a_{16}\varepsilon_{12}$$

In Matrixschreibweise zusammengefasst erhält man

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} \\ a_{61} & a_{62} & a_{63} & a_{64} & a_{65} & a_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix}$$

3.4.1 Homogenes, isotropes Materialverhalten

Bei isotropem Material ist das Verhalten in allen Richtungen gleich. Dies bedeutet, dass sich bei Rotation des Koordinatensystems der Elastizitätstensor nicht ändert. Damit ergeben sich die einzelnen Komponenten des Tensors

$$E_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + \kappa (\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk}),$$

dabei sind λ, μ, κ Konstanten. Da die Indizes i, j bzw. k, l vertauschbar sind , fällt der dritte Summand weg, es ergibt sich

$$E_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}).$$

Demnach sind die Komponenten des Elastizitätstensors durch zwei unabhängige Konstanten λ und μ bestimmt. Setzt man nun die letzte Gleichung in (3.8) ein erhält man

$$\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} \varepsilon_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} \varepsilon_{kl} + \delta_{il} \delta_{jk} \varepsilon_{kl}) = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + \mu (\varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ji}).$$

$$\Rightarrow \sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}$$
(3.10)

Die Konstanten λ und μ sind die sogenannten **Lamé-Konstanten**. Mit dem Elastizitätsmodul E und der Querkontraktion ν , besteht folgender Zusammenhang:

$$\nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}, \qquad \qquad E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu}, \qquad (3.11)$$

$$\nu = \frac{1}{2(\lambda + \mu)}, \qquad E = \frac{1}{\lambda + \mu}, \qquad (3.11)$$

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}, \qquad \mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}$$

Gibt man Gleichung (3.10) in Matrixschreibweise an, erhält man

$$\sigma(\varepsilon) = \lambda \operatorname{spur}(\varepsilon)I + 2\mu\varepsilon.$$

Ersetzt man desweiteren die Konstanten λ und μ wie in (3.12) angegeben, erhält man

$$\boldsymbol{\sigma}(\varepsilon) = \frac{\mathbf{E}\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left(\operatorname{spur} \boldsymbol{\varepsilon} \right) \mathbf{I} + \frac{\mathbf{E}}{(1+\nu)} \varepsilon$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{\sigma}(\varepsilon) = \frac{E}{1+\nu} \left(\boldsymbol{\varepsilon} + \frac{\nu}{1-2\nu} (\operatorname{spur} \boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{I} \right)$$
(3.13)

3.5 Signorini's Problem

Das Signorini Problem modelliert den linearisierten Kontakt eines elastischen Körpers mit einem festen Hindernis. Da der Teil des Randes, der mit dem Hindernis tatsächlich in Kontakt tritt nicht bekannt ist, ist das Problem nichtlinear. Um das Signorini Problem formulieren zu können, wird zunächst gezeigt, wie die Nichtdurchdringung des Hindernis G gewährleistet werden kann. Der Körper $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ und das Hindernis $G \subset \mathbb{R}^3$ seien beschränkte Lipschitz-Gebiete. Wie ein solches Problem aussehen kann, ist in Abbildung 3.7 zu sehen.

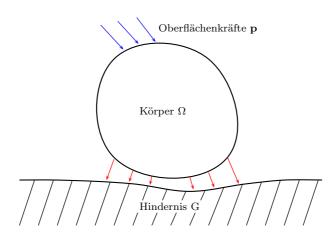


Abbildung 3.7: Signorini Problem

Der Rand $\partial\Omega$ des Körpers besteht aus drei disjunkten Teilen:

$$\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_C$$

Auf Γ_D gelten Dirichlet-Randbedingungen, Γ_N ist Neumann-Rand des Gebietes, auf dem die Oberflächenkräfte wirken. Desweiteren ist Γ_C der mögliche Kontaktrand, der tatsächliche Kontaktbereich ist eine Teilmenge von Γ_C .

Da Ω und G Lipschitz-Gebiete sind, können die Ränder der Gebiete lokal-lipschitz stetig parametrisiert werden.

Es sei $x \in \partial \Omega$ ein Punkt auf dem Rand des Gebietes, die Parametrisierung ist dann durch $\eta_x: (x_1, x_2) \to x_3$ gegeben. Entsprechned gilt die Parametrisierung η_y für das Hindernis G. Es wird davon ausgegangen, dass die beiden Punkte "dicht" beieinander liegen, so dass für beide Parametrisierungen das gleiche Koordinatensystem gewählt werden kann. Anschaulich ist dies in Abbildung 3.8 zu erkennen.

Betrachtet man die Verschiebung u nun ebenfalls in diesem Koordinatensystem, kann

3 Grundlagen der Elastizitätstheorie

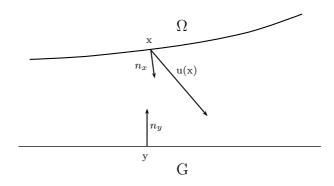


Abbildung 3.8: Linearisierter Kontakt

die Bedingung das Hindernis nicht zu druchdringen folgendermaßen formuliert werden:

$$\eta_x(x_1, x_2) + u_3 \le \eta_y(x_1 + u_1, x_2 + u_2).$$

Bestizen η_x und η_y stetige erste Ableitungen, kann man **u** linearisieren und erhält:

$$\eta_x(x_1, x_2) + u_3 \le \eta_y(x_1, x_2) \left(\frac{\partial \eta_y}{\partial x_1}, \frac{\partial \eta_y}{\partial x_2}\right) \cdot (u_1, u_2)^T$$

umformuliert ergibt sich

$$\left(-\frac{\partial \eta_y}{\partial x_1}, -\frac{\partial \eta_y}{\partial x_2}, 1\right) \cdot (u_1, u_2, u_3)^T \le \eta_y(x_1, x_2) - \eta_x(x_1, x_2)$$

Es ist $\tilde{n}_y = \left(-\frac{\partial \eta_y}{\partial x_1}, -\frac{\partial \eta_y}{\partial x_2}, 1\right)$ senkrecht zu ∂G , damit erhält man

$$n_y(u_1, u_2, u_3)^T \le G (3.14)$$

wobei

$$G = \frac{\eta_y(x_1, x_2) - \eta_x(x_1, x_2)}{\|\tilde{n}_y\|}$$

den Spalt zwischen Ω und G normalisiert bzgl. \tilde{n}_y darstellt.

Das Problem ist nun, dass der Punkt y, in dem wir die äußere Normale bestimmen müssen, nicht bekannt ist. Setzt man voraus, dass nur kleinere Deformationen auftreten, kann man (3.14) auch bzgl. n_x formulieren:

$$n_x(u_1, u_2, u_3)^T \le g (3.15)$$

mit

$$g = \frac{\eta_y(x_1, x_2) - \eta_x(x_1, x_2)}{\|\tilde{n}_x\|} \quad \text{und } \tilde{n}_x = \left(-\frac{\partial \eta_x}{\partial x_1}, -\frac{\partial \eta_x}{\partial x_2}, 1\right)$$
(3.16)

Dann ist Gleichung (3.15) die endgültige Kontkatbedingung.

Nun kann die klassische Formulierung des Signorini Problems in Form einer Differentialgleichung angegeben werden. Für die Verschiebung \mathbf{u} ist die linearisierte Kontaktbedingung (3.15) bereits gegeben, für die Spannungen werden nun auch noch Bedingungen benötigt. Es ist offensichtlich, dass die Spannungen in Normalenrichtung σ_n Druckspannungen sein müssen oder verschwinden, d.h.

$$\sigma_n(\mathbf{u}) \leq 0.$$

Desweiteren wird nur der reibungslose Kontakt betrachtet, dies bedeutet, dass der Körper sich in tangentialer Richtung frei bewegen kann. Daher gilt für die tangentiale Spannnung $\sigma_T(\mathbf{u})$

$$\sigma_T(\mathbf{u}) = 0.$$

Man nimmt an, dass der Körper auf Γ_D eingespannt ist, es gilt also:

$$u = 0 \quad \text{auf } \Gamma_D \tag{3.17}$$

Auf Γ_N sind Oberflächenkräfte t gegeben:

$$\sigma \cdot n = t \quad \text{auf } \Gamma_N \tag{3.18}$$

Hier bezeichnet $n = (n_1, n_2, n_3)$ die äußere Normale auf dem Rand $\partial\Omega$.

Die Volumenkräfte werden mit **f** bezeichnet, der deformierte Körper befindet sich genau dann im Gleichgewichtszustand, wenn gilt:

$$-\operatorname{div}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f} \quad \text{in } \Omega \tag{3.19}$$

Der verbleibende Teil des Randes Γ_C tritt unter Krafteinwirkung möglicherweise mit dem festen Hindernis in Kontakt. Für diesen Teil des Randes erhält man folgende linearen Bedingungen:

$$\begin{aligned}
\sigma_n &\leq 0 \\
\sigma_T &= 0 \\
\sigma_n(u \cdot n - g) &= 0 \\
u \cdot n - g &\leq 0
\end{aligned} \quad \text{auf } \Gamma_C \tag{3.20}$$

Die Funktion g beschreibt den Abstand zwischen dem Körper Ω und dem festen Hindernis G, wie in Gleichung (3.16). Der linearisierte Spannungstensor σ ist in den Gleichungen (3.20) in Normal- und Tangentialteil zerlegt, dabei ist die normale Komponente

$$\sigma_n = \sigma_{ij} n_i n_j$$

und die tangentiale Komponente

$$(\sigma_T)_i = \sigma_{ij} n_j - \sigma_n n_i.$$

Gleichung 3 in (3.20) bringt zum Ausdruck, dass man den tatsächlichen Kontaktbereich nicht kennt. Durch diese Bedingung wird ausgeschlossen, dass der Normalteil der Spannung $\sigma_n < 0$ ist, obwohl kein Kontakt auftritt, also $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0$.

Das Problem (3.19) unter den Nebenbedingungen (3.17),(3.18), (3.20) zu lösen, wird dann das Signorini Problem in der linearen Elastizität genannt.

In diesem Kapitel werden die für die Arbeit notwendigen mathematischen Grundlagen dargestellt. Dabei gibt es eine Unterteilung in zwei Hauptbereiche: Numerische Grundlagen und Numerische Optimierung.

4.1 Lösen linearer Gleichungssysteme

Das Lösen von linearen Gleichungssystemen ist das am häufigsten gestelle Problem in der Numerischen Mathematik. Es sei ein Gleichungssystem $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ gegeben, dabei ist die Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und die rechte Seite $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ bekannt, gesucht ist $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.

Viele praktische Probleme führen auf sehr große Gleichungssysteme, bei denen die Matrix A eher schwach besetzt ist. Die üblichen Eliminationsverfahren wie z.B. Gauß-Elimination sind bei einer solchen Besetzungsstruktur eher ungeeignet, da in Zwischenschritten wieder stark besetzte Matrizen auftreten.

Daher löst man solche Systeme mit sogenannten *Iterationsverfahren*. Bei diesen Verfahren wird von einem Startvektor $\mathbf{x}^{(0)}$ ausgegangen, es wird eine Folge von Vektoren

$$\mathbf{x}^{(0)} \rightarrow \mathbf{x}^{(1)} \rightarrow \mathbf{x}^{(2)} \rightarrow \dots$$

erzeugt, die gegen die gesuchte Lösung \mathbf{x} konvergiert.

4.1.1 Relaxationsverfahren

Gegeben sei das lineare Gleichungssystem(LGS) $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Die Grundidee der Relaxationsvefahren ist es auszunutzen, dass die Matrix A folgendermaßen aufgespalten werden kann:

$$A = B + (A - B), \qquad B \in \mathbb{R}^{n \times n} \tag{4.1}$$

Somit ergibt sich das LGS zu

$$(B + (A - B))\mathbf{x} = b \qquad \Leftrightarrow \qquad B\mathbf{x} = (B - A)\mathbf{x} + b$$

Setzt man voraus, dass die Matrix B regulär ist, erhält man

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = B^{-1}(B-A)\mathbf{x}^{(k)} + B^{-1}b$$

Satz 4.1 : Das Verfahren

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = M^{-1}(b - N\mathbf{x}^{(k)})$$

konvergiert genau dann für alle $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ gegen die Lösung des linearen Gleichungssystems $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, wenn für die zugehörige Iterationsmatrix $G = M^{-1}N$ gilt:

$$\rho(G) < 1.$$

Dabei ist ρ der Spektralradius der Matrix, dieser ist der betragsmäßig größte Eigenwert:

$$\rho(A) := \max_{1 \le i \le n} |\lambda_i(A)|$$

Jacobi-Verfahren

Das Jacobi-Vefahren setzt voraus, dass für die reguläre Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gilt:

$$a_{ii} \neq 0, \quad i = 1, ..., n$$

Für die neue Iterierte $\mathbf{x}^{(k+1)}$ gilt folgende Komponentenschreibweise:

$$a_{ii}x_i^{(k+1)} = b_i - \sum_{i \neq i} a_{ij}x_j^{(k)}, \ i = 1, ..., n$$

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^{(k)} \right), \ i = 1, ..., n$$

Die neue Iterierte $\mathbf{x}^{(k+1)}$ wird ausschließlich aus der alten Iterierten $\mathbf{x}^{(k)}$ berechnet, daher wird das Verfahren als Gesamtschrittverfahren bezeichnet.

Die Matrix A kann in drei unterschiedliche Matrizen zerlegt werden A = L + D + U, wobei

$$D = \begin{pmatrix} a_{11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{nn} \end{pmatrix}, L = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ a_{12} & \ddots & & \\ \vdots & & \ddots & \\ a_{1n} & \dots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} 0 & a_{21} & \dots & a_{n1} \\ & \ddots & & & \vdots \\ & & \ddots & a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{pmatrix}.$$

Mithilfe dieser drei Matrizen lässt sich das Jacobi-Verfahren in Matrixschreibweise angeben:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = -D^{-1}(L+U)\mathbf{x}^{(k)} + D^{-1}\mathbf{b}$$
(4.2)

Gauß-Seidel-Verfahren

Für das Gauß-Seidel-Vefahren wird ebenfalls voraus gesetzt, dass für die reguläre Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gilt:

$$a_{ii} \neq 0, \quad i = 1, ..., n$$

Für die neue Iterierte $\mathbf{x}^{(k+1)}$ gilt die Komponentenschreibweise:

$$\sum_{j=i}^{n} a_{ij} x_j^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k)}, \ i = 1, ..., n$$

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right), \ i = 1, ..., n$$

Dieses Verfahren benutzt zur Berechnug der i-ten Komponente der neuen Iterierten $x_i^{(k+1)}$ sowohl die alte Iterierte $\mathbf{x}^{(k)}$ als auch die (i-1) bereits bekannten Komponenten der neuen Iterierten $\mathbf{x}^{(k+1)}$. Daher bezeichnet man dieses Verfahren als *Einzelschrittverfahren*. In Matrixschreibweise hat das Gauß-Seidel-Verfahren die Form:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = -(D+L)^{-1}U\mathbf{x}^{(k)} + (D+L)^{-1}\mathbf{b}$$
(4.3)

4.1.2 Vorkonditionierer

Die Vorkonditionierer spielen bei der Lösung von linearen Gleichungssystemen eine wichtige Rolle. Unter der Vorkonditionierung eines linearen Gleichungssystems versteht man eine äquivalente Umformung des Systems $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ derart, dass ein Iterationsverfahren schneller oder überhaupt konvergiert. Dabei bleibt die eigentliche Lösung des Gleichungssystems erhalten. Die Idee der Vorkonditionierer ist es die Konditionszahl der Koeffizientenmatrix A zu verringern, da das Konvergenzverhalten wesentlich von dieser abhängt.

Das System wird folgendermaßen transformiert

$$P_L A P_R \mathbf{y} = P_L \mathbf{b}$$
$$\mathbf{x} = P_R \mathbf{y},$$

dabei werden die regulären Matrizen P_L und P_R mit Linksvorkonditionierer und Rechtsvorkonditionierer bezeichnet. Im konkreten Fall kann eine der Vorkonditionierungsmatritzen P=I sein, das System heißt dann links- bzw. rechtsvorkonditioniert. Der Vorkonditionierer sollte die Inverse von A mit geringstmöglichem Aufwand bestmöglich approximieren.

4.1.2.1 Splitting assoziierte Vorkonditionierer

Zu Beginn des Kapitels wurden die Relaxationsverfahren vorgestellt, welche auf der Zerlegung der Matrix A in der Form A = B + (A - B) basieren. Dabei soll B eine leicht

invertierbare Approximation an A sein. Damit bietet sich die Matrix $N=B^{-1}$ als Vorkonditionierer an.

Definition 4.2: Es sei durch $\mathbf{x}^{(k+1)} = M\mathbf{x}^{(j)} + N\mathbf{b}$ eine Splittung Methode zur Lösung von $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ gegeben, mit einer regulären Matrix N. Dann heißt P = N der zur Splitting Methode gehörige Vorkonditionierer.

Damit ergibt die Zerlegung von A eine Klasse von Splitting-assoziierten Vorkonditioneren, einige davon werden in Tabelle 4.1 dargestellt. Dabei stellt D eine Diagonalmatrix dar, desweiteren sind L und R strikte linkere untere bzw. rechte obere Deiecksmatrix bzgl. A. Bei der Implementierung nutzt man aus, dass bei den vorgestellten Vorkonditionierern die zu invertierende Matrix stets eine Diagonal- oder Dreiecksgestalt hat und bei der Matrix-Vektor Multiplikation die entsprechende Eliminationstechnik genutzt werden kann.

Splitting-Methode	Assoziierter Vorkonditionierer
Jacobi-Verfahren	$P_{Jac} = D^{-1}$
Gauß-Seidel-Verfahren	$P_{GS} = (D+L)^{-1}$
symm. Gauß-Seidel-Verfahren	$P_{SGS} = (D+R)^{-1}D(D+L)^{-1}$

Tabelle 4.1: Splitting-assoziierte Vorkonditionierer

4.1.2.2 Unvollständige Cholesky-Zerlegung

Die vollständige Cholesky-Zerlegung einer symmetrischen positiven definiten Matrix A in der Form $A = LL^T$ ist als Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme bekannt. Die unvollständige Zerlegung kann zur Vorkonditionierung verwendet werden.

Definition 4.3: Es sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch und positiv definit. Die Zerlegung

$$A = LL^T + F (4.4)$$

existiert unter den Bedinungungen

- (1) $l_{ij} = 0$, falls $(i, j) \notin \mathcal{M}^{\mathcal{A}}$
- (2) $(LL^T)_{ij} = a_{ij}$, falls $(i,j) \in \mathcal{M}^A$

dabei sei $L = (l_{ij})_{i,j=1,\dots,n}$ eine reguläre untere Dreiecksmatrix und $\mathcal{M}^{\mathcal{A}} := \{(i,j)|a_{ij} \neq 0\}$ die Besetzungsstruktur von A, dann heißt (4.4) **unvollständige Cholesky-Zerlegung** der Matrix A.

Die Matrix $F \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist eine sogenannte Rest- oder Fehlermatrix. Vernachlässigt man die Matrix F erhält man eine Matrix $\tilde{A} = LL^T$, deren Inverse ist eine Approximation an A^{-1} und kann damit als Vorkonditionierer von Ax = b verwendet werden.

Der wesentliche Vorteil einer solchen Zerlegung liegt im Rechen- und Speicheraufwand und in der Eigenschaft, dass im Fall einer posity definiten, symmetrischen Matrix A gilt:

$$\left(LAL^{T}\right)^{T} = LAL^{T}$$

und

$$(LAL^T\mathbf{x}, \mathbf{x})_2 = (AL^T\mathbf{x}, L^T\mathbf{x})_2 > 0, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}.$$

Das bedeutet also, dass die Symmetrie und positive Definitheit auf das Produkt LAL^T übertragen wird. Daher können die Verfahren für symmetrische positive definite Matrizen auch auf das vorkonditionierte System angewendet werden, insbesondere das CG-Verfahren.

4.2 Least-Squares-Ansatz

In diesem Abschnitt werden die wichtigsten Eigenschaften der Least-Squares-Methode erläutert. Für einen umfangreicheren Überblick sei z.B. auf [BG09] verwiesen.

Es sei ein Gleichungssystem

$$r_1(x) = 0$$

$$r_2(x) = 0$$

$$\vdots$$

$$r_n(x) = 0$$

kurz

$$R(x) = 0$$

gegeben, die Least-Squares Methode besteht dann darin

$$F(x) = \sum_{i=1}^{n} r_i(x)^2$$

zu minimieren

$$\min_{x \in X} F(x)$$
.

Ist der Ansatzraum X genügend groß gewählt, so dass eine Lösung $x^* \in X$ des Gleichungssystems existiert, dann ist $F(x^*) = 0$. Desweiteren kann man die Residuen r_i unterschiedlich gewichten

$$F(x) = \sum_{i_1}^n w_i r_i(x)^2$$

ohne dass sich die Lösung x^* ändert. Ist der Ansatzraum zu klein gewählt, erhält man ein möglichst kleines Residuum $R(x^*) \neq 0$, welches von den Gewichten w_i abhängt.

Die Least-Squares-Formulierung für partielle Differentialgleichungen beruht auf der Minimierung bzgl. einer Norm des zugehörigen Residuums des Systems.

Beispiel: Im Beispiel der Poisson-Gleichung

$$\Delta u = f \tag{4.5}$$

ist das Residuum $R = \Delta u - f$. Man sieht, u ist Lösung der Poisson-Gleichung genau dann, wenn

$$\left\|\Delta u - f\right\|^2 = 0\tag{4.6}$$

dabei ist ||.|| eine vom Problem abhängige Norm.

Man versucht nun eine Näherungslösung u_h der Poisson-Gleichung zu finden, indem man Gleichung (4.6) nicht exakt, sondern nur näherungsweise löst. Dies bedeutet, dass man versucht die linke Seite zu minimieren.

In obigen Beispiel bedeutet dies:

$$\min_{u} \left\| \Delta u - f \right\|^2$$

4.3 Numerische Optimierung

In den folgenden Abschnitten werden numerische Optimierungsmethoden vorgestellt, mit denen das Minimum einer Zielfunktion $\phi(x)$ numerisch bestimmt werden kann. Es sei das lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{4.7}$$

gegeben, wobei \mathbf{A} eine symmetrische postiv definite $n \times n$ Matrix ist. Das Problem (4.7) ist äquivalent zu folgendem Minimierungsproblem

$$\min \phi(\mathbf{x}) := \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x}$$
 (4.8)

es haben (4.7) und (4.8) die gleiche eindeutige Lösung. Diese Äquivalenz zeigt, dass die folgenden Methoden sowohl als Löser für lineare Gleichungssysteme als auch für die Minimierung von konvexen quadratischen Funktionen verwendet werden können. Desweiteren ist wichtig festzuhalten, dass der Gradient von ϕ äquivalent ist zum Residuum des linearen Systems:

$$\nabla \phi(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} - \mathbf{b} = r(\mathbf{x}).$$

4.3.1 Das Verfahren der konjugierten Gradienten

Das lineare konjugierte Gradientenverfahren wurde von Hestens und Stiefel in den 1950er Jahren entwickelt und ist eine Methode zum Lösen linearer Gleichungssysteme mit positiv definiter Koeffizientenmatrix.

Das erste nichtlineare konjugierte Gradientenverfahren wurde von Fletcher und Reeves in den 1960er Jahren vorgestellt.

Definition 4.4: Eine Menge von Vektoren $[\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_l]$, die ungleich dem Nullvektor sind, wird als konjugiert bzgl. einer symmetrisch positiv definiten Matrix A bezeichnet, wenn gilt:

$$\mathbf{p}_i^T A \mathbf{p}_i = 0 \quad \text{für alle } i \neq j. \tag{4.9}$$

Beim konjugierten Gradientenverfahren werden als Suchrichtungen Vektoren \mathbf{p} gewählt, die gerade der Gleichung (4.9) genügen.

Das konjugierte Gradientenverfahren(CG-Verfahren) basiert auf der sukzessiven Minimierung einer Zielfunktion f gegenüber der vorherigen Näherung. Dabei besteht die Idee des Verfahrens darin, in Richtung des steilsten Abstiegs zu suchen, d.h. die Suchrichtung \mathbf{p} ist $-\nabla f(\mathbf{x})$. Jedoch kann es passieren, dass der Winkel zwischen aufeinanderfolgenden Suchrichtungen recht klein ist. In diesem Fall konvergiert das Gradientenverfahren sehr langsam. Daher wählt man als neue Suchrichtung eine Linearkombination der aktuellen Gradientenrichtung und der vorherigen Suchrichtung. Die neue Suchrichtung \mathbf{p}_k ergibt sich somit nur aus der vorigen Suchrichtung \mathbf{p}_{k-1} , es ist also nicht nötig alle voherigen Suchrichtungen zu speichern. Die sich ergebende Richtung ist automatisch kojugiert zu den anderen. Ein solch nichtlineares Verfahren der konjugierten Gradienten ist z.B. das Verfahren von Fletcher/Reeves:

Startnäherung
$$\mathbf{x}^{(0)}$$
gegeben; $k=0$;
 $\mathbf{p}^{(0)} = -\nabla f(\mathbf{x}^{(0)});$
while $\nabla f(\mathbf{x}^{(k)}) \neq 0$,
Bestimme α_k aus $\min_{\alpha \in \mathbb{R}} f(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha \mathbf{p}^{(k)});$
 $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)}; \quad \beta_{k+1}^{FR} = \frac{\nabla f(\mathbf{x}^{(k+1)})^T \nabla f(\mathbf{x}^{(k+1)})}{\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^T \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})};$
 $\mathbf{p}^{(k+1)} = -\nabla f(\mathbf{x}^{(k+1)}) + \beta_{k+1}^{FR} \mathbf{p}^{(k)};$
 $k = k+1;$
end

Betrachtet man den Spezialfall einer gleichmäßig konvexen quadratischen Funktion, d.h.

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T A \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \mathbf{b} + c \text{ mit } c \in \mathbb{R}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n, A \in \mathbb{R}^{n \times n},$$

A sei symmetrisch und positiv definit. Es ergibt sich $\nabla f(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} - \mathbf{b}$.

Das quadratische Minimierungsproblem für α_k in obigen Algorithmus kann für diesen Spezialfall explizit gelöst werden. Man erhält:

$$\alpha_k = \frac{(\mathbf{p}^{(k)})^T (\mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(k)})}{(\mathbf{p}^{(k)})^T A\mathbf{p}^{(k)})}$$

Wählt man die Abkürzung $\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(k)}$ ergibt sich das Verfahren von Fletcher/Reeves wie im Folgenden. Das Verfahren wird dann nach Hestenes/Stiefel benannt.

Startnäherung
$$\mathbf{x}^{(0)}$$
 gegeben; $k = 0$;
 $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(0)}; \quad \mathbf{p}^{(0)} = \mathbf{r}^{(0)};$
while $\mathbf{r}^{(k)} \neq 0$,
 $\alpha_k = \frac{(\mathbf{r}^{(k)})^T \mathbf{r}^{(k)}}{(\mathbf{p}^{(k)})^T A \mathbf{p}^{(k)}};$
 $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)}; \quad \mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} - \alpha_k A \mathbf{p}^{(k)};$
 $\beta_{k+1} = \frac{(\mathbf{r}^{(k+1)})^T \mathbf{r}^{(k+1)}}{(\mathbf{r}^{(k)})^T \mathbf{r}^{(k)}}; \quad \mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k+1)} + \beta_{k+1} \mathbf{p}^{(k)};$
 $k = k + 1;$

Für die im Verfahren auftretenden Residuen $\mathbf{r}^{(k)}$ gilt die Orthogonalitätseigenschaft:

$$(\mathbf{r}^{(k)})^T \mathbf{r}^{(i)} = 0$$
 für $i = 0, 1, \dots, k - 1$ (4.10)

4.3.1.1 Vorkonditioniertes CG-Verfahren

Das Verfahren der konjugierten Gradienten kann durch eine Transformation des linearen Systems beschleunigt werden. Man spricht in diesem Fall von Vorkonditionierung. Man geht von einer veränderten Variable $\hat{\mathbf{x}}$ in Bezug zu \mathbf{x} aus, diese erhält man durch eine nichtsinguläre Matrix C

$$\hat{\mathbf{x}} = C\mathbf{x}.$$

Entsprechend erhält man für das quadratische Funktional ϕ , welches in (4.8) definiert ist

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) := \frac{1}{2}\hat{\mathbf{x}}^T (C^{-T}AC^{-1})\hat{\mathbf{x}} - (C^{-T}\mathbf{b})^T\hat{\mathbf{x}}.$$
(4.11)

Benutzt man nun das CG-Verfahren um $\hat{\phi}$ zu minimieren, ist es äquivalent das lineare System

$$(C^{-T}AC^{-1})\hat{\mathbf{x}} = C^{-T}\mathbf{b},\tag{4.12}$$

zu lösen.

end

In diesem Fall sind für die Konvergenz die Eigenwerte der Matrix $C^{-T}AC^{-1}$ verantwortlich. Daher ist es wichtig C so zu wählen, dass die Konditionszahl von $C^{-T}AC^{-1}$ kleiner ist als die Original Konditionszahl von A.

Dabei ist es nicht nötig die Transformation explizit zu berechnen. Man wendet den Algorithmus von Hestens/Stiefel auf das Problem (4.11) an, es ist dann in der Variablen $\hat{\mathbf{x}}$ angegeben. Anschließend invertiert man den Algorithmus so, dass alle Terme wieder

auf \mathbf{x} beruhen. Das Ergebnis ist im folgenden Algorithmus zu sehen. Oftmals wird nicht die Matrix C genutzt sondern die Matrix $M = C^T C$, welche aufgrund der Konstruktion symmetrisch und positiv definit ist.

Startnäherung $\mathbf{x}^{(0)}$ und Vorkonditionierer M gegeben; k = 0; $\mathbf{r}^{(0)} = A\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{b}$; Löse $M\mathbf{y}^{(0)} = \mathbf{r}^{(0)}$ für $\mathbf{y}^{(0)}$ $\mathbf{p}^{(0)} = -\mathbf{y}^{(0)}$; while $\mathbf{r}^{(k)} \neq 0$, $\alpha_k = \frac{(\mathbf{r}^{(k)})^T\mathbf{y}^{(k)}}{(\mathbf{p}^{(k)})^TA\mathbf{p}^{(k)}};$ $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k\mathbf{p}^{(k)}; \quad \mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} + \alpha_kA\mathbf{p}^{(k)};$ Löse $M\mathbf{y}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k+1)}$ $\beta_{k+1} = \frac{(\mathbf{r}^{(k+1)})^T\mathbf{y}^{(k+1)}}{(\mathbf{r}^{(k)})^T\mathbf{y}^{(k)}}; \quad \mathbf{p}^{(k+1)} = -\mathbf{y}^{(k+1)} + \beta_{k+1}\mathbf{p}^{(k)};$ k = k + 1; end

Setzt man in diesem Algorithmus M=I, erhält man den Standard Algorithmus von Hestens/Stiefel aus dem vorherigen Abschnitt. Für die Orthogonalitätseigenschaft (4.10) erhält man in diesem Fall:

$$(\mathbf{r}^{(i)})^T M^{-1} \mathbf{r}^{(j)} = 0 \qquad \text{für alle } i \neq j$$

4.3.2 Strategie der aktiven Mengen

Es sei eine quadratische Zielfunktion mit affinen Nebenbedingungen wie folgt gegeben:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \mathbf{x}^T G \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{d} \quad \text{unter den Nebenbedingungen}
\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = \mathbf{b}_i, \ i \in I_G$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \le \mathbf{b}_i, \ i \in I_U$$
(QMuaN)

Die quadratische Zielfunktion wird durch die symmetrische Matrix $G \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und den Vektor $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ beschrieben. Desweiteren sind die Nebenbedingungen festgelegt durch $i \in I_G \cup I_U$, $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n$ und $\mathbf{b}_i \in \mathbb{R}^n$.

Man definiert für jeden Punkt $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ die Menge der aktiven Indizes:

$$I_A(\mathbf{x}) = \{i \in I_G \cup I_U : \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = \mathbf{b}_i\} = I_G \cup \{i \in I_U : \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = \mathbf{b}_i\}$$

dann kann das Ausgangsproblem umgeschrieben werden:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \mathbf{x}^T G \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{d} \quad \text{unter den Nebenbedingungen}$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = \mathbf{b}_i, \ i \in I_A(\mathbf{x})$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} < \mathbf{b}_i, \ i \in I_U \backslash I_A(\mathbf{x})$$

Es gelten für jede Lösung $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ von (QMuaN) die folgenden KKT-Bedingungen

$$G\mathbf{x}^* + \mathbf{d} + \sum_{i \in I_A(\mathbf{x}^*)} \lambda^* \mathbf{a}_i = 0$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* = \mathbf{b}_i, \text{ für } i \in I_A(\mathbf{x}^*)$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* \leq \mathbf{b}_i, \text{ für } i \in I_U \setminus I_A(\mathbf{x}^*)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \text{ für } i \in I_U \setminus I_A(\mathbf{x}^*)$$

Die Grundidee des Verfahrens ist es nun, dass bei Kenntnis der aktiven Indizes $I_A(\mathbf{x}^*)$ am Lösungspunkt die Lösung des quadratischen Minimierungsproblems unter affinen Nebenbedingungen (QMuaN) auch Lösung des Minimierungsproblem unter affinen Gleichungsnebenbedingungen

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \mathbf{x}^T G \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{d} \text{ unter den Nebenbedingungen}$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = \mathbf{b}_i, \ i \in I_A(\mathbf{x}^*)$$
(QMuaGN)

ist. Ein Problem der Art (QMuaGN) ist relativ einfach z.B. mit dem CG-Verfahren zu lösen.

Ausgehend von einem Startpunkt $\mathbf{x}^{(0)}$, der zulässiger Punkt für das quadratische Minimierungsproblem unter affinen Nebenbedingungen ist, wird eine aktive Menge $I^{(0)}(\mathbf{x}^{(0)})$ bestimmt. Für die Indexmenge $I^{(0)}$ gilt $I_G \subseteq I^{(0)} \subseteq I_A(\mathbf{x}^{(0)})$. Die Menge der aktiven Indizes wird über ein iteratives Verfahren entsprechend vergrößert oder verkleinert.

Ausgehend von einem zulässigen Punkt $\mathbf{x}^{(k)}$ und einer zugehörigen Indexmenge $I^{(k)}$, mit $I_G \subseteq I^{(k)} \subseteq I_A(\mathbf{x}^{(k)})$, besteht das Iterationsverfahren aus folgenden zwei Schritten:

(i) Lösen des Minimierungsproblem mit Gleichungsnebenbedingungen bzgl. der aktuellen Indexmenge:

$$\min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} (\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{p})^T G(\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{p}) + (\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{p})^T \mathbf{d} \text{ unter den Nebenbedingungen}$$
$$\mathbf{a}_i^T (\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{p}) = \mathbf{b}_i, \ i \in I(k)$$

(ii) Aus dem aus (i) erhaltenen Punkt $\mathbf{x}^{(k)} + p$ wird ein Punkt $\mathbf{x}^{(k+1)}$ konstruiert, der in der zulässigen Menge bzgl. aller Nebenbediungungen $I_G \cup I_U$ enthalten ist.

Die Lösung des Minimierungsproblems in (i) ist äquivalent zu

$$\min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \mathbf{p}^T G \mathbf{p} + \mathbf{p}^T (\mathbf{d} + G \mathbf{x}^{(k)}) + \frac{1}{2} (\mathbf{x}^{(k)})^T G \mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d} \text{ unter den Neben.}$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{p} = \mathbf{b}_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^{(k)}, \ i \in I^{(k)}$$

Unter Beachtung der Tatsache, dass konstante Terme in der zu minimierenden Funktion keine Rolle spielen, sowie dass $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{b}_i$, und setzt man desweiteren $\mathbf{d}^{(k)} = \mathbf{d} + G\mathbf{x}^{(k)}$, lässt sich das Problem umschreiben in:

$$\min_{\mathbf{p} \in \mathbf{R}^n} \frac{1}{2} \mathbf{p}^T G \mathbf{p} + \mathbf{p}^T \mathbf{d}^{(k)} \quad \text{unter den Neben.}$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{p} = 0, \ i \in I^{(k)}$$
(QMuaGN(k))

Dieses quadratische Minimierungsproblem unter Gleichungsnebenbedingungen ist mit den üblichen Verfahren wie z.B. CG-Verfahren zu lösen.

Bei der genauen Umsetzung von (ii) kann wie folgt vorgegangen werden: Erfüllt $\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{p}^{(k)}$ auch die Nebenbedingungen:

$$\mathbf{a}_i^T(\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{p}^{(k)}) \leq \mathbf{b}_i \text{ für } i \in I_U \setminus I^{(k)}$$

dann wird $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{p}^{(k)}$ gesetzt.

Sind nicht alle Nebenbedingungen erfüllt, bestimmt man $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)}$ mit $\alpha_k \in [0, 1)$ größtmöglich, so dass alle Nebenbediungungen:

$$\mathbf{a}_i^T(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)}) \le \mathbf{b}_i \text{ für } i \in I_U \setminus I^{(k)}$$

erfüllt sind. Dabei wird α_k durch Fallunterscheidung bestimmt:

(i) Für alle $i \in I_U \setminus I^{(k)}$ mit $\mathbf{a}_i^T \mathbf{p}^{(k)} \leq 0$ gilt:

$$\mathbf{a}_i^T(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)}) \le \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^{(k)} \le \mathbf{b}_i$$

für alle $\alpha_k \geq 0$. Daher werden durch diese Nebenbedingungen keine Einschränkungen an α_k verursacht.

(ii) Für alle $i \in I_U \setminus I^{(k)}$ mit $\mathbf{a}_i^T \mathbf{p}^{(k)} > 0$ ergibt sich folgenden Einschränkung:

$$\alpha_k \le \frac{\mathbf{b}_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^{(k)}}{\mathbf{a}_i^T \mathbf{p}^{(k)}}.$$

Insgesamt ergibt sich:

$$\alpha_k = \min \left\{ 1, \min_{i \notin I^{(k)}, \mathbf{a}_i^T \mathbf{p}^{(k)} > 0} \frac{\mathbf{b}_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^{(k)}}{\mathbf{a}_i^T \mathbf{p}^{(k)}} \right\}$$

Die Nebenbedingungen, für die in obiger Formel das Minimum angenommen wird, werden als blockierende Nebenbedingungen bezeichnet. Ist $\alpha_k < 1$ so wird zu $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)}$ eine neue Indexmenge $I^{(k+1)}$ festgelgt, indem man eine oder mehrere blockierende Nebenbedingungen hinzufügt.

Die Iteration wird solange durchgeführt bis ein Punkt $\hat{\mathbf{x}}$ gefunden ist, der das quadratische Minimierungsproblem mit Gleichungsnebenbedingungen mit der aktuellen Indexmenge \hat{I} löst. Dieses ist genau dann der Fall, wenn das zugehörige quadratische Minimierungsproblem (QMuaGN(k)) die Lösung $\hat{\mathbf{p}} = 0$ besitzt.

Hat man eine Lösung $\hat{\mathbf{x}}$ gefunden, dann gilt die erste KKT-Bedingung für (QMuaGN(k))

$$G\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{d} + \sum_{i \in \hat{I}} \hat{\lambda}_i \mathbf{a}_i = 0$$

mit den Lagrange-Multiplikatoren $\hat{\lambda}_i, i \in \hat{I}$. Für die Indizes, die nicht in \hat{I} enthalten sind, setzt man $\hat{\lambda}_i = 0$ für $i \in I_U \backslash \hat{I}$, damit ist auch die erste KKT-Bedingung für das Minimierungsproblem (QMuaN) erfüllt:

$$G\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{d} + \sum_{i \in I_G \cup I_U} \hat{\lambda}_i \mathbf{a}_i = 0.$$

Die zweite und dritte KKT-Bedingung für das Problem (QMuaN) lauten

$$\mathbf{a}_{i}^{T}\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{b}_{i}, \text{ für } i \in I_{G}$$

 $\mathbf{a}_{i}^{T}\hat{\mathbf{x}} \leq \mathbf{b}_{i}, \text{ für } i \in I_{U}$

und sind aufgrund der Konstruktion von $\hat{\mathbf{x}}$ erfüllt. Für die Lagrange-Multiplikatoren gilt nach obiger Annahme $\hat{\lambda}_i = 0$ für $i \in I_U \setminus \hat{I} \supseteq I_U \setminus I_A(\hat{\mathbf{x}})$, daher ist die fünfte KKT-Bedingung ebenfalls erfüllt

$$\hat{\lambda}_i(\mathbf{b}_i - \mathbf{a}_i^T \hat{\mathbf{x}}) = 0 \text{ für } I_G \cup I_U.$$

Damit die vierte KKT-Bedingung erfüllt werden kann, muss das Vorzeichen der Lagrange-Multiplikatoren $\hat{\lambda}_i$ für $i \in \hat{I} \cap I_U$ bestimmt werden. Sind diese alle sämtlich nichtnegativ, dann ist auch die vierte Bedingung erfüllt. Es sind damit alle KKT-Bedingungen für (QMuaN) erfüllt, ist die Matrix G positiv definit, ist $\hat{\mathbf{x}}$ eine lokale Lösung des Minimierungsproblems.

Ist dagegen einer der Lagrange-Multiplkatoren $\hat{\lambda}_j$ für $j \in \hat{I} \cap I_U$ negativ, ist die vierte KKT-Bedingung nicht erfüllt und $\hat{\mathbf{x}}$ kann keine Lösung von (QMuaN) sein. Der Wert des quadratischen Funktionals lässt sich verkleinern, indem man die zu j gehörige Nebenbedingung aus der Indexmenge \hat{I} streicht. Auf diese Weise lassen sich alle Nebenbedingungen mit negativen Lagrange-Multiplikatoren entfernen und man erhält einen Punkt $\hat{\mathbf{x}}$, der alle KKT-Bedingungen erfüllt.

4.3.3 Nullraum-Methode

Die Nullraum-Methode ist ein Verfahren, mit dessen Hilfe ein quadratisches Minimierungsproblem unter Gleichungsnebenbedingungen

$$\min_{\mathbf{x}} \frac{1}{2} \mathbf{x}^T G \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{c} \quad \text{unter den Nebenbedingungen}$$
$$A \mathbf{x} = \mathbf{b},$$

gelöst werden kann. Der große Vorteil der Methode ist, dass die Matrix G nicht nichtsingulär sein muss.

Ist \mathbf{x}^* eine Lösung von obigem System, dann existiert ein Vektor $\boldsymbol{\lambda}^*$ derart, dass gilt:

$$\begin{pmatrix} G & -A^T \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}^* \\ \boldsymbol{\lambda}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{c} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix} .$$

Dies sind gerade die KKT-Bedingungen des quadratischen Minimierungsproblems, der Vektor λ^* enthält die Lagrange-Multiplikatoren. Wenn man davon ausgeht, dass sich \mathbf{x}^* aus einer Iteration $\mathbf{x}^* = \mathbf{x} + \mathbf{p}$ ergibt, kann man das System folgendermaßen umschreiben:

$$\begin{pmatrix} G & -A^{T} \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mathbf{p} \\ \boldsymbol{\lambda}^{*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{g} \\ \mathbf{h} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{h} = A\mathbf{x} - \mathbf{b}, \quad \mathbf{g} = \mathbf{c} + G\mathbf{x}, \quad \mathbf{p} = \mathbf{x}^{*} - \mathbf{x}$$

$$(4.13)$$

Es sei Z eine $n \times (n-m)$ Matrix, deren Spalten eine Basis des Nullraums von A bilden. Dies bedeutet Z hat vollen Rang und es gilt AZ = 0.

Dann kann man den Vektor **p** in zwei Komponenten zerlegen:

$$\mathbf{p} = Y\mathbf{p}_{\mathbf{y}} + Z\mathbf{p}_{\mathbf{z}}$$

dabei ist Z die Nullraum-Matrix von A und Y ist eine beliebige $n \times m$ Matrix, für die [Y|Z] nichtsingulär ist. Desweiteren ist \mathbf{p}_{Y} ein m-Vektor und \mathbf{p}_{Z} ein (n-m)-Vektor. Ersetzt man \mathbf{p} entsprechend in der zweiten Gleichung des KKT-Systems (4.13) und berücksichtigt, dass AZ = 0 ist, erhät man:

$$(AY)\mathbf{p}_{Y} = -\mathbf{h}$$
.

Hat A den Rang m und [Y|Z] ist laut Konstruktion nichtsingulär, Daher hat das Produkt A[Y|Z] = [AY|0] den Rang m. Dann ist AY eine $m \times m$ Matrix und nichtsingulär, daher ist \mathbf{p}_Y durch die Gleichung eindeutig bestimmt.

Ersetzt man p auch entsprechend in der ersten Gleichung von (4.13), ergibt sich:

$$-GY\mathbf{p}_{Y} - GZ\mathbf{p}_{Z} + A^{T}\boldsymbol{\lambda}^{*} = \mathbf{g}$$

durch Multiplikation mit Z^T erhält man:

$$(Z^T G Z) \mathbf{p}_z + A^T \boldsymbol{\lambda}^* = -Z^T G Y \mathbf{p}_Y - Z^T \mathbf{g}$$

Dieses System kann dann z.B. mit der Cholesky-Zerlegung für die reduzierte Matrix Z^TGZ gelöst werden um \mathbf{p}_z zu bestimmen. Damit kann insgesamt $\mathbf{p} = Y\mathbf{p}_Y + Z\mathbf{p}_Z$ bestimmt werden.

Um dann noch die Lagrange-Multiplikatoren λ^* zu berechnen, multipliziert man die erste Zeile von (4.13) mit Y^T und erhält

$$(AY)^T \lambda^* = Y^T (\mathbf{g} + G\mathbf{p})$$

dieses System kann dann für λ^* gelöst werden.

4.4 Methode der finiten Elemente

Bei der Methode der finiten Elemente wird ein gegebenes kontinuierliches Problem in ein diskretes überführt. Im Unterschied zu klassischen Verfahren werden bei der Finiten-Elemente-Methode stückweise definierte Funktionen zugrunde gelegt.

Ein Finite-Elemente-Raum besitzt die folgenden drei typischen Merkmale:

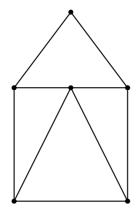
- Zerlegung des Gebietes in geometrisch einfache Teilgebiete, z.B. Dreiecke
- Definition von Ansatzfunktionen über den Teilgebieten, stückweise auf jedem Element der Zerlegung, z.B. durch ein Polynom von vorgegebenem Grad
- Einhaltung von Übergangsbedingungen bei den Ansatzfunktionen zur Sicherung globaler Eigenschaften.

Diese drei Teilaspekte stehen in einem gewissen Zusammenhang. Insbesondere lassen sich durch gewisse Voraussetzungen an die Zerlegung des Grundgebietes und die geschickte Wahl der Ansatzfunktionen vereinfachte Bedingungen zur Erfüllung der globalen Eigenschaften, wie z.B. Stetigkeit oder Differenzierbarkeit angeben.

Definition 4.5: Eine **Zerlegung** $\mathcal{T} = \{T_1, T_2, ..., T_M\}$ heißt **zulässig**, wenn folgendene Eigenschaften erfüllt sind:

- (i) $\overline{\Omega} = \bigcup_{\nu=1}^{M} T_{\nu}$
- (ii) Ist $T_{\nu} \cap T_{\mu}$ genau ein Punkt, so ist dieser Eckpunkt sowohl von T_{ν} als auch von T_{μ} .
- (iii) Besteht $T_{\nu} \cap T_{\mu}$ für $\nu \neq \mu$ aus mehr als einem Punkt, so ist $T_{\nu} \cap T_{\mu}$ sowohl eine Kante von T_{ν} als auch von T_{μ} .

In Abbildung 4.1 ist auf der linken Seite eine unzulässige Zerlegung zu sehen, es ist ein sogenannter hängender Knoten vorhanden. Man erhält eine zulässige Zerlegung, indem man eine zusätzliche Kante einfügt, wie auf der rechten Seite zu sehen.



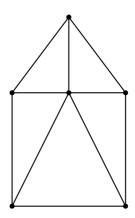


Abbildung 4.1: Begriff der zulässigen Zerlegung

In Anlehnung an [GR05], Kapitel 4 wird zunächst ein einführendes Beispiel betrachtet. Es bezeichne $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ein Teilgebiet mit

$$\Omega = \{(x, y) : x > 0, y > 0, x + y < 1\}.$$

Auf Ω sei eine stetige Funktion f gegeben, gesucht wird eine Funktion $u \in H_0^1(\Omega)$ mit

$$\int_{\Omega} \nabla u \nabla v \, d\Omega = \int_{\Omega} f v \, d\Omega \qquad \text{für alle } v \in H_0^1(\Omega). \tag{4.14}$$

Für eine vereinfachte Darstellung fasst man die linke Seite zu einer Bilinearform $a(u,v) = \int_{\Omega} \nabla u \nabla v \, d\Omega$ zusammen. Dies ist gerade die schwache Formulierung der Poisson-Gleichung

$$-\Delta u = f \quad \text{in } \Omega$$

$$u = 0 \quad \text{auf } \Gamma = \delta \Omega.$$
(4.15)

Zur näherungsweisen Lösung der Formulierung (4.14) mit der Methode der finiten Elemente wird das Grundgebiet Ω in Rechtecke und Dreiecke zerlegt. Die Teilgebiete werden mit $\Omega_j, j=1,\ldots,m$ bezeichnet. Die gewählte Zerlegung des Gebietes Ω in Quadrate $\Omega_i, i=1,\ldots,10$ und Dreiecke $\Omega_i, i=11,\ldots,15$ ist in Abbildung 4.2 zu sehen. Als Ansatzfunktionen u_h wähle man Funktionen mit folgenden Eigenschaften

- (i) $u_h \in C(\Omega)$
- (ii) $u_h|_{\Omega_i}$ ist bilinear auf $\Omega_i, i = 1, \dots, 10$
- (iii) $u_h|_{\Omega_i}$ ist linear auf Ω_i , $i = 11, \ldots, 15$

Es wird ein auf den Gitterpunkten stetiger bilinearer bzw. linearer Ansatz gewählt. Die Gitterpunkte werden mit $p_j, j = 1, ..., N$ bezeichnet. Als Ansatz wählt man die nodale Basis $\{\phi_1, \phi_2, ..., \phi_N\}$, d.h. $\phi_{\nu}(p_{\nu}) = 1$ und $\phi_{\nu}(p_{\mu}) = 0$ für $\mu \neq \nu$. Dann gilt für die Lösung u_h :

$$u_h(x,y) = \sum_{\mu=1}^{N} u_{\mu} \phi_{\mu}(x,y),$$

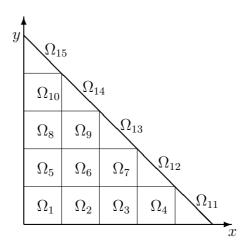


Abbildung 4.2: Zerlegung des Gebietes Ω

mit der Linearität der Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ folgt:

$$a(u_h, \phi_{\nu}) = \sum_{\mu=1}^{N} s_{\mu} a(\phi_{\mu}, \phi_{\nu}).$$

Damit ergibt sich für die Variationsformulierung (4.14) das Gleichungssystem:

$$\sum_{\mu=1}^{N} s_{\mu} a(\phi_{\mu} \phi_{\nu}) = \int_{\Omega} f \phi_{\nu} \, d\Omega$$

Mit

$$A = \left[a(\phi_{\mu}, \phi_{\nu}) \right]_{1 \le \nu, \mu \le N}, \quad s = \left[s_{\mu} \right]_{1 \le \mu \le N}, \quad \mathbf{f} = \left[\int_{\Omega} f \phi_{\nu} \, d\Omega \right]_{1 \le \nu \le N}$$

erhält man folgende Gleichung $As = \mathbf{f}$. In Anlehnung an die Elastizitätstheorie wird A mit Steifigkeitsmatrix bezeichnet.

Bei der Beschreibung des einleitenden Beipiels sind die typischen Merkmale der Methode der finiten Elemente klargeworden. Im Gegensatz zu klassischen Methoden wird bei den finiten Elementen eine stückweise Definition der Ansatzfunktionen gewählt. Wichtig ist die Zulässigkeit der Ansatzfunktionen zum Ausgangsraum V zu sichern, d.h. $V_h \subset V$, wobei V_h den durch die Ansatzfunktionen aufgespannten Raum bezeichnet. Als typische Räume treten bei elliptischen Aufgaben die Sobolev-Räume $H^1(\Omega)$ und $H^2(\Omega)$ auf bzw. entsprechende Teilräume je nach gestellten Randbedingungen.

Im Folgenden soll kurz die Vorgehensweise zur Aufstellung des linearen Gleichungssystems dargestellt werden. Dabei erfolgt eine Konzentration auf den zweidimensionalen Fall, d.h.

 $\Omega\subset\mathbb{R}^2.$ Zur Speicherung einer Triangulierung $\mathcal T$ benötigt man eine Liste der Knoten

$$\{x_1, x_2, ..., x_N\}$$

gegeben druch die Koordinaten im \mathbb{R}^2 und eine Liste der Elemente

$$\{T_1, T_2, ..., T_M\}$$
,

gegeben durch die Indizes der zugehörigen Knoten.

Man stellt das entstehende Gleichungssystem bzgl. der nodalen Basis $\{\phi_1, \phi_2, ..., \phi_N\}$ dar, d.h. $\phi_{\nu}(x_{\nu}) = 1$ und $\phi_{\nu}(x_{\mu}) = 0$ für $\mu \neq \nu$. Die Näherung

$$u_h = \sum_{\mu=1}^{N} u_h(x_\mu) \phi_\mu$$

erfüllt die Variationsformulierung

$$a(u_h, \phi_\nu) = \sum_{\mu=1}^N u_h(x_\mu) a(\phi_\mu, \phi_\nu) = f(\phi_\nu), \quad \nu = 1, 2, ..., N.$$

Damit ergibt sich mit:

$$A = [a(\phi_{\mu}, \phi_{\nu})]_{1 < \nu, \mu < N}, \quad \mathbf{u} = [u_{h}(x_{\mu})]_{1 < \mu < N}, \quad \mathbf{f} = [f(\phi_{\nu})]_{1 < \nu < N}$$

ein lineares Gleichungssystem $A\mathbf{u} = \mathbf{f}$.

Das Aufstellen der Steifigkeitsmatrix und der rechten Seite geschieht elementweise, d.h.

$$a(\phi_{\mu}, \phi_{\nu}) = \sum_{T \in \mathcal{T}} a_T(\phi_{\mu}, \phi_{\nu}).$$

Enthält jedes Element s Knoten, so stellt man für jedes Element T der Triangulierung T die Element-Steifigkeitsmatrix auf:

$$A_T = \begin{pmatrix} a_T(\phi_1, \phi_1) & \cdots & a_T(\phi_s, \phi_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_T(\phi_1, \phi_s) & \cdots & a_T(\phi_s, \phi_s) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{s \times s}.$$

In den beiden folgenden Abschnitten werden die in dieser Arbeit verwendeten Finite-Elemente beschrieben. Das gegebene Gebiet wird in Dreieckselemente zerlegt, für die Verschiebungskomponente ${\bf u}$ werden sogenannte Standardelemente gewählt. Die Spannungen ${\boldsymbol \sigma}$ werden durch Raviart-Thomas-Elemente approximiert.

4.4.1 Standard-Elemente

Zur Approximatoin der Verschiebungen ${\bf u}$ werden Standard-Elemente vom Polynomgrad k gewählt. Der Ansatzraum auf einer Zerlegung sind Polynome vom Grad $\leq k$

$$\mathcal{P}_k = \left\{ v(x_1, x_2) = \sum_{i+j \le ki, j \ge 0} \alpha_{ij} x_1^i x_2^j \right\}$$

Es sei eine Basis $\{\phi_{\nu}, \nu=1,...,N\}$ für V_h gegeben, es gilt also:

$$V_h = \left\{ v : v(x) = \sum_{\nu=1}^N s_{\nu} \phi_{\nu}(x) \right\}.$$

Bemerkung: Anschaulich betrachtet besteht der Raum \mathcal{P}_1 aus linearen Funktionen auf einem Dreieck T, diese haben als Freiheitsgrade die Eckpunkte des Dreiecks. Der Ansatzraum \mathcal{P}_2 besteht aus quadratischen Funktionen über jedem Dreieck T. Die Frei-

Der Ansatzraum \mathcal{P}_2 besteht aus quadratischen Funktionen über jedem Dreieck T. Die Freiheitsgrade sind sowohl die Eckpunkte als auch die Kantenmittelpunkte auf jeder Kante. Anschaulich ist dies in Abbildung 4.3 zu sehen.

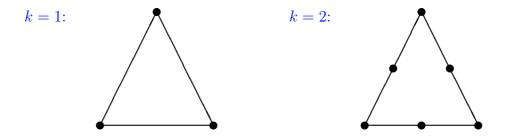


Abbildung 4.3: konforme Standardelemente

Für die Standard-Elemente gilt folgende Approximationsabschätzung

$$\|\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u} - \mathcal{I}_h \mathbf{u})\|^2 \le C_I h^{2k} |\mathbf{u}|_{k+1,\Omega}^2$$
(4.16)

mit einer Konstanten C_I und der zugehörigen Interpolierenden $\mathcal{I}_h: H^1_D(\Omega)^d \to V_h$.

4.4.2 Raviart-Thomas-Elemente

Um eine Näherungslösung für die Spannungen σ mit Hilfe von finiten Elementen zu erhalten, wird der unendlich dimensionale Raum $H(div, \Omega)$ durch einen endlich dimensionalen

Raum Σ_h approximiert. Als geeignete Teilräume bieten sich die Raviart-Thomas-Elemente RT_k an. Es sei eine zulässige Zerlegung \mathcal{T} gegeben, für $T \in \mathcal{T}$ ist der Raviart-Thomas Raum der Ordnung k definiert als:

$$RT_k(T) := (P_k(T))^2 + \mathbf{x}P_k(T)$$

dabei bezeichnet P_k die Polynome vom Grad $\leq k$.

Lemma 4.6 : Für jedes Dreieck T gilt für $v \in RT_k(T)$

- (i) $\operatorname{div} v \in P_k(T)$
- (ii) $v \cdot n|_{\partial T} \in R_k(\partial T)$

mit $R_k(\partial T) = \{q : q \in L^2(\partial T), q|_{e_i} \in P_k(e_i) \ \forall e_i\}$ dabei bezeichnet e_i die Kanten des Dreiecks.

Lemma 4.7: Für $k \geq 0$ und für jedes $v \in RT_k(T)$ gelte, falls

$$\int_{\partial T} v \cdot n \ p_k \ ds = 0 \qquad \forall p_k \in R_k(\partial T)$$

und

$$\int_T v \cdot p_{k-1} \, dx = 0 \qquad \forall p_{k-1} \in P_{k-1}(T)^2$$

dann ist v = 0.

Es wird mit $RT_{k,0}$ die Berücksichtigung von Randbedinungungen bezeichnet, es gilt also

$$RT_{k,0}(T) = \{ \mathbf{v} \in RT_k : \operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \}.$$

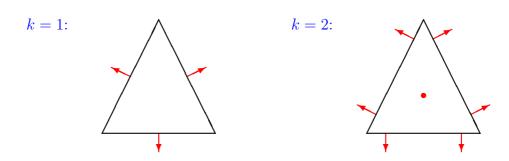


Abbildung 4.4: Raviart-Thomas-Elemente

Beschränkt man die Betrachtung auf die Raviart-Thomas-Elemente niedrigster Ordnung, RT_1 (linear) und Ordnung 2 (quadratisch), erhält man durch die beschriebenen Eigenschaften eine sehr einfache Darstellung der Raviart-Thomas-Elemente. Die Freiheitsgrade sind im linearen Fall durch den Wert $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$ auf den Kanten von T eindeutig bestimmt. Im quadratischen Fall durch den Wert $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$ an den Eckpunkten jeder Kante sowie dem Wert \mathbf{v}

im Mittelpunkt des Dreiecks, siehe Abbildung 4.4.

Für den Interpolationsoperator $\mathcal{R}_h: H_N(\operatorname{div},\Omega)^d \to \Sigma_h$ der Raviart-Thomas-Elemente erhält man die Abschätzung:

$$\|\operatorname{div}\left(\boldsymbol{\sigma} - \mathcal{R}_{h}\boldsymbol{\sigma}\right)\|^{2} + \|\boldsymbol{\sigma} - \mathcal{R}_{h}\boldsymbol{\sigma}\|^{2} \le C_{I}h^{2k}\left(|\operatorname{div}\boldsymbol{\sigma}|_{k,\Omega}^{2} + |\boldsymbol{\sigma}|_{k,\Omega}^{2}\right). \tag{4.17}$$

4.4.2.1 Vorkonditionierung nach Hiptmair

Es sei eine Zerlegung $\mathcal{T} := \{T_i\}_i$ des Gebietes Ω gegeben, desweiteren seien auf dieser Zerlegung Raviart-Thomas-Elemente RT_k der Ordnung k definiert.

Die natürliche diskrete Helmholtzzerlegung eines Vektorfeldes $v_h \in RT_{k,0}$ ist gegeben durch

$$v_h = v_h^+ + v_h^0 (4.18)$$

mit

$$v_h^0 \in RT_{k,0}^0 := \{ j_h \in RT_{k,0} : \operatorname{div} j_h = 0 \}$$

und

$$v_h^+ \in RT_{k,0}^+ := \left\{ j_h \in RT_{k,0} : (j_h, \mathbf{q}_h^0)_{L^2(\Omega)} = 0 \quad \forall \ \mathbf{q}_h^0 \in RT_{k,0}^0 \right\}$$

Dabei wird durch $RT_{k,0}^0$ der divergenzfreie Unterraum von $RT_{k,0}$ bezeichnet. Es zeigt sich, dass es sinnvoll ist die Kenntnis dieses divergenzfreien Unterraums zur Vorkonditionierung zu nutzen.

Es wird nach einem Gauß-Seidel-Schritt, bei dem bezüglich der herkömmlichen nodalen Basis relaxiert wird , eine Relaxation bezüglich einer Basis des divergenzfreien Unterraums angeschlossen. Die Basisfunktionen des divergenzfreien-Unterraums lassen sich als eine Linearkombination einiger weniger nodaler Basisfunktionen angeben. Bildet man nun durch Hinzunahme dieser Basisfunktionen des divergenzfreien Unterraums ein Erzeugendensystem, so kann man das Verfahren von Hiptmair als Gauß-Seidel-Relaxation des erweiterten Systems auffassen.

5 Least-Squares-Formulierung für das Signorini-Kontaktproblem

Das der Arbeit zugrundeliegende Problem ist das Signorini-Kontakt Problem aus Abschnitt 3.5. Es werden sowohl die Verschiebungen \mathbf{u} als auch die Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ berechnet. Man geht von den Gleichungen für das Gleichgewicht und das Materialverhalten aus der linearen Elastizitätstheorie aus:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} ,$$

$$\boldsymbol{\sigma} - \mathcal{C}\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \mathbf{0} ,$$
 (5.1)

dabei bezeichnet $\varepsilon(\mathbf{u}) = (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)/2$ den Verzerrungstensor und \mathcal{C} das lineare Materialgesetz

$$C\varepsilon(\mathbf{u}) = \frac{E}{1+\nu} \left(\varepsilon(\mathbf{u}) + \frac{\nu}{1-2\nu} (\operatorname{spur} \varepsilon(\mathbf{u})) \mathbf{I} \right)$$

mit dem Elastizitätsmodul E und der Poissonzahl ν . Der Rand des Gebietes $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ besteht aus drei Teilen $\partial \Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_C$. Auf Γ_D sind Dirichlet-Randbedingungen $\mathbf{u} = \mathbf{u}^D$ vorgegeben, auf Γ_N Neumann-Randbedingungen $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}$ und Kontaktbedingungen

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} - g \le 0$$
,
 $\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \le 0$,
 $\mathbf{t} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = 0$ (5.2)

auf Γ_C . Dabei bezeichnen **n** und **t** die normalen bzw. tangentialen Richtungen auf dem Rand $\partial\Omega$ und g steht für den Abstand eines Randpunktes von $\partial\Omega$ zum festen Hindernis, wie in (3.16) angegeben. Die erste Bedingung in (5.2) garantiert die Nicht-Durchdringung, die zweite steht für die Richtung des Oberflächendrucks, die dritte besagt, dass keine Reibung berücksichtigt wird.

Zusätzlich existiert eine Komplementaritätsbedingung, diese besagt, dass auf dem Kontaktrand Γ_C entweder $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} - g$ oder $\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})$ verschwindet. Anschaulich bedeutet dies, dass in jedem Punkt, in dem kein Kontakt herrscht, die Zugkraft in normalen Richtung null ist. Die Verschiebungsnebenbedingungen auf Γ_D und die Spannungsnebenbedingungen auf Γ_N werden direkt in die Approximationsräume integriert, daher definiert man

$$H_D^1(\Omega) = \{ q \in H^1(\Omega) : q = 0 \text{ on } \Gamma_D \}$$

$$H_N(\text{div}, \Omega) = \{ \mathbf{w} \in H(\text{div}, \Omega) : \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ on } \Gamma_N \}.$$

Insgesamt ergibt sich dann, minimiere das quadratische Least-Squares-Funktional

$$\mathcal{F}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}) = \|\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}\|^2 + \|\mathcal{C}^{-1/2} \boldsymbol{\sigma} - \mathcal{C}^{1/2} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})\|^2$$
(5.3)

unter allen $\mathbf{u} = \mathbf{u}^D + \hat{\mathbf{u}}$ mit $\hat{\mathbf{u}} \in H_D^1(\Omega)^d$ und $\boldsymbol{\sigma} \in H_N(\operatorname{div}, \Omega)^d$, welche die linearen Bedingungen (5.2) und die Komplementaritätsbedingung

$$\langle \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}), \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} - g \rangle_{\Gamma_C} = 0.$$
 (5.4)

erfüllen.

Das entstehende Problem ist, dass die Komplementaritätsbedingung nicht linear ist. Ohne diese Bedingung wäre das Minimierungsproblem ein quadratisches Funktional und einfach zu lösen. Die Komplementaritätsbedingung kann jedoch nicht einfach ignoriert werden, da das Problem dann nicht wohlgestellt wäre. Daher ergibt sich dann das gewichtete Funktional:

$$\mathcal{F}_C(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}) = \|\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}\|^2 + \|\mathcal{C}^{-1/2}\boldsymbol{\sigma} - \mathcal{C}^{1/2}\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})\|^2 + \langle \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} - g, \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \rangle_{\Gamma_C}.$$
 (5.5)

5.1 Der Finite-Element Ansatz

Für den Finite-Element Ansatz werden Standard-Elemente vom Polynomgrad k für die Verschiebungen \mathbf{u}_h und Raviart-Thomas-Elemente RT_k für die Spannungen $\boldsymbol{\sigma}_h$ gekoppelt. Die zugehörigen Finite-Element-Räume werden mit $\mathbf{V}_h \subset H_D^1(\Omega)^d$ und $\boldsymbol{\Sigma}_h \subset H_N(\mathrm{div},\Omega)^d$ bezeichnet. Die Randbedingungen für die Verschiebungs- und Spannungskomponenten werden durch entsprechende Fortsetzungen $\mathbf{u}^D \in H^1(\Omega)^d$ bzw. $\boldsymbol{\sigma}^N \in H(\mathrm{div},\Omega)^d$ festgelegt.

Zur Least-Squares-Formulierung (5.5) ist die zugehörige Bilinearform durch

$$\begin{split} \mathcal{A}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}; \mathbf{v}, \boldsymbol{\tau}) &= (\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}, \operatorname{div} \boldsymbol{\tau})_{0,\Omega} + (\mathcal{C}^{-1/2} \boldsymbol{\sigma} - \mathcal{C}^{1/2} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \mathcal{C}^{-1/2} \boldsymbol{\tau} - \mathcal{C}^{1/2} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}))_{0,\Omega} \\ &+ \frac{1}{2} \langle \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}, \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}) \rangle_{\Gamma_C} + \frac{1}{2} \langle \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}), \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \rangle_{\Gamma_C} \end{split}$$

gegeben.

Desweiteren muss bei der Finite-Element Ausgleichsformulierung beachtet werden, die Kontaktbedingungen

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{u}^{D} + \mathbf{u}_{h}) - g \le 0 ,$$

$$\mathbf{n} \cdot ((\boldsymbol{\sigma}^{N} + \boldsymbol{\sigma}_{h}) \cdot \mathbf{n}) \le 0 ,$$

$$\mathbf{t} \cdot ((\boldsymbol{\sigma}^{N} + \boldsymbol{\sigma}_{h}) \cdot \mathbf{n}) = 0$$
(NB)

auf Γ_C geeignet zu implementieren.

Die Menge der Verschiebungen \mathbf{u}_h und Spannungen $\boldsymbol{\sigma}_h$, die den Kontaktbedingungen genügen, wird als zulässige Menge

$$\mathcal{K} = \{ (\mathbf{v}_h, \boldsymbol{\sigma}_h) \in \mathbf{V}_h \times \boldsymbol{\Sigma}_h : \text{ (NB) erfüllt } \}$$

bezeichnet. Es ist \mathcal{K} eine konvexe Teilmenge des Raumes $\mathbf{V}_h \times \Sigma_h$. Die Finite-Element Auslgeichsformulierung besteht darin, $(\mathbf{u}_h, \boldsymbol{\sigma}_h) \in \mathcal{K}$ so zu bestimmen, dass

$$\mathcal{A}(\mathbf{u}^{D} + \mathbf{u}_{h}, \boldsymbol{\sigma}^{N} + \boldsymbol{\sigma}_{h}; \mathbf{u}^{D} + \mathbf{u}_{h}, \boldsymbol{\sigma}^{N} + \boldsymbol{\sigma}_{h}) - \langle g, \mathbf{n} \cdot ((\boldsymbol{\sigma}^{N} + \boldsymbol{\sigma}_{h}) \cdot \mathbf{n}) \rangle_{\Gamma_{C}}$$

$$= \min_{(\mathbf{v}_{h}, \boldsymbol{\tau}_{h}) \in \mathcal{K}} \mathcal{A}(\mathbf{u}^{D} + \mathbf{v}_{h}, \boldsymbol{\sigma}^{N} + \boldsymbol{\tau}_{h}; \mathbf{u}^{D} + \mathbf{v}_{h}, \boldsymbol{\sigma}^{N} + \boldsymbol{\tau}_{h}) - \langle g, \mathbf{n} \cdot ((\boldsymbol{\sigma}^{N} + \boldsymbol{\tau}_{h}) \cdot \mathbf{n}) \rangle_{\Gamma_{C}}$$

minimal wird. Führt man für den Raum $\mathbf{V}_h \times \mathbf{\Sigma}_h$ eine Basis ein, kann das Minimierungsproblem im \mathbb{R}^n formuliert werden. Die Basen für die Räume \mathbf{V}_h und $\mathbf{\Sigma}_h$ werden folgendermaßen bezeichnet:

$$\mathbf{V}_h = \operatorname{span}\{\boldsymbol{\phi}_1, \dots, \boldsymbol{\phi}_{n_u}\},$$

 $\boldsymbol{\Sigma}_h = \operatorname{span}\{\boldsymbol{\psi}_1, \dots, \boldsymbol{\psi}_{n_s}\}$

Mithilfe der Basisfunktionen kann die Steifigkeitsmatrix

$$G = \begin{pmatrix} G_{uu} & G_{su}^T \\ G_{su} & G_{ss} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [\mathcal{A}(\phi_j, 0; \phi_i, 0)]_{1 \le i, j \le n_u} & [\mathcal{A}(0, \psi_j; \phi_i, 0)]_{1 \le i \le n_u, 1 \le j \le n_s} \\ [\mathcal{A}(\phi_j, 0; 0, \psi_i)]_{1 \le i \le n_s, 1 \le j \le n_u} & [\mathcal{A}(0, \psi_j; \phi_i, 0)]_{1 \le i, j \le n_s} \end{pmatrix}$$

und die Vektoren

$$\mathbf{c}^{D} = \begin{pmatrix} [\mathcal{A}(\mathbf{u}^{D}, 0; \boldsymbol{\phi}_{i}, 0)]_{1 \leq i \leq n_{u}} \\ [\mathcal{A}(\mathbf{u}^{D}, 0; 0, \boldsymbol{\psi}_{i})]_{1 \leq i \leq n_{u}} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{c}^{N} = \begin{pmatrix} [\mathcal{A}(0, \boldsymbol{\sigma}^{N}; \boldsymbol{\phi}_{i}, 0)]_{1 \leq i \leq n_{u}} \\ [\mathcal{A}(0, \boldsymbol{\sigma}^{N}; 0, \boldsymbol{\psi}_{i})]_{1 \leq i \leq n_{u}} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{c}^{C} = \begin{pmatrix} [0]_{1 \leq i \leq n_{u}} \\ [\langle g, \mathbf{n} \cdot ((\boldsymbol{\sigma}^{N} + \boldsymbol{\psi}_{i}) \cdot \mathbf{n}) \rangle_{\Gamma_{G}}]_{1 \leq i \leq n_{s}} \end{pmatrix}$$

aufgestellt werden. Insgesamt führt dies auf die Minimierung von

$$\frac{1}{2}\mathbf{x}^T G \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{c} \quad \text{mit } \mathbf{c} = \mathbf{c}^D + \mathbf{c}^N + \mathbf{c}^C$$

für $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_u, \mathbf{x}_s)^T \in \mathbb{R}^n$ unter den Nebenbedingungen (NB).

Die Nebenbedingungen lassen sich ebenfalls in Matrix-Schreibweise bezüglich ${\bf x}$ formulieren:

$$A_{u}\mathbf{x} \le \mathbf{b}_{u} ,$$

$$A_{sn}\mathbf{x} \le \mathbf{b}_{sn} ,$$

$$A_{st}\mathbf{x} = \mathbf{b}_{st}$$

mit

$$A_{u} = \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\phi}_{j} \big|_{i} \end{bmatrix}_{1 \leq i \leq m_{u}, 1 \leq j \leq n_{u}} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{b}_{u} = \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} g - \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^{D} \big|_{i} \end{bmatrix}_{1 \leq i \leq m_{u}} \end{pmatrix},$$

$$A_{sn} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \begin{bmatrix} \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\psi}_{j} \cdot \mathbf{n}) \big|_{i} \end{bmatrix}_{1 \leq i \leq m_{sn}, 1 \leq j \leq n_{s}} \end{pmatrix}, \mathbf{b}_{sn} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \begin{bmatrix} -\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma}^{N} \cdot \mathbf{n}) \big|_{i} \end{bmatrix}_{1 \leq i \leq m_{sn}} \end{pmatrix},$$

$$A_{st} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \begin{bmatrix} \mathbf{t} \cdot (\boldsymbol{\psi}_{j} \cdot \mathbf{n}) \big|_{i} \end{bmatrix}_{1 \leq i \leq m_{st}, 1 \leq j \leq n_{s}} \end{pmatrix}, \mathbf{b}_{st} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \begin{bmatrix} -\mathbf{t} \cdot (\boldsymbol{\sigma}^{N} \cdot \mathbf{n}) \big|_{i} \end{bmatrix}_{1 \leq i \leq m_{st}} \end{pmatrix}.$$

5 Least-Squares-Formulierung für das Signorini-Kontaktproblem

Bei der Finiten-Element Implementierung werden die Bedingungen (5.2) ersetzt durch punktweise Bedingungen an den Knoten, welche zu den Kanten auf dem Kontaktbereich gehören. Zum Beispiel ergben sich für k=1 die Nebenbedingungen

$$(\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_{h} - g)|_{x_{i}} \leq 0 \text{ für alle } x_{i} \in \mathcal{V}_{h} \cap \Gamma_{C} ,$$

$$\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma}_{h} \cdot \mathbf{n})|_{x_{i}} \leq 0 \text{ für alle } x_{i} \in \mathcal{M}_{h} \cap \Gamma_{C} ,$$

$$\mathbf{t} \cdot (\boldsymbol{\sigma}_{h} \cdot \mathbf{n})|_{x_{i}} = 0 \text{ für alle } x_{i} \in \mathcal{M}_{h} \cap \Gamma_{C}$$

$$(5.6)$$

wobei \mathcal{V}_h und \mathcal{M}_h die Menge aller Knoten und Kantenmittelpunkt der Triangulierung \mathcal{T}_h bezeichnen. In diesem Fall ist einfach zu sehen, dass (5.6) und (5.2) äquivalent sind, solange nur lineare Funktionen auf Γ_C verwendet werden.

Es handelt sich folglich um ein quadratisches Minimierungsproblem unter affinen Nebenbedingungen. Dieses Problem kann mit verschiedenen Lösungsansätzen behandelt werden. In diesem Fall wird die Aktive-Mengen-Strategie, wie in 4.3.2 beschrieben, gewählt.

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} - g = 0 \text{ on } \Gamma_{C,d},$$

 $\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = 0 \text{ on } \Gamma_{C,s},$
 $\mathbf{t} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = 0 \text{ on } \Gamma_{C}.$

Es muss also ein Kontaktbereich Γ_C , eine aktive Menge, festgelegt werden. Es ergeben sich somit die aktiven Mengen I_u für \mathbf{u}_h und I_{sn} für $\boldsymbol{\sigma}_h$. In der k-ten Iteration der Aktiven-Mengen-Strategie ist ein quadratisches Minimierungsproblem unter affinen Gleichungsnebenbedingungen zu lösen:

Minimiere

$$\frac{1}{2}(\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{p})^T G(\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{p}) + (\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{p})^T \mathbf{c}$$

unter allen $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$, welche den Bedingungen

$$A_{u}(I_{u}^{(k)},:)\mathbf{p} = \mathbf{b}_{u}(I_{u}^{(k)}) - A_{u}(I_{u}^{(k)},:)\mathbf{x}^{(k)},$$

$$A_{sn}(I_{sn}^{(k)},:)\mathbf{p} = \mathbf{b}_{sn}(I_{sn}^{(k)}) - A_{sn}(I_{sn}^{(k)},:)\mathbf{x}^{(k)},$$

$$A_{st}\mathbf{p} = \mathbf{b}_{st} - A_{st}\mathbf{x}^{(k)}$$

genügen.

Dabei bezeichnen $I_u^{(k)}$ und $I_{sn}^{(k)}$ die Näherungen an die jeweiligen aktiven Indexmengen im kten Schritt. Da bei der Aktiven-Mengen-Strategie nur Indizes in $I_u^{(k)}$ und $I_{sn}^{(k)}$ aufgenommen
werden, für die die entsprechende Nebenbedingung von $x^{(k)}$ aktiv ist, sind die Bedingungen
homogen und die Nebenbedingungen vereinfachen sich zu

$$A_u(I_u^{(k)},:)\mathbf{p} = \mathbf{0} ,$$

$$A_{sn}(I_{sn}^{(k)},:)\mathbf{p} = \mathbf{0} ,$$

$$A_{st}\mathbf{p} = \mathbf{0} .$$

Dann ergibt sich aus den KKT-Bedingungen für dieses Minimierungsproblem folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{pmatrix} G & A_u(I_u^{(k)},:)^T & A_{sn}(I_{sn}^{(k)},:)^T & A_{st}^T \\ A_u(I_u^{(k)},:) & 0 & 0 & 0 \\ A_{sn}(I_{sn}^{(k)},:) & 0 & 0 & 0 \\ A_{st} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \boldsymbol{\lambda}_u \\ \boldsymbol{\lambda}_{sn} \\ \boldsymbol{\lambda}_{st} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{c} - G\mathbf{x}^{(k)} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}.$$

Fasst man die Nebenbedingungen zu einer Matrix A zusammen, kann man abkürzend schreiben:

$$\begin{pmatrix} G & A^T \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{c} - G\mathbf{x}^{(k)} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} .$$

5.2 Approximationsgüte

In diesem Abschnitt ist es das Ziel, ausgehend von den Abschätzungen für die einzelnen Finite-Elmente-Ansätze, eine Abschätzung der Approximation für das Problem zu finden.

Lemma 5.1: Für jede Kante E der Triangulierung \mathcal{T}_h bezeichne \mathcal{Q}_h die orthogonale Projektion in die Polynome vom Grad k-1. Dann gilt für den Interpolationsoperator \mathcal{R}_h der Raviart-Thomas-Elemente

$$\mathbf{n} \cdot (\mathcal{R}_h \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = \mathcal{Q}_h (\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}))$$

Beweis: Der Interpolationsoperators der Raviart-Thomas-Elemente, eingeschränkt auf eine Kante E, stimmt aufgrund der Konstruktion mit der lokalen $L^2(E)$ orthogonalen Projektion \mathcal{Q}_h in die Polynome vom Grad k-1 über ein. Daher gilt:

$$\mathcal{R}_h \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathcal{Q}_h (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) ,$$

hier ist die $L^2(E)$ Projektion \mathcal{Q}_h komponentenweise gemeint für $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$. Die Definition von \mathcal{Q}_h führt auf

$$\langle \mathcal{Q}_h(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}), \mathbf{w} \rangle_E = \langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}, \mathbf{w} \rangle_E$$

für alle Polynome **w** vom Grad k-1 (komponentenweise). Wählt man $\mathbf{w} = w\mathbf{n}$, wobei w ein skalares Polynom vom Grad k-1 ist, so erhält man

$$\langle \mathcal{Q}_h(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}), w \mathbf{n} \rangle_E = \langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}, w \mathbf{n} \rangle_E$$

und damit

$$\langle \mathbf{n} \cdot (\mathcal{Q}_h(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})), w \rangle_E = \langle \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}), w \rangle_E$$
.

Dies bedeutet, dass $\mathbf{n} \cdot (\mathcal{Q}_h(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}))$ übereinstimmt mit der skalaren $L^2(E)$ orthogonalen Projektion \mathcal{Q}_h von $\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})$.

5 Least-Squares-Formulierung für das Signorini-Kontaktproblem

Der zusätzliche Randterm in (5.5) kann daher folgendermaßen abgeschätzt werden:

$$\langle \mathbf{n} \cdot \mathcal{I}_{h} \mathbf{u} - g, \mathbf{n} \cdot (\mathcal{R}_{h} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \rangle \rangle_{\Gamma_{C}} = \langle \mathcal{I}_{h} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) - g, \mathcal{Q}_{h} (\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})) \rangle_{\Gamma_{C}}$$

$$= \langle \mathcal{I}_{h} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} - g), \mathcal{Q}_{h} (\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})) \rangle_{\Gamma_{C}} + \langle \mathcal{I}_{h} g - g, \mathcal{Q}_{h} (\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})) \rangle_{\Gamma_{C}}.$$
(5.7)

Lemma 5.2: Angenommen es existiert eine exakte Lösung von (5.1), unter den NB (5.2), (5.4) derart, dass es nur eine endliche Anzahl von Kanten gibt, an denen $\Gamma_{C,d}$ und $\Gamma_{C,s}$ aneinander grenzen. Dann gilt für k = 1, 2,

$$\langle \mathbf{n} \cdot \mathcal{I}_{h} \mathbf{u} - g, \mathbf{n} \cdot (\mathcal{R}_{h} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \rangle_{\Gamma_{C}}$$

$$\leq C_{I} h^{2k} \left(\|\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} - g\|_{1/2 + k, \Gamma_{C}} + \|g\|_{2k, \Gamma_{C}} \right) \|\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})\|_{-1/2 + k, \Gamma_{C}}.$$
(5.8)

Beweis: Für den ersten Term auf der rechten Seite in (5.7) gilt:

$$\langle \mathcal{I}_h(\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} - g), \mathcal{Q}_h(\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})) \rangle_{\Gamma_C} = \sum_{E \cap \Gamma_{C,d} \neq \emptyset, E \cap \Gamma_{C,s} \neq \emptyset} \langle \mathcal{I}_h(\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} - g), \mathcal{Q}_h(\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})) \rangle_E,$$

wobei, wie schon erwähnt, nur eine endliche Anzahl von Kanten in dieser Summe auftauchen. Mit der Annahme $p = \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} - g$ und $q = \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})$ können wir jeden Kantenterm einzeln betrachten $\langle \mathcal{I}_h p, \mathcal{Q}_h q \rangle_E$. Es bezeichne ξ_0 den Kantenmittelpunkt und ξ_d und ξ_s die Eckpunkte einer Kante E, insbesondere diese die in $\Gamma_{C,d}$ und $\Gamma_{C,s}$ enthalten sind. Aufgrund der Tatsache, dass der Integrant ein Polynom vom Grad 3 darstellt, bekommt man:

$$\langle \mathcal{I}_h p, \mathcal{Q}_h q \rangle_E = \int_E (\mathcal{I}_h p)(\mathcal{Q}_h q) ds$$

= $h_E \left(\frac{1}{6} (\mathcal{I}_h p)(\xi_s) (\mathcal{Q}_h q)(\xi_s) + \frac{2}{3} (\mathcal{I}_h p)(\xi_0) (\mathcal{Q}_h q)(\xi_0) \right),$

dabei wird die Tatsache, dass $(\mathcal{I}_h p)(\xi_d) = 0$ ist, ausgenutzt Im Fall k = 1 ($\mathcal{Q}_h q$ konstant),

$$(\mathcal{Q}_h q)(\xi_0) = (\mathcal{Q}_h q)(\xi_s) = \frac{1}{h_E} \int_E q(\xi) d\xi,$$

dies führt auf

$$\langle \mathcal{I}_h p, \mathcal{Q}_h q \rangle_E = \left(\frac{1}{6} (\mathcal{I}_h p)(\xi_s) + \frac{2}{3} (\mathcal{I}_h p)(\xi_0) \right) \int_E q(\xi) d\xi = \frac{1}{2} p(\xi_s) \int_E q(\xi) d\xi.$$

Für k = 2 ($Q_h q$ linear) erhält man

$$(\mathcal{Q}_h q)(\xi_0) = \frac{1}{h_E} \int_E q(\xi) d\xi \, , \, \frac{1}{6} \left((\mathcal{Q}_h q)(\xi_s) - (\mathcal{Q}_h q)(\xi_0) \right) = \frac{1}{h_E^2} \int_E q(\xi)(\xi - \xi_0) d\xi \, ,$$

und das bedeutet

$$\langle \mathcal{I}_h p, \mathcal{Q}_h q \rangle_E = \left(\frac{1}{6} p(\xi_s) + \frac{2}{3} p(\xi_0) \right) \int_E q(\xi) \, d\xi + p(\xi_s) \frac{1}{h_E} \int_E q(\xi) (\xi - \xi_0) \, d\xi \,.$$

Allgemeinen bedeutet dies:

$$\langle \mathcal{I}_h p, \mathcal{Q}_h q \rangle_E \le 2 \sup_E |p(\xi)| \int_E |q(\xi)| d\xi.$$
 (5.9)

Dadurch, dass p in der Umgebung von ξ_d verschwindet, erhält man:

$$|p(\xi)| = \left| \int_{\xi_d}^{\xi} p'(\eta) \, d\eta \right| \le \int_{\xi_d}^{\xi} |p'(\eta)| \, d\eta \le h_E^{1/2} ||p'||_{0,E}$$

für alle $\xi \in E$, if $p \in H^1(E)$. Gleichermaßen gilt, wenn $p \in H^2(E)$,

$$|p'(\xi)| \le h_E^{1/2} ||p''||_{0,E}$$

und daher

$$|p(\xi)| \le h_E \left(\int_E ||p''||_{0,E}^2 \right)^{1/2} = h_E^{3/2} ||p''||_{0,E}.$$

Allgemeiner, wenn $p \in H^{1+l}(E)$,

$$|p(\xi)| \le h_E^{1/2+l} ||p^{(1+l)}||_{0,E}$$

In gleicher Weise impliziert die Tatsache, dass q in einer Umgebung von ξ_s verschwindet:

$$\int_{E} |q(\xi)| d\xi = \int_{E} \left| \int_{\xi_{s}}^{\xi} q'(\eta) d\eta \right| d\xi \le h_{E}^{3/2} ||q'||_{0,E},$$

wenn $q \in H^1(E)$ und allgemeiner, wenn $q \in H^1(E)$,

$$\int_{E} |q(\xi)| d\xi \le h_E^{1/2+l} ||q^{(l)}||_{0,E}.$$

Die erwünschte Abschätzung

$$\sup_{E} |p(\xi)| \int_{E} |q(\xi)| d\xi \le C h_{E}^{2k} ||p||_{1/2+k,E} ||q||_{-1/2+k,E} . \tag{5.10}$$

für k=1,2 folgt aus der Interpolation zwischen den Sobolev-Räumen. Kombiniert man (5.10) mit (5.9) bekommt man letztlich

$$\langle \mathcal{I}_h(\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} - g), \mathcal{Q}_h(\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})) \rangle_{\Gamma_C} \leq C_I h_E^{2k} \|\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} - g\|_{1/2 + k, \Gamma_C} \|\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})\|_{-1/2 + k, \Gamma_C}$$

für den ersten Term in (5.7). Den zweiten Term in (5.7) kann man schreiben als:

$$\langle \mathcal{I}_h g - g, \mathcal{Q}_h q \rangle_E = \int_E K_1(\xi) (g \mathcal{Q}_h q)''(\xi) d\xi$$

5 Least-Squares-Formulierung für das Signorini-Kontaktproblem

oder

$$\langle \mathcal{I}_h g - g, \mathcal{Q}_h q \rangle_E = \int_E K_3(\xi) (g \mathcal{Q}_h q)^{(4)}(\xi) d\xi$$

für k = 1, 2. Dabei bezeichnen K_1 und K_3 den Peano Kern der Trapez und der Simpson Quadraturformel Es sind $(\mathcal{I}_h g)(\mathcal{Q}_h q)$ Polynome vom Grad 1 und 3, inbesondere im Fall k = 1 und k = 2. Für k = 1 erhält man direkt

$$\begin{split} \langle \mathcal{I}_h g - g, \mathcal{Q}_h q \rangle_E &\leq \int_E |K_1(\xi)| \, |(g\mathcal{Q}_h q)''(\xi)| \, d\xi \\ &\leq \frac{1}{8} h_E^2 \int_E |g''(\xi)| \, |\mathcal{Q}_h q(\xi)| \, d\xi \\ &\leq \frac{1}{8} h_E^2 ||g''||_{0,E} ||\mathcal{Q}_h q||_{0,E} \leq \frac{1}{8} h_E^2 ||g||_{2,E} ||q||_{0,E} \,, \end{split}$$

wobei man ausnutzt, dass $Q_h q$ konstant ist auf E. Nutzt man für k = 2 die Tatsache, dass $Q_h q$ linear ist auf E, erhält man

$$\begin{split} \langle \mathcal{I}_{h}g - g, \mathcal{Q}_{h}q \rangle_{E} &\leq \int_{E} |K_{3}(\xi)| \left| (g\mathcal{Q}_{h}q)^{(4)}(\xi) \right| d\xi \\ &\leq \frac{1}{1152} h_{E}^{4} \int_{E} \left(|g^{(4)}(\xi)| \left| \mathcal{Q}_{h}q(\xi) \right| + 4|g'''(\xi)| \left| (\mathcal{Q}_{h}q)'(\xi) \right| \right) d\xi \\ &\leq \frac{1}{288} h_{E}^{4} \left(\|g^{(4)}\|_{0,E} \|\mathcal{Q}_{h}q\|_{0,E} + \|g'''\|_{0,E} \|(\mathcal{Q}_{h}q)'\|_{0,E} \right) \\ &\leq \frac{C_{1}}{288} h_{E}^{4} \|g\|_{4,E} \|q\|_{1,E} \,. \end{split}$$

Die letzte der oben auftretenden Ungleichungen folgt aus der H^1 -Stabilität der lokalen L^2 -Projektion \mathcal{Q}_h , dies bedeutet, es existiert eine Konstante C_1 derart, dass gilt:

$$|\mathcal{Q}_h q|_{1,E} \leq C_1 |q|_{1,E}$$
 for all $q \in H^1(E)$.

Theorem 5.3: Sei $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}) \in H^1(\Omega)^d \times H(\operatorname{div}, \Omega)^d$ die exakte Lösung des Kontaktproblems, welche (5.1) unter den Nebenbedingungen (5.2) und (5.4) genügt. Desweiteren sei $(\mathbf{u}_h, \boldsymbol{\sigma}_h) \in (\mathbf{u}^D + \mathbf{U}_h) \times \boldsymbol{\Sigma}_h$ die Finite-Element Approximation, welche das Least-Squares-Funktional (5.5) minimiert unter den Nebenbedingungen (5.2). Dabei werden die in diesem Abschnitt vorgestellten Finite-Element-Räume vom Grad k genutzt. Dann gilt, wenn das Problem ausreichend regulär ist, so dass die rechte Seite existiert:

$$\|\boldsymbol{\varepsilon} \left(\mathbf{u} - \mathbf{u}_{h}\right)\| + \|\operatorname{div} \left(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_{h}\right)\| + \|\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_{h}\|$$

$$\leq C h^{k} \left(|\mathbf{u}|_{k+1,\Omega} + |\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}|_{k,\Omega} + |\boldsymbol{\sigma}|_{k,\Omega} + \|\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} - g\|_{1/2+k,\Gamma_{C}} + \|g\|_{2k,\Gamma_{C}} + \|\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})\|_{-1/2+k,\Gamma_{C}}\right)$$
(5.11)

Beweis: Für das Least-Squares-Funktional gilt:

$$\mathcal{F}_C(\mathbf{u}_h, \boldsymbol{\sigma}_h) \ge C_R |||(\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_h)|||^2$$
(5.12)

und

$$\mathcal{F}_C(\mathbf{u}_h, \boldsymbol{\sigma}_h) \le 2|||(\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_h)|||^2 + \langle \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_h - g, \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma}_h \cdot \mathbf{n}) \rangle_{\Gamma_C}$$
 (5.13)

mit der Norm auf $H^1(\Omega)^d \times H(\operatorname{div}, \Omega)^d$:

$$|||(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma})||| = (\|\mathcal{C}^{1/2}\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})\|^2 + \|\operatorname{div}\boldsymbol{\sigma}\|^2 + \|\mathcal{C}^{-1/2}\boldsymbol{\sigma}\|^2)^{1/2}.$$

Für den Beweis dieser Abschätzung sei auf [ACS09] verwiesen. Aus (5.12) und (5.13) folgt:

$$\|\boldsymbol{\varepsilon} \left(\mathbf{u} - \mathbf{u}_{h}\right)\|^{2} + \|\operatorname{div}\left(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_{h}\right)\|^{2} + \|\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_{h}\|^{2} \leq C_{1}\mathcal{F}_{C}(\mathbf{u}_{h}, \boldsymbol{\sigma}_{h}) \leq C_{1}\mathcal{F}_{C}(\mathcal{I}_{h}\mathbf{u}, \mathcal{R}_{h}\boldsymbol{\sigma})$$

$$\leq C_{2}\left(\|\boldsymbol{\varepsilon} \left(\mathbf{u} - \mathcal{I}_{h}\mathbf{u}\right)\|^{2} + \|\operatorname{div}\left(\boldsymbol{\sigma} - \mathcal{R}_{h}\boldsymbol{\sigma}\right)\|^{2} + \|\boldsymbol{\sigma} - \mathcal{R}_{h}\boldsymbol{\sigma}\|^{2} + \langle \mathbf{n} \cdot \mathcal{I}_{h}\mathbf{u} - q, \mathbf{n} \cdot (\mathcal{R}_{h}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})\rangle_{\Gamma_{C}}\right).$$

Kombiniert man dies mit (4.16), (4.17) und (5.8) erhält man (5.11).

5.3 Nullraum-Methode

Wählt man die oben vorgestellte Finite-Element-Ausgleichformulierung entsteht das Problem, dass die Steifigkeitsmatrix G nicht positiv definit ist. Dies ist sehr entscheidend bei der Wahl der Lösungsstrategien und der Vorkonditionierer. Daher wird die Nullraum-Methode, wie in 4.3.3 beschrieben, auf das Problem angewendet, um eine positiv definite Matrix Z^TGZ zu erhalten.

Von jeder Näherungslösung wird gefordert, dass die Nebenbedingungen $A\mathbf{p}=\mathbf{0}$ erfüllt werden. Es wird eine Matrix Z gesucht, deren Spalten eine Basis des Nullraums von A bilden.

Bei dem betrachteten Signorini-Kontaktproblem ist die Konstruktion einer solchen Matrix sehr einfach. Für die Erfüllung der Nebenbedingungen ist nur der Kontaktbereich Γ_C relevant, daher ist der Eintrag für jeden Freiheitsgrad, der nicht auf dem Kontaktrand liegt, der Einheitsvektor. Bei Freiheitsgraden auf dem Kontaktrand muss unterschieden werden, ob die zugehörige Nebenbedingung in der aktuellen Indexmenge $I_u^{(k)}$ oder $I_{sn}^{(k)}$ enthalten ist oder nicht. Ist die Nebenbedingung nicht enthalten, wird wieder der Einheitsvektor eingetragen. Für die Nebenbedingungen aus den Indexmengen lassen sich die Spalten für Z aus den jeweiligen Werten in A bestimmen.

Das Problem geht dann über in

$$Z^T G Z \mathbf{q} = -Z^T (\mathbf{c} + G \mathbf{x}^{(k)}).$$

Die Matrix Z^TGZ ist positiv definit, zumindest wenn man die Indexmengen $I_u^{(k)}$ und $I_{sn}^{(k)}$ genügend groß wählt. Daher ist es sinnvoll die Indexmengen eher zu überschätzen als zu unterschätzen.

Die Lagrange-Multiplikatoren können dann im Nachhinein berechnet werden

$$AA^{T} \lambda = -A(\mathbf{c} + G(\mathbf{x}^{(k)} + p))$$

Die Matrix A^TA ist nichtsingulär, da die Zeilen von A den Nebenbedingungen entsprechen und diese sind linear unabhängig.

5.4 Vorkonditionierung

Es bieten sich verschiedene Vorkonditionierer für Z^TGZ an. Es werden matrix-orientierte Vorkonditionierer wie Gauß-Seidel oder die unvollständige Cholesky Zerlegung betrachtet. Und auf der anderen Seite Vorkonditionierer, die auf der Finite-Element-Struktur der Matrix G beruhen, wie der Vorkonditionierer von Hiptmair. Die matrix-orientierten Vorkonditionierer sind intuitiv zu implementieren, daher wird nur auf den Vorkonditionierer nach Hiptmair näher eingegangen.

5.4.1 Hiptmair-Vorkonditionierer

Viele Vorkonditionierer, die die Struktur der verwendeten Finite-Element-Räume nutzen, werden durch eine Erweiterung der zugrundeliegenden Basis aus Finite-Element-Ansatzfunktionen definiert. Der Finite-Element-Raum wird somit über ein Erzeugendensystem dargestellt, in dem die Darstellung nicht mehr eindeutig ist. Dementsprechend führt die Variationsformulierung auf ein singuläres Gleichungssystem, welches aber konsistent ist, es besitzt also unendlich viele Lösungen. Die Interpretation von Vorkonditionierern auf der Grundlage von Erzeugendensystemen erweiterter Finite-Element-Basisfunktionen wird bei [Gri94] speziell für Multilevel-Vorkonditionierer ausführlich beschrieben.

In diese Klasse fällt auch die von Hiptmair vorgeschlagene erweiterte Relaxation für die Raviart-Thomas-Elemente und andere H(div)-konforme Elemente, wie in Abschnitt 4.4.2.1 beschrieben.

Im Folgenden wird die Kombination der Nullraum-Methode mit der erweiterten Darstellung des Erzeugendensystems für das Signorini-Kontakt Problem dargestellt. Dabei sei der Ansatzraum für die Spannungen Σ_h durch Raviart-Thomas-Elemente der niedrigsten Ordnung gegeben. Die erweiterte Darstellung ist dann gegeben durch

$$\mathbf{\Sigma}_h = \operatorname{span}\{\boldsymbol{\psi}_1,\ldots,\boldsymbol{\psi}_{n_s},\hat{\boldsymbol{\psi}}_1,\ldots,\hat{\boldsymbol{\psi}}_{\hat{n}_s}\},$$

wobei $\hat{\psi}_i,\,i=1,\ldots,\hat{n}_s$ die Basisfunktionen für den divergenzfreien Unterraum

$$\mathbf{\Sigma}_h^0 = \{ \boldsymbol{\sigma}_h \in \mathbf{\Sigma}_h : \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_h = \mathbf{0} \}$$

bezeichnen.

Im speziellen Fall des Signorini-Problems und Raviart-Thomas-Elementen als Ansatzfunktionen, handelt es sich dabei (für beide Zeilen des Spannungstensors) um wirbelförmige Anordnungen, die jeweils aus einer Linearkombination von Basisfunktionen aller an einem Eckpunkt der Triangulierung angrenzenden Kanten bestehen, wie in Abbildung 5.1 dargestellt.

Es ergibt sich dann bezüglich des Erzeugendensystems die erweiterte Matrix

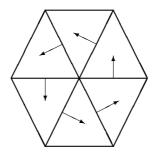


Abbildung 5.1: Divergenzfreie Funktionen

$$G^e = \begin{pmatrix} G_{uu} & \hat{G}_{su}^T \\ \hat{G}_{su} & \hat{G}_{ss} \end{pmatrix}$$

mit

$$\begin{split} \hat{G}_{su} &= \begin{pmatrix} [\mathcal{A}(\phi_{j}, 0; 0, \psi_{i})]_{1 \leq i \leq n_{s}, 1 \leq j \leq n_{u}} \\ [\mathcal{A}(\phi_{j}, 0; 0, \hat{\psi}_{i})]_{1 \leq i \leq \hat{n}_{s}, 1 \leq j \leq n_{u}} \end{pmatrix} , \\ \hat{G}_{ss} &= \begin{pmatrix} [\mathcal{A}(0, \psi_{j}; 0, \psi_{i})]_{1 \leq i \leq \hat{n}_{s}, 1 \leq j \leq \hat{n}_{s}} & [\mathcal{A}(0, \hat{\psi}_{j}; 0, \psi_{i})]_{1 \leq i \leq n_{s}, 1 \leq j \leq \hat{n}_{s}} \\ [\mathcal{A}(0, \psi_{j}; 0, \hat{\psi}_{i})]_{1 \leq i \leq \hat{n}_{s}, 1 \leq j \leq \hat{n}_{s}} & [\mathcal{A}(0, \hat{\psi}_{j}; 0, \hat{\psi}_{i})]_{1 \leq i, j \leq \hat{n}_{s}} \end{pmatrix} \end{split}$$

und der erweiterten rechten Seite

$$\mathbf{c}^e = \begin{pmatrix} [\mathcal{A}(\mathbf{u}^D, \boldsymbol{\sigma}^N; \boldsymbol{\phi}_i, 0)]_{1 \leq i \leq n_u} \\ [\mathcal{A}(\mathbf{u}^D, \boldsymbol{\sigma}^N; 0, \boldsymbol{\psi}_i)]_{1 \leq i \leq n_s} \\ [\mathcal{A}(\mathbf{u}^D, \boldsymbol{\sigma}^N; 0, \hat{\boldsymbol{\psi}}_i)]_{1 \leq i \leq \hat{n}_s} \end{pmatrix}.$$

Das Prinzip der Aktiven-Mengen-Strategie lässt sich auf das erweiterte System übertragen. Dann ist in jdem Schritt zu minimieren

$$\frac{1}{2}((\mathbf{x}^e)^{(k)} + \mathbf{p}^e)^T G^e((\mathbf{x}^e)^{(k)} + \mathbf{p}^e) + ((\mathbf{x}^e)^{(k)} + \mathbf{p}^e)^T \mathbf{c}^e$$

unter allen $\mathbf{p}^e \in \mathbb{R}^{\hat{n}} \ (\hat{n} = n_u + n_s + \hat{n}_s)$, welche den Bedingungen

$$egin{aligned} A_u^e(I_u^{(k)},:)\mathbf{p}^e &= \mathbf{0} \;, \ A_{sn}^e(I_{sn}^{(k)},:)\mathbf{p}^e &= \mathbf{0} \;, \ A_{st}^e\mathbf{p}^e &= \mathbf{0} \end{aligned}$$

5 Least-Squares-Formulierung für das Signorini-Kontaktproblem

genügen muss. Dabei sind die erweiterten Nebenbedingungsmatrizen durch

$$\begin{split} A_u^e &= \begin{pmatrix} \left[\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\phi}_j\right|_i\right]_{1 \leq i \leq m_u, 1 \leq j \leq n_u} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ A_{sn}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \left[\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\psi}_j \cdot \mathbf{n})\right|_i\right]_{1 \leq i \leq m_{sn}, 1 \leq j \leq n_s} & \left[\mathbf{n} \cdot (\hat{\boldsymbol{\psi}}_j \cdot \mathbf{n})\right|_i\right]_{1 \leq i \leq m_{sn}, 1 \leq j \leq \hat{n}_s} \end{pmatrix}, \\ A_{st}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \left[\mathbf{t} \cdot (\boldsymbol{\psi}_j \cdot \mathbf{n})\right|_i\right]_{1 \leq i \leq m_{st}, 1 \leq j \leq n_s} & \left[\mathbf{t} \cdot (\hat{\boldsymbol{\psi}}_j \cdot \mathbf{n})\right|_i\right]_{1 \leq i \leq m_{st}, 1 \leq j \leq \hat{n}_s} \end{pmatrix} \end{split}$$

gegeben.

Zur Implementierung der Nullraum-Methode muss eine erweiterte Nullraum-Matrix aufgestellt werden. Es bietet sich der Ansatz

$$Z^e = \begin{pmatrix} Z & 0 \\ 0 & \hat{Z} \end{pmatrix}$$

an. Die Konstruktion entsprechender Spalten der Matrix \hat{Z} funktioniert problemlos, wenn mindestens eine Kante, auf der die zugehörige Basisfunktion $\hat{\psi}_j$ nicht verschwindet, zu $I_{sn}^{(k)}$ gehört. Dann verschwinden auf dieser Kante sowohl die Tangential- als auch die Normalkomponente von $\hat{\psi}_j \cdot \mathbf{n}$ und die entsprechende Spalte ist einfach aus \hat{Z} zu streichen. Problematischer ist der Fall, wenn beide Randkanten aus dem Träger von $\hat{\psi}_j$ nicht zu $I_{sn}^{(k)}$ gehören.

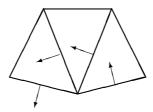


Abbildung 5.2: Divergenzfreie Funktionen am Rand

Es werden mit E^{in} und E^{out} diejenigen Randkanten bezeichnet, an denen die "Wirbel-Basisfunktionen" $\hat{\psi}_{j_1}$ und $\hat{\psi}_{j_2}$ (für beide Spannungskomponeneten) in das Gebiet hinein bzw. aus dem Gebiet heraus zeigen. Die entsprechenden Normalenvektoren seien mit \mathbf{n}^{in} und \mathbf{n}^{out} bezeichnet. Desweiteren sei $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$ eine "mittlere" Normalenrichtung, die zum Beispiel durch

$$\theta^{out} = \arctan\left(\frac{n_2^{out}}{n_1^{out}}\right), \ \theta^{in} = \arctan\left(\frac{n_2^{in}}{n_1^{in}}\right), \ \theta = \frac{1}{2}(\theta^{out} + \theta^{in}), \ \mathbf{n} = (\cos\theta, \sin\theta).$$

definiert werden kann. Um eine Basis des Nullraums aufzustellen, benötigt man für jeden Knoten j, deren beide Kanten angrenzenden Kanten nicht in $I_{sn}^{(k)}$ enthalten ist, eine

Basisfunktion für beide Spannungskomponenten. Diese Basisfunktion muss der Nebenbedingungen $\mathbf{t}^{in} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}^{in}) = 0$ auf E^{in} sowie $\mathbf{t}^{out} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}^{out}) = 0$ auf E^{out} genügen. Die erweiterte Nullraum-Matrix ist dann von der Gestalt

$$Z^e = \begin{pmatrix} Z & 0\\ \hat{W} & \hat{Z} \end{pmatrix}$$

Das positiv semidefinite lineare Gleichungssystem lautet diesbezüglich

$$(Z^e)^T G^e Z^e \mathbf{q}^e = -(Z^e)^T (\mathbf{c}^e + G^e \mathbf{x}^{(k)}).$$

Auf dieses lineare Gleichungssystem lässt sich das CG-Verfahren unter Einastz eines positiv definiten Vorkonditionierers anwenden.

6 Numerische Ergebnisse

6.1 Hertzsches-Kontakt-Problem

Es wird der elastische, reibungslose Kontakt eines Halbkreises mit einer nicht durchdringbaren Fläche betrachtet. Diese Fläche ist durch die x_1 -Achse gegeben. Der Halbkreis hat den Mittelpunkt (0,0.4) mit dem Radius 0.4. Das Material des Halbkreises sei homogen und isotrop mit dem Elastizitätsmodul $E=270269\mathrm{N/mm^2}$ und der Querkontraktion $\nu=0.248$. Auf dem Dirichletrand $\Gamma_D=\{(x_1,x_2):-0.4< x_1<0.4, x_2=0.4\}$ ist eine Verschiebung $u_D=-0.005$ auf Γ_D gegeben. Auf dem möglichen Kontaktrand gelten die Bedigungen (3.20). Das kontinuierliche Problem wird mit linearen Standard-Elemente für die Verschiebungen \mathbf{u} und Raviart-Thomas-Elementen RT_1 für die Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ diskretisiert. In Abbildung 6.1 ist die Triangulierung des Gebietes für h=0.1 zu sehen.

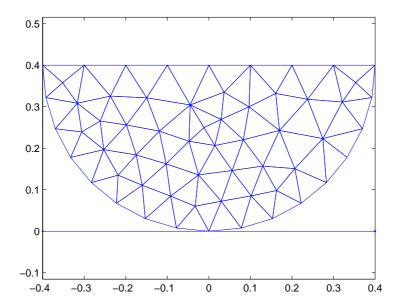


Abbildung 6.1: Hertzsches-Kontakt-Problem

6.2 Ergebnisse für das Hertz-Kontakt-Problem

Im Folgenden werden die numerischen Ergebnisse des in Matlab implementierten Programmes dargestellt. Dabei liegt immer das im vorherigen Abschnitt vorgestelle Hertz'sche Kontaktproblem zugrunde.

Zunächst einmal wird das Gebiet trianguliert, dann wird die Steifigkeitsmatrix aufgestellt, dabei werden die Verschiebungen ${\bf u}$ durch lineare Standard-Elemente und die Spannungen ${\boldsymbol \sigma}$ durch Raviart-Thomas-Elemente erster Ordnung approximiert. Es wurde in Matlab eine Aktive-Mengen-Strategie umgesetzt. Die innerhalb der Aktiven-Mengen-Strategie entstehenden Systeme werden mit der von Matlab bereitgestellten Funktion für das PCG-Verfahren gelöst. Dabei wird als Toleranz immer 10^{-8} gewählt.

Im Folgenden werden zunächst die Ergebnisse für die einzelnen Vorkonditionerer vorgestellt. Dabei sind die Ergebnisse auf die Splitting assoziierten Vorkonditionierer und die Basiserweiterung von Hiptmair beschränkt. Die unvollständige Cholesky-Zerlegung als Vorkonditionierer hat sich, gerade auf feineren Gittern, als sehr empfindlich gegenüber der Abweichung von der kompletten Zerlegung erwiesen. Daher können für diesen Vorkonditionierer keine Ergebnisse präsentiert werden.

Zusammenfassend werden dann die Ergebnisse der einzelnen Vorkonditionierer verglichen.

Alle Vorkonditionierer werden auf verschieden feinen Triangulierungen angewendet, diese sind in den Abbildungen 6.2 - 6.6 zu sehen.

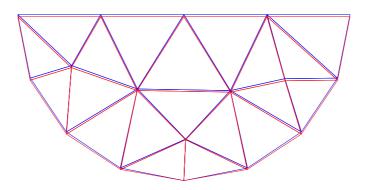


Abbildung 6.2: Triangulierung h = 0.2

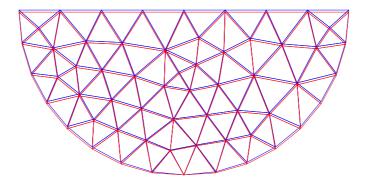


Abbildung 6.3: Triangulierung h=0.1

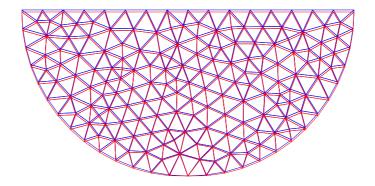


Abbildung 6.4: Triangulierung h=0.05

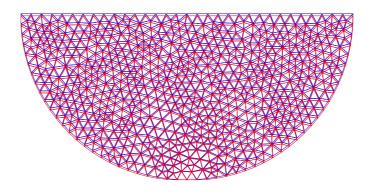


Abbildung 6.5: Triangulierung $h=0.025\,$

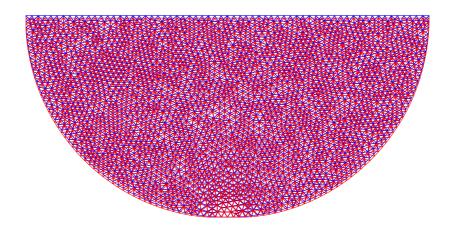


Abbildung 6.6: Triangulierung $h=0.0125\,$

6.2.1 Splitting assoziierte Vorkonditionierer

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse für Splitting assoziierte Vorkonditionierer vorgestellt. Es wird das Jacobi- und das Gauß-Seidel-Verfahren als Vorkonditionierer verwendet. Das Verfahren konvergiert für beide Vorkonditionierer und im Laufe des Verfahrens wird das Funktional $\mathcal{F}_C(\mathbf{u}_h, \boldsymbol{\sigma}_h)$ kontinuierlich verringert. In Tabelle 6.1 werden auf den unterschiedlich feinen Gittern die Anzahl der Freiheitsgrade, der Wert des Funktionals am Ende des Algorithmus' und die Anzahl der aktiven Indizes verglichen.

Aus der Tabelle ist zu erkennen, dass sich der Wert des Funktionals $\mathcal{F}_C(\mathbf{u}_h, \boldsymbol{\sigma}_h)$ auf den

h	$ \dim \mathbf{U}_h $	$\dim \Sigma_h$	$\mid \mathcal{F}_{C}(\mathbf{u}_{h},oldsymbol{\sigma}_{h}) \mid$	$\#I_A(\mathbf{u}_h)$	$\#I_A(oldsymbol{\sigma}_h)$
0.2	24	72	4.13714 e-5	1	8
0.1	102	306	2.22561 e-5	1	14
0.05	334	1010	7.20265 e-6	1	26
0.025	1366	4122	2.19026 e-6	3	48
0.0125	5598	16842	5.88697 e-7	5	98
0.00625	22284	66956	1.73242 e-7	11	192

Tabelle 6.1: Ergebnisse für den Gauß-Seidel Vorkonditionierer

feineren Gittern immer weiter minimiert. Es ist jedoch auch zu erkennen, dass die Anzahl der Freiheitsgrade sehr stark ansteigt.

Die Abbildungen 6.7 - 6.12 zeigen die Verteilung des Least-Squares Funktionals über dem gegebenen Gebiet. In den Abbildungen ist die farbige Skala bezüglich des 10er Logarithmus angegeben. Die Abbildungen zeigen, dass der kritische Bereich, also der Bereich in dem das Funktional am größten ist, der Kontaktbereich ist.

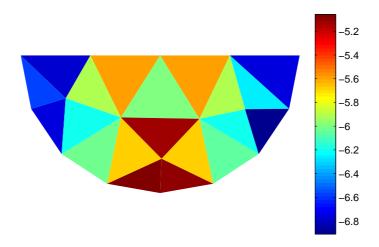


Abbildung 6.7: Least-Squares Funktional log10 auf h=0.2

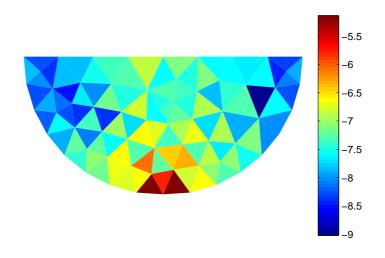


Abbildung 6.8: Least-Squares Funktional log10 auf h=0.1

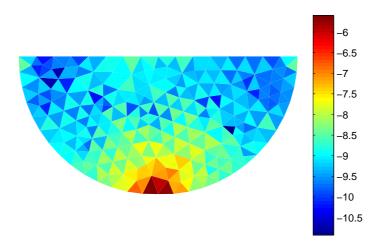


Abbildung 6.9: Least-Squares Funktional log10 auf h=0.05

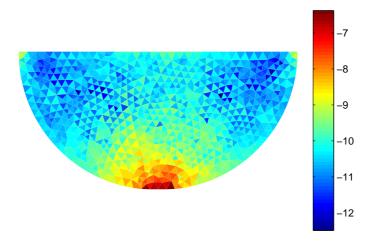


Abbildung 6.10: Least-Squares Funktional log10 auf h=0.025

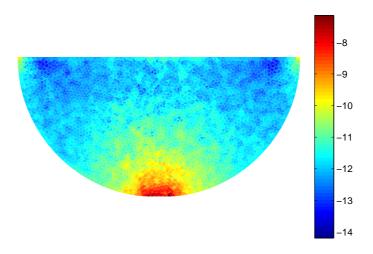


Abbildung 6.11: Least-Squares Funktional log
10 auf h=0.0125

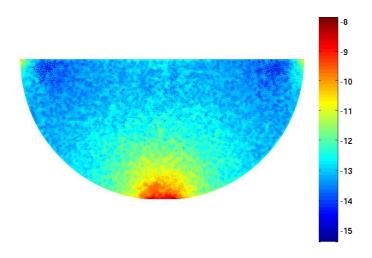


Abbildung 6.12: Least-Squares Funktional log10 auf h=0.00625

6.2.2 Erweitertes System nach Hiptmair

In diesem Teil werden die Ergebnisse für die Vorkonditionierung gemäß Hiptmair dargestellt. Dabei wird wie im vorherigen Kapitel beschrieben eine Basiserweiterung vorgenommen. Es wird die erweiterte Steifigkeitsmatrix aufgestellt, diese wird dann mithilfe der Nullraum-Methode transformiert, dass eine positiv definite Matrix entsteht. Dem PCG-Vefahren wird die transformierte erweiterte Steifigkeitsmatrix übergeben, die Toleranz wird dann weiterhin mit 10^{-8} angegeben. Da die Matlab-Funktion für das vorkonditionierte CG-Verfahren genutzt wird, wird das erweiterte System dann noch mit der Jacobi- oder Gauß-Seidel Methode vorkonditioniert.

In Tabelle 6.2 sind die Ergebnisse für das erweiterte Symstem mit Gauß-Seidel Vorkonditionierer zu sehen. Für die jeweiligen Triangulierungen wird der Wert des Least-Squares Funktional $\mathcal{F}_C(\mathbf{u}_h, \boldsymbol{\sigma}_h)$ und die Anzahl der aktiven Indizes zum Ende der Iterationen dargestellt.

In den Abbildungen 6.13-6.17 ist die V	Verteilung der Spannungen	über dem gesamten Gebiet
--	---------------------------	--------------------------

h	$\operatorname{dim} \mathbf{U}_h$	$\dim \Sigma_h$	$\mid \mathcal{F}_{C}(\mathbf{u}_{h},oldsymbol{\sigma}_{h}) \mid$	$\#I_A(\mathbf{u}_h)$	$\#I_A(\boldsymbol{\sigma}_h)$
0.2	24	72	4.13714 e-5	1	8
0.1	102	306	2.22561 e-5	1	14
0.05	334	1010	7.20265 e-6	1	26
0.025	1366	4122	2.19026 e-6	3	48
0.0125	5598	16842	5.88697 e-7	5	98
0.00625	22284	66956	1.73242 e-7	11	192

Tabelle 6.2: Ergebnisse des erweiterten Systems mit Gauß-Seidel Vorkonditionierer

dargestellt. Es wird der Betrag, bzgl der Frobenius-Norm, der Spannungen jeweils in den Dreiecksmittelpunkten dargestellt. Es ist insbesondere bei den feineren Triangulierungen zu sehen, dass die Spannungen im Kontaktbereich am größten sind. Dies ist auch zu erwarten, da der Körper mit dem Hindernis in Kontakt ist und dadurch Spannungen entstehen.

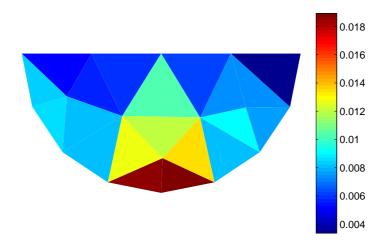


Abbildung 6.13: Spannungsverteilung auf Gitter h=0.2

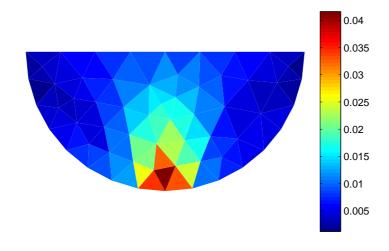


Abbildung 6.14: Spannungsverteilung auf Gitter h=0.1

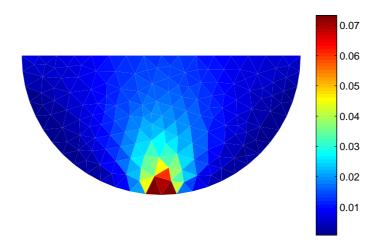


Abbildung 6.15: Spannungsverteilung auf Gitter h=0.05

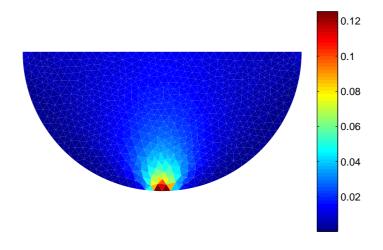


Abbildung 6.16: Spannungsverteilung auf Gitter h=0.025

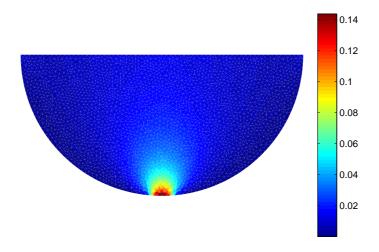


Abbildung 6.17: Spannungsverteilung auf Gitter h = 0.0125

6.2.3 Vergleich der unterschiedlichen Vorkonditionierer

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der in den beiden vorherigen Abschnitten vorgestellten Vorkonditionierer miteinander verglichen. Die Verteilung des Funktionals und der Spannungen über dem Gebiet ist bei allen Vorkonditionierern gleich. Man erhält also mit den verschiedenen Vorkonditionierern die gleichen Werte für das Least-Squares-Funktional. Daher wird beim Vergleich nur auf die Anzahl der CG-Schritte und damit auf die Geschwindigkeit des Algorithmus' geachtet.

In den folgenden Tabellen ist die Anzahl der CG-Iterationsschritte zur jeweiligen Reduktion des Residuums um den Fakotr 10^{-8} aufgelistet.

h	Originalsystem	erweitertes System
0.2	96	51
0.1	326/408	123/169
0.05	607/782	214/327
0.025	1024/1604/1035/1033	442/713/652/633
0.0125	2185/3070/1931/1921/1948/1738	819/1442/1308/1278/1280/1271

Tabelle 6.3: CG-Schritte bei Jacobi Vorkonditionierer

h	Originalsystem	erweitertes System
0.2	58	21
0.1	161/211	44/60
0.05	285/378	77/113
0.025	534/754/462/437	153/244/221/215
0.0125	879/1195/716/669/668/671	$\mid 299/475/438/431/352/426 \mid$
0.00625	1676/2481/1161/1200/1161/1167/ 1162/1200/1164/1202/1201/1201	582/957/856/838/856/859 684/677/675/833/825/831

Tabelle 6.4: CG-Schritte bei Gauß-Seidel Vorkonditionierer

Die Tabellen 6.3 und 6.4 vergleichen die Anzahl der CG-Schritte für das Originalsystem und das erweiterte System. Das Originalsystem beinhaltet dabei nur die Basisfunktionen der Standard- und der Raviart-Thomas-Elemente. Das erweiterte System ist durch die Basiserweiterung um die divergenz-freien Funktionen gegeben. Beide Systeme wurden durch die Nulraum-Methode transformiert, damit ein positiv definites System gegeben ist.

Es ist klar zu sehen, dass der Übergang zum erweiterten System eine deutliche Reduktion der Interationschritte liefert. Da die Verringerung der CG-Schritte sehr hoch ist, gleicht es die leichte Erhöhung der Dimension des System klar aus.

Für den Jacobi-Vorkonditionierer sind in Tabelle 6.3 für die Triangulierung h=0.00625 keine Ergebnisse mehr angegeben. Beim Vergleich mit der Tabelle 6.4 fällt auf, dass die Erweiterung des System zwar eine Verbesserung liefert, diese aber im Bereich des Gauß-Seidel-Vorkonditionierers für das Originalsystem liegt.

Es ist also leicht ersichtlich, dass das erweiterte System mit Gauß-Seidel-Vorkonditionierer am effizientesten ist. Durch einen geringen Mehraufwand lässt sich eine erhebliche Reduktion der CG-Schritte erreichen.

6.3 Fazit

Es ist erkennbar, dass das erweiterte System eine wesentliche Reduktion der Iterationsschritte bewirkt. Die Anzahl der CG-Schritte wächst allerdings noch immer proportional zu 1/h. Eine gleichmäßige Konvergenz bezüglich der Feinheit der Triangulierung lässt sich mit Multilevel-Verfahren erreichen. Um diese realisieren zu können, muss die Lösung des groben Gitters auf das feine Gitter transformiert werden, um diese als Startnäherung verwenden zu können. Dafür müssen Interpolationsoperatoren sowohl für die Standard-Elemente als auch für die Raviart-Thomas-Elemente geschrieben werden. Dabei ist es notwendig die Nebenbedingungen zu berücksichtigen, es ist als nicht möglich auf Standardoperatoren zurück zu greifen. Zeitlich war es aber nicht möglich diese Erweiterungen im Rahmen dieser Arbeit zu realisieren. Daher würde es ausreichen nur diesen Bereich zu verfeinern.

Sicherlich wäre es auch sinnvoll bei einer Erweiterung auf Multilevel-Verfahren das Gitter adaptiv zu verfeinern, da die Ergebnisse zeigen, dass das Funktional im Kontatkbereich am größten ist.

Im Rahmen dieser Arbeit ist es gelungen ein effizientes Verfahren zu implementieren. Es wurde eine Aktive-Mengen-Strategie realisiert, in welcher die auftretenden KKT-Systeme mit dem von Matlab vorgegebnem PCG-Verfahren gelöst werden. Die Anwendung der Idee von Hiptmair als Vorkonditionierer hat das Verfahren wesentlich effizienter gemacht.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Spannungen in einem Stab
2.2	Dehnung eines Stabes mit konstantem ε
2.3	Dehnung eines Stabes mit variablem ε
3.1	Verformung einer Scheibe
3.2	Verzerrungszustand
3.3	Spannungen in einem Körper
3.4	Spannungen in drei senkrechten Schnitten
3.5	Infinitesimaler Tetraeder
3.6	Volumenelement
3.7	Signorini Problem
3.8	Linearisierter Kontakt
4.1	Begriff der zulässigen Zerlegung
4.2	Zerlegung des Gebietes Ω
4.3	konforme Standardelemente
4.4	Raviart-Thomas-Elemente
5.1	Divergenzfreie Funktionen
5.2	Divergenzfreie Funktionen am Rand
6.1	Hertzsches-Kontakt-Problem
6.2	Triangulierung $h = 0.2 \dots 72$
6.3	Triangulierung $h = 0.1 \dots 73$
6.4	Triangulierung $h = 0.05$
6.5	Triangulierung $h = 0.025$
6.6	Triangulierung $h = 0.0125$
6.7	Least-Squares Funktional log10 auf $h = 0.2$
6.8	Least-Squares Funktional log10 auf $h = 0.1$
6.9	Least-Squares Funktional log10 auf $h = 0.05$
6.10	Least-Squares Funktional log10 auf $h = 0.025$
6.11	Least-Squares Funktional log10 auf $h = 0.0125$
6.12	Least-Squares Funktional log10 auf $h = 0.00625$
	Spannungsverteilung auf Gitter $h = 0.2$
6.14	Spannungsverteilung auf Gitter $h = 0.1$
	Spannungsverteilung auf Gitter $h = 0.05$

Abbildungsverzeichnis

6.16	Spannungsverteilung	auf Gitter	h = 0.025									81
6.17	Spannungsverteilung	auf Gitter	h = 0.0125									82

Literaturverzeichnis

- [ACS09] Frank S. Attia, Zhiqiang Cai, und Gerhard Starke. First-order system least squares for the Signorini contact problem in linear elasticity. SIAM J. Numer. Anal. 45:3027-3043, 2009.
- [BBS04] H. Blum and D. Braess and F. T. Suttmeier. A Cascadic Multigrid Algorithm for Variational Inequalities. Comput. Visual Sci., 7:153–157, 2004.
- [Bra97] Dietrich Braess. Finite Elemente Theorie, schnelle Löser und Anwendungen in der Elastizitätstheorie. Springer, 1997.
- [BG09] Pavel B. Bochev und Max D. Gunzburger. Least-Squares Finite Element Method. Springer, 2009.
- [Do09] Zdeněk Dostál *Optimal Quadratic Programming Algorithms*. Springer, New York, 2009.
- [GR05] Christian Großmann und Hans Görg Roos. Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen. Teubner, Wiesbaden, 3. Auflage, 2005.
- [Gri94] Michael Griebel. Multilevel algorithms considered as iterative methods on semidefinite systems. SIAM J. Sci. Comput., 15:547–565, 1994.
- [Hip97] Ralf Hiptmair. Multigrid method for H(div) in three dimensions. Electr. Trans. Numer. Anal., 6:133–152, 1997.
- [KK01] Ralf Kornhuber and Rolf Krause. Adaptive multigrid methods for signorini's problem in linear elasticity. Computing and Visualization in Science, 4:9–20, 2001.
- [Kra01] Rolf H. Krause. Monotone Multigrid Methods for Signorini's Problem with Friction. Dissertation, FU Berlin, 2001.
- [Kru06] Astrid Krüger. Ein kaskadisches Mehrgitterverfahren für Variationsungleichungen. Diplomarbeit, Universität Hannover, 2006.
- [KO88] N. Kikuchi and J. T. Oden Contact Problems in Elasticity: A Study of Variational Inequalities and Finite Element Methods. SIAM, Philadelphia, 1988
- [Mech1] D. Gross, W. Hauger, J. Schröder und W. A. Wall *Technische Mechanik 1: Statik*. Springer, 10. Auflage, 2009.
- [Mech2] D. Gross, W. Hauger, J. Schröder und W. A. Wall Technische Mechanik 2: Elastostatik. Springer, 9. Auflage, 2007.

Literaturverzeichnis

- [Mech3] D. Gross, W. Hauger, J. Schröder und W. A. Wall *Technische Mechanik 3: Kinetik.* Springer, 10. Auflage, 2008.
- [Mech4] D. Gross, W. Hauger, und P. Wriggers Technische Mechanik 4: Hydromechanik, Elemente der Höheren Mathematik, Numerische Methoden. Springer, 7. Auflage, 2009.
- [Mei99] Andreas Meister. Numerik linearer Gleichungssysteme. Vieweg, Wiesbaden, 1. Auflage, 1999.
- [NW06] Jorge Nocedal and Stephen J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer, New York, 2nd edition, 2006.
- [Sta04] Gerhard Starke. Numerik nichtlinearer Optimierung. Universität Hannover, Wintersemester 2003/04. Skript zur Vorlesung.
- [Su05] F. T. Suttmeier. On Computational Methods for Variational Inequalities. Comput. Mech., 35:401–408, 2005.
- [Su06] F. T. Suttmeier. Adaptive Computational Methods for Variational Inequalities Based On Mixed Formulations. Int. J. Numer. Meth. Engng., 68:1180–1208, 2006.
- [Wri02] Peter Wriggers. Computational Contact Mechanics. Wiley, Chichester, 2002.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Astrid Intas geb. Krüger, geboren am 31. Januar 1981 in Uelzen, verheiratet, deutsch

Schulbildung

1987 - 1991	Grundschule Suderburg, Suderburg
1991 - 1993	Orientierungsstufe Suderburg, Suderburg
1993 - 2000	Herzog-Ernst-Gymnasium, Uelzen
Studium	
2000 - 2006	Studium der Mathematik mit Studienrichtung Informatik, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, Abschluss Diplom
	Diplomarbeit mit dem Thema: "Ein kaskadisches Mehrgitterverfahren für Variationsungleichungen"
seit $12/2006$	Doktorandin mit Stipendium der DFG im Graduiertenkolleg "Interaktion von Modellbildung, Numerik und Software-Konzepten für technischwissenschaftliche Problemstellungen" (GRK 615) an der Gottfried Wil-

Wissenschaftliche Tätigkeit

03/2002 – 02/2006	Mitglied der "Ada Lovelace Initiative" am Institut "Mensch-Maschine-Kommunikation" (Betreuung von Schülern bei Informatikprojekten)
seit $10/2005$	Studentische Hilfskraft am Institut für Angewandte Mathematik, Betreuung und Leitung von Übungen

helm Leibniz Universität Hannover

Hannover, 19. Juli 2010