

Numerische Analyse und parallele Simulation von nichtlinearen Cosserat-Modellen

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN



Tag der mündlichen Prüfung: 4. November 2009

Angefertigt am Institut für Angewandte und Numerische Mathematik

Referent: Prof. Dr. C. Wieners, Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Korreferenten: Prof. Dr. P. Neff, Universität Duisburg-Essen

Prof. Dr. W. Dörfler, Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Inhaltsverzeichnis

Motivation	1
1 Nichtlineare Cosserat-Modelle	5
1.1 Das Modellproblem der perfekten Plastizität	6
1.2 Einführung in die infinitesimale Cosserat-Elastizität	14
1.3 Ein elasto-plastisches Cosserat-Modell	21
1.4 Ein geometrisch exaktes Modell	27
2 Diskrete Cosserat-Plastizität	29
2.1 Diskretisierung in der Zeit	30
2.2 Das diskrete primale Inkrementproblem	34
2.3 Konvergenz der Finite-Elemente-Methode	39
2.4 Konvergenz des nichtglatten Newton-Verfahren	41
2.5 Algorithmus	48
2.6 Das duale Inkrementproblem	52
3 Ein paralleles Programmiermodell	63
3.1 Parallele Finite Elemente	64
3.2 Ein paralleles Mehrgitterverfahren	69
4 Numerische Ergebnisse für das infinitesimale Modell	71
4.1 Geometrie und Problemstellung für eine Scheibe mit Loch	72
4.2 Einfluss der Cosserat-Parameter auf den Löseprozess	73
4.3 Nichtlineare Konvergenz	83
4.4 Parallele Skalierbarkeit	84
4.5 Konvergenzstudie der Orts- und Zeitdiskretisierung	86
4.6 Grafiken	90
5 Minimierung auf Mannigfaltigkeiten	95
5.1 Newton-Verfahren zur Minimierung	96
5.2 Newton-Analysis	101
6 Numerische Behandlung finiter Cosserat-Elastizität	107
6.1 Variationelle Formulierung in Finite-Element-Räumen	108
6.2 Diskretisierung im Ort	112
6.3 Algorithmus	115

7	Numerische Ergebnisse für ein finites elastisches Cosserat-Modell	119
7.1	Geometrie und Problemstellung 3D	120
7.2	Numerische Überprüfung der Newton-Konvergenz	122
7.3	Konvergenz im Ort für verschiedene Diskretisierungen	124
Anhang		131
A	Orthogonalprojektionen und konvexe Potentiale	131
B	Studie der parallelen Skalierbarkeit für verschiedene Diskretisierungen . .	135
C	Studie der Konvergenz in h und Δt	137
D	Lie-Gruppen und Lie-Algebren	140
E	Beispiele von Matrix Gruppen	144
F	Elementare Ableitungen von matrixwertigen Funktionen	145
G	Beispiel: Minimierungsaufgabe auf $SO(3)$ und $SL(3)$	151
H	Hardware Spezifikation	153
Literaturverzeichnis		154
Index		160

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand in der Zeit von Januar 2004 bis Oktober 2009 im Rahmen meiner Tätigkeit als akademischer Angestellter am Lehrstuhl für wissenschaftliches Rechnen des Institut für Angewandte und Numerische Mathematik. Die Arbeit war dabei Teilprojekt im IWRMM in der Arbeitsgruppe „Effiziente Löser in der Plastizität“ des Karlsruher Institut für Technologie (KIT).

Zuallererst danke ich Herrn Prof. Dr. C. Wieners für die Auswahl des spannenden Themas der vorliegenden Arbeit, die hervorragenden Arbeitsbedingungen und die stets freundliche, engagierte und persönliche Betreuung dieser Arbeit. Ohne die in seiner Forschungsgruppe entwickelte Software-Toolbox *M++* wäre die vorliegende Untersuchung nicht möglich gewesen.

Ebenso gilt mein Dank Herrn Prof. Dr. P. Neff für seine beständige Unterstützung und Hilfsbereitschaft. Sein großes Interesse an der vorliegenden Untersuchung war für mich immer Bestätigung und Motivation zur weiteren Forschungsarbeit.

Weiter bedanke ich mich bei Herrn Prof. Dr. W. Dörfler für die freundliche Übernahme des zweiten Korreferats. Danke sagen möchte ich auch Herrn Prof. Dr. A. Rieder, ohne ihn hätte ich möglicherweise nie den Weg nach Karlsruhe gefunden.

Ich danke allen meinen Kolleginnen und Kollegen am Lehrstuhl für wissenschaftliches Rechnen für die vielen fruchtbaren wissenschaftlichen Diskussionen und das freundliche Arbeitsumfeld, welches zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat. Insbesondere danke ich Martin Sauter, Nicolas Neuß, Antje Sydow, Daniel Maurer, Tudor Udrescu, Tim Kreutzmann und Tobias Jahnke.

Schließlich danke ich meiner Familie für die seelische Unterstützung und meiner Frau Jana für unsere Kinder Joshua und Lara.

Motivation

Verlässliche numerische Simulationen mathematischer Modelle aus der Kontinuumsmechanik sind auch heute noch eine große Herausforderung, voller spannender Anwendungen und offener Fragen. Um eine realistische mathematische Problembeschreibung der Vorgänge in der Natur in drei Raumdimensionen und einer Zeitdimension numerisch zu simulieren, müssen große Gleichungssysteme mit Millionen von Freiheitsgraden aufgestellt und gelöst werden. Mit finite Elemente Techniken können solche Aufgaben heute in wenigen Stunden auf einem Parallelrechner mit verteiltem Speicher bewältigt werden. Das parallele Rechnen und die Entwicklung paralleler Algorithmen für das Lösen partieller Differentialgleichungen ist aktuelles Forschungsgebiet.

Die lineare Elastizitätstheorie ist der historische Ausgangspunkt in der Kontinuumsmechanik. Die lineare Theorie ist sehr gut untersucht und viele präzise mathematische Aussagen zur Existenz und Eindeutigkeit oder auch zur Regularität der Lösungen sind vorhanden. Für die Beschreibung aktueller Fragen aus den Ingenieurwissenschaften reicht diese Theorie jedoch nicht aus und verfeinerte Modelle sind nötig. Auf drei mögliche Erweiterungen möchten wir in der vorliegenden Arbeit dabei eingehen: Cosserat-Drehfreiheitsgrade, infinitesimale Plastizität und finite Elastizität.

Die Beschreibung von granularen Materialien, wie Sänden, Kies oder gar Schäumen, in denen innere Strukturen durch Kristalle oder auch Stoffe verschiedener Aggregatzustände gemischt sind, ist von großer Wichtigkeit. In der klassischen linearen Elastizitätstheorie können innere Strukturunterschiede im Material zwar durch Anpassung der entsprechenden Materialparameter oder auch durch Hinzufügen anisotroper Materialparameter berücksichtigt werden, diese Beschreibung ist aber für viele Situation mit sehr großem Aufwand verbunden und manchmal aufgrund der großen Teilchenzahl gar unmöglich – denken wir an eine Baugrube mit tausend Kubikmeter Schotter. Cosserat-Modelle werden für solche Materialien in den Ingenieurwissenschaften eingesetzt, denn die Hinzunahme zusätzlicher Drehfreiheitsgrade scheint bildlich in der Lage zu sein, das gegenseitige Aneinanderreiben von Körner beschreiben zu können. Diese Erweiterung der linear elastischen Theorie bildet die Überschrift der vorliegenden Arbeit.

Auch irreversible Schädigungen in Werkstoffen oder in der Natur sind möglich. Solche Vorgänge fallen in den Bereich plastischer Materialmodelle. Plastische Erweiterungen linearer Elastizität sind seit den 70er Jahren sehr gut mathematisch analysiert. Existenz und Eindeutigkeit können in technisch aufwendig ausgewählten Funktionenräumen geklärt werden. Effektive Algorithmen, z. B. Radial-Return-Algorithmen, zur Lösung plastischer Modelle sind vorhanden.

Für die Beschreibung großer Deformationen von Bauteilen ist die Verwendung geometrisch exakter Modelle notwendig. Die auftretenden Verzerrungen können in einer linearisierten Kinematik nicht erfasst werden und Modelle finiter Elastizität sind notwendig.

Existenzaussagen für einzelne Modelle können dafür zwar noch formuliert werden, aber die Frage nach der Eindeutigkeit der Lösung ist meistens ungeklärt. Für die Problembeschreibung verwendet man hier häufig hyperelastische Modelle, in denen die innere Energie im Material durch ein Potential beschrieben wird. Es gibt eine große Vielzahl von Potentialen, jedes führt zu einem neuen hyperelastischen Modell. Die numerische Behandlung erfolgt dabei in der Regel über Algorithmen der Optimierungstheorie zur Minimierung von Funktionalen.

Ein weit entferntes Ziel ist sicherlich die Kombination aller drei Erweiterungen, welche zu einem geometrisch exakten plastischen Cosserat Modell führen würde. Um für solch ein Modell Erfahrungen aufzubauen, untersuchen wir erst einmal die Kombinationen infinitesimale Plastizität mit Cosserat-Drehfreiheitsgraden sowie finite Cosserat Elastizität an zwei ausgewählten Modellen. Dann beschäftigen wir uns mit dem Design von Lösungsalgorithmen.

Das Newton-Verfahren ist aufgrund seiner reichhaltigen Einsatzmöglichkeiten von zentraler Bedeutung in der Numerik und bildet auch in der vorliegenden Arbeit das Grundgerüst für jeden Algorithmus. Um (un)restringierte Optimierungsprobleme mit der Methode von Newton zu lösen, steht an erster Stelle die Umformulierung in ein Nullstellenproblem einer nichtlinearen oder auch nichtglatten Funktion. Durch die Verwendung von Informationen aus der (verallgemeinerten) Ableitung können so Algorithmen mit lokal superlinearer oder gar lokal quadratischer Konvergenz erreicht werden und hochpräzise Approximationen von Nullstellen gewonnen werden. In den letzten 20 bis 30 Jahren konnte ein Konzept mit mathematischen Konvergenzaussagen für Newton-Verfahren für Nullstellenprobleme nichtglatter Funktionen formuliert werden und die Realisierung solcher Verfahren für praktisch relevante Probleme hat im letzten Jahrzehnt deutlich zugenommen. Wir werden ein nichtglattes Newton-Verfahren für die Lösung eines infinitesimalen elasto-plastischen Cosserat-Modells aufbauen. Am Beispiel eines geometrisch exakten elastischen Cosserat-Modelle zeigen wir die Anwendung eines Newton-Verfahrens auf Mannigfaltigkeiten auf.

Die Zielsetzung ist es robuste Algorithmen zu finden. Robust kann ein Algorithmus nur dann sein, wenn er auch für den Grenzfall $\Delta x \rightarrow 0$ im Ort nicht degeneriert. Allerdings sind damit noch lange nicht alle Qualitäten erfüllt, oft sind in realen Anwendungen gerade die Situationen von Interesse, in denen Modellparameter sehr klein werden. In dieser Arbeit wollen wir die verwendeten Algorithmen auf die Robustheit bzgl. der Cosserat-Parameter studieren. Für unterschiedliche Anwendungen braucht es speziell angepasste Algorithmen, je nachdem welcher Grenzfall der Parameter studiert werden soll. Algorithmen können (oft) nicht stabil für sämtliche Problemstellungen konstruiert werden. Das Auffinden und Konstruieren geeigneter Algorithmen ist aktuelle angewandte mathematische Forschung.

In Kapitel 1 führen wir in die Theorie plastischer Modelle ein, und stellen ein Cosserat-Modell vor. Mit der numerischen Analyse eines elasto-plastischen Cosserat-Modells beschäftigen wir uns dann in Kapitel 2 und präsentieren die numerischen Ergebnisse in Kapitel 4. In Abschnitt 3.1 stellen wir ein paralleles Programmiermodell vor, welches als Grundlage für die Implementierung herangezogen wird.

Im zweiten Teil der Arbeit führen wir dann auf eine numerische Behandlung eines fini-

ten Cosserat-Modell hin und formulieren in Kapitel 5 einen Newton-Kantorovich-Satz auf Mannigfaltigkeiten, der für die Minimierung auf Lie-Gruppen eingesetzt wird. Der notwendige Kalkül für die Implementierung und eine Beschreibung der verwendeten Methoden stellen wir in Kapitel 6 bereit und präsentieren anschließend in Kapitel 7 numerische Ergebnisse.

1 Nichtlineare Cosserat-Modelle

Prinzipiell sind bei der Beschreibung kontinuumsmechanischer Modelle zwei Größen wichtig, diese sind das Verschiebungs- und Spannungsfeld. In vielen Fällen ist es möglich, mathematische Formulierungen für den Gleichgewichtszustand eines Körpers unter Last durch eine der beiden Größen zu beschreiben. Werden dabei nur die Verschiebungen verwendet, so sprechen wir von der primalen, andernfalls von der dualen Formulierung. Für die Darstellung der den Zustand bestimmenden Gleichungen oder Prinzipien sind mehrere Ansätze möglich. Für die numerische Behandlung ist dabei die Beschreibung durch

- eine variationelle Ungleichung (oder auch Gleichung),
- ein zu minimierendes Funktional,

am bedeutendsten.

Ausgangspunkt der vorliegenden Arbeit ist eine mikropolare Erweiterung der klassischen Kontinuumsmechanik. Da wir insbesondere auch eine Beschreibung von plastischem Materialverhalten im Cosserat-Modell durchführen werden, wiederholen wir im nächsten Abschnitt das Modell der perfekten Plastizität. Wir fokussieren unsere Betrachtungen auf quasi-statische Plastizität, d. h. wir vernachlässigen in unserer Darstellung Trägheitskräfte und formulieren die Modelle ohne dynamische Größen.

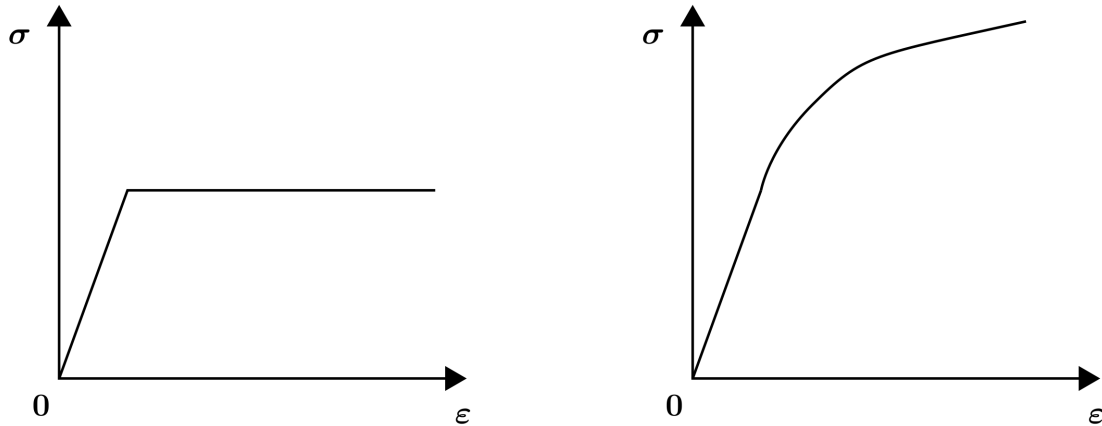


Abbildung 1.1: Veranschaulichung von plastischem Materialverhalten im Spannungs-Dehnungs-Diagramm, links: perfekt plastisch, rechts: mit Verfestigung.

1.1 Das Modellproblem der perfekten Plastizität

Ein physikalisches Experiment – (ir)reversible Belastung einer Feder. Für kleine Auslenkungen wird die Expansion einer Feder unter Last durch das Hooke'sche Gesetz beschrieben. Dieses Verhalten lässt sich leicht in einem physikalischen Experiment verdeutlichen. Betrachten wir eine fest aufgehängte Feder in der Ruhelage. Wenn wir nun am unteren Ende ein Massestück mit dem Gewicht m anhängen, können wir eine Auslenkung um Δu aus der Ruhelage feststellen. Befestigen wir ein weiteres Gewicht m wird die Auslenkung auf $2\Delta u$ verdoppelt. Die Auslenkung ist also proportional zur angelegten Kraft bzw. angehängten Masse. Es handelt sich um ein lineares Materialgesetz. Des Weiteren verhält sich die Feder für kleine bzw. wenige Gewichte elastisch, denn die Expansion der Feder ist reversibel, d. h. nach dem Entfernen der beiden angehängten Massestücke wird die Feder wieder in die Ruhelage zurückkehren.

Wenn wir nun andererseits sehr viele Massestücke an die Feder anhängen, wird die Proportionalität zwischen Masse und Auslenkung nicht mehr gelten. Das Material verhält sich nichtlinear. Diese Nichtlinearität könnte sich z. B. darin äußern, dass der Zusammenhang zwischen Auslenkung und Masse nicht mehr linear ist, aber immer noch reversibel. Noch spannender allerdings ist die Beobachtung, dass wir nach einer Überbelastung der Feder mit sehr vielen Massestücken, die Feder nach dem Entfernen derselbigen nicht wieder in die ursprüngliche Ruhelage zurückkehrt. Das Material der Feder wurde irreversibel verändert, ein Teil der Energie könnte z. B. in eine Umbildung der inneren Struktur geflossen sein. Die Feder wurde durch die Deformation irreversibel verändert. Diese Beobachtung ist ein Beispiel für Plastizität.

Das Auftreten einer irreversiblen Materialschädigung durch Überbelastung werden wir nun mathematisch präzise beschreiben. In Abbildung 1.1 sind zwei Spannungs-Dehnungs-Diagramme elasto-plastischer Deformation aufgeführt. Im perfekt-plastischen Modell verhält sich das Material zunächst gemäß dem Hookeschen Gesetz, und reißt sofort ab, wenn eine gewisse Spannung überschritten wird. Ab da ist eine kräftefreie Dehnung

der Feder möglich. Es ist aber auch vorstellbar, dass die Feder (je nach verwendetem Material) ab einem gewissen Punkt versteift, und weniger Auslenkung beim Erhöhen der Kraft zeigt.

Schwache Regularitätseigenschaften perfekt plastischer Lösungen. Die größte Schwierigkeit bei der Beschreibung perfekt plastischen Verhaltens (vgl. Abb. 1.1) ist die richtige Wahl des Funktionenraums für die Verschiebungen. Wohingegen für die Spannungen gezeigt werden kann, dass diese in dem Lebesgue-Raum $L_2(\Omega)$ liegen (vgl. [Joh76]), ist die Situation für die Verschiebungen bei weitem komplizierter. Die Verschiebungen der perfekten Plastizität liegen im Banachraum der beschränkten Deformationen (vgl. [Mat79]), welcher nur in einem sehr schwachen Sinn unter Verwendung von Radonmaßen definiert ist.

Es gibt viele Möglichkeiten das Modell der perfekten Plastizität zu erweitern, um höhere Regularität in der Verschiebungslösung zu erreichen [ER04]. Dazu gehört die Regularisierung durch Einführung von isotroper oder kinematischer Verfestigung (vgl. Abb. 1.1) oder Viskoplastizität – ebenso kann die Hinzunahme eines Mikrorotationsfeldes (Cosserat-Modell) Abhilfe schaffen, wie wir später noch ausführlich diskutieren werden.

Die physikalischen Grundlagen und die Modellbildung der Ingenieurwissenschaften sind z. B. in den Büchern von Simo-Hughes [SH98] und Lubliner [Lub90] dargestellt. Die Numerische Analysis und Algorithmik wird z. B. in Simo [Sim98] und Han-Reddy [HR99] behandelt. Für die Analyse der mathematischen Modelle verweisen wir z. B. auf Temam [Tem85], Duvaut-Lions [DL76], Alber [Alb98] und Ionescu-Sofonea [IS93]. Eine Übersicht der Theorie und Numerik der Prandtl-Reuß-Plastizität ist in Wieners [Wie00] dargestellt.

Bezeichnungen. Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein Gebiet mit Lipschitz-stetigem Rand $\partial\Omega$ und seien $\Gamma \subset \partial\Omega$ mit $\text{meas}_2(\Gamma) > 0$, sowie $\Gamma_N = \partial\Omega \setminus \Gamma$. Zur mathematischen Darstellung der Modelle benötigen wir verschiedene Funktionenräume, die wir hier definieren: die Räume der Verschiebungen

$$\mathbf{V} = H^1(\Omega, \mathbb{R}^3), \quad \mathbf{V}_\Gamma(\mathbf{g}) = \{\mathbf{v} \in \mathbf{V} : \mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Gamma\}, \quad \mathbf{V}_\Gamma = \mathbf{V}_\Gamma(\mathbf{0}), \quad (1.1)$$

die nach Randbedingungen unterschieden werden, sowie den Raum der Spannungen

$$\mathbf{S} = \{\boldsymbol{\tau} \in L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})\}, \quad \mathbf{S}_{\text{sym}} = \{\boldsymbol{\tau} \in \mathbf{S} : \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x})^T \text{ fast überall in } \Omega\}.$$

Sei $\mathbf{u} \in C^1(\Omega, \mathbb{R}^3)$, dann bezeichnen wir mit

$$(D\mathbf{u})_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

den Gradienten von \mathbf{u} . Für Tensoren $\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ definieren wir das Frobenius-Skalarprodukt

$$\boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\eta} = \sum_{i,j=1}^3 \tau_{ij} \eta_{ij}$$

und die Frobenius-Norm

$$|\boldsymbol{\tau}| = \sqrt{\boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\tau}} ,$$

sowie den deviatorischen Anteil

$$\text{dev}(\boldsymbol{\tau}) = \boldsymbol{\tau} - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}) \mathbf{I} .$$

Wir bezeichnen mit $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ bzw. $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{3 \times 3 \times 3 \times 3}$ den Einheitstensor zweiter bzw. vierter Stufe, z. B. $\mathbf{I} : \mathbf{I} = \mathbf{I}$. Für die Beschreibung der plastischen Verzerrungen führen wir noch die Lie-Algebra

$$\mathfrak{sl}(3) = \{M \in \mathbb{R}^{3 \times 3} : \text{tr} M = 0\}$$

ein. Des Weiteren benötigen wir häufig den Vektorraum der symmetrischen Tensoren

$$\text{Sym}(3) = \{M \in \mathbb{R}^{3 \times 3} : M^T = M\} .$$

Wir bezeichnen mit (\cdot, \cdot) das L_2 -Skalarprodukt für beliebige Tensoren bzgl. der Frobenius-Norm. Ferner definieren für $M \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ die Operatoren $\text{sym} M = \frac{1}{2}(M + M^T)$, sowie $\text{skew} M = \frac{1}{2}(M - M^T)$.

Das System partieller Differentialgleichungen für lineare isotrope Elastizität.

Die klassische Herleitung der linearen isotropen Elastizitätstheorie erfolgt aufgrund physikalischer Prinzipien. Dabei werden Bedingungen für die Verschiebungen \mathbf{u} und Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ formuliert. Wir fordern nun zusätzlich, dass die auftretenden Spannungstensoren symmetrisch sind, d. h. $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{S}_{\text{sym}}$. Für glatte Probleme erhalten wir die starke Formulierung der linearen Elastizität:

Zu gegebener Volumenkraft \mathbf{b} und Flächenkraft \mathbf{t} , finde ein Verschiebungsfeld $\mathbf{u} \in \mathbf{V}_\Gamma$ und Spannungsfeld $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{S}_{\text{sym}}$, sodass die Gleichung der Impulserhaltung

$$\text{div} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} , \quad (1.2a)$$

die kinematische Beziehung

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \text{sym} D\mathbf{u}, \quad (1.2b)$$

die konstitutive Beziehung

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} = 2\mu \boldsymbol{\varepsilon} + \lambda \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{I} , \quad (1.2c)$$

sowie die Randbedingungen

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_D(\mathbf{x}) , \quad \mathbf{x} \in \Gamma , \quad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \mathbf{t}(\mathbf{x}) , \quad \mathbf{x} \in \Gamma_N \quad (1.2d)$$

erfüllt sind. Hierbei bezeichnet $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ den äußeren Normalenvektor am Rand von Ω und \mathbf{C} den isotropen Elastizitätstensor¹ mit den Lamé-Konstanten μ und λ .

¹Der Elastizitätstensor \mathbf{C} ist ein Tensor vierter Stufe. Er ist positiv definit, falls $\mu > 0$, $2\mu + 3\lambda > 0$ (vgl. [Bra03, S.277] und [HR99, S.30]), d. h. es existiert ein $\alpha > 0$, sodass gilt: $\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \geq \alpha |\boldsymbol{\varepsilon}|^2$ für alle $\boldsymbol{\varepsilon}$ aus der Menge der symmetrischen Tensoren zweiter Stufe.

Variationelle Formulierung linearer Elastizität. Aus der im letzten Abschnitt angegebenen partiellen Differentialgleichung (1.2) können wir eine variationelle Formulierung herleiten, welche für die numerischen Behandlung äußerst nützlich ist. Eliminiert man die Verzerrung $\boldsymbol{\varepsilon}$ mit (1.2b) und die Spannung $\boldsymbol{\sigma}$ in (1.2) durch Einsetzen von (1.2c) in (1.2a), so erhält man nach Multiplikation mit einer Testfunktion $\mathbf{v} \in \mathbf{V}_\Gamma$ und dem Integralsatz von Gauß das Problem:

Finde $\mathbf{u} \in \mathbf{V}_\Gamma(\mathbf{u}_D)$, sodass

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \ell(\mathbf{v}) , \quad \text{für alle } \mathbf{v} \in \mathbf{V}_\Gamma , \quad (1.3a)$$

wobei

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \text{sym } D\mathbf{u} : \mathbf{C} : \text{sym } D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} , \quad (1.3b)$$

$$\ell(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma_N} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{a} , \quad (1.3c)$$

gilt.

Die Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ ist stetig und gleichmäßig konvex, dies folgt mithilfe der Kornschen Ungleichung.² Des Weiteren ist das Lastfunktional $\ell(\cdot)$ ebenfalls stetig. Mit dem Satz von Lax-Milgram A.5 folgt damit die Existenz einer eindeutigen Lösung der äquivalenten Minimierungsaufgabe

$$\min_{\mathbf{v} \in \mathbf{V}_\Gamma(\mathbf{u}_D)} \frac{1}{2} a(\mathbf{v}, \mathbf{v}) - \ell(\mathbf{v}) . \quad (1.4)$$

Der Ansatz der Minimierungsaufgabe (1.4) ist in der Literatur, z. B. [Bra03, Kap. VI, §3], als reiner Verschiebungsansatz bekannt, die Spannungen sind eliminiert und auch die Verzerrungen tauchen nicht mehr auf. Oftmals wird diese Formulierung auch als primale Formulierung bezeichnet, da nur die primale Variable \mathbf{u} verwendet wird, und nicht die als dual bezeichnete Variable $\boldsymbol{\sigma}$.

Eine duale Formulierung linearer Elastizität. Bleibt die duale Variable $\boldsymbol{\sigma}$ in der Problemformulierung erhalten, so wird diese gemischte Formulierung oft als duale Formulierung bezeichnet. Ein Beispiel dafür ist die gemischte Methode nach Hellinger und Reissner [Bra03, Kap. VI, §3].

Finde das Spannungsfeld $\boldsymbol{\sigma} \in \tilde{\mathbf{H}} = \{\boldsymbol{\tau} \in \mathbf{S}_{\text{sym}} : \text{div } \boldsymbol{\tau} \in L_2(\Omega, \mathbb{R}^3)\}$ und das Verschiebungsfeld $\mathbf{u} \in L_2(\Omega, \mathbb{R}^3)$, sodass die freie Energie

$$\mathcal{E}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2} (\mathbf{C}^{-1} \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}) , \quad (1.5a)$$

minimal wird unter der Gleichgewichtsbedingung

$$\text{div } \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}(\mathbf{x}) = 0 , \quad \mathbf{x} \in \Omega , \quad (1.5b)$$

² $\|\mathbf{u}\|_{\mathbf{V}}^2 \leq C(\Omega) \int_{\Omega} |\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})|^2 \, d\mathbf{x}$ für alle $\mathbf{u} \in \mathbf{V}_\Gamma$. Hierbei ist $\Gamma \subset \partial\Omega$ der homogene Dirichletrand mit $\text{meas}_2(\Gamma) > 0$, siehe [Cia88].

für eine gegebene Last \mathbf{b} , der konstitutiven Beziehung

$$\int_{\Omega} \mathbf{C}^{-1} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\tau} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \operatorname{div} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u} \, d\mathbf{x} = 0, \quad \boldsymbol{\tau} \in \{\boldsymbol{\tau} \in \tilde{\mathbf{H}} : \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in \Gamma_N\}, \quad (1.5c)$$

und Randbedingung

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \mathbf{t}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_N. \quad (1.5d)$$

Zur Vereinfachung berücksichtigt die Darstellung (1.5) nur homogene Randbedingungen für die Verschiebungen.

Aufgrund der Nebenbedingung (1.5b) handelt es sich bei (1.5) um ein Sattelpunktproblem. Eine notwendige Bedingung für die Wohldefiniertheit des Problems (1.5) ist die inf-sup-Bedingung.

Die duale Formulierung der Hencky Plastizität. Das Modell der linearen Elastizität verhindert nicht, dass auftretende Spannungen beliebig groß werden können. Dies ist aus physikalischer Sicht (vgl. Einleitung zu Abs. 1.1) ein unrealistisches Materialverhalten. Durch Einführen einer weiteren Nebenbedingung schränken wir die zulässigen Spannungszustände weiter ein.

Eine Möglichkeit, die Spannungen zu beschränken, geht auf von Mises zurück. Betrachten wir die Spannung in einem Materialpunkt \mathbf{x} und definieren mittels der konvexen Fließfunktion³ $\phi : \mathbb{R}^{3 \times 3} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$\phi(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) = |\operatorname{dev}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}))| - K_0 \quad (1.6)$$

die konvexe Menge der zulässigen Spannungen

$$K = \{\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \in \operatorname{Sym}(3) : \phi(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) \leq 0\}$$

mit dem Materialparameter $K_0 > 0$.⁴ Übertragen wir diese Einschränkung auf die Darstellung in Funktionenräume und betrachten die Menge der zulässigen Spannungen

$$\mathbf{K} = \{\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{S}_{\operatorname{sym}} : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \in K \text{ fast überall in } \Omega\},$$

sowie deren Teilmenge

$$\mathbf{K}(\ell) = \{\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{K} : (\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})) = \ell(\mathbf{v}), \mathbf{v} \in \mathbf{V}_{\Gamma}(\mathbf{u}_D)\}$$

die bereits die Gleichgewichtsbedingungen berücksichtigt. Wir nehmen an, dass die Menge $\mathbf{K}(\ell)$ nichtleer ist.

³Die Annahme ist dadurch motiviert, dass die Grenze für elastisches Materialverhalten durch die elastische Scherenergie $\frac{1}{4\mu} |\operatorname{dev}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}))|^2$ der Spannung $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ bestimmt wird.

⁴Der Materialparameter K_0 lässt sich in einem (eindimensionalen) Zugversuch experimentell bestimmen. Dabei gilt $K_0 = \sqrt{\frac{2}{3}} \sigma_0$ und berechnet sich aus der Fließspannung σ_0 , ab der plastisches Fließen eintritt.

Damit können wir das Problem der statischen Plastizität (Hencky Plastizität) formulieren:

Finde einen zulässigen Spannungszustand $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{K}(\ell)$, sodass die freie Energie

$$\mathcal{E}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2}(\mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}) \quad (1.7)$$

minimal ist.

Da die freie Energie $E(\cdot)$ eine Norm im Hilbertraum \mathbf{S}_{sym} definiert, und $\mathbf{K}(\ell)$ eine nicht-leere, konvexe und abgeschlossene Teilmenge von \mathbf{S}_{sym} ist, folgt wegen Satz A.1, dass (1.7) lösbar ist und eindeutig durch die folgende variationellen Ungleichung charakterisiert ist:

Finde $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{K}(\ell)$, sodass

$$(\mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\sigma}) \geq 0, \quad \boldsymbol{\tau} \in \mathbf{K}(\ell).$$

Die Lösung ergibt sich direkt zu $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{P}_{\mathbf{K}(\ell)}(\mathbf{0})$, wobei $\mathbf{P}_{\mathbf{K}(\ell)}$ die Orthogonalprojektion von \mathbf{S}_{sym} auf $\mathbf{K}(\ell)$ bzgl. des Energieskalarproduktes zu $E(\cdot)$ bezeichnet.

Bemerkung 1.1 *Aufgrund der besonderen Struktur kann die Orthogonalprojektion sogar lokal bestimmt werden, d. h. es genügt eine (lokale) Orthogonalprojektion \mathbf{P}_K .*

Da in dieser Formulierung keine Zeitvariable erscheint, nennen wir das sich damit ergebende Problem statisch.

Bringt man die Last ℓ nun in mehreren Schritten auf, entsteht das Problem der inkrementellen Plastizität, wobei jedes Inkrementproblem die gleiche Struktur aufweist wie das der statischen Plastizität.

Quasi-statische Plastizität in der dualen Formulierung. Für ein gegebenes Zeitintervall $I := [0, T]$ definieren wir eine in der Zeit stetige Last

$$\mathbf{b} : [0, T] \longrightarrow L_2(\Omega, \mathbb{R}^3) \quad (1.8)$$

mit $\mathbf{b}(0) = 0$. Für alle $\boldsymbol{\tau}$ aus dem Funktionenraum

$$\tilde{\mathbf{H}} = \{ \boldsymbol{\tau} \in \mathbf{S}_{\text{sym}} : \text{div } \boldsymbol{\tau} \in L_2(\Omega, \mathbb{R}^3) \}$$

betrachten wir die zeitabhängige Menge der zulässigen Spannungen, die den Gleichgewichtsbedingungen genügen

$$\tilde{\mathbf{K}}(t) = \{ \boldsymbol{\sigma} \in \tilde{\mathbf{H}} : \text{div } \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b}(t) = 0, \quad \phi(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) \leq 0 \text{ fast überall in } \Omega \}.$$

Die duale Formulierung des quasi-statischen Problems lautet: Gegeben sei $\boldsymbol{\sigma}(0) = 0$. Finde $\boldsymbol{\sigma}(t) \in \tilde{\mathbf{K}}(t)$, sodass

$$(\mathbf{C}^{-1}\dot{\boldsymbol{\sigma}}(t), \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\sigma}(t)) \geq 0, \quad \boldsymbol{\tau} \in \tilde{\mathbf{K}}(t) \quad (1.9)$$

fast überall in $[0, T]$ erfüllt ist.

Die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung der variationellen Ungleichung (1.9) kann unter geeigneten Annahmen nachgewiesen werden.

Annahme 1.2 (Safe-Load-Bedingung) *Es existiere ein $\chi(t) \in \tilde{\mathbf{K}}(t)$ für alle $t \in I$ mit $\chi(0) = 0$. Ferner besitzt $\chi(t)$ die Eigenschaften*

i) *Es existiert eine Konstante $C > 0$ mit*

$$\left| \frac{\partial^j \chi}{\partial t^j}(\mathbf{x}, t) \right| \leq C$$

für $j = 0, 1, 2$ und alle $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times I$.

ii) *Es existiert eine Konstante $\delta > 0$, sodass*

$$(1 + \delta) \chi(\mathbf{x}, t) \in \tilde{\mathbf{K}}$$

für alle $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times I$.

Unter der Annahme 1.2 erhalten wir für die eindeutige Lösung

$$\boldsymbol{\sigma} \in L_\infty([0, T], \mathbf{S}_{\text{sym}}) , \quad \dot{\boldsymbol{\sigma}} \in L_2([0, T], \mathbf{S}_{\text{sym}}) ,$$

siehe [Joh76].

Bemerkung 1.3 *Die Verschiebungen \mathbf{u} , die sich aus der dualen Lösung $\boldsymbol{\sigma}$ der perfekten Plastizität ergeben, können nur in einem sehr schwachen Sinne angegeben werden, denn es ist im Allgemeinen nur $\mathbf{u} \in BD(\Omega)$ zu erwarten. Hierbei ist*

$$BD(\Omega) = \{ \mathbf{v} \in L_1(\Omega, \mathbb{R}^3) : \text{sym}(D\mathbf{v}) \in \mathcal{M}(\Omega, \text{Sym}(3)) \} ,$$

der Banachraum der beschränkten Deformationen (versehen mit einer geeigneten Norm), wobei $\mathcal{M}(\Omega, \text{Sym}(3))$ den Raum der beschränkten Radonmaße bezeichnet [Tem85].

Primale Formulierungen. Unter einer primalen Formulierung in der Festkörpermechanik verstehen wir eine Beschreibung, die ausschließlich mit der kinematischen Größe des Verzerrungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}$ auskommt, indem die Spannungen aus den Gleichungen eliminiert werden. Während für rein elastisches Materialverhalten eine wohl-gestellte Beschreibung auf einfache Weise möglich ist, verhält es sich für das Modell der perfekten Plastizität anders. Die Angabe des primalen Problems in einer wohldefinierten Weise ist äußerst technisch und geht über das Ziel dieser Arbeit hinaus (vgl. Bemerkung 1.3). Unter Hinzunahme isotroper Verfestigung verliert sich diese Schwierigkeit.

Beginnen wir mit der Einführung der elastischen bzw. plastischen Verzerrung $\boldsymbol{\varepsilon}_e(\mathbf{x}) \in \text{Sym}(3)$ bzw. $\boldsymbol{\varepsilon}_p(\mathbf{x}) \in \mathfrak{sl}(3) \cap \text{Sym}(3)$ durch eine additive Aufteilung des Verzerrungstensors

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_p .$$

Zwischen Spannung $\boldsymbol{\sigma}$ und elastischer Verzerrung gilt dabei der lineare Zusammenhang

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_e .$$

Die isotrope Verfestigung des Materials wird nun durch eine interne Variable, die akkumulierte plastische Verzerrung

$$\alpha(t) = \int_0^t \sqrt{\frac{2}{3}} |\dot{\epsilon}_p(s)| ds ,$$

und die Fließregel

$$\phi(\boldsymbol{\sigma}, \alpha) = \text{dev}(\boldsymbol{\sigma}) - \sqrt{\frac{2}{3}} K(\alpha)$$

mit z. B. linearer isotroper Verfestigung

$$K(\alpha) = K_0 + \bar{K}\alpha$$

modelliert. Hierbei sind K_0 und \bar{K} Materialparameter. Die Evolution von plastischer Verzerrung und interner Variable ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_p &= \gamma \frac{\text{dev}(\boldsymbol{\sigma})}{|\text{dev}(\boldsymbol{\sigma})|} , \\ \dot{\alpha} &= \gamma \sqrt{\frac{2}{3}} , \end{aligned}$$

und den Kuhn-Tucker-Bedingungen

$$\gamma \geq 0 , \quad \phi(\boldsymbol{\sigma}, \alpha) \leq 0 , \quad \gamma \phi(\boldsymbol{\sigma}, \alpha) = 0 ,$$

sowie der Konsistenzbedingung

$$\gamma \dot{\phi}(\boldsymbol{\sigma}, \alpha) = 0 .$$

1.2 Einführung in die infinitesimale Cosserat-Elastizität

Die klassische Kontinuumsmechanik betrachtet ausschließlich materielle Kontinua, welche sich aus materiellen Punkten zusammensetzen, die jeweils drei Verschiebungsfreiheitsgrade besitzen. Das Cosserat-Modell [CC09] ist eine Erweiterung dieses Modells, welches zusätzlich drei weitere unabhängige Freiheitsgrade in jedem materiellen Punkt zulässt. Diese zusätzlichen Freiheitsgrade wechselwirken mit der Rotation der Partikel, müssen aber nicht mit den makroskopischen Rotationen übereinstimmen. Das in dieser Arbeit betrachtete Cosserat-Modell wird durch die beiden Lamé-Konstanten μ und λ des klassischen linear isotropen Elastizitätsmodell sowie zwei weiteren Konstanten μ_c und L_c beschrieben. Der Parameter μ_c wird Cosserat-Kopplungsmodul genannt und beschreibt den direkten Einfluss der makroskopischen Rotation auf die Cosserat-Rotation. L_c beschreibt in gewisser Weise eine interne charakteristische Länge des Materials, welche zur Beschreibung von Größeneffekten herangezogen werden kann [DS02]. Zum Beispiel wird im Experiment beobachtet, dass ein feinkörniges Material sich etwas steifer verhält als größere Körner ein und desselben Materials.

Im klassischen Kontinuum folgt aus dem Gleichgewicht der Drehmomente die Symmetrie des Cauchyschen Spannungstensor. Ein fundamentaler Unterschied zum erweiterten Cosserat-Modell: Die Symmetrie wird durch die Cosserat-Rotationen aufgehoben und asymmetrische Spannungen sind dadurch möglich. Das Gleichgewicht der Drehmomente muss dafür entsprechend angepasst werden. Das Cosserat-Modell lässt sich als ein Zweifeldproblem in variationeller Darstellung angeben. Dabei gibt es ein Verschiebungsfeld \mathbf{u} sowie ein Mikrorotationsfeld $\bar{\mathbf{A}}$.

Die Cosserat-Theorie kann aber auch aus der Theorie poröser Medien [Ehl02] durch einen Homogenisierungsprozess entstehen. Hierbei entstehen die nichtsymmetrischen Kopplungsspannungen durch Mittelung der Kontaktmomente einzelner Körner über einem repräsentativen Volumen [ERDD03, ESD05, FDC99].

Wir wollen auch erwähnen, dass für Cosserat-Modelle immer noch Unklarheit über die Wahl der Randbedingungen für die Mikrorotationen herrscht. Ebenso ist die Bestimmung der Cosserat-Parameter μ_c und L_c (als Materialparameter) unklar. Wir verwenden soweit möglich natürliche Randbedingungen für die Mikrorotationen oder kommen durch Symmetriebetrachtungen auf homogene Dirichletrandwerte. Die Konstanten betrachten wir im elasto-plastischen Themenbereich dieser Arbeit in erster Linie als Regularisierungsparameter für die numerische Realisierung von klassischer perfekter Plastizität.

Die ersten Arbeiten, in denen infinitesimale Cosserat-Modelle um Elasto-Plastizität erweitert werden, sind z. B. [Saw67, Lip69, Bes74] und aus jüngerer Zeit z. B. [dB92, DSW93, IW98, RV96]. In den dort beschriebenen Modellen sind die plastischen Effekte mit den Cosserat-Rotationen direkt gekoppelt. In [FCS97] werden die Cosserat-Effekte hingegen nur für die elastische Antwortfunktion eingesetzt. Die hier beschriebenen Modelle lassen sich aus geometrisch exakten Modellen in [Nef03, Nef06] ableiten. Das infinitesimale Modell wurde bereits in [NC05, NC07] untersucht. Die Sichtweise der durch Cosserat-Effekte regularisierten Elasto-Plastizität wird z.B in [IW98, DSW93, RV96,

dB91, dBS91, dB92] untersucht.

Bezeichnungen. Die Cosserat-Mikrorotationen \bar{A} sind Elemente der Lie-Algebra

$$\mathfrak{so}(3) = \{M \in \mathbb{R}^{3 \times 3} : M^T + M = 0\} .$$

Jedem Element $M \in \mathfrak{so}(3)$ kann auf eindeutige Weise ein Vektor $m \in \mathbb{R}^3$ zugeordnet werden, sodass $Mv = m \times v$ für alle $v \in \mathbb{R}^3$ gilt. Diese Abbildung nennen wir

$$\text{axl} : \mathfrak{so}(3) \longrightarrow \mathbb{R}^3$$

und die Umkehrabbildung

$$\text{anti} : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathfrak{so}(3) .$$

Um die Darstellung übersichtlich zu halten, definieren wir die Funktionenräume (vgl. (1.1))

$$\begin{aligned} W &= H^1(\Omega, \mathfrak{so}(3)) , & W_\Gamma &= \{\bar{B} \in W : \bar{B}(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in \Gamma\} , \\ \mathbf{X}^C &= \mathbf{V} \times W , & \mathbf{X}_\Gamma^C &= \mathbf{V}_\Gamma \times W_\Gamma \end{aligned}$$

und die Norm $\|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2 = \|\mathbf{u}\|_{\mathbf{V}}^2 + \|\bar{A}\|_W^2$. Ferner bezeichne $\langle \cdot, \cdot \rangle_{(\mathbf{X}^C)' \times \mathbf{X}^C}$ die duale Paarung. Sei $\bar{A} \in C^1(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})$, dann bezeichnen wir mit

$$(D\bar{A})_{ikj} = \frac{\partial \bar{A}_{ij}}{\partial x_k}$$

den Gradienten von \bar{A} . Für $M, N \in \mathbb{R}^{3 \times 3 \times 3}$ definieren wir das Skalarprodukt

$$M : N = \sum_{1 \leq i, j, k \leq 3} M_{ijk} N_{ijk} .$$

Des Weiteren definieren wir die Divergenz und Rotation eines Vektorfeldes \mathbf{v}

$$\text{div}(\mathbf{v}) = \text{tr}(D\mathbf{v}) , \quad \text{curl}(\mathbf{v}) = 2 \text{axl}(\text{skew}(D\mathbf{v})) . \quad (1.10)$$

Das primale Problem der Cosserat-Elastizität. Ausgangspunkt für unsere Betrachtungen der linearen isotropen Cosserat-Elastizität bildet die Bilinearform

$$a^C : \mathbf{X}^C \times \mathbf{X}^C \longrightarrow \mathbb{R}$$

mit

$$\begin{aligned} a^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{v}, \bar{B})) &:= \int_{\Omega} \left(2\mu \text{sym } D\mathbf{u} : \text{sym } D\mathbf{v} + \lambda \text{tr } D\mathbf{u} \cdot \text{tr } D\mathbf{v} \right. \\ &\quad \left. + 2\mu_c (\text{skew } D\mathbf{u} - \bar{A}) : (\text{skew } D\mathbf{v} - \bar{B}) \right. \\ &\quad \left. + 2\mu L_c^2 D\bar{A} : D\bar{B} \right) d\mathbf{x} . \end{aligned} \quad (1.11)$$

Die Bilinearform a^C ist stetig auf $\mathbf{X}^C \times \mathbf{X}^C$.

Lemma 1.4 Die Einschränkung von $a^C(\cdot, \cdot)$ auf $\mathbf{X}_\Gamma^C \times \mathbf{X}_\Gamma^C$ ist für $\mu, L_c > 0$ elliptisch, d. h. es existiert eine Konstante $c > 0$ mit

$$a^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{u}, \bar{A})) \geq c \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2, \quad (\mathbf{u}, \bar{A}) \in \mathbf{X}_\Gamma^C.$$

c ist nur abhängig vom Gebiet Ω und dem internen Längenparameter L_c .

Beweis. Wir erhalten mithilfe der zweiten Korn'schen Ungleichung und der Ungleichung von Poincaré-Friedrichs für alle $(\mathbf{u}, \bar{A}) \in \mathbf{X}_\Gamma^C$ die Abschätzung

$$\begin{aligned} a^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{u}, \bar{A})) &\geq 2\mu \int_{\Omega} \text{sym}(D\mathbf{u}) : \text{sym}(D\mathbf{u}) \, d\mathbf{x} + 2\mu L_c^2 \int_{\Omega} |D\bar{A}|^2 \, d\mathbf{x} \\ &\geq 2\mu c_1(\Omega) \|\mathbf{u}\|_{\mathbf{V}}^2 + 2\mu L_c^2 c_2(\Omega) \|\bar{A}\|_W^2 \\ &\geq 2\mu \min\{c_1(\Omega), L_c^2 c_2(\Omega)\} \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2. \end{aligned}$$

□

Damit können wir das primale Problem der Cosserat-Elastizität formulieren:

Finde $(\mathbf{u}, \bar{A}) \in \mathbf{X}_\Gamma^C(\mathbf{u}_D)$, sodass

$$a^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{v}, \bar{B})) = \ell(\mathbf{v}, \bar{B}), \quad (\mathbf{v}, \bar{B}) \in \mathbf{X}_\Gamma^C, \quad (1.12a)$$

für eine gegebene Last $\ell \in (\mathbf{X}_\Gamma^C)'$. Wir beschränken unsere Darstellung auf die speziellen Lasten

$$\ell(\mathbf{v}, \bar{B}) = \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \bar{V} \cdot \bar{B} \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma_N} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{a}. \quad (1.12b)$$

Für den Fall $\bar{V} = 0$, schreiben wir kurz $\ell(\mathbf{v}) := \ell(\mathbf{v}, \bar{B})$.

Nach dem Satz von Lax-Milgram (Satz A.5) ist die Existenz und Eindeutigkeit des primalen Problems der linearen isotropen Cosserat-Elastizität gesichert und das Problem ist wohldefiniert.

Vernachlässigen wir in der Bilinearform $a^C(\cdot, \cdot)$ den Term mit dem symmetrischen Anteil des Deformationsgradienten, so ist die veränderte Bilinearform unter gewissen Voraussetzungen immer noch elliptisch. Diese Tatsache werden wir im weiteren Verlauf bei der Diskussion des plastischen Modells verwenden. Daher formulieren wir jetzt schon für

$$a_{\text{red}}^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{v}, \bar{B})) := a^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{v}, \bar{B})) - 2\mu \int_{\Omega} \text{sym} D\mathbf{u} : \text{sym} D\mathbf{v} \, d\mathbf{x}$$

das nächste Lemma.

Lemma 1.5 Seien $\Gamma = \partial\Omega$ und $\lambda, L_c > 0$ und $\mu_c > 0$. Die Bilinearform

$$\begin{aligned} a_{\text{red}}^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{v}, \bar{B})) &= \int_{\Omega} \left(\lambda \text{tr} D\mathbf{u} \cdot \text{tr} D\mathbf{v} + 2\mu_c (\text{skew} D\mathbf{u} - \bar{A}) : (\text{skew} D\mathbf{v} - \bar{B}) \right. \\ &\quad \left. + 2\mu L_c^2 D\bar{A} : D\bar{B} \right) d\mathbf{x} \end{aligned}$$

ist $\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C$ -elliptisch. Insbesondere gilt für hinreichend kleines $\mu_c \in (0, \mu)$

$$a_{\text{red}}^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{u}, \bar{A})) \geq c \mu_c \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2, \quad (\mathbf{u}, \bar{A}) \in \mathbf{X}_{\partial\Omega}^C,$$

wobei c unabhängig von μ_c ist.

Beweis. Wir beginnen mit der Darstellung

$$a_{\text{red}}^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{u}, \bar{A})) = \lambda \|\operatorname{div}(\mathbf{u})\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R})}^2 + 2\mu_c \|\operatorname{skew}(D\mathbf{u}) - \bar{A}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 + 2\mu L_c^2 \|D\bar{A}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3 \times 3})}^2 .$$

Nun wenden wir die elementare Ungleichung

$$|M - N|^2 \geq (1 - \alpha)|M|^2 + (1 - \frac{1}{\alpha})|N|^2$$

für alle $M, N \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ und $\alpha \in \mathbb{R}^+$ auf den Term $|\operatorname{skew}(D\mathbf{u}) - \bar{A}|^2$ an. Ferner verwenden wir die Poincaré-Friedrichs Ungleichung

$$\|D\bar{A}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3 \times 3})} \geq c \|\bar{A}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})} , \quad \bar{A} \in W_\Gamma ,$$

für eine Konstante $c > 0$, die nur abhängig vom Gebiet Ω ist. Damit erhalten wir eine Abschätzung für $a_{\text{red}}^C(\cdot, \cdot)$, die keine gemischten Terme mehr enthält. Wir setzen $\hat{\mu} = \min\{\mu, \mu_c\}$ und erhalten

$$\begin{aligned} & a_{\text{red}}^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{u}, \bar{A})) \\ & \geq \lambda \|\operatorname{div}(\mathbf{u})\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R})}^2 + 2\mu L_c^2 \|D\bar{A}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3 \times 3})}^2 + 2\hat{\mu} (1 - \alpha) \|\operatorname{skew}(D\mathbf{u})\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 \\ & \quad + 2\hat{\mu} (1 - \frac{1}{\alpha}) \|\bar{A}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 \\ & \geq \lambda \|\operatorname{div}(\mathbf{u})\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R})}^2 + \mu L_c^2 \|D\bar{A}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3 \times 3})}^2 + 2\hat{\mu} (1 - \alpha) \|\operatorname{skew}(D\mathbf{u})\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 \\ & \quad + (2\hat{\mu} (1 - \frac{1}{\alpha}) + c\mu L_c^2) \|\bar{A}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 \\ & \geq \lambda \|\operatorname{div}(\mathbf{u})\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R})}^2 + 2\hat{\mu} (1 - \alpha) \|\operatorname{skew}(D\mathbf{u})\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 + \hat{\mu} L_c^2 \|D\bar{A}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3 \times 3})}^2 \\ & \quad + 2\frac{\hat{\mu}}{\alpha} \left(\alpha(1 + \frac{cL_c^2}{2}) - 1 \right) \|\bar{A}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 . \end{aligned}$$

Wir wählen nun $\alpha \in (0, 1)$ so, dass der Koeffizient vor $\|\bar{A}\|^2$ im letzten Term der letzten Abschätzung verschwindet, und die restlichen Summanden positives Vorzeichen besitzen. Das erreichen wir durch die Wahl

$$\alpha = \frac{1}{1 + \frac{cL_c^2}{2}} .$$

Ferner gilt die Abschätzung (siehe [GR86, Chapter I, Paragraph 2])

$$\|D\mathbf{u}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 \leq C (\|\operatorname{div} \mathbf{u}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R})}^2 + \|\operatorname{curl} \mathbf{u}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^3)}^2) , \quad \mathbf{u} \in \mathbf{V}_{\partial\Omega} ,$$

die wir hier unter Verwendung von (vgl. (1.10))

$$\|\operatorname{curl} \mathbf{u}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^3)}^2 = 2 \|\operatorname{skew}(D\mathbf{u})\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2$$

in der Form

$$\frac{1}{C} \|D\mathbf{u}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 \leq \| \operatorname{div} \mathbf{u} \|_{L_2(\Omega, \mathbb{R})}^2 + 2 \| \operatorname{skew}(D\mathbf{u}) \|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2, \quad \mathbf{u} \in \mathbf{V}_{\partial\Omega},$$

für den letzten Schritt im Beweis des Lemmas einsetzen, und erhalten mit den Konstanten $c_1(\Omega)$ bzw. $c_2(\Omega)$ für die Poincaré-Friedrichs Ungleichung von \mathbf{u} bzw. \bar{A}

$$\begin{aligned} a_{\text{red}}^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{u}, \bar{A})) &\geq \frac{\min\{\lambda, \hat{\mu}(1-\alpha)\}}{C} \|D\mathbf{u}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 + \hat{\mu}L_c^2 \|D\bar{A}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3 \times 3})}^2 \\ &\geq \min\{c_1(\Omega), c_2(\Omega)\} \min\left\{\frac{\lambda}{C}, \frac{\hat{\mu}(1-\alpha)}{C}, \hat{\mu}L_c^2\right\} \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2. \end{aligned}$$

Für hinreichend kleines μ_c haben wir dann direkt

$$a_{\text{red}}^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{u}, \bar{A})) \geq \mu_c \min\{c_1(\Omega), c_2(\Omega)\} \min\left\{\frac{1-\alpha}{C}, L_c^2\right\} \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2$$

und die zusätzliche Aussage des Lemmas folgt. \square

Die klassische Darstellung des elastischen Cosserat-Modells. Ein anderer Zugang kann unter der Annahme hinreichender Glattheit der Lösung formuliert werden. Wir entwickeln das lineare Cosserat-Modell aus physikalischen Prinzipien heraus und erhalten damit eine (starke) Formulierung als System partieller Differentialgleichungen. Die lineare Verzerrungs-Spannungs-Beziehung ist dabei durch die konstitutive Gleichung

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu \boldsymbol{\varepsilon} + \lambda \operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{I} + 2\mu_c (\operatorname{skew} D\mathbf{u} - \bar{A}) \quad (1.13a)$$

gegeben. Die auftretenden Größen sind der asymmetrische Spannungstensor $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, der linearisierte Greensche Verzerrungstensor $\boldsymbol{\varepsilon} = \operatorname{sym} D\mathbf{u}$ sowie die Makrorotationen $\operatorname{skew} D\mathbf{u}$ und die infinitesimalen Cosserat-Rotationen (oder auch infinitesimale Mikrorotationen) $\bar{A} \in \mathfrak{so}(3)$.

Aus dem Prinzip der Impulserhaltung

$$\operatorname{div} \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad (1.13b)$$

der Gleichgewichtsbedingung (vgl. (1.12b) mit $\bar{V} = 0$)

$$\operatorname{div} \mathbf{m} + 4\mu_c \operatorname{axl}(\operatorname{skew} D\mathbf{u} - \bar{A}) = \mathbf{0}, \quad (1.13c)$$

des Drehmomententensors

$$\mathbf{m} = \mu L_c^2 D \operatorname{axl} \bar{A} \quad (1.13d)$$

sowie den Randbedingungen

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_D(\mathbf{x}), \quad \bar{A}(\mathbf{x}) = \bar{A}_D(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \quad (1.13e)$$

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x})\mathbf{n}(\mathbf{x}) = \mathbf{t}(\mathbf{x}), \quad D\bar{A}(\mathbf{x})\mathbf{n}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_N, \quad (1.13f)$$

erhalten wir dann eine (für glatte Felder) äquivalente Darstellung zur variationellen Formulierung. Denn nach Eliminierung von $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ erhalten wir aus Gleichung (1.13b) durch Testen mit $\mathbf{v} \in \mathbf{V}_\Gamma$

$$\int_{\Omega} \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \, d\mathbf{x} + 2\mu_c \int_{\Omega} (\text{skew } D\mathbf{u} - \bar{A}) : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma_N} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} \, da .$$

Nun schreiben wir die Gleichung (1.13c) mithilfe der Abbildung $\text{axl} : \mathfrak{so}(3) \longrightarrow \mathbb{R}^3$ um und gelangen mit $\bar{\alpha} = \text{axl } \bar{A}$ und der Testfunktion $\bar{\beta} = \text{axl } \bar{B}$, $\bar{B} \in W_\Gamma$ zu

$$\mu L_c^2 \int_{\Omega} \text{div } D\bar{\alpha} \cdot \bar{\beta} \, d\mathbf{x} + \mu_c \int_{\Omega} (\text{axl}(\text{skew } D\mathbf{u}) - \bar{\alpha}) \cdot \bar{\beta} \, d\mathbf{x} = 0$$

und (mit $2 \text{axl}(\bar{A}) \cdot \text{axl}(\bar{B}) = \bar{A} : \bar{B}$) schließlich zu

$$\mu L_c^2 \int_{\Omega} D\bar{A} : D\bar{B} \, d\mathbf{x} = \mu_c \int_{\Omega} (\text{skew } D\mathbf{u} - \bar{A}) : \bar{B} \, d\mathbf{x} .$$

Bemerkung 1.6 *Bezeichne*

$$\hat{K}\mathbf{u} = -2\mu \text{div sym } D\mathbf{u} - \lambda \text{grad div } \mathbf{u}$$

den Differentialoperator der klassischen elliptischen Laméschen Differentialgleichung der linearen isotropen Elastizitätstheorie. Somit können wir dem Cosserat-Modell den Differentialoperator

$$K^C = \begin{bmatrix} \hat{K} & -2\mu_c \text{curl} \\ -2\mu_c \text{curl} & -4\mu L_c^2 \Delta + 2\mu_c \mathbf{I} \end{bmatrix}$$

zuordnen. Durch die stetige Bilinearform $a^C(\cdot, \cdot)$ definieren wir den Differentialoperator $K^C \in L(\mathbf{X}^C, (\mathbf{X}^C)')$

$$\langle K^C(\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{v}, \bar{B}) \rangle_{(\mathbf{X}^C)' \times \mathbf{X}^C} = a^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{v}, \bar{B})) , \quad (\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{v}, \bar{B}) \in \mathbf{X}^C \times \mathbf{X}^C .$$

Darstellung als Minimierungsaufgabe. Nun zerlegen wir die verallgemeinerte Spannung im Cosserat-Modell in einen symmetrischen und schiefsymmetrischen Anteil, dazu führen wir die Bezeichnung

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\sigma}} &= \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\alpha} , \\ \boldsymbol{\sigma} &= \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} , \\ \boldsymbol{\alpha} &= \text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}} , \end{aligned}$$

ein und können direkt die Bilinearform der dualen Formulierung für das Cosserat-Modell angeben. Wir haben

$$d((\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{m}), (\hat{\boldsymbol{\tau}}, \mathbf{n})) = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\tau} + \frac{1}{2\mu_c} \text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \text{skew } \hat{\boldsymbol{\tau}} + \frac{1}{2\mu L_c^2} \mathbf{m} : \mathbf{n} \, d\mathbf{x} , \quad (1.14)$$

1 Nichtlineare Cosserat-Modelle

wobei wir für $\hat{\boldsymbol{\tau}}$ die gleiche Zerlegung wählen wie für $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$. Damit können wir das duale Problem der Cosserat-Elastizität als Minimierungsproblem formulieren:
Finde den Spannungszustand $(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{m}) \in \mathbf{S}_{\text{sym}} \times L_2(\Omega, \mathfrak{so}(3)) \times L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3 \times 3})$, sodass die freie duale Energie

$$\mathcal{D}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{m}) = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{4\mu_c} |\boldsymbol{\alpha}|^2 + \frac{1}{4\mu L_c^2} |\mathbf{m}|^2 \, d\mathbf{x} \quad (1.15)$$

minimal wird unter den Gleichgewichtsbedingungen

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})) &= \ell(\mathbf{v}), \quad \mathbf{v} \in \mathbf{V}_{\Gamma}, \\ \int_{\Omega} \mathbf{m} : D\bar{B} \, d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \bar{B} \, d\mathbf{x}, \quad \bar{B} \in W_{\Gamma} \end{aligned}$$

für eine gegebene Last $\ell \in \mathbf{V}'_{\Gamma}$

$$\ell(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma_N} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x}. \quad (1.16)$$

1.3 Ein elasto-plastisches Cosserat-Modell

Bezeichnungen. Wir definieren den Raum der plastischen Verzerrungen

$$\mathbf{E}^p = \{ \boldsymbol{\eta} \in \mathbf{S}_{\text{sym}} : \text{tr } \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}) = 0 \text{ fast überall in } \Omega \} .$$

Im Folgenden benötigen wir einige Begriffe der konvexen Analysis [ET76], welche wir nun kurz angeben.

Definition 1.7 Seien $K \subset \mathbb{R}^{n \times n}$ konvex und $f : K \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ eine konvexe Funktion. Dann bezeichnen wir mit

$$\partial f(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) := \left\{ \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^{n \times n} \mid f(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) < \infty, \quad \boldsymbol{\eta} : (\boldsymbol{\tau} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) + f(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) \leq f(\boldsymbol{\tau}), \quad \boldsymbol{\tau} \in K \right\} \quad (1.17)$$

das (konvexe) Subdifferential von f . Wir nennen die Funktion

$$\chi_K(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \begin{cases} 0 & \text{für } \hat{\boldsymbol{\sigma}} \in K \\ +\infty & \text{für } \hat{\boldsymbol{\sigma}} \notin K \end{cases} \quad (1.18)$$

die Indikatorfunktion von K .

Satz 1.8 Wir betrachten die Funktion

$$\begin{aligned} \phi : \mathbb{R}^{3 \times 3} &\longrightarrow \mathbb{R}, \\ \hat{\boldsymbol{\sigma}} &\longmapsto |\text{dev}(\hat{\boldsymbol{\sigma}})| - K_0, \end{aligned}$$

und die Menge $K = \{ \hat{\boldsymbol{\sigma}} \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \mid \phi(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) \leq 0 \}$. Die Indikatorfunktion von K besitzt das Subdifferential

$$\partial \chi_K(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \begin{cases} \left\{ \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \mid \boldsymbol{\eta} : (\boldsymbol{\tau} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \leq 0, \quad \boldsymbol{\tau} \in K \right\} & \text{für } \hat{\boldsymbol{\sigma}} \in K \\ \emptyset & \text{für } \hat{\boldsymbol{\sigma}} \notin K \end{cases} .$$

Insbesondere gilt für $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \in K \cap \text{Sym}(3)$:

$$\boldsymbol{\eta} \in \partial \chi_K(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) \implies \boldsymbol{\eta} \in \mathfrak{sl}(3) \cap \text{Sym}(3) .$$

Beweis. Das Subdifferential $\partial \chi_K(\hat{\boldsymbol{\sigma}})$ ist einfach nachzurechnen. Zum Beweis der zweiten Aussage nehmen wir an, $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \in K \cap \text{Sym}(3)$ und $\boldsymbol{\eta} \in \partial \chi_K(\hat{\boldsymbol{\sigma}})$. Dann folgt wegen $\boldsymbol{\tau} \in K \implies \boldsymbol{\tau}^T \in K$ auch $\boldsymbol{\eta}^T \in \partial \chi_K(\hat{\boldsymbol{\sigma}})$.

Nehmen wir nun an, es gelte $\boldsymbol{\eta}^T = -\boldsymbol{\eta}$, dann erhalten wir die beiden Ungleichungen

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\eta} : (\boldsymbol{\tau} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) &\leq 0, & \boldsymbol{\tau} \in K, \\ -\boldsymbol{\eta} : (\boldsymbol{\tau} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) &\leq 0, & \boldsymbol{\tau} \in K. \end{aligned}$$

Daraus folgt aber $\boldsymbol{\eta} : \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\eta} : \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ für alle $\boldsymbol{\tau} \in K$, also $\boldsymbol{\eta} = 0$.

Andererseits ist $t \mathbf{I} \in K$ und wir erhalten wegen $\boldsymbol{\eta} \in \partial \chi_K(\hat{\boldsymbol{\sigma}})$

$$t \text{tr}(\boldsymbol{\eta}) \leq \boldsymbol{\eta} : \boldsymbol{\sigma}, \quad t \in \mathbb{R} .$$

Aus der Betrachtung $t \rightarrow \infty$ folgt: $\text{tr } \boldsymbol{\eta} = 0$. □

Die primale Fließregel. Andererseits können wir plastisches Materialverhalten auch einführen, indem wir das System (1.13) durch die plastische Fließregel

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p \in \mathfrak{sl}(3) \cap \text{Sym}(3) \quad (1.19a)$$

$$K_0 |\boldsymbol{\eta}| \geq K_0 |\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p| + \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\eta} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p), \quad \boldsymbol{\eta} \in \mathfrak{sl}(3) \cap \text{Sym}(3) \quad (1.19b)$$

und die additive Aufspaltung

$$\boldsymbol{\varepsilon}_p := \text{sym}(D\mathbf{u}) - \text{sym} \boldsymbol{\varepsilon}_e =: \text{sym}(D\mathbf{u}) - \mathbf{C}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \quad (1.19c)$$

erweitern.⁵

Lemma 1.9 *Ist die Ungleichung (1.19b) erfüllt, so folgt $\boldsymbol{\sigma} \in K$.*

Beweis. O.B.d.A sei $\text{dev}(\boldsymbol{\sigma}) \neq 0$. Für die Wahl $\boldsymbol{\eta} = t \text{dev}(\boldsymbol{\sigma})$ in (1.19b) erhalten wir für den Grenzübergang $t \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} & K_0 |t \text{dev}(\boldsymbol{\sigma})| \geq K_0 |\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p| + \boldsymbol{\sigma} : (t \text{dev}(\boldsymbol{\sigma}) - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p) \\ \iff & K_0 |t| |\text{dev}(\boldsymbol{\sigma})| \geq K_0 |\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p| + t |\text{dev}(\boldsymbol{\sigma})|^2 + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p \\ \iff & K_0 |\text{dev}(\boldsymbol{\sigma})| \geq |\text{dev}(\boldsymbol{\sigma})|^2 \end{aligned}$$

und es folgt die Aussage. □

Lemma 1.10 *Sei $\boldsymbol{\sigma} \in K$ und*

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p \in \partial \chi_{\mathbf{K}}(\text{sym} \hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \{ \boldsymbol{\eta} \in \mathfrak{sl}(3) \cap \text{Sym}(3) \mid \boldsymbol{\eta} : (\boldsymbol{\tau} - \text{sym} \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \leq 0 \text{ für alle } \boldsymbol{\tau} \in \mathbf{K} \}. \quad (1.20)$$

erfüllt, dann gilt Ungleichung (1.19b).

Beweis. Aus der Identität $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p = \gamma D\phi(\boldsymbol{\sigma})$ folgt sofort $\gamma = |\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p|$. Für $\boldsymbol{\sigma} \in \text{int} K$ erhalten wir direkt $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p = 0$ und weiter auch die Identität $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p : \boldsymbol{\sigma} = K_0 |\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p|$. Für $\boldsymbol{\sigma} \in \partial K$ erhalten wir mittels

$$D\phi(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\text{dev} \boldsymbol{\sigma}}{|\text{dev} \boldsymbol{\sigma}|}$$

⁵ Wir können die Gleichung (1.19c) auch noch in einer anderen Form darstellen. Dazu betrachten wir

$$\boldsymbol{\sigma} = \text{dev}(\boldsymbol{\sigma}) + \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{I} = 2\mu \text{dev}(\text{sym} \boldsymbol{\varepsilon}_e) + \kappa \text{tr}(\text{sym} \boldsymbol{\varepsilon}_e) \mathbf{I} = \mathbf{C} \text{sym} \boldsymbol{\varepsilon}_e$$

mit $\kappa = \frac{3\lambda+2\mu}{3}$ und invertieren den Elastizitätstensor $\mathbf{C} = 2\mu \mathbf{I} + \lambda \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}$ explizit. Wir erhalten

$$\mathbf{C}^{-1} \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2\mu} \text{dev}(\boldsymbol{\sigma}) + \frac{1}{9\kappa} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{I} .$$

die Gleichung

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p : \boldsymbol{\sigma} = \gamma \frac{\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}}{|\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}|} : \boldsymbol{\sigma} = |\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p| |\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}| = K_0 |\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p| .$$

Damit gilt für $\boldsymbol{\eta} \in \mathfrak{sl}(3) \cap \operatorname{Sym}(3)$ und $\boldsymbol{\sigma} \in K$:

$$K_0 |\boldsymbol{\eta}| \geq |\operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma}| |\boldsymbol{\eta}| \geq \operatorname{dev} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\eta} + K_0 |\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p| - \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p .$$

□

Definieren wir das Dissipationsfunktional $D : \mathfrak{sl}(3) \cap \operatorname{Sym}(3) \longrightarrow \mathbb{R}$ mit $D(\boldsymbol{\eta}) = K_0 |\boldsymbol{\eta}|$, so erhalten wir für (1.19b) die äquivalente Formulierung

$$D(\boldsymbol{\eta}) \geq D(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p) + \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\eta} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p) \iff \boldsymbol{\sigma} \in \partial D(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p) .$$

Das System der partiellen Differentialgleichungen für das plastische Cosserat-Modell. Zur besseren Übersicht geben wir noch einmal alle bestimmenden Gleichungen für das plastische Cosserat-Modell an. Wir wählen auf dem ganzen Rand von Ω homogene Dirichletrandwerte

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} , \quad \bar{A}(\mathbf{x}) = 0 , \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega , \quad (1.21a)$$

die Anfangsbedingungen

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{0} , \quad \bar{A}(\mathbf{x}, 0) = 0 , \quad \boldsymbol{\varepsilon}_p(\mathbf{x}, 0) = 0 , \quad \mathbf{x} \in \Omega , \quad (1.21b)$$

die Gleichgewichtsbedingungen

$$\operatorname{div} \hat{\boldsymbol{\sigma}}(t) + \mathbf{b}(t) = \mathbf{0} , \quad (1.21c)$$

$$-\mu L_c^2 \Delta \operatorname{axl}(\bar{A}(t)) = \mu_c \operatorname{axl}(\operatorname{skew} D\mathbf{u}(t) - \bar{A}(t)) \quad (1.21d)$$

sowie die konstitutiven Gleichungen

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\sigma}}(t) &= 2\mu(\operatorname{sym} D\mathbf{u}(t) - \boldsymbol{\varepsilon}_p(t)) + \lambda \operatorname{tr} D\mathbf{u}(t) \cdot \mathbf{I} + 2\mu_c(\operatorname{skew} D\mathbf{u}(t) - \bar{A}(t)) , \\ \mathbf{T}_E(t) &= 2\mu(\operatorname{sym} D\mathbf{u}(t) - \boldsymbol{\varepsilon}_p(t)) \end{aligned} \quad (1.21e)$$

und die (punktweise) Fließregel

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p(t) \in \partial\chi_{\mathbf{K}}(\mathbf{T}_E(t)) \text{ fast überall} . \quad (1.21f)$$

Bemerkung 1.11 *Unter der zusätzlichen Annahme, dass die Funktion ϕ auf der Fließfläche ∂K differenzierbar ist, können wir die Fließregel (1.21f) ohne Subdifferential schreiben. Wir erhalten stattdessen die punktweise Fließregel als KKT-System*

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p(t)(\mathbf{x}) = \lambda(t)(\mathbf{x}) \cdot D\phi(\mathbf{T}_E(t)(\mathbf{x})) \quad (1.22a)$$

$$\lambda(t)(\mathbf{x}) \geq 0 , \quad \phi(\mathbf{T}_E(t)(\mathbf{x})) \leq 0 , \quad \lambda(t)(\mathbf{x}) \cdot \phi(\mathbf{T}_E(t)(\mathbf{x})) = 0 , \quad (1.22b)$$

für fast alle $\mathbf{x} \in \Omega$.

Bemerkung 1.12 *Das System partieller Differentialgleichungen (1.21) besitzt eine globale Lösung mit der Regularität*

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &\in H^{1,\infty}((0, T), H^1(\Omega, \mathbb{R}^3)) , \\ \bar{A} &\in H^{1,\infty}((0, T), H^2(\Omega, \mathfrak{so}(3))) , \\ \boldsymbol{\varepsilon}_p &\in H^{1,\infty}((0, T), L^2(\Omega, \text{Sym}(3) \cap \mathfrak{sl}(3))) . \end{aligned}$$

Die Eindeutigkeit lässt sich nur unter weiteren Glattheitsannahmen in der Zeit folgern, vgl. [NC05, Theorem 4.6].

Bemerkung 1.13 *Eine im Vergleich zu (1.21f) allgemeinere Fließregel der Art*

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p(t) \in \partial\chi_{\mathbf{K}}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}(t))$$

mit $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu(\text{sym } D\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) + \lambda \text{tr } \text{sym } D\mathbf{u} \cdot \mathbf{I} + 2\mu_c(\text{skew } D\mathbf{u} - \bar{A})$ wäre auch möglich. Da wir in dieser Arbeit den Fokus auf die regularisierende Eigenschaft des Cosserat-Modells auf perfekte Plastizität richten und beide Modelle dieselben symmetrischen Spannungsanteile

$$\boldsymbol{\sigma} = \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}(\text{sym } D\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) = 2\mu(\text{sym } D\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) + \lambda \text{tr } \text{sym } D\mathbf{u} \cdot \mathbf{I}$$

besitzen, lassen wir den schiefsymmetrischen Anteil unkontrolliert. Des Weiteren betrachten wir hier nur die von Mises Fließregel, welche nur den deviatorischen Anteil der Spannung kontrolliert.

Die variationelle Formulierung des primalen Problems. Um die Darstellung übersichtlich zu halten definieren wir desweiteren den Funktionenraum

$$\mathbf{Z}_\Gamma^C = \mathbf{X}_\Gamma^C \times \mathbf{E}^p ,$$

mit der Norm

$$\|(\mathbf{u}, \bar{A}, \boldsymbol{\varepsilon}_p)\|_{\mathbf{Z}_\Gamma^C}^2 = \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}_\Gamma^C}^2 + \|\boldsymbol{\varepsilon}_p\|_{L_2(\Omega, \text{Sym}(3))}^2 .$$

Wir verwenden die Notation $\|\boldsymbol{\varepsilon}_p\|_{\mathbf{E}^p} = \|\boldsymbol{\varepsilon}_p\|_{L_2(\Omega, \text{Sym}(3))}$.

Damit können wir nun unter Verwendung der Bilinearform des elastischen Cosserat-Modells (1.11) die Bilinearform für die plastische Erweiterung formulieren:

$$\begin{aligned} a^{C,p}(\cdot, \cdot) : \quad \mathbf{Z}_\Gamma^C \times \mathbf{Z}_\Gamma^C &\longrightarrow \mathbb{R} , \\ a^{C,p}((\mathbf{u}, \bar{A}, \boldsymbol{\varepsilon}_p), (\mathbf{v}, \bar{B}, \boldsymbol{\eta})) &:= \int_\Omega \mathbf{C} (\text{sym } D\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) : (\text{sym } D\mathbf{v} - \boldsymbol{\eta}) \, dx \\ &\quad + 2\mu_c \int_\Omega (\text{skew } D\mathbf{u} - \bar{A}) : (\text{skew } D\mathbf{v} - \bar{B}) \, dx \\ &\quad + 2\mu L_c^2 \int_\Omega D\bar{A} : D\bar{B} \, dx . \end{aligned} \quad (1.23)$$

Lemma 1.14 *Die Voraussetzungen von Lemma 1.5 seien erfüllt. Seien $\Gamma = \partial\Omega$ und $\lambda, L_c > 0$ und $\mu > \mu_c > 0$. Die Bilinearform*

$$\begin{aligned} a^{C,p}((\mathbf{u}, \bar{A}, \boldsymbol{\varepsilon}_p), (\mathbf{v}, \bar{B}, \boldsymbol{\eta})) &= \int_\Omega 2\mu (\text{sym } D\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) : (\text{sym } D\mathbf{v} - \boldsymbol{\eta}) \, dx \\ &\quad + a_{red}^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{v}, \bar{B})) \end{aligned}$$

ist elliptisch auf $\mathbf{Z}_{\partial\Omega}^C$, d. h. für hinreichend kleines $\mu_c \in (0, \mu)$ gilt

$$a^{C,p}((\mathbf{u}, \bar{A}, \boldsymbol{\varepsilon}_p), (\mathbf{u}, \bar{A}, \boldsymbol{\varepsilon}_p)) \geq 2\mu \frac{\frac{c}{8} \frac{\mu_c}{\mu}}{1 + \frac{c}{8} \frac{\mu_c}{\mu}} \|\boldsymbol{\varepsilon}_p\|_{\mathbf{E}^p}^2 + \frac{c}{2} \mu_c \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2 , \quad (\mathbf{u}, \bar{A}, \mathbf{E}^p) \in \mathbf{Z}_{\partial\Omega}^C ,$$

wobei \tilde{c} unabhängig von μ_c ist.

Beweis. Symmetrische und schiefsymmetrische Matrizen sind orthogonal bzgl. dem Frobenius-Skalarprodukt, daher erhalten wir

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u}\|_{\mathbf{V}}^2 &= \|\mathbf{u}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^3)}^2 + \|D\mathbf{u}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 \geq \|D\mathbf{u}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 \\ &= \|\text{sym } D\mathbf{u}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 + \|\text{skew } D\mathbf{u}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 \\ &\geq \|\text{sym } D\mathbf{u}\|_{L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3})}^2 = \|\text{sym } D\mathbf{u}\|_{\mathbf{E}^p}^2 . \end{aligned} \quad (1.24)$$

1 Nichtlineare Cosserat-Modelle

Wir verwenden Lemma 1.5, die Youngsche Ungleichung und (1.24). Wir erhalten für alle $(\mathbf{u}, \bar{A}) \in \mathbf{X}_{\partial\Omega}^C$ und $\boldsymbol{\varepsilon}_p \in \mathbf{E}^p$ mit $\alpha \in \mathbb{R}^+$ die Abschätzung

$$\begin{aligned}
 a^{C,p}((\mathbf{u}, \bar{A}, \boldsymbol{\varepsilon}_p), (\mathbf{u}, \bar{A}, \boldsymbol{\varepsilon}_p)) &\geq \int_{\Omega} 2\mu(\operatorname{sym} D\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) : (\operatorname{sym} D\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) \, d\mathbf{x} + c \mu_c \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2 \\
 &= 2\mu \|\operatorname{sym} D\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}_p\|_{\mathbf{E}^p}^2 + \frac{c}{2} \mu_c \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2 + \frac{c}{2} \mu_c \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2 \\
 &\geq 2\mu(1 - \alpha) \|\operatorname{sym} D\mathbf{u}\|_{\mathbf{E}^p}^2 + 2\mu(1 - \frac{1}{\alpha}) \|\boldsymbol{\varepsilon}_p\|_{\mathbf{E}^p}^2 \\
 &\quad + \frac{c}{2} \mu_c \|\operatorname{sym} D\mathbf{u}\|_{\mathbf{E}^p}^2 + \frac{c}{2} \mu_c \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2 \\
 &= (2\mu(1 - \alpha) + \frac{c}{2} \mu_c) \|\operatorname{sym} D\mathbf{u}\|_{\mathbf{E}^p}^2 + 2\mu(1 - \frac{1}{\alpha}) \|\boldsymbol{\varepsilon}_p\|_{\mathbf{E}^p}^2 + \frac{c}{2} \mu_c \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2 .
 \end{aligned}$$

Nun wählen wir $\alpha > 1$ sodass gilt: $1 - \frac{1}{\alpha} > 0$ und

$$\begin{aligned}
 &2\mu(1 - \alpha) + \frac{c}{2} \mu_c > 0 \\
 \Leftrightarrow &\frac{2\mu + \frac{c}{2} \mu_c}{2\mu} > \alpha \\
 \Leftrightarrow &\alpha < 1 + \frac{c\mu_c}{4\mu} .
 \end{aligned}$$

Für $\alpha = 1 + \frac{c}{8} \frac{\mu_c}{\mu}$ erhalten wir damit

$$a^{C,p}((\mathbf{u}, \bar{A}, \boldsymbol{\varepsilon}_p), (\mathbf{u}, \bar{A}, \boldsymbol{\varepsilon}_p)) \geq 2\mu \frac{\frac{c}{8} \mu_c}{1 + \frac{c}{8} \frac{\mu_c}{\mu}} \|\boldsymbol{\varepsilon}_p\|_{\mathbf{E}^p}^2 + \frac{c}{2} \mu_c \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2 .$$

□

1.4 Ein geometrisch exaktes Modell

In diesem Abschnitt stellen wir ein geometrisch exaktes Cosserat-Modell vor, welches in der Linearisierung mit dem infinitesimalen Modell (1.12) übereinstimmt. Das finite Modell kann daher als eine Erweiterung des infinitesimalen aufgefasst werden. Für eine ausführliche Darstellung der Modellierungsaspekte und der Analysis verweisen wir auf [Nef04, Nef05] und die darin angegebenen Referenzen. Für erste numerische Berechnungen und Resultate verweisen wir auf [Mün07]. Später in Kapitel 5 und 6 untersuchen und beschreiben wir die numerische Behandlung des finiten Modells, unsere numerischen Ergebnisse sind in Kapitel 7 aufgeführt.

Wir definieren, die zur Lie-Algebra $\mathfrak{so}(3)$ der schiefssymmetrischen Matrizen assoziierte Lie-Gruppe der speziellen orthogonalen Matrizen

$$SO(3) = \left\{ \bar{R} \in \mathbb{R}^{3 \times 3} : \bar{R}^T \bar{R} = \mathbf{I} , \det(\bar{R}) = 1 \right\} .$$

Für den elastischen Fall wollen wir unser verwendetes Cosserat-Modell motivieren. Dazu führen wir eine multiplikative Zerlegung des makroskopischen Deformationsgradienten F in eine unabhängige Mikrorotation \bar{R} (Cosserat-Rotationstensor) und einen mikropolaren Strecktensor \bar{U} (erster Cosserat-Verzerrungstensor) mit

$$F = \bar{R} \bar{U} \quad (1.25)$$

ein. Hierbei ist $\bar{R} \in SO(3)$ und $\bar{U} \in GL^+(3) := \{M \in GL(3) : \det(M) > 0\}$. Ohne Berücksichtigung von Cosserat-Effekte existiert eine eindeutige Zerlegung (Polarzerlegung) des Deformationsgradienten, sodass in (1.25) \bar{U} symmetrisch positiv definit ist. Wir lösen uns nun davon und betrachten den Deformationsgradienten als eine Funktion der unabhängigen Variablen $\bar{R} \in SO(3)$ und $\bar{U} \in GL^+(3)$.

Die freie Energie W für unser Cosserat-Modell sei nun abhängig von F , \bar{R} und dem räumlichen Gradienten $D_{\mathbf{x}} \bar{R}$. Insbesondere durch Hinzunahme des Gradienten des Cosserat-Rotationstensors ist eine Berücksichtigung einer internen Länge im Materialmodell möglich. Fordert man nun, dass die freie Energie W unabhängig ist unter einer Starrkörperbewegung, d. h. insbesondere

$$W(F, \bar{R}, D_{\mathbf{x}} \bar{R}) = W(QF, Q\bar{R}, D_{\mathbf{x}}(Q\bar{R})) , \quad Q \in SO(3) , \quad (1.26)$$

so erhalten wir für die Wahl $Q = \bar{R}^T$ in (1.26) die reduzierte Darstellung

$$W(F, \bar{R}, D_{\mathbf{x}} \bar{R}) = W(\bar{R}^T F, \bar{R}^T \bar{R}, \bar{R}^T D_{\mathbf{x}} \bar{R}) = W(\bar{R}^T F, \mathbf{I}, \bar{R}^T D_{\mathbf{x}} \bar{R}) = W(\bar{U}, \boldsymbol{\kappa}) ,$$

wobei $\bar{U} = \bar{R}^T F$ und $\boldsymbol{\kappa} = \bar{R}^T D_{\mathbf{x}} \bar{R}$.

Dies führt uns zu der Minimierungsaufgabe des geometrisch exakten elastischen mikropolaren Cosserat-Modell:

Gegeben sei eine Last ℓ . Finde Funktionen $\varphi : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}^3$ und $\bar{R} : \Omega \longrightarrow SO(3)$, sodass die Gesamtenergie

$$\mathcal{I}(\varphi, \bar{R}) = \mathcal{E}(\varphi, \bar{R}) - \ell(\varphi) \quad (1.27a)$$

1 Nichtlineare Cosserat-Modelle

mit der finiten makroskopischen Deformation

$$\varphi = \mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x}) \quad (1.27b)$$

und dem Deformationsgradienten

$$F = \mathbf{I} + D\mathbf{u} \quad (1.27c)$$

unter den Randbedingungen

$$\varphi(\mathbf{x}) = \varphi_D(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \quad (1.27d)$$

mit der freien Energie

$$\mathcal{E}(\varphi, \bar{R}) = \int_{\Omega} W(D\varphi, \bar{R}) d\mathbf{x} \quad (1.27e)$$

und den Energiedichten

$$W(F, \bar{R}) = W_{\text{shear}}(\bar{U}) + W_{\text{vol}}(F) + W_{\text{curv}}(\boldsymbol{\kappa}), \quad (1.27f)$$

$$W_{\text{shear}}(\bar{U}) = \mu |\text{sym}(\bar{U} - I)|^2 + \mu_c |\text{skew}(\bar{U})|^2, \quad (1.27g)$$

$$W_{\text{vol}}(F) = \frac{\lambda}{4} \left((\det F - 1)^2 + \left(\frac{1}{\det F} - 1 \right)^2 \right), \quad (1.27h)$$

$$W_{\text{curv}}(\boldsymbol{\kappa}) = 2\mu L_c^2 |\boldsymbol{\kappa}|^2, \quad (1.27i)$$

mit $\bar{U} = \bar{R}^T F$ und $\boldsymbol{\kappa} = \bar{R}^T D_{\mathbf{x}} \bar{R}$ ein lokales Minimum annimmt.

2 Diskrete Cosserat-Plastizität

In diesem Kapitel wollen wir nun die kontinuierliche Formulierung des elasto-plastischen Cosserat-Modells diskretisieren. Wir beginnen mit der Diskretisierung in der Zeit und diskretisieren im Anschluss daran im Ort. Für die Zeitdiskretisierung verwenden wir ein implizites Euler Verfahren.

Für die Diskretisierung im Ort wählen wir in dieser Arbeit ausschließlich die Methode der Finite-Elemente und wir beschränken uns in der Darstellung auf Gebiete, die wir durch eine Zerlegung in Hexaeder exakt beschreiben können. Durch die Wahl geeigneter Finite-Elemente-Räume erhalten wir schließlich ein endlichdimensionales, nichtlineares und nichtglattes Gleichungssystem.

2.1 Diskretisierung in der Zeit

Wir wählen eine Zerlegung $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$ des Simulationsintervalls $[0, T]$ und definieren $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$. Dabei erhalten wir diskrete Approximationen $\mathbf{u}^n \approx \mathbf{u}(t_n)$, $\bar{A}^n \approx \bar{A}(t_n)$ und $\boldsymbol{\varepsilon}_p^n \approx \boldsymbol{\varepsilon}_p(t_n)$, indem wir die einzig auftretende Zeitableitung $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p$ mithilfe des Differenzenquotienten

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p(t_n)(\mathbf{x}) \approx \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_p^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x})}{\Delta t_n}$$

diskret approximieren. Damit erhalten wir formal das Problem:

Sei $\boldsymbol{\varepsilon}_p^0 = 0$. Finde \mathbf{u}^n , \bar{A}^n und $\boldsymbol{\varepsilon}_p^n$, sodass für alle $n = 1, 2, \dots, N$ die Gesamtenergie

$$\mathcal{E}(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n, \boldsymbol{\varepsilon}_p^n) - \ell(t^n, \mathbf{u}^n) \quad (2.1a)$$

mit der inneren Energie

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\mathbf{u}, \bar{A}, \boldsymbol{\varepsilon}_p) &= \int_{\Omega} \frac{1}{2} (\text{sym } D\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) : \mathbf{C} : (\text{sym } D\mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) \, d\mathbf{x} \\ &+ \int_{\Omega} \mu_c |\text{skew } D\mathbf{u} - \bar{A}|^2 \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \mu L_c^2 |D\bar{A}|^2 \, d\mathbf{x} , \end{aligned} \quad (2.1b)$$

minimal wird unter den Randbedingungen

$$\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_D(t_n, \mathbf{x}) , \quad \mathbf{x} \in \Gamma , \quad (2.1c)$$

$$\bar{A}^n(\mathbf{x}) = 0 , \quad \mathbf{x} \in \Gamma , \quad (2.1d)$$

sowie der (punktweisen) Fließregel für fast alle $\mathbf{x} \in \Omega$

$$\frac{\boldsymbol{\varepsilon}_p^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x})}{\Delta t_n} \in \partial\chi_K(\mathbf{T}_E^n(\mathbf{x})) , \quad (2.1e)$$

mit

$$K = \{ \boldsymbol{\tau} \in \text{Sym}(3) \mid \phi(\boldsymbol{\tau}) \leq 0 , \phi \text{ konvex} \} \quad (2.1f)$$

$$\mathbf{T}_E^n = 2\mu(\text{sym } D\mathbf{u}^n - \boldsymbol{\varepsilon}_p^n) . \quad (2.1g)$$

Differenzierbare Fließregel auf der Fließfläche. Wenn die konvexe Menge K eine Darstellung $K = \{ \boldsymbol{\tau} \in \text{Sym}(3) \mid \phi(\boldsymbol{\tau}) \leq 0 \}$ mit einer auf der Fließfläche ∂K differenzierbaren Fließregel ϕ besitzt, können wir die Darstellung weiter vereinfachen (vgl. (1.22)). Wir nehmen zusätzlich an: $\mathbf{0} \in K$. Dann erhalten wir statt (2.1e) die diskrete Fließregel

$$\boldsymbol{\varepsilon}_p^n(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x}) + \Delta t_n \Lambda_n(\mathbf{x}) D\phi(\mathbf{T}_E^n(\mathbf{x})) , \quad (2.2a)$$

mit den Komplementaritätsbedingungen

$$\phi(\mathbf{T}_E^n(\mathbf{x})) \leq 0 , \quad \Lambda_n(\mathbf{x}) \geq 0 , \quad \Lambda_n(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{T}_E^n(\mathbf{x})) = 0 . \quad (2.2b)$$

Zur Vereinfachung der Notation definieren wir $\gamma_n(\mathbf{x}) = 2\mu\Delta t_n\Lambda_n(\mathbf{x})$. Damit ergibt sich aus (2.1g) und (2.2)

$$\mathbf{T}_E^n(\mathbf{x}) = 2\mu(\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x})) - \gamma_n(\mathbf{x})D\phi(\mathbf{T}_E^n(\mathbf{x})) , \quad (2.3a)$$

$$\phi(\mathbf{T}_E^n(\mathbf{x})) \leq 0 , \quad \gamma_n(\mathbf{x}) \geq 0 , \quad \gamma_n(\mathbf{x})\phi(\mathbf{T}_E^n(\mathbf{x})) = 0 . \quad (2.3b)$$

Das System (2.3) beschreibt die notwendigen Optimalitätsbedingungen für einen Sattelpunkt des Lagrangefunktionals

$$L(\mathbf{T}_E^n(\mathbf{x}), \gamma_n(\mathbf{x})) = \frac{1}{2} |\mathbf{T}_E^n(\mathbf{x}) - 2\mu(\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x}))|^2 + \gamma_n\phi(\mathbf{T}_E^n(\mathbf{x})) .$$

Wegen der Annahme $\mathbf{0} \in K$ ist die Slater-Bedingung erfüllt. Daraus folgt die Existenz eines eindeutigen KKT-Punktes $(\mathbf{T}_E^n(\mathbf{x}), \gamma_n(\mathbf{x}))$ von (2.3) und ferner auch die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung von (2.2).

Das inkrementelle Problem der Cosserat-Plastizität. Wir fordern für die folgende Analyse zusätzlich $\Gamma = \partial\Omega$ und definieren für die plastische Verzerrung den linearen Raum

$$\mathbf{E}^p = \{ \boldsymbol{\eta} \in L_2(\Omega) : \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}) \in \mathfrak{sl}(3) \cap \text{Sym}(3) \text{ fast überall in } \Omega \} .$$

Des Weiteren definieren wir für die Last $\ell \in \mathbf{V}'$ die Norm

$$\|\ell\|_{\mathbf{V}'} = \sup_{\mathbf{0} \neq \mathbf{v} \in \mathbf{V}} \frac{|\ell(\mathbf{v})|}{\|\mathbf{v}\|_{\mathbf{V}}} .$$

Wir betrachten das zeitdiskrete und im Ort kontinuierliche Problem:

Gegeben sei $\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} \in \mathbf{E}^p$. Finde $\mathbf{u}^n \in \mathbf{V}_\Gamma(\mathbf{u}_D)$ und $\bar{A}^n \in W_\Gamma$, sodass die Gesamtenergie

$$\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n) = \mathcal{E}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n) - \ell^n(\mathbf{u}^n) \quad (2.4a)$$

mit der inneren Energie

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A}) &= \frac{1}{2\mu} \int_{\Omega} \psi_{\mathbf{K}}(2\mu(\text{sym}(D\mathbf{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1})) \, d\mathbf{x} + \frac{\lambda}{2} \int_{\Omega} \text{tr}(D\mathbf{u})^2 \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \mu_c \int_{\Omega} |\text{skew}(D\mathbf{u}) - \bar{A}|^2 \, d\mathbf{x} + \mu L_c^2 \int_{\Omega} |D\bar{A}|^2 \, d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (2.4b)$$

minimal ist. Hierbei geht das Potential

$$\psi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) = \frac{1}{2} |\boldsymbol{\tau}|^2 - \frac{1}{2} |\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})|^2 , \quad (2.4c)$$

aus (A.5) ein.

Wir werden in Abschnitt 2.2 die Wahl des Potentials motivieren. Für den späteren Verwendungszweck halten wir fest

Lemma 2.1 $\mathcal{I}_{\text{incr}}^n$ ist gleichmäßig konvex.

Beweis. Wegen Lemma A.4 wissen wir, dass das Potential $\psi_{\mathbf{K}}$ konvex ist, und dass

$$D\psi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})[\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\eta}] - D\psi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta})[\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\eta}] \geq 0 \quad (2.5)$$

gilt. Nun setzen wir $\boldsymbol{\tau} = 2\mu(\text{sym}(D\mathbf{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1})$ und $\boldsymbol{\eta} = 2\mu(\text{sym}(D\mathbf{v}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1})$, verwenden (2.5) und erhalten mit Lemma 1.5

$$\begin{aligned} & D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A})[(\mathbf{u} - \mathbf{v}, \bar{A} - \bar{B})] - D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{v}, \bar{B})[(\mathbf{u} - \mathbf{v}, \bar{A} - \bar{B})] \\ &= \int_{\Omega} \frac{1}{2\mu} D\psi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})[2\mu(\text{sym}(D\mathbf{u}) - 2\mu(\text{sym}(D\mathbf{v}))] dx \\ &\quad - \int_{\Omega} \frac{1}{2\mu} D\psi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta})[2\mu(\text{sym}(D\mathbf{v}) - 2\mu(\text{sym}(D\mathbf{v}))] dx \\ &\quad + \frac{1}{2} a_{\text{red}}^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{u} - \mathbf{v}, \bar{A} - \bar{B})) - \frac{1}{2} a_{\text{red}}^C((\mathbf{v}, \bar{B}), (\mathbf{u} - \mathbf{v}, \bar{A} - \bar{B})) \\ &\geq \frac{1}{2} a_{\text{red}}^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{u} - \mathbf{v}, \bar{A} - \bar{B})) - \frac{1}{2} a_{\text{red}}^C((\mathbf{v}, \bar{B}), (\mathbf{u} - \mathbf{v}, \bar{A} - \bar{B})) \\ &= \frac{1}{2} a_{\text{red}}^C((\mathbf{u} - \mathbf{v}, \bar{A} - \bar{B}), (\mathbf{u} - \mathbf{v}, \bar{A} - \bar{B})) \\ &\geq \frac{1}{2} c \mu_c \|(\mathbf{u} - \mathbf{v}, \bar{A} - \bar{B})\|_{\mathbf{X}^C}^2. \end{aligned}$$

Damit ist $\mathcal{I}_{\text{incr}}^n$ nach Definition gleichmäßig konvex. □

Lemma 2.2 Sei $0 < \mu_c \leq \mu$. Das Funktional $\mathcal{I}_{\text{incr}}^n$ ist nach unten beschränkt. Insbesondere gilt

$$\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A}) \geq \frac{\mu_c c}{4} \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2 - \frac{2}{\mu_c c} \|\ell^n\|_{\mathbf{V}'}^2$$

mit einer von μ_c unabhängigen Konstante c .

Beweis. Wir zitieren [NCMW07]. Da das Potential $\psi_{\mathbf{K}}$ nichtnegativ ist (vgl. Lemma A.4) erhalten wir unter Verwendung der Elliptizitätskonstante $\mu_c c$ aus Lemma 1.5 die Abschätzung

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A}) &\geq \frac{1}{2} a_{\text{red}}^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{u}, \bar{A})) - \ell^n(\mathbf{u}) \\ &\geq \frac{1}{2} \mu_c c \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2 - \ell^n(\mathbf{u}). \end{aligned}$$

Nun verwenden wir die Dualnorm der Lösung, für welche die Abschätzung

$$\|\ell^n\|_{\mathbf{V}'} \leq \frac{|\ell^n(\mathbf{u})|}{\|\mathbf{u}\|_{\mathbf{V}}}$$

gilt, und deshalb auch: $-\ell^n(\mathbf{u}) \leq -\|\ell^n\|_{\mathbf{V}'}\|\mathbf{u}\|_{\mathbf{V}}$. Damit erhalten wir mittels

$$\begin{aligned} 2\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A}) &\geq a_{\text{red}}^C((\mathbf{u}, \bar{A}), (\mathbf{u}, \bar{A})) - 2\ell^n(\mathbf{u}) \\ &\geq \mu_{cC} \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2 - 2\|\ell^n\|_{\mathbf{V}'}\|\mathbf{u}\|_{\mathbf{V}} \\ &\geq \frac{\mu_{cC}}{2} \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C}^2 - \frac{4}{\mu_{cC}} \|\ell^n\|_{\mathbf{V}'}^2 \end{aligned}$$

die Aussage. □

Satz 2.3 *Das Minimierungsproblem (2.4) besitzt eine eindeutige Lösung.*

Beweis. Wegen Lemma 2.1 ist das Funktional (2.4a) gleichmäßig konvex. Ferner ist es unterhalb stetig und wegen Lemma 2.2 auch koerziv, d. h.

$$\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A}) \longrightarrow \infty \text{ für } \|(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}^C} \longrightarrow \infty .$$

Aus [ET76, Proposition 1.2] folgt die Existenz und Eindeutigkeit. □

2.2 Das diskrete primale Inkrementproblem

Diskretisierung im Ort. Für die unendlichdimensionalen kontinuierlichen Räume der auftretenden Felder wählen wir nun endlichdimensionale Approximationen. Wir kennzeichnen diese Finite-Elemente-Räume durch den Index h und deuten damit auf die diskrete Approximation im Ort hin. Im Folgenden verwenden wir für die Verschiebungen und Mikrorotationen die Räume:

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_h &= \{ \mathbf{u} = (u_i) : u_i \in V_h \} , \\ W_h &= \{ \bar{A} = \text{anti}(\alpha) \text{ mit } \alpha = (\alpha_i) : \alpha_i \in V_h \} , \end{aligned}$$

sowie die mit den entsprechenden Dirichletrandvorgaben versehenen Räume:

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_{\Gamma,h}(\mathbf{u}_D) &= \{ \mathbf{u} \in \mathbf{V}_h : \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_D(\mathbf{x}) , \mathbf{x} \in \Gamma \cap \mathcal{N} \} , & \mathbf{V}_{\Gamma,h} &= \mathbf{V}_{\Gamma,h}(\mathbf{0}) , \\ W_{\Gamma,h}(\mathbf{u}_D) &= \{ \bar{A} \in W_h : \bar{A}(\mathbf{x}) = \text{skew}(D\mathbf{u}_D)(\mathbf{x}) , \mathbf{x} \in \Gamma \cap \mathcal{N} \} , & W_{\Gamma,h} &= W_{\Gamma,h}(\mathbf{0}) . \end{aligned}$$

Hierbei bezeichne \mathcal{N} die Menge der Knotenpunkt der nodalen Basis. Bei der mathematischen Analyse des diskreten Problems konzentrieren wir uns auf homogene Dirichletrandvorgaben auf ganz $\partial\Omega$, d. h. $\Gamma = \partial\Omega$ und verwenden daher für die Verschiebungen $\mathbf{V}_{\partial\Omega,h}$ und die Mikrorotationen $W_{\partial\Omega,h}$. Für die plastische Verzerrung definieren wir abhängig von einer Quadraturformel mit Quadraturpunkten $\boldsymbol{\xi} \in \boldsymbol{\Xi}_h \subset \Omega$ den Raum

$$\mathbf{E}_h^p = \{ \boldsymbol{\Xi}_h \rightarrow \mathfrak{sl}(3) \cap \text{Sym}(3) \} .$$

Die Orthogonalprojektion auf die von Mises Fließfläche. Im Folgenden konzentrieren wir uns auf eine spezielle glatte Fließgrenze und assoziierte Fließregel: Die Menge der zulässigen Spannungen mit der von Mises Fließregel ist

$$K = \{ \boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{3 \times 3} : |\text{dev}(\boldsymbol{\tau})| - K_0 \leq 0 \} , \quad (2.6)$$

wobei $K_0 > 0$, welche in allen bis hierher verwendeten Beschreibungen der Plastizität mit der konvexen Funktion ϕ

$$\phi(\boldsymbol{\tau}) = |\text{dev}(\boldsymbol{\tau})| - K_0 , \quad (2.7a)$$

$$D\phi(\boldsymbol{\tau}) = \frac{\text{dev}(\boldsymbol{\tau})}{|\text{dev}(\boldsymbol{\tau})|} , \boldsymbol{\tau} \neq 0 , \quad (2.7b)$$

enthalten ist. Die Menge K in (2.6) ist geometrisch betrachtet ein Zylinder im Spannungsraum, dessen Rand sich durch die Beschränkung des deviatorischen Anteils der Spannung ergibt. Die Achse bildet der volumetrische Anteil, welcher orthogonal zum deviatorischen Anteil bzgl. des Frobenius-Skalarprodukt liegt. Im Folgenden benötigen wir die orthogonale Projektion eines symmetrischen Tensors auf die Menge K bzgl. der Frobenius-Metrik. Diese bezeichnen wir im Folgenden immer mit P_K . Wir können die Projektion explizit ausrechnen, es gilt:

$$P_K(\boldsymbol{\tau}) = \boldsymbol{\tau} - \max \{ 0, |\text{dev}(\boldsymbol{\tau})| - K_0 \} \frac{\text{dev}(\boldsymbol{\tau})}{|\text{dev}(\boldsymbol{\tau})|} , \quad \boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{3 \times 3} . \quad (2.8)$$

Lemma 2.4 Seien $\boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$, ϕ wie in (2.7a) und K wie in (2.6). Die Projektion $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = P_K(\boldsymbol{\tau}) \in K$ und der Lagrange-Multiplikator $\gamma \in \mathbb{R}$ sind eindeutig durch die KKT-Bedingungen

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{\tau} - \gamma D\phi(\boldsymbol{\tau}) \quad (2.9a)$$

$$\phi(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) \leq 0, \quad \gamma\phi(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = 0, \quad \gamma \geq 0 \quad (2.9b)$$

charakterisiert.

Beweis. Die Projektion P_K ist definiert als die Lösung der Optimierungsaufgabe: Gegeben sei $\boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$. Finde $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$, sodass

$$e(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \frac{1}{2}|\hat{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\tau}|^2 \quad (2.10a)$$

unter der Nebenbedingung

$$\phi(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) \leq 0 \quad (2.10b)$$

minimal ist. Die Zielfunktion e der konvexen Optimierungsaufgabe (2.10) ist stetig und gleichmäßig konvex. Desweiteren ist wegen $K_0 > 0$ die Menge K nichtleer. Ferner ist K konvex, denn für $\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\eta} \in K$ und $\alpha \in [0, 1]$ gilt

$$\begin{aligned} |\text{dev}((1 - \alpha)\boldsymbol{\tau} + \alpha\boldsymbol{\eta})| &= |(1 - \alpha)\text{dev}(\boldsymbol{\tau}) + \alpha\text{dev}(\boldsymbol{\eta})| \\ &\leq (1 - \alpha)|\text{dev}(\boldsymbol{\tau})| + \alpha|\text{dev}(\boldsymbol{\eta})| \leq K_0, \end{aligned}$$

also $\text{dev}((1 - \alpha)\boldsymbol{\tau} + \alpha\boldsymbol{\eta}) \in K$. Daraus folgt Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ von (2.10). Die Existenz des Lagrange-Multiplikators γ ist aufgrund einer weiteren Eigenschaft von (2.10) erfüllt, denn es existiert ein strikt zulässiges Element in K ($\phi(\mathbf{0}) < 0$ wegen $K_0 > 0$) und die Slater-Bedingung für (2.10) ist erfüllt. Damit existiert ein $\gamma \in \mathbb{R}$ sodass mit der Lösung $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ von (2.10) die KKT-Bedingungen (2.9) erfüllt sind. Dabei erhalten wir (2.9a) als kritische Stelle des Lagrangefunktional

$$L(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \gamma) = e(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) + \gamma\phi(\hat{\boldsymbol{\sigma}}),$$

denn wir haben $D_{\hat{\boldsymbol{\sigma}}}L(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \gamma) = \hat{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\tau} + \gamma D\phi(\hat{\boldsymbol{\sigma}})$. Ferner ist der Lagrange-Multiplikator γ eindeutig bestimmt. Angenommen $(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \gamma_1), (\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \gamma_2) \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \times \mathbb{R}$ mit $\gamma_1 \neq \gamma_2$ sind Lösungen von (2.9), dann muss gelten $D\phi(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \mathbf{0}$ und $\phi(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = 0$. Dies führt aber zu einem Widerspruch mit der Annahme $K_0 > 0$. \square

Nützliche Eigenschaften von P_K sind

$$P_K(\boldsymbol{\tau} + \alpha \mathbf{I}) = P_K(\boldsymbol{\tau}) + \alpha \mathbf{I}, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}, \quad (2.11a)$$

$$P_K(\text{sym } \boldsymbol{\tau}) = \text{sym } P_K(\boldsymbol{\tau}), \quad \boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}, \quad (2.11b)$$

$$\text{tr } P_K(\boldsymbol{\tau}) = \text{tr } \boldsymbol{\tau}, \quad \boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}, \quad (2.11c)$$

$$\text{dev } P_K(\boldsymbol{\tau}) = P_K(\text{dev } \boldsymbol{\tau}), \quad \boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}. \quad (2.11d)$$

Die volldiskreten Darstellungen als Optimierungsaufgabe, variationelle Formulierung und nichtlineares Gleichungssystem. Wir betrachten die zeitdiskrete Optimierungsaufgabe (2.1) mit der (punktweisen) Fließregel (2.3) als KKT-System. Nun führen wir unter Verwendung der Finite-Elemente-Methode eine Diskretisierung im Ort durch und erhalten das volldiskrete inkrementelle Problem der Cosserat-Plastizität als Optimierungsaufgabe mit Nebenbedingung:

Gegeben sei $\boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1} \in \mathbf{E}_h^p$. Finde $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_h^n(\boldsymbol{\xi})$ und $\mathbf{T}_{E,h}^n(\boldsymbol{\xi})$ für alle $\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h$, sowie $\mathbf{u}_h^n \in \mathbf{V}_{\partial\Omega,h}(\mathbf{u}_D)$ und $\bar{A}_h^n \in W_{\partial\Omega,h}(\mathbf{u}_D)$, sodass die Gleichgewichtsbedingungen

$$\int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_h^n : D\mathbf{v} = \ell_h(t_n, \mathbf{v}), \quad \mathbf{v} \in \mathbf{V}_{\partial\Omega,h}, \quad (2.12a)$$

$$\mu L_c^2 \int_{\Omega} D\bar{A}_h^n \cdot D\bar{B} = \mu_c \int_{\Omega} (\text{skew}(D\mathbf{u}_h^n) - \bar{A}_h^n) : \bar{B}, \quad \bar{B} \in W_{\partial\Omega,h}, \quad (2.12b)$$

sowie die konstitutiven Beziehungen

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_h^n(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{T}_{E,h}^n(\boldsymbol{\xi}) + \lambda \text{tr}(D\mathbf{u}_h^n(\boldsymbol{\xi})) \mathbf{I} + 2\mu_c (\text{skew}(D\mathbf{u}_h^n(\boldsymbol{\xi})) - \bar{A}_h^n(\boldsymbol{\xi})), \quad \boldsymbol{\xi} \in \Xi_h, \quad (2.12c)$$

$$\mathbf{T}_{E,h}^n(\boldsymbol{\xi}) = 2\mu \left(\text{sym}(D\mathbf{u}_h^n(\boldsymbol{\xi})) - \boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1}(\boldsymbol{\xi}) \right) - \gamma_h^n(\boldsymbol{\xi}) D\phi(\mathbf{T}_{E,h}^n(\boldsymbol{\xi})), \quad \boldsymbol{\xi} \in \Xi_h, \quad (2.12d)$$

und die Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen

$$\phi(\mathbf{T}_{E,h}^n(\boldsymbol{\xi})) \leq 0, \quad \gamma_h^n(\boldsymbol{\xi}) \phi(\mathbf{T}_{E,h}^n(\boldsymbol{\xi})) = 0, \quad \gamma_h^n(\boldsymbol{\xi}) \geq 0, \quad \boldsymbol{\xi} \in \Xi_h, \quad (2.12e)$$

erfüllt sind. Die diskrete Evolution des plastischen Verzerrungstensor bestimmen wir wieder durch die Fließregel

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^n(\boldsymbol{\xi}) = \boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1}(\boldsymbol{\xi}) + \frac{\gamma_h^n(\boldsymbol{\xi})}{2\mu} D\phi(\mathbf{T}_{E,h}^n(\boldsymbol{\xi})). \quad (2.12f)$$

Bemerkung 2.5 Berücksichtigen wir, dass $\phi(\mathbf{T}_{E,h}^n(\boldsymbol{\xi})) = \phi(\text{sym} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_h^n(\boldsymbol{\xi}))$ gilt, so ist (2.12) die diskrete Darstellung von (2.27).

Ein Bindeglied bildet das nichtlineare Gleichungssystem:

Gegeben sei $\boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1} \in \mathbf{E}_h^p$. Finde $\mathbf{u}_h^n \in \mathbf{V}_h$ und $\bar{A}_h^n \in W_h$, sodass

$$\int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_h^n : D\mathbf{v} = \ell_h(t_n, \mathbf{v}), \quad \mathbf{v} \in \mathbf{V}_{\partial\Omega,h}(\mathbf{0}), \quad (2.13a)$$

$$2\mu L_c^2 \int_{\Omega} D\bar{A}_h^n \cdot D\bar{B} = 2\mu_c \int_{\Omega} (\text{skew}(D\mathbf{u}_h^n) - \bar{A}_h^n) : \bar{B}, \quad \bar{B} \in W_{\partial\Omega,h}(\mathbf{0}), \quad (2.13b)$$

mit den konstitutiven Beziehungen

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_h^n = P_K(\mathbf{T}_{E,\text{test}}^n) + \lambda \text{tr}(D\mathbf{u}_h^n) \mathbf{I} + 2\mu_c (\text{skew}(D\mathbf{u}_h^n) - \bar{A}_h^n), \quad (2.13c)$$

$$\mathbf{T}_{E,\text{test}}^n = 2\mu (\text{sym} D\mathbf{u}_h^n - \boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1}), \quad (2.13d)$$

Des Weiteren haben wir für alle $\boldsymbol{\xi} \in \boldsymbol{\Xi}_h$ die Fließregel

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^n(\boldsymbol{\xi}) = \text{sym } D\mathbf{u}_h^n(\boldsymbol{\xi}) - \frac{1}{2\mu} P_K(\mathbf{T}_{E,\text{test}}^n(\boldsymbol{\xi})) . \quad (2.14)$$

Schließlich existiert eine Darstellung als differenzierbares Optimierungsproblem: Gegeben sei $\boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1} \in \mathbf{E}_h^p$. Finde $\mathbf{u}_h^n \in \mathbf{V}_h$ und $\bar{A}_h^n \in W_h$, sodass die Gesamtenergie

$$\mathcal{I}_{\text{incr}}^n = \mathcal{E}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}_h^n, \bar{A}_h^n) - \ell(t^n, \mathbf{u}_h^n) \quad (2.15a)$$

mit der inneren Energie

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A}) &= \frac{1}{2\mu} \int_{\Omega} \psi_K(2\mu(\text{sym}(D\mathbf{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1})) \, d\mathbf{x} + \frac{\lambda}{2} \int_{\Omega} \text{tr}(D\mathbf{u})^2 \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \mu_c \int_{\Omega} |\text{skew}(D\mathbf{u}) - \bar{A}|^2 \, d\mathbf{x} + \mu L_c^2 \int_{\Omega} |D\bar{A}|^2 \, d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (2.15b)$$

minimal ist. Hierbei geht das Potential

$$\psi_K(\boldsymbol{\tau}) = \frac{1}{2} |\boldsymbol{\tau}|^2 - \frac{1}{2} |\boldsymbol{\tau} - P_K(\boldsymbol{\tau})|^2 , \quad (2.15c)$$

aus (A.5) ein.

Nun beweisen wir zuerst die Äquivalenz des nichtlinearen Gleichungssystems (2.13) zu dem Optimierungsproblem (2.15) und halten dies in folgendem Satz fest.

Satz 2.6 $(\mathbf{u}_h^n, \bar{A}_h^n)$ ist genau dann Lösung von (2.13) wenn $(\mathbf{u}_h^n, \bar{A}_h^n)$ eine Minimalstelle von (2.15a) ist. Ferner besitzt (2.15) immer eine eindeutige Lösung.

Beweis. Wir folgen [NCMW07]. Für $\Gamma = \partial\Omega$ folgt wegen $\mathbf{V}_h \times W_h \subset \mathbf{V}_{\partial\Omega} \times W_{\partial\Omega}$ aus der kontinuierlichen Elliptizität (Lemma 1.5 und Lemma A.4), dass die Energie (2.15a) gleichmäßig konvex ist. Daraus folgt (2.15a) besitzt eine eindeutige Minimalstelle. Diese Minimalstelle ist charakterisiert als kritische Stellen von (2.13b), welche Nullstelle der ersten Ableitung

$$\begin{aligned} D\mathcal{E}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A})[\mathbf{v}, \bar{B}] &= \frac{1}{2\mu} \int_{\Omega} D\psi_K(2\mu(\text{sym}(D\mathbf{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1}))[2\mu \text{sym}(D\mathbf{v})] \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \lambda \int_{\Omega} \text{tr}(D\mathbf{u}) \mathbf{I} : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} \\ &\quad + 2\mu_c \int_{\Omega} (\text{skew}(D\mathbf{u}) - \bar{A}) : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} - 2\mu_c \int_{\Omega} (\text{skew}(D\mathbf{u}) - \bar{A}) : \bar{B} \, d\mathbf{x} \\ &\quad + 2\mu L_c^2 \int_{\Omega} D\bar{A} : D\bar{B} \, d\mathbf{x} = 0 , \quad (\mathbf{v}, \bar{B}) \in \mathbf{V}_{\partial\Omega,h} \times W_{\partial\Omega,h} \end{aligned}$$

ist. Für $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ erhalten wir (2.13b) und für $\bar{B} = 0$ folgt mit Lemma A.4

$$\frac{1}{2\mu} D\psi_K(2\mu(\text{sym}(D\mathbf{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1})) [2\mu \text{sym}(D\mathbf{v})] = P_K(2\mu(\text{sym}(D\mathbf{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1})) : D\mathbf{v} ,$$

also Gleichung (2.13a) mit (2.13c) und (2.13d). □

Beweisen wir nun die Äquivalenz des nichtlinearen Gleichungssystems (2.13) und des variationellen Gleichungssystem (2.12) und halten dies auch in einem Satz fest.

Satz 2.7 *Die beiden Formulierungen (2.12) und (2.13) sind äquivalent.*

Beweis. Folgt durch Umformulierung der KKT-Bedingungen (2.12e) und dem Einführen der Projektion (2.8) direkt aus Lemma 2.4. Die Betrachtungen (2.2) und (2.3) beweisen die Aussage. □

2.3 Konvergenz der Finite-Elemente-Methode

In diesem Abschnitt zeigen wir, dass die Finite-Elemente-Lösung $(\mathbf{u}_h^n, \bar{A}_h^n)$ des volldiskreten Problems (2.15) für $h \rightarrow 0$ gegen die Lösung $(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n)$ des kontinuierlichen inkrementellen Problem (2.4) konvergiert, wenn die Lösung $(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n)$ glatt genug ist. Dazu zeigen wir in einem ersten Schritt ein Céa-Lemma für die uns vorliegende spezielle nichtlineare variationelle Formulierung einer partiellen Differentialgleichung.

Für die Finite-Elemente-Analyse nehmen wir an, dass alle Integrale exakt ausgewertet werden.

Ein Céa-Lemma. Für die konforme Wahl endlichdimensionaler Finite-Elemente-Räume

$$\mathbf{V}_{\partial\Omega, h} \times W_{\partial\Omega, h} \subset \mathbf{V}_{\partial\Omega} \times W_{\partial\Omega} = \mathbf{X}_{\partial\Omega}^C$$

zeigen wir nun, dass der Diskretisierungsfehler

$$\|(\mathbf{u}^n - \mathbf{u}_h^n, \bar{A}^n - \bar{A}_h^n)\|_{\mathbf{V}_{\partial\Omega} \times W_{\partial\Omega}}$$

mithilfe des Bestapproximationsfehler

$$\inf_{(\mathbf{v}, \bar{B}) \in \mathbf{V}_{\partial\Omega, h} \times W_{\partial\Omega, h}} \|(\mathbf{u}^n - \mathbf{v}, \bar{A}^n - \bar{B})\|_{\mathbf{V} \times W}$$

abgeschätzt werden kann.

Theorem 2.8 *Es gilt die Abschätzung*

$$\|(\mathbf{u}^n - \mathbf{u}_h^n, \bar{A}^n - \bar{A}_h^n)\|_{\mathbf{V}_{\partial\Omega} \times W_{\partial\Omega}} \leq \frac{C}{\mu_c} \inf_{(\mathbf{v}, \bar{B}) \in \mathbf{V}_{\partial\Omega, h} \times W_{\partial\Omega, h}} \|(\mathbf{u}^n - \mathbf{v}, \bar{A}^n - \bar{B})\|_{\mathbf{V}_{\partial\Omega} \times W_{\partial\Omega}} .$$

Hierbei ist C unabhängig von $\mu_c \in (0, \mu]$.

Um dieses Theorem zu beweisen benötigen wir noch, dass $D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n$ Lipschitz-stetig ist. Wir definieren die Operatornorm

$$\|D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C} = \sup_{(\mathbf{0}, \mathbf{0}) \neq (\mathbf{v}, \bar{B}) \in \mathbf{X}_{\partial\Omega}^C} \frac{|D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A})[(\mathbf{v}, \bar{B})]|}{\|(\mathbf{v}, \bar{B})\|_{\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C}}$$

mit der Eigenschaft

$$|D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A})[(\mathbf{v}, \bar{B})]| \leq \|D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A})\|_{\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C} \|(\mathbf{v}, \bar{B})\|_{\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C} . \quad (2.16)$$

Dieses Resultat benötigen wir auch für die spätere Analyse des semi-glatten Newton-Verfahrens zur Lösung des nichtlinearen Gleichungssystem, daher formulieren wir den

Satz 2.9 *Es gilt*

$$\|D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A}) - D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{v}, \bar{B})\|_{\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C} \leq C \|(\mathbf{u}, \bar{A}) - (\mathbf{v}, \bar{B})\|_{\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C} .$$

Beweis.

Im Beweis von Satz 2.6 haben wir für die Ableitung $D\mathcal{E}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A})[(\mathbf{v}, \bar{B})]$ die Darstellung

$$\begin{aligned} & D\mathcal{E}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A})[(\mathbf{v}, \bar{B})] \\ &= \int_{\Omega} \left(\mathbf{P}_{\mathbf{K}} (2\mu(\text{sym}(D\mathbf{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1})) + \lambda \text{tr}(D\mathbf{u}) \mathbf{I} + 2\mu_c(\text{skew}(D\mathbf{u}) - \bar{A}) \right) : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} \\ &+ \int_{\Omega} -2\mu_c(\text{skew}(D\mathbf{u}) - \bar{A}) : \bar{B} + 2\mu L_c^2 D\bar{A} : D\bar{B} \, d\mathbf{x} \end{aligned}$$

angegeben. Bis auf die Projektion $\mathbf{P}_{\mathbf{K}}$ sind alle auftretenden Terme linear in \mathbf{u} und \bar{A} und daher insbesondere Lipschitz-stetig. Aus Lemma A.2 geht jedoch hervor, dass $\mathbf{P}_{\mathbf{K}}$ ebenfalls Lipschitz-stetig (mit Lipschitz-Konstante 1) ist. Ebenso ist $\ell^n(\mathbf{v})$ linear in \mathbf{v} und somit folgt die Aussage. \square

Damit können wir nun Theorem 2.8 beweisen.

Beweis. Für die Lösung $(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n)$ des inkrementellen Problems (2.4) gilt:

$$D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n)[(\mathbf{v}, \bar{B})] = 0, \quad (\mathbf{v}, \bar{B}) \in \mathbf{V}_{\partial\Omega} \times W_{\partial\Omega}, \quad (2.17)$$

und für die numerische Lösung $(\mathbf{u}_h^n, \bar{A}_h^n)$ des volldiskreten Problems (2.15) haben wir

$$D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}_h^n, \bar{A}_h^n)[(\mathbf{v}_h, \bar{B}_h)] = 0, \quad (\mathbf{v}_h, \bar{B}_h) \in \mathbf{V}_{\partial\Omega,h} \times W_{\partial\Omega,h}. \quad (2.18)$$

Wir beginnen mit der Abschätzung aus Lemma 2.1 nach dem $\mathcal{I}_{\text{incr}}^n$ gleichmäßig konvex ist. Des Weiteren verwenden wir für $(\mathbf{u}^n - \mathbf{u}_h^n, \bar{A}^n - \bar{A}_h^n) \in \mathbf{V}_{\partial\Omega} \times W_{\partial\Omega}$ die Gleichung (2.17) und für $(\mathbf{v}_h - \mathbf{u}_h^n, \bar{B}_h - \bar{A}_h^n) \in \mathbf{V}_{\partial\Omega,h} \times W_{\partial\Omega,h}$ Gleichung (2.18). Dies liefert

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} c \mu_c \|(\mathbf{u}^n - \mathbf{u}_h^n, \bar{A}^n - \bar{A}_h^n)\|_{\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C}^2 \\ &\leq D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n)[(\mathbf{u}^n - \mathbf{u}_h^n, \bar{A}^n - \bar{A}_h^n)] - D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}_h^n, \bar{A}_h^n)[(\mathbf{u}^n - \mathbf{u}_h^n, \bar{A}^n - \bar{A}_h^n)] \\ &= -D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}_h^n, \bar{A}_h^n)[(\mathbf{u}^n - \mathbf{u}_h^n, \bar{A}^n - \bar{A}_h^n)] \\ &= -D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}_h^n, \bar{A}_h^n)[(\mathbf{u}^n - \mathbf{v}_h, \bar{A}^n - \bar{B}_h)] \\ &= -D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}_h^n, \bar{A}_h^n)[(\mathbf{u}^n - \mathbf{v}_h, \bar{A}^n - \bar{B}_h)] + D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n)[(\mathbf{u}^n - \mathbf{v}_h, \bar{A}^n - \bar{B}_h)]. \end{aligned}$$

Gleichung (2.16) und Satz 2.9 liefern damit

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} c \mu_c \|(\mathbf{u}^n - \mathbf{u}_h^n, \bar{A}^n - \bar{A}_h^n)\|_{\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C}^2 \\ &\leq \left| D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n)[(\mathbf{u}^n - \mathbf{v}_h, \bar{A}^n - \bar{B}_h)] - D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}_h^n, \bar{A}_h^n)[(\mathbf{u}^n - \mathbf{v}_h, \bar{A}^n - \bar{B}_h)] \right| \\ &\leq \|D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n) - D\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}_h^n, \bar{A}_h^n)\|_{\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C} \|(\mathbf{u}^n - \mathbf{v}_h, \bar{A}^n - \bar{B}_h)\|_{\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C} \\ &\leq C \|(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n) - (\mathbf{u}_h^n, \bar{A}_h^n)\|_{\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C} \|(\mathbf{u}^n - \mathbf{v}_h, \bar{A}^n - \bar{B}_h)\|_{\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C}. \end{aligned}$$

Division durch $\|(\mathbf{u}^n - \mathbf{u}_h^n, \bar{A}^n - \bar{A}_h^n)\|_{\mathbf{X}_{\partial\Omega}^C}$ liefert die Aussage. \square

2.4 Konvergenz des nichtglatten Newton-Verfahren

Ziel dieses Abschnitts ist es die Konvergenz des nichtglatten Newton-Verfahrens, vgl. S5) in Abschnitt 2.5, für das Nullstellenproblem aus Gleichung (2.13) nachzuweisen.

Das Nullstellenproblem (2.13) lautet:

Gegeben sei $\boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1} \in \mathbf{E}_h^p$. Finde $\mathbf{u}_h^n \in \mathbf{V}_{\partial\Omega,h}(\mathbf{u}_D)$ und $\bar{A}_h^n \in W_{\partial\Omega,h}(\mathbf{u}_D)$, sodass

$$\int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_h^n : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \ell_h(t_n, \mathbf{v}) = 0, \quad \mathbf{v} \in \mathbf{V}_{\partial\Omega,h}, \quad (2.19a)$$

$$2\mu L_c^2 \int_{\Omega} D\bar{A}_h^n \cdot D\bar{B} \, d\mathbf{x} - 2\mu_c \int_{\Omega} (\text{skew}(D\mathbf{u}_h^n) - \bar{A}_h^n) : \bar{B} \, d\mathbf{x} = 0, \quad \bar{B} \in W_{\partial\Omega,h}, \quad (2.19b)$$

mit

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_h^n = \mathbf{P}_K(\mathbf{T}_{E,\text{test}}^n) + \lambda \text{tr}(D\mathbf{u}_h^n) \mathbf{I} + 2\mu_c (\text{skew}(D\mathbf{u}_h^n) - \bar{A}_h^n), \quad (2.19c)$$

$$\mathbf{T}_{E,\text{test}}^n = 2\mu (\text{sym} D\mathbf{u}_h^n - \boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1}), \quad (2.19d)$$

$$\ell_h(t_n, \mathbf{v}) = t_n \int_{\Gamma_N} \mathbf{t}_N \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{a}, \quad (2.19e)$$

und der Orthogonalprojektion

$$\mathbf{P}_K(\boldsymbol{\tau})(\mathbf{x}) = P_K(\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x})) = \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) - \max\{0, |\text{dev}(\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}))| - K_0\} \frac{\text{dev}(\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}))}{|\text{dev}(\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}))|}. \quad (2.19f)$$

Um die Darstellung zu vereinfachen, vernachlässigen wir nun sämtliche Indizes der Orts- und Zeitdiskretisierung und analysieren das Nullstellenproblem (2.19). Dazu setzen wir (2.19c) und (2.19d) in (2.19a), übernehmen (2.19b) und schreiben für das entstehende System kurz:

Finde $(\mathbf{u}, \bar{A}) \in \mathbf{V}_{\partial\Omega,h}(\mathbf{u}_D) \times W_{\partial\Omega,h}(\mathbf{u}_D)$, sodass

$$D\mathcal{I}(\mathbf{u}, \bar{A})[(\mathbf{v}, \bar{B})] = 0, \quad (\mathbf{v}, \bar{B}) \in \mathbf{V}_{\partial\Omega,h} \times W_{\partial\Omega,h}. \quad (2.20)$$

Aus Satz 2.9 wissen wir, dass $D\mathcal{I}(\mathbf{u}, \bar{A})$ ist Lipschitz-stetig in $\mathbf{V}_{\partial\Omega,h} \times W_{\partial\Omega,h}$. Für den Rest des Abschnitts führen wir die Bezeichnung

$$F(\mathbf{u}, \bar{A}) = D\mathcal{I}(\mathbf{u}, \bar{A})$$

ein.

Wir wählen nun eine Basis $\{\phi_i\}$ bzw. $\{\psi_j\}$ von $\mathbf{V}_{\partial\Omega,h}$ bzw. $W_{\partial\Omega,h}$ und machen für die Lösung (\mathbf{u}, \bar{A}) von (2.20) den Ansatz

$$\mathbf{u} = \sum_{i \in \mathcal{I}} u_i \phi_i, \quad \bar{A} = \sum_{j \in \mathcal{J}} A_j \psi_j.$$

2 Diskrete Cosserat-Plastizität

Des Weiteren wählen wir eine Quadraturformel auf Ω bzw. Γ_N mit Stützstellen $\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h$ bzw. $\tilde{\boldsymbol{\xi}} \in \tilde{\Xi}_h$ und Gewichten w_ξ bzw. $w_{\tilde{\xi}}$. Daraus resultiert das nichtlineare Gleichungssystem (für alle $k \in \mathcal{I}$ und alle $l \in \mathcal{J}$)

$$\begin{aligned} t_n \sum_{\tilde{\boldsymbol{\xi}} \in \tilde{\Xi}_h} w_{\tilde{\xi}} \mathbf{t}_N(\tilde{\boldsymbol{\xi}}) \cdot \phi_k(\tilde{\boldsymbol{\xi}}) &= \sum_{i \in \mathcal{I}} \left(\lambda \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h} w_\xi \operatorname{tr} D\phi_i(\boldsymbol{\xi}) \cdot \operatorname{tr} D\phi_k(\boldsymbol{\xi}) \right. \\ &\quad \left. + 2\mu_c \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h} w_\xi \operatorname{skew} D\phi_i(\boldsymbol{\xi}) : D\phi_k(\boldsymbol{\xi}) \right) \underline{u}_i + (\mathbf{P}(\underline{u}))_k \\ &\quad - \sum_{j \in \mathcal{J}} \left(2\mu_c \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h} w_\xi \psi_j(\boldsymbol{\xi}) : D\phi_k(\boldsymbol{\xi}) \right) \underline{A}_j, \end{aligned} \quad (2.21a)$$

$$\begin{aligned} 0 &= - \sum_{i \in \mathcal{I}} \left(2\mu_c \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h} w_\xi \operatorname{skew} D\phi_i(\boldsymbol{\xi}) : \psi_l(\boldsymbol{\xi}) \right) \underline{u}_i \\ &\quad + \sum_{j \in \mathcal{J}} \left(2\mu L_c^2 \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h} w_\xi D\psi_j(\boldsymbol{\xi}) : D\psi_l(\boldsymbol{\xi}) \right. \\ &\quad \left. + 2\mu_c \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h} w_\xi \psi_j(\boldsymbol{\xi}) : \psi_l(\boldsymbol{\xi}) \right) \underline{A}_j, \end{aligned} \quad (2.21b)$$

dabei haben wir die Funktion

$$\begin{aligned} (\mathbf{P}(\underline{u}))_k &= \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h} w_\xi P_K \left(\sum_{i \in \mathcal{I}} (2\mu \operatorname{sym} D\phi_i(\boldsymbol{\xi}) \underline{u}_i) - 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1}(\boldsymbol{\xi}) \right) : D\phi_k(\boldsymbol{\xi}) \\ &= \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h} w_\xi P_K(\mathbf{T}_\xi(\underline{u})) : D\phi_k(\boldsymbol{\xi}), \end{aligned} \quad (2.21c)$$

$$\mathbf{T}_\xi(\underline{u}) = \sum_{i \in \mathcal{I}} (2\mu \operatorname{sym} D\phi_i(\boldsymbol{\xi}) \underline{u}_i) - 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1}(\boldsymbol{\xi}), \quad (2.21d)$$

verwendet.

Zur besseren Darstellung definieren wir die Matrizen

$$\begin{aligned} (\mathbf{A})_{ki} &= \lambda \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h} w_\xi \operatorname{tr} D\phi_i(\boldsymbol{\xi}) \cdot \operatorname{tr} D\phi_k(\boldsymbol{\xi}), & (\mathbf{M})_{lj} &= 2\mu L_c^2 \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h} w_\xi D\psi_j(\boldsymbol{\xi}) : D\psi_l(\boldsymbol{\xi}), \\ (\mathbf{C}_1)_{ki} &= 2\mu_c \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h} w_\xi \operatorname{skew} D\phi_i(\boldsymbol{\xi}) : D\phi_k(\boldsymbol{\xi}), & (\mathbf{C}_3)_{lj} &= 2\mu_c \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h} w_\xi \psi_j(\boldsymbol{\xi}) : \psi_l(\boldsymbol{\xi}), \\ (\mathbf{C}_2)_{kj} &= 2\mu_c \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h} w_\xi \psi_j(\boldsymbol{\xi}) : D\phi_k(\boldsymbol{\xi}), \end{aligned}$$

und den Vektor

$$(\ell)_k = t_n \sum_{\tilde{\boldsymbol{\xi}} \in \tilde{\Xi}_h} w_{\tilde{\xi}} \mathbf{t}_N(\tilde{\boldsymbol{\xi}}) \cdot \phi_k(\tilde{\boldsymbol{\xi}}),$$

und erhalten für (2.21)

$$\begin{bmatrix} \mathbf{P}(\underline{u}) \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{A} + \mathbf{C}_1 & -\mathbf{C}_2 \\ -\mathbf{C}_2^T & \mathbf{M} + \mathbf{C}_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{u} \\ \underline{A} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ell \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.22)$$

Nichtglatte Newton-Verfahren. Um für das Problem (2.22) ein Newton-Verfahren formulieren zu können, benötigen wir ein gutes Konzept für die lokale Approximation nichtglatter Funktionen, dieses führen wir in diesem Abschnitt ein.

Das Konzept semiglatte Funktionen wurde bereits 1977 von Mifflin für Funktionale eingeführt. Für Funktionen $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ haben dann Qi und Sun 1993 die Begrifflichkeit übertragen. Wesentliche Beiträge lieferten insbesondere auch Kummer (siehe [KK02]) und Pang (siehe [FP03]).

Die semiglatte Funktionen besitzen eine lokale Approximationseigenschaft, die für ein nichtglattes Newton-Verfahren hinreichend ist. Wir bezeichnen im folgenden mit $X \rightrightarrows Y$ eine Abbildung, die als Bild auch Mengen besitzen kann.

Definition 2.10 Seien $X, Y \subset \mathbb{R}^n$ und $M : X \rightrightarrows \text{Lin}(X, Y)$ eine mengenwertige Abbildung. Existiert eine Umgebung U von $x \in X$, sodass gilt $M(U) \subset C$ für eine beschränkte bzw. kompakte Menge C , dann nennen wir M lokal beschränkt bzw. lokal kompakt.

Definition 2.11 (Newton-Abbildung) Seien $X, Y \subset \mathbb{R}^n$ und $F : X \rightarrow Y$. Und sei $M : X \rightrightarrows \text{Lin}(X, Y)$ lokal beschränkt. Ist für $x^*, d \in X$ die Bedingung

$$M(x^* + d) d := \{A d : A \in M(x^* + d)\} \subset F(x^* + d) - F(x^*) + o(d) B_1(0) \quad (2.23)$$

erfüllt und $M(x^* + d) d$ nichtleer, dann heißt M eine Newton-Abbildung von F in x^* .

Wir wollen nun eine geeignete Newton-Abbildung für unser Problem (2.22) finden. Dafür müssen wir etwas ausholen.

Verallgemeinerte Ableitungsbegriffe. Sei $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ eine lokal Lipschitz-stetige Funktionen, d.h. für alle $x \in \mathbb{R}^n$ gibt es eine Umgebung U von x (mit $x \in U$) und eine Konstante $L > 0$, sodass die Abschätzung

$$\|F(x) - F(y)\|_{\mathbb{R}^m} \leq L \|x - y\|_{\mathbb{R}^n}, \quad x, y \in U,$$

gilt. Wir bezeichnen die Menge der lokal Lipschitz-stetigen Funktionen von \mathbb{R}^n nach \mathbb{R}^m mit $C^{0,1}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)$. Nach dem Satz von Rademacher ist dann F fast überall Fréchet-differenzierbar. Wir bezeichnen die Menge der Stellen an denen die Fréchet-Ableitung DF von F existiert mit Θ_F .

Definition 2.12 (B-Subdifferential) Wir nennen die mengenwertige verallgemeinerte Ableitung

$$\partial_B F(\tilde{x}) = \left\{ \lim_{\substack{x \rightarrow \tilde{x} \\ x \in \Theta_F}} DF(x) \right\}$$

das B-Subdifferential von F .

Definition 2.13 (Subdifferential nach Clarke) *Wir nennen die mengenwertige verallgemeinerte Ableitung*

$$\partial_C F(\tilde{x}) = \text{conv } \partial_B F(\tilde{x})$$

Subdifferential nach Clarke von F .

Für die Klasse der stückweise stetig Fréchet-differenzierbaren Funktionen, kann das Subdifferential von Clarke mit dem folgenden Lemma berechnet werden.

Lemma 2.14 *Sei $F \in C^{0,1}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)$ und bezeichne $\{F_s\}$ eine endliche Familie von stetig Fréchet-differenzierbaren Funktionen von \mathbb{R}^n nach \mathbb{R}^m , sodass für alle $x \in \mathbb{R}^n$ die Menge der aktiven Indizes $I(x) = \{s: F(x) = F_s(x)\}$ nichtleer ist. Dann gilt*

$$\partial_C F(x) = \text{conv} \left\{ DF_s(x): x \in I^{-1}(s) \text{ und } DF(x_k) = DF_s(x_k) \text{ für } (x_k) \text{ mit } x_k \rightarrow x \right\}$$

Beweis. Siehe [KK02, Abschnitt 1.3]. □

Lemma 2.15 *Sei $K_0 \in \mathbb{R}^+$. Das Subdifferential nach Clarke von*

$$P_K(\boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} \boldsymbol{\theta} - \max\{0, |\text{dev}(\boldsymbol{\theta})| - K_0\} \frac{\text{dev}(\boldsymbol{\theta})}{|\text{dev}(\boldsymbol{\theta})|}, & \text{dev } \boldsymbol{\theta} \neq 0 \\ \boldsymbol{\theta}, & \text{dev } \boldsymbol{\theta} = 0 \end{cases}$$

ist gegeben durch

$$\partial_C P_K(\boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} \mathbf{I} & |\text{dev } \boldsymbol{\theta}| < K_0, \\ \text{conv} \left\{ \mathbf{I}, \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \frac{K_0}{|\text{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \left((\mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}) - \frac{\text{dev}(\boldsymbol{\theta})}{|\text{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \otimes \frac{\text{dev}(\boldsymbol{\theta})}{|\text{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \right) \right\} & |\text{dev } \boldsymbol{\theta}| = K_0, \\ \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \frac{K_0}{|\text{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \left((\mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}) - \frac{\text{dev}(\boldsymbol{\theta})}{|\text{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \otimes \frac{\text{dev}(\boldsymbol{\theta})}{|\text{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \right) & |\text{dev } \boldsymbol{\theta}| > K_0, \end{cases}$$

wobei wir den auftretenden Tensor vierter Stufe durch seine Wirkung

$$(\boldsymbol{\theta} \otimes \boldsymbol{\theta})\boldsymbol{\eta} = (\boldsymbol{\theta} : \boldsymbol{\eta}) \boldsymbol{\theta}$$

definieren.

Beweis. Wir führen zuerst die für die Berechnung notwendigen elementaren Fréchet-Ableitung auf. Aufbauend auf

$$D(\max\{0, \cdot\})(s) = \begin{cases} 1 & , \quad s > 0 \\ 0 & , \quad s < 0 \end{cases}, \quad D(|\cdot|)(\boldsymbol{\theta}) = \frac{\boldsymbol{\theta}}{|\boldsymbol{\theta}|}, \quad \boldsymbol{\theta} \neq 0$$

erhalten wir mit der Kettenregel

$$D(|\cdot|^{-1})(\boldsymbol{\theta}) = -\frac{\boldsymbol{\theta}}{|\boldsymbol{\theta}|^3}, \quad \boldsymbol{\theta} \neq 0,$$

und weiter für $f(\boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{\theta} \cdot |\boldsymbol{\theta}|^{-1}$ mit der Produktregel das Ergebnis

$$Df(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{|\boldsymbol{\theta}|} \left(\mathbf{I} - \frac{\boldsymbol{\theta}}{|\boldsymbol{\theta}|} \otimes \frac{\boldsymbol{\theta}}{|\boldsymbol{\theta}|} \right), \quad \boldsymbol{\theta} \neq 0.$$

Siehe auch [SH98, Lemma 3.2]. Daraus folgt für $g(\operatorname{dev} \boldsymbol{\theta}) = \operatorname{dev} \boldsymbol{\theta} \cdot |\operatorname{dev} \boldsymbol{\theta}|^{-1}$ durch nochmalige Verwendung der Kettenregel

$$Dg(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{|\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \left(\left(\mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \right) - \frac{\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})}{|\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \otimes \frac{\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})}{|\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \right), \quad \operatorname{dev} \boldsymbol{\theta} \neq 0.$$

Schließlich erhalten wir für $|\operatorname{dev} \boldsymbol{\theta}| > K_0$ das Ergebnis

$$\begin{aligned} & DP_K(\boldsymbol{\theta}) \\ &= \mathbf{I} - \frac{\operatorname{dev} \boldsymbol{\theta}}{|\operatorname{dev} \boldsymbol{\theta}|} \otimes \frac{\operatorname{dev} \boldsymbol{\theta}}{|\operatorname{dev} \boldsymbol{\theta}|} \\ &\quad - (|\operatorname{dev} \boldsymbol{\theta}| - K_0) \frac{1}{|\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \left(\left(\mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \right) - \frac{\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})}{|\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \otimes \frac{\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})}{|\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \right) \\ &= \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \frac{K_0}{|\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \left(\left(\mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \right) - \frac{\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})}{|\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \otimes \frac{\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})}{|\operatorname{dev}(\boldsymbol{\theta})|} \right), \quad |\operatorname{dev} \boldsymbol{\theta}| > K_0. \end{aligned}$$

Nun betrachten wir die Folge $(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_k)_{k \in \mathbb{N}}$ mit $|\operatorname{dev} \tilde{\boldsymbol{\theta}}_k| > K_0$ bzw. $|\operatorname{dev} \tilde{\boldsymbol{\theta}}_k| < K_0$ und $\lim_{k \rightarrow \infty} |\operatorname{dev} \tilde{\boldsymbol{\theta}}_k| = K_0$, dann erhalten wir mit Lemma 2.14 die Aussage des Lemmas. \square
Für die Durchführbarkeit des nichtglatten Newton-Verfahren benötigen wir, dass

Lemma 2.16 *Sei $A \in \partial_C P_K(\boldsymbol{\theta})$, dann ist A symmetrisch positiv semidefinit. Insbesondere existiert für jedes $\tilde{\boldsymbol{\theta}} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ mit $|\operatorname{dev} \tilde{\boldsymbol{\theta}}| \geq K_0$ ein $A \in \partial_C P_K(\tilde{\boldsymbol{\theta}})$ mit $A : \operatorname{dev} \tilde{\boldsymbol{\theta}} = 0$.*

Beweis. Wegen Lemma A.4 ist P_K die Fréchet-Ableitung der konvexen Funktion

$$\psi_K(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2} |\boldsymbol{\theta}|^2 - \frac{1}{2} |\boldsymbol{\theta} - P_K(\boldsymbol{\theta})|^2.$$

Somit gilt nach [KZ05, Theorem 6.2.1] für die zweite Gâteaux-Ableitung von ψ_K

$$D^2 \psi_K(\boldsymbol{\theta})[\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\tau}] \geq 0, \quad \boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}.$$

Jedes Element aus $\partial_B P_K$ ist also symmetrisch positiv semidefinit. Dies überträgt sich auch auf die Elemente aus $\partial_C P_K$, da die Menge der symmetrisch positiv semidefiniten Tensoren konvex ist. Ferner rechnen wir nach:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \frac{K_0}{|\operatorname{dev}(\tilde{\boldsymbol{\theta}})|} \left(\left(\mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \right) - \frac{\operatorname{dev}(\tilde{\boldsymbol{\theta}})}{|\operatorname{dev}(\tilde{\boldsymbol{\theta}})|} \otimes \frac{\operatorname{dev}(\tilde{\boldsymbol{\theta}})}{|\operatorname{dev}(\tilde{\boldsymbol{\theta}})|} \right) \right) \operatorname{dev} \tilde{\boldsymbol{\theta}} \\ &= \left(\mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} - \frac{\operatorname{dev}(\tilde{\boldsymbol{\theta}})}{K_0} \otimes \frac{\operatorname{dev}(\tilde{\boldsymbol{\theta}})}{K_0} \right) \operatorname{dev} \tilde{\boldsymbol{\theta}} = \operatorname{dev} \tilde{\boldsymbol{\theta}} - \frac{K_0^2}{K_0^2} \operatorname{dev} \tilde{\boldsymbol{\theta}} = 0. \end{aligned}$$

\square

Definition 2.17 (Semiglatt)

a) Eine Funktion F nennen wir semiglatt in x^* , genau dann wenn

$$\sup_{A \in \partial_C F(x^*+d)} |F(x^*+d) - F(x^*) - A d| \leq o(|d|) .$$

b) Eine semiglatte Funktion F in x^* nennen wir strikt semiglatt in x^* , falls gilt

$$\sup_{A \in \partial_C F(x^*+d)} |F(x^*+d) - F(x^*) - A d| \leq O(|d|^2) .$$

Lemma 2.18 Seien F und G Funktionen von \mathbb{R}^n nach \mathbb{R}^n , und F sei (strikt) semiglatt in $x^* \in \mathbb{R}^n$ und G sei zweimal stetig Fréchet-differenzierbar. Dann ist die Funktion $H := F + G$ (strikt) semiglatt.

Beweis. Ist F semiglatt in $x^* \in \mathbb{R}^n$, dann gilt

$$\sup_{A \in \partial_C F(x^*+d)} |F(x^*+d) - F(x^*) - A d| \leq o(|d|) .$$

Für G existiert eine Konstante $C > 0$, sodass gilt:

$$|G(x^*) - G(x^*+d) + DG(x^*+d)d| \leq C|d|^2 .$$

Wir haben $\partial_C H(x) = \partial_C F(x) + DG(x)$ und erhalten damit

$$\begin{aligned} & \sup_{A \in \partial_C H(x^*+d)} |H(x^*+d) - H(x^*) - A d| \\ &= \sup_{A \in \partial_C F(x^*+d)} |(F+G)(x^*+d) - (F+G)(x^*) - (A + DG(x^*+d))d| \\ &\leq \sup_{A \in \partial_C F(x^*+d)} |F(x^*+d) - F(x^*) - A d| \\ &\quad + |G(x^*+d) - G(x^*) - DG(x^*+d)d| \\ &\leq o(|d|) + C|d|^2 . \end{aligned}$$

□

Lemma 2.19 Sei $X \subset \mathbb{R}^n$ eine offene Menge und $f: X \rightarrow \mathbb{R}$. Dann gilt: Ist f stetig differenzierbar in einer Umgebung von $x^* \in X$, dann ist f semiglatt in x^* . Ist zusätzlich Df Lipschitz-stetig in einer Umgebung von $x^* \in X$, dann ist f sogar strikt semiglatt in x^* . Ist f konvex in einer Umgebung von $x^* \in X$, dann ist f semiglatt in x^* .

Beweis. [FP03, Proposition 7.4.5].

□

Lemma 2.20 Seien $X, Y \subset \mathbb{R}^n$ offene Mengen, $g: Y \rightarrow \mathbb{R}$ bzw. $F: X \rightarrow Y$ (strikt) semiglatt in $y^* := F(x^*)$ bzw. x^* . Dann ist $g \circ F$ (strikt) semiglatt in x^* .

Beweis. [FP03, Proposition 7.4.4]. □

Lemma 2.21 ∂P_K aus Lemma 2.15 und F aus (2.20) bzw. (2.22) ist strikt semiglatt.

Beweis. Folgt direkt aus den Lemmata 2.18, 2.19 und 2.20. □

Satz 2.22 Für das nichtglatte Nullstellenproblem (2.20) beschreibt

$$0 \in F(\mathbf{u}^k, \bar{A}^k) + \partial_C F(\mathbf{u}^k, \bar{A}^k)[(\mathbf{u}^{k+1} - \mathbf{u}^k, \bar{A}^{k+1} - \bar{A}^k)] ,$$

ein konvergentes nichtglattes Newton-Verfahren. Insbesondere konvergiert das Verfahren lokal quadratisch.

Beweis. Die Aussage folgt durch Nachweis der Voraussetzung von [KK02, Theorem 10.7]. Dazu benötigen wir insbesondere Nachweise für die beiden Bedingungen (CI) und (CA) aus [KK02, Theorem 10.7].

Die Gültigkeit der Injektivitätsbedingung (CI) in einer Umgebung der Lösung wird garantiert durch [KK02, Theorem 10.9], wofür insbesondere Lemma 2.16 und Lemma 1.5 benötigt werden.

Die Gültigkeit der Approximationsbedingung (CA) folgt direkt aus Lemma 2.21, insbesondere ist die Konvergenzordnung lokal quadratisch, da F sogar strikt semiglatt ist. □

2.5 Algorithmus

Um eine numerische Approximation der Lösung der infinitesimalen Cosserat-Plastizität zu gewinnen, wählen wir als Ansatzpunkt für unseren Algorithmus die Formulierung als Lipschitz-stetiges Nullstellenproblem wie in (2.13). Wir geben das Problem hier noch einmal an:

Sei $\boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^0(\boldsymbol{\xi}) = 0$ für alle $\boldsymbol{\xi} \in \boldsymbol{\Xi}_h$. Finde $\mathbf{u}_h^n \in \mathbf{V}_{\Gamma,h}(\mathbf{u}_D)$ und $\bar{A}_h^n \in W_{\Gamma,h}(\mathbf{u}_D)$ für alle $n = 1, \dots, N$, sodass die Gleichgewichtsbedingungen

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_h^n : D\mathbf{v} &= \ell_h(t_n, \mathbf{v}) , & \mathbf{v} \in \mathbf{V}_{\Gamma,h} , \\ 2\mu L_c^2 \int_{\Omega} D\bar{A}_h^n \cdot D\bar{B} &= 2\mu_c \int_{\Omega} (\text{skew}(D\mathbf{u}_h^n) - \bar{A}_h^n) : \bar{B} , & \bar{B} \in W_{\Gamma,h} , \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_h^n &= P_K(\mathbf{T}_{E,\text{test}}^n) + \lambda \text{tr}(D\mathbf{u}_h^n) \mathbf{I} + 2\mu_c (\text{skew}(D\mathbf{u}_h^n) - \bar{A}_h^n) , \\ \mathbf{T}_{E,\text{test}}^n &= 2\mu (\text{sym } D\mathbf{u}_h^n - \boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^{n-1}) , \end{aligned}$$

erfüllt sind. Anschließend bestimmen wir $\boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^n(\boldsymbol{\xi})$ für alle $\boldsymbol{\xi} \in \boldsymbol{\Xi}_h$ durch

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{p,h}^n(\boldsymbol{\xi}) = \text{sym } D\mathbf{u}_h^n(\boldsymbol{\xi}) - \frac{1}{2\mu} P_K(\mathbf{T}_{E,\text{test}}^n(\boldsymbol{\xi})) .$$

Der folgende Algorithmus löst das voll-diskrete primale Problem der infinitesimalen Cosserat-Plastizität mithilfe des nichtglatten Newton-Verfahren aus Abschnitt 2.4.

S0) Wähle $n_{\text{opt}} \in \mathbb{N}$, eine Zeitschrittweite Δt_1 , setze $t_0 = 0$, $\varepsilon_{p,h}^0(\boldsymbol{\xi}) = 0$ für alle $\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h$ und $n = 1$.

S1) Setze $k = 0$, $t_n = t_{n-1} + \Delta_n$ und wähle geeignete Startwerte $\mathbf{u}^{n,0}$, $\bar{A}^{n,0}$ und setze die Dirichlet-Randwerte $\mathbf{u}^{n,0}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_D^n(\mathbf{x})$ für alle $\mathbf{x} \in \Gamma \cap \mathcal{N}$ und $\bar{A}^{n,0}(\mathbf{x}) = \bar{A}_D^n(\mathbf{x})$ für alle $\mathbf{x} \in \Gamma \cap \mathcal{N}$.

S2) Berechne in jedem Quadraturpunkt $\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\theta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}) &= \mathbf{T}_{E,\text{test}}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}) = 2\mu(\text{sym}(D\mathbf{u}^{n,k}(\boldsymbol{\xi})) - \varepsilon_{p,h}^{n-1}(\boldsymbol{\xi})) , \\ \boldsymbol{\eta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{\text{dev}(\boldsymbol{\theta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}))}{|\text{dev}(\boldsymbol{\theta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}))|} , \\ \mathbf{T}_E^{n,k}(\boldsymbol{\xi}) &= \begin{cases} \boldsymbol{\theta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}) & |\text{dev}(\boldsymbol{\theta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}))| \leq K_0 , \\ \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\theta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi})) \cdot \mathbf{I} + \frac{K_0}{|\text{dev}(\boldsymbol{\theta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}))| - K_0} \text{dev}(\boldsymbol{\theta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi})) & |\text{dev}(\boldsymbol{\theta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}))| > K_0 , \end{cases} \\ \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}) &= \mathbf{T}_E^{n,k}(\boldsymbol{\xi}) + \lambda \text{tr}(D\mathbf{u}^n)(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{I} + 2\mu_c(\text{skew}(D\mathbf{u}^n(\boldsymbol{\xi})) - \bar{A}^n(\boldsymbol{\xi})) . \end{aligned}$$

S3) Berechne das Residuum $F^{n,k}[\mathbf{v}, \bar{B}]$

$$\begin{aligned} F^{n,k}[\mathbf{v}, \bar{B}] &= \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{n,k} : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} - t_n \int_{\Omega} \mathbf{t}_N \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{a} \\ &\quad + 2\mu L_c^2 \int_{\Omega} D\bar{A}^{n,k} \cdot D\bar{B} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{n,k} : \bar{B} \, d\mathbf{x} . \end{aligned}$$

Falls $\|F^{n,k}\|$ klein genug, setze $\mathbf{u}^n = \mathbf{u}^{n,k}$ und $\bar{A}^n = \bar{A}^{n,k}$. Berechne für alle $\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h$ die neue plastische Verzerrung

$$\varepsilon_{p,h}^n(\boldsymbol{\xi}) = \text{sym}(D\mathbf{u}^{n,k}(\boldsymbol{\xi})) - \frac{1}{2\mu} \boldsymbol{\theta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}) ,$$

setze $\Delta t_{n+1} = \frac{n_{\text{opt}}}{k} \Delta t_n$, $n := n + 1$ und gehe zum nächsten Zeitschritt nach S1).

S4) Berechne für jeden Quadraturpunkt $\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h$ die konsistente Linearisierung

$$\mathbf{C}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} \mathbf{I} & |\text{dev}(\boldsymbol{\theta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}))| \leq K_0 \\ \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \frac{K_0}{|\text{dev}(\boldsymbol{\theta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}))|} \left((\mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}) - \boldsymbol{\eta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}) \otimes \boldsymbol{\eta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}) \right) & |\text{dev}(\boldsymbol{\theta}^{n,k}(\boldsymbol{\xi}))| > K_0 \end{cases}$$

und definiere die Bilinearform

$$\begin{aligned} a^{n,k}[(\mathbf{w}, \bar{C}), (\mathbf{v}, \bar{B})] &= 2\mu \int_{\Omega} \text{sym}(D\mathbf{w}) : \mathbf{C}^{n,k} : \text{sym}(D\mathbf{v}) \, d\mathbf{x} + \lambda \int_{\Omega} \text{tr}(D\mathbf{w}) \text{tr}(D\mathbf{v}) \, d\mathbf{x} \\ &\quad + 2\mu_c \int_{\Omega} (\text{skew}(D\mathbf{w}) - \bar{C}) : (\text{skew}(D\mathbf{v}) - \bar{B}) \, d\mathbf{x} + 2\mu L_c^2 \int_{\Omega} D\bar{C} : D\bar{B} \, d\mathbf{x} . \end{aligned}$$

2 Diskrete Cosserat-Plastizität

S5) Berechne $(\mathbf{w}^{n,k}, \bar{C}^{n,k}) \in \mathbf{V}_{\Gamma,h} \times W_{\Gamma,h}$ als Lösung des linearen Variationsproblem

$$a^{n,k}[(\mathbf{w}^{n,k}, \bar{C}^{n,k}), (\mathbf{v}, \bar{B})] = -F^{n,k}[\mathbf{v}, \bar{B}], \quad (\mathbf{v}, \bar{B}) \in \mathbf{V}_{\Gamma,h} \times W_{\Gamma,h}$$

setze $\mathbf{u}^{n,k+1} = \mathbf{u}^{n,k} + \mathbf{w}^{n,k}$ und $\bar{A}^{n,k+1} = \bar{A}^{n,k} + \bar{C}^{n,k}$. Dann gehe zum nächsten Newtonschritt mit $k := k + 1$ nach S2).

Erklärung des Algorithmus. Wir diskutieren nun im Folgenden die einzelnen Schritte des Algorithmus etwas genauer.

In Schritt S0) sollte die Schrittweite Δt so gewählt werden, dass im ersten Zeitschritt, d. h. $n = 1$, in jedem Quadraturpunkt ξ die Bedingung $|\text{dev}(\boldsymbol{\theta}^{n,k}(\xi))| < K_0$ erfüllt ist, es also kein plastisches Fließen gibt, sondern ein rein elastisches Modell gilt.

Betrachten wir nun Schritt S1). Hier müssen geeignete Startwerte für die Newtoniteration gewählt werden. Dafür verwenden wir eine lineare Extrapolation der letzten beiden Zeitschritte t_{n-1} bzw. t_n mit den Lösungen $(\mathbf{u}^{n-1}, \bar{A}^{n-1})$ bzw. $(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n)$. Durch die Extrapolation wird die globale Konvergenz des Algorithmus in den ersten Zeitschritten verbessert. Da die Extrapolierte für elastische Lastfälle mit der Lösung übereinstimmt kann so schnell hin zum Beginn der plastischen Verformung simuliert werden.

In Schritt S2) wird in einem Radial-Return Algorithmus in jedem Quadraturpunkt die Projektion der Testspannung $\mathbf{T}_{E,\text{test}}^{n,k}(\xi)$ auf die Menge der zulässigen Spannungen berechnet. Ausgehend von dieser Projektion wird dann in Schritt S3) das aktuelle Residuum berechnet. Die Norm des Residuums berechnen wir anschließend in der Euklidischen Norm $\|\cdot\|$. Ist die Residuumsnorm klein genug wird die Fließregel in jedem Quadraturpunkt ausgewertet und die neue plastische Verzerrung berechnet und abgespeichert.

Die Berechnung der Newton-Korrektur in Schritt S5) stellt die schwierigste Aufgabe in dem angegebenen Algorithmus dar. Zur parallelen numerischen Lösung des LGS verwenden wir ein vorkonditioniertes CG-Verfahren. Die Vorkonditionierung erfolgt über ein paralleles Mehrgitterverfahren.

Als Glätter verwenden wir überwiegend einen Punkt-Block-Gauß-Seidel-Glätter in der symmetrisierten Variante. In unseren Experimenten haben sich 2 bis 5 Vor- bzw. Nachglättungsschritte als ausreichend herausgestellt. Für den parallelen Einsatz wird der Glätter auf jedem Prozessorgebiet exakt berechnet und anschließend gedämpft aufaddiert.

Die Grobgitterkorrektur wird über ein vorkonditioniertes GMRES-Verfahren bestimmt. Sind noch nicht allzu viele Quadraturpunkte plastisch, so hat sich das Punkt-Block-Jacobi-Verfahren als parallel gut einsetzbar erwiesen. Für $\mu_c = 0$ degeneriert das eingesetzte Modell zum Modell der perfekten Plastizität, und eine Grenzlast kann auftreten. In unseren Experimenten hat sich gezeigt, dass ein parallel angepasster direkter Löser für kleine μ_c auch noch für fast vollständig plastifizierte Lastfälle einsetzbar ist.

Beim direkten parallelen Lösen wird auf dem Masterprozess die gesamte Systemmatrix und die rechte Seite aufgebaut. Nach erfolgreichem Lösen mit SuperLU [DEG+99] wird die Korrektur anschließend wieder an die übrigen Prozesse verschickt. Diese Verfahrensweise ist allerdings für große Grobgitter ungeeignet, ebenso leidet die parallele Skalierbarkeit drastisch unter diesem nicht parallelisierbaren Anteil des Algorithmus. Eine andere Möglichkeit besteht durch den Einsatz von SuperLU Korrekturen für jeden Prozessor und die anschließende Mittlung. Dieses Verfahren ist aber wieder nahe der Grenzlast schlecht. Sehr gute Ergebnisse in Bezug auf parallele Skalierbarkeit und zuverlässiges Lösen auch in der Nähe der Grenzlast haben wir durch eine überlappende Variante erhalten.

2.6 Das duale Inkrementproblem

Duale Formulierung des zeitdiskreten Problem. Wie auch im klassischen Fall ist für das Cosserat-Modell die duale Formulierung von Interesse. Für das duale Problem werden wir die enggeknapfte Beziehung zum klassischen Modell für $\mu_c \rightarrow 0$ herausarbeiten. Wir werden die Regularisierungseigenschaft des betrachteten Modells geeignet verdeutlichen, indem wir zeigen, dass der symmetrische Teil der verallgemeinerten Cosserat-Spannung für den Grenzübergang $\mu_c \rightarrow 0$ gegen die Spannung der klassischen Lösung konvergiert. Wir folgen dabei [NCMW07].

Wir geben nochmal das primale inkrementelle Problem des infinitesimalen elastoplastischen Cosserat-Modells an:

Gegeben sei $\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} \in \mathbf{E}^p$. Finde $\mathbf{u}^n \in \mathbf{V}_\Gamma(\mathbf{u}_D)$ und $\bar{A}^n \in W_\Gamma$, sodass die primale Gesamtenergie

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}, \bar{A}) &= \frac{1}{2\mu} \int_{\Omega} \psi_{\mathbf{K}}(2\mu(\text{sym}(D\mathbf{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1})) \, d\mathbf{x} + \frac{\lambda}{2} \int_{\Omega} (\text{tr } D\mathbf{u})^2 \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \mu_c \int_{\Omega} |\text{skew}(D\mathbf{u}) - \bar{A}|^2 \, d\mathbf{x} + \mu L_c^2 \int_{\Omega} |D\bar{A}|^2 \, d\mathbf{x} - \ell^n(\mathbf{u}^n) \end{aligned} \quad (2.24a)$$

minimal ist. In der Lösung gelten die konstitutiven (punktweisen) Beziehungen:

$$\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n(\mathbf{x}) = P_K(\mathbf{C}(\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x}))) , \quad (2.24b)$$

$$\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n(\mathbf{x}) = 2\mu_c(\text{skew } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) - \bar{A}^n(\mathbf{x})) , \quad (2.24c)$$

$$\mathbf{m}^n(\mathbf{x}) = 2\mu L_c^2 D\bar{A}^n(\mathbf{x}) . \quad (2.24d)$$

Dazu definieren wir nun eine duale Formulierung:

Gegeben sei $\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} \in \mathbf{E}^p$. Finde $\hat{\boldsymbol{\sigma}}^n \in \mathbf{S}$ und $\mathbf{m}^n \in \mathbf{M}$, sodass die duale Gesamtenergie

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{m}) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \mathbf{C}^{-1} : \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \frac{1}{4\mu_c} \int_{\Omega} |\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}|^2 \, d\mathbf{x} + \frac{1}{4\mu L_c^2} \int_{\Omega} |\mathbf{m}|^2 \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} \, d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{4\mu} \int_{\Omega} |\text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}|^2 \, d\mathbf{x} + \frac{1}{18\kappa} \int_{\Omega} (\text{tr } \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \frac{1}{4\mu_c} \int_{\Omega} |\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}|^2 \, d\mathbf{x} + \frac{1}{4\mu L_c^2} \int_{\Omega} |\mathbf{m}|^2 \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} \, d\mathbf{x} , \end{aligned} \quad (2.25a)$$

wobei $3\kappa = 3\lambda + 2\mu$, unter den Nebenbedingungen

$$\phi(\text{sym}(\hat{\boldsymbol{\sigma}})) \leq 0 , \quad (2.25b)$$

$$\int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}} : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} = \ell(\mathbf{v}) , \quad \mathbf{v} \in \mathbf{V}_\Gamma , \quad (2.25c)$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{m} : D\bar{B} \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \bar{B} \, d\mathbf{x} , \quad \bar{B} \in W_\Gamma \quad (2.25d)$$

minimal ist.

Karush-Kuhn-Tucker System des dualen Problems. Wir stellen nun eine notwendige Bedingung für eine Lösung der Optimierungsaufgabe (2.25) auf. Wir fassen die Gleichheitsnebenbedingungen in der Menge

$$\begin{aligned}
 (\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{m}) \in \mathbf{K}(\ell) = & \left\{ \hat{\boldsymbol{\sigma}} \in \mathbf{S}, \mathbf{m} \in L_2(\Omega, \mathbb{R}^{3 \times 3 \times 3}) \mid \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \in K \text{ fast überall und} \right. \\
 & \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}} : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} = \ell(\mathbf{v}), \quad \mathbf{v} \in \mathbf{V}_{\Gamma}, \quad (2.26) \\
 & \left. \int_{\Omega} \mathbf{m} : D\bar{B} \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \bar{B} \, d\mathbf{x}, \quad \bar{B} \in W_{\Gamma} \right\}
 \end{aligned}$$

zusammen, und formulieren das Lagrangefunktional. Wir zerlegen die Spannung $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\alpha}$ in einen symmetrischen $\boldsymbol{\sigma} = \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ und schiefsymmetrischen Anteil $\boldsymbol{\alpha} = \text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}$. Wir erhalten das Lagrangefunktional

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{m}, \Lambda, \mathbf{u}, \bar{A}) = & \mathcal{D}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{m}) + \int_{\Omega} \Lambda \phi(\boldsymbol{\sigma}) \, d\mathbf{x} \\
 & - \int_{\Omega} (\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\alpha}) : D\mathbf{u} \, d\mathbf{x} + \ell(\mathbf{u}) \\
 & - \int_{\Omega} \mathbf{m} : D\bar{A} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} (\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\alpha}) : \bar{A} \, d\mathbf{x},
 \end{aligned}$$

mit den Lagrangemultiplikatoren Λ , \mathbf{u} und \bar{A} . Ein Sattelpunkt $(\boldsymbol{\sigma}^n, \boldsymbol{\alpha}^n, \mathbf{m}^n, \Lambda^n, \mathbf{u}^n, \bar{A}^n)$ ist eine kritische Stelle von \mathcal{L} wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind: für alle $\boldsymbol{\tau}$ gilt

$$\begin{aligned}
 0 = & D_{\boldsymbol{\sigma}^n} \mathcal{L}(\boldsymbol{\sigma}^n, \boldsymbol{\alpha}^n, \mathbf{m}^n, \Lambda^n, \mathbf{u}^n, \bar{A}^n)[\boldsymbol{\tau}] \\
 = & \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}^n : \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\tau} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \Lambda^n D\phi(\boldsymbol{\sigma}^n) : \boldsymbol{\tau} \, d\mathbf{x} \\
 & - \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : D\mathbf{u}^n \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \bar{A}^n \, d\mathbf{x} \\
 = & \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}^n : \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\tau} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \Lambda^n D\phi(\boldsymbol{\sigma}^n) : \boldsymbol{\tau} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} (\text{sym } D\mathbf{u}^n - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}) : \boldsymbol{\tau} \, d\mathbf{x},
 \end{aligned}$$

für alle $\boldsymbol{\beta}$ gilt

$$\begin{aligned}
 0 = & D_{\boldsymbol{\alpha}^n} \mathcal{L}(\boldsymbol{\sigma}^n, \boldsymbol{\alpha}^n, \mathbf{m}^n, \Lambda^n, \mathbf{u}^n, \bar{A}^n)[\boldsymbol{\beta}] \\
 = & \int_{\Omega} \frac{1}{2\mu_c} \boldsymbol{\alpha}^n : \boldsymbol{\beta} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \boldsymbol{\beta} : D\mathbf{u}^n \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \boldsymbol{\beta} : \bar{A}^n \, d\mathbf{x} \\
 = & \int_{\Omega} \frac{1}{2\mu_c} \boldsymbol{\alpha}^n : \boldsymbol{\beta} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \boldsymbol{\beta} : \text{skew } D\mathbf{u}^n \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \boldsymbol{\beta} : \bar{A}^n \, d\mathbf{x}
 \end{aligned}$$

und für alle \mathbf{n} gilt

$$0 = D_{\mathbf{m}^n} \mathcal{L}(\boldsymbol{\sigma}^n, \boldsymbol{\alpha}^n, \mathbf{m}^n, \Lambda^n, \mathbf{u}^n, \bar{A}^n)[\mathbf{n}] = \int_{\Omega} \frac{1}{2\mu L_c^2} \mathbf{m}^n : \mathbf{n} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \mathbf{n} : D\bar{A}^n \, d\mathbf{x}.$$

Damit können wir unter Hinzunahme der Nebenbedingung den Sattelpunkt durch das KKT-System

$$0 = \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x}) - (\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x})) + \Lambda^n(\mathbf{x})D\phi(\boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x})) , \quad (2.27a)$$

$$\phi(\boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x})) \leq 0 , \quad \Lambda(\mathbf{x})\phi(\boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x})) = 0 , \quad \Lambda^n(\mathbf{x}) \geq 0 , \quad (2.27b)$$

$$0 = \frac{1}{2\mu_c}\boldsymbol{\alpha}^n(\mathbf{x}) - \text{skew } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) + \bar{A}^n(\mathbf{x}) , \quad (2.27c)$$

$$0 = \frac{1}{2\mu L_c^2}\mathbf{m}^n(\mathbf{x}) - D\bar{A}^n(\mathbf{x}) , \quad (2.27d)$$

$$0 = \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \ell(\mathbf{v}) , \quad \mathbf{v} \in \mathbf{V}_{\Gamma} , \quad (2.27e)$$

$$0 = \int_{\Omega} \mathbf{m}^n : D\bar{B} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \boldsymbol{\alpha}^n : \bar{B} \, d\mathbf{x} , \quad \bar{B} \in W_{\Gamma} \quad (2.27f)$$

charakterisieren.

Lemma 2.23 *Aus den beiden Bedingungen (2.27a) und (2.27b) folgen durch Einführung des plastischen Verzerrungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}_p^n(\mathbf{x})$ mit*

$$\boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x}) = \mathbf{C} : (\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^n(\mathbf{x}))$$

und des Lagrange-Multiplikators $\Lambda^n(\mathbf{x}) = \frac{\gamma^n}{2\mu}(\mathbf{x})$ die Identitäten

$$\boldsymbol{\varepsilon}_p^n(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x}) + \frac{\gamma^n}{2\mu}(\mathbf{x})D\phi(\boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x})) , \quad (2.28a)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x}) = P_K(2\mu(\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x}))) + \lambda \text{tr}(\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x})) . \quad (2.28b)$$

Beweis. Wir schreiben mit $\mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x}) = \text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^n(\mathbf{x})$ die Bedingung (2.27a) um, und erhalten

$$\boldsymbol{\varepsilon}_p^n(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x}) + \Lambda^n(\mathbf{x})D\phi(\boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x})) . \quad (2.29)$$

Wir multiplizieren Bedingung (2.27a) mit \mathbf{C} und erhalten

$$\boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x}) = \mathbf{C} : (\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x})) - \Lambda^n(\mathbf{x})\mathbf{C} : D\phi(\boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x})) . \quad (2.30)$$

Mit der Definition von \mathbf{C} in Fußnote 5 auf Seite 22 erhalten wir für die spezielle Wahl von ϕ aus (2.30) die Darstellung

$$\boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x}) = 2\mu(\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x})) + \lambda \text{tr}(\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x})) - \gamma^n(\mathbf{x})D\phi(\boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x})) . \quad (2.31)$$

Mit Lemma 2.4 und $\boldsymbol{\tau} = 2\mu(\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x})) + \lambda \text{tr}(\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}))$ folgt aus (2.31) und (2.27b)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x}) &= P_K(2\mu(\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x})) + \lambda \text{tr}(\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}))) \\ &= P_K(2\mu(\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}(\mathbf{x}))) + \lambda \text{tr}(\text{sym } D\mathbf{u}^n(\mathbf{x})) . \end{aligned}$$

□

Satz 2.24 Sei $(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n)$ die Lösung des primalen Problems (2.24) und $(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^n, \mathbf{m}^n)$ die Lösung des dualen Problems (2.25). Dann gilt mit $\boldsymbol{\theta}^n = 2\mu(\text{sym}(D\mathbf{u}) - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1})$

$$\text{tr } \boldsymbol{\theta}^n = 2\mu \text{tr } D\mathbf{u}^n, \quad (2.32a)$$

$$\text{dev } P_K(\boldsymbol{\theta}^n) = \text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n, \quad (2.32b)$$

$$\text{tr } P_K(\boldsymbol{\theta}^n) = \text{tr } \boldsymbol{\theta}^n, \quad (2.32c)$$

$$\text{skew } D\mathbf{u}^n = \frac{1}{2\mu_c} \text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n + \bar{A}^n, \quad (2.32d)$$

$$\text{tr } D\mathbf{u}^n = \frac{1}{3\kappa} \text{tr } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n, \quad (2.32e)$$

$$D\bar{A}^n = \frac{1}{2\mu L_c^2} \mathbf{m}^n, \quad (2.32f)$$

und zusätzlich

$$\mathcal{I}_{\text{incr}}^n(\mathbf{u}^n, \bar{A}^n) = -\mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^n, \mathbf{m}^n). \quad (2.33)$$

Beweis. Wir folgen im Wesentlichen der Darstellung in [NCMW07]. Die Identitäten (2.32) folgen direkt mit (2.11), (2.24c) und (2.24d).

Die Beziehung (2.33) zwischen primaler und dualer Gesamtenergie zeigen wir in mehreren Schritten, wobei wir die einzelnen Energiebeiträge des primalen Funktionals (2.24a) geeignet zusammenfassen.

Schritt 1: Mit (2.4c), (2.32b), (2.32c), (2.32a) und (2.32e) erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\mu} \psi_K(\boldsymbol{\theta}^n) &= \frac{1}{4\mu} |\boldsymbol{\theta}^n|^2 - \frac{1}{4\mu} |\boldsymbol{\theta}^n - P_K(\boldsymbol{\theta}^n)|^2 \\ &= \frac{1}{2\mu} P_K(\boldsymbol{\theta}^n) : \left(\boldsymbol{\theta}^n - \frac{1}{2} P_K(\boldsymbol{\theta}^n) \right) \\ &= \frac{1}{2\mu} \left(\text{dev } P_K(\boldsymbol{\theta}^n) : \left(\boldsymbol{\theta}^n - \frac{1}{2} P_K(\boldsymbol{\theta}^n) \right) + \frac{1}{3} \text{tr } P_K(\boldsymbol{\theta}^n) \left(\text{tr } \boldsymbol{\theta}^n - \frac{1}{2} \text{tr } P_K(\boldsymbol{\theta}^n) \right) \right) \\ &= \frac{1}{2\mu} \left(\text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : \left(\boldsymbol{\theta}^n - \frac{1}{2} \text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n \right) + \frac{2\mu}{9\kappa} \text{tr } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n \frac{1}{2} \text{tr } \boldsymbol{\theta}^n \right) \\ &= -\frac{1}{4\mu} |\text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n|^2 + \frac{1}{2\mu} \text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : \boldsymbol{\theta}^n + \frac{1}{9\kappa} \text{tr } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n \frac{2\mu}{6\kappa} \text{tr } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n \\ &= -\frac{1}{4\mu} |\text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n|^2 + \text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : (\text{sym } D\mathbf{u}^n - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}) + \frac{\mu}{27\kappa^2} (\text{tr } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n)^2. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Aus (2.32e) erhalten wir $\frac{\lambda}{2} (\text{tr } D\mathbf{u})^2 = \frac{\lambda}{18\kappa^2} (\text{tr } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n)^2$ und mit der integrierten Form von (2.34) schließlich

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\mu} \int_{\Omega} \psi_K(\boldsymbol{\theta}^n) d\mathbf{x} + \frac{\lambda}{2} \int_{\Omega} (\text{tr } D\mathbf{u})^2 d\mathbf{x} &= -\frac{1}{4\mu} \int_{\Omega} |\text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n|^2 d\mathbf{x} + \frac{1}{18\kappa} \int_{\Omega} (\text{tr } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n)^2 d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Omega} \text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : D\mathbf{u}^n d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Schritt 2:

Einsetzen von (2.32d) und (2.32f) liefert

$$\begin{aligned} \mu_c \int_{\Omega} |\text{skew}(D\mathbf{u}^n) - \bar{A}^n|^2 d\mathbf{x} + \mu L_c^2 \int_{\Omega} |D\bar{A}^n|^2 d\mathbf{x} \\ = \frac{1}{4\mu_c} \int_{\Omega} |\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n|^2 d\mathbf{x} + \frac{1}{4\mu L_c^2} \int_{\Omega} |\mathbf{m}^n(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} . \end{aligned} \quad (2.36)$$

Schritt 3:

Mit (2.32d), (2.25d) und (2.32f) folgt

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : D\mathbf{u}^n d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : \text{skew } D\mathbf{u}^n d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{2\mu_c} \int_{\Omega} \text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : (\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n + 2\mu_c \bar{A}^n) d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{2\mu_c} \int_{\Omega} |\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n|^2 d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \mathbf{m}^n : \bar{D}A^n d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{2\mu_c} \int_{\Omega} |\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n|^2 d\mathbf{x} + \frac{1}{2\mu L_c^2} \int_{\Omega} |\mathbf{m}^n|^2 d\mathbf{x} , \end{aligned} \quad (2.37)$$

und mit (2.32e) folgt

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : D\mathbf{u}^n d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \left(\text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n + \frac{1}{3} \text{tr sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n \cdot \mathbf{I} \right) : D\mathbf{u}^n d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega} \text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : D\mathbf{u}^n d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \text{tr sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n \cdot \text{tr } D\mathbf{u}^n d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega} \text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : D\mathbf{u}^n d\mathbf{x} + \frac{1}{3\kappa} \int_{\Omega} (\text{tr } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n)^2 d\mathbf{x} . \end{aligned} \quad (2.38)$$

Einsetzen von (2.37) und (2.38) liefert

$$\begin{aligned} -\ell^n(\mathbf{u}^n) &= - \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : D\mathbf{u}^n d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} \text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : D\mathbf{u}^n d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : D\mathbf{u}^n d\mathbf{x} \\ &= - \frac{1}{2\mu_c} \int_{\Omega} |\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n|^2 d\mathbf{x} - \frac{1}{2\mu L_c^2} \int_{\Omega} |\mathbf{m}^n|^2 d\mathbf{x} \\ &\quad - \int_{\Omega} \text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : D\mathbf{u}^n d\mathbf{x} - \frac{1}{9\kappa} \int_{\Omega} (\text{tr } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n)^2 d\mathbf{x} . \end{aligned} \quad (2.39)$$

Schritt 4:

Addition von (2.36) und (2.39) liefert

$$\begin{aligned} \mu_c \int_{\Omega} |\text{skew}(D\mathbf{u}) - \bar{A}|^2 d\mathbf{x} + \mu L_c^2 \int_{\Omega} |D\bar{A}|^2 d\mathbf{x} - \ell^n(\mathbf{u}^n) \\ = - \frac{1}{4\mu_c} \int_{\Omega} |\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n|^2 d\mathbf{x} - \frac{1}{4\mu L_c^2} \int_{\Omega} |\mathbf{m}^n|^2 d\mathbf{x} \\ - \int_{\Omega} \text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : D\mathbf{u}^n d\mathbf{x} - \frac{1}{9\kappa} \int_{\Omega} (\text{tr } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n)^2 d\mathbf{x} . \end{aligned} \quad (2.40)$$

Durch Addition von (2.35) und (2.40) erhalten wir dann die Aussage (2.33). \square

Starke Konvergenz der symmetrischen Spannungen. In diesem Abschnitt zeigen wir, dass der symmetrische Anteil der Cosserat-Spannungen für $\mu_c \rightarrow 0$ gegen die Spannungen des klassischen Modells normweise konvergiert. Dieses Resultat wurde bereits in [NCMW07] angegeben. Aufgrund der großen Bedeutung dieser Aussage wollen wir den Beweis hier zitieren.

Definieren wir nun die zulässige Menge des inkrementellen Problems der perfekten Plastizität:

$$\mathbf{K}_{\text{sym}}^n = \left\{ \boldsymbol{\tau} \in \mathbf{S}_{\text{sym}} : \boldsymbol{\tau} \in \mathbf{K} \text{ fast überall in } \Omega, \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} = \ell^n[\mathbf{v}], \mathbf{v} \in \mathbf{V}_{\Gamma} \right\},$$

sowie des Cosserat-Modells:

$$\mathbf{K}^n = \left\{ (\hat{\boldsymbol{\tau}}, \mathbf{n}) \in \mathbf{S} \times \mathbf{M} : \hat{\boldsymbol{\tau}} \in \mathbf{K} \text{ fast überall in } \Omega, \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\tau}} : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} = \ell^n[\mathbf{v}], \mathbf{v} \in \mathbf{V}_{\Gamma}, \int_{\Omega} \mathbf{n} : D\bar{B} \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\tau}} : \bar{B} \, d\mathbf{x}, \bar{B} \in W_{\Gamma} \right\}.$$

Annahme 2.25 (Schwache safe-load Bedingung) Wir nehmen an, dass die Menge $\mathbf{K}_{\text{sym}}^n$ nichtleer ist.

Aus der Annahme 2.25 folgt, dass die Menge \mathbf{K}^n nichtleer ist. Denn zu einem zulässigen Element $\boldsymbol{\eta}^n \in \mathbf{K}_{\text{sym}}^n$ der perfekten Plastizität, ist $(\boldsymbol{\eta}^n, 0) \in \mathbf{K}^n$ ein zulässiges Element der Cosserat-Plastizität, da die zusätzliche Gleichgewichtsbedingung in der Definition von \mathbf{K}^n nur den schiefsymmetrischen Spannungsanteil testet.

Unter der Annahme 2.25 geben wir nun wichtige Schranken für die Lösung des dualen Cosserat-Inkrementproblems an, und stellen diese in drei Lemmata zur Verfügung. Es bezeichne $\hat{\boldsymbol{\sigma}}^n \in \mathbf{S}$ die Lösung des inkrementellen dualen Cosserat-Problems (2.25).

Lemma 2.26 Es gelte die Annahme 2.25. Dann ist $\mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n, \mathbf{m}^n)$ unabhängig von μ_c beschränkt, denn für ein $\boldsymbol{\eta}^n \in \mathbf{K}_{\text{sym}}^n$ gilt

$$-\mu \|\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}\|^2 \leq \mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n, \mathbf{m}^n) \leq \mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\boldsymbol{\eta}^n, 0).$$

Ferner ist $\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n$ unabhängig von μ_c beschränkt.

Beweis. Betrachten wir kurz das Funktional (2.25a) und stellen die einzelnen Terme etwas um. Insbesondere verwenden wir die Symmetrie von \mathbf{C} und erhalten die Identität

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_{\Omega} \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \mathbf{C}^{-1} : \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} \, d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \mathbf{C}^{-1} : \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \mathbf{C}^{-1} : \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} \, d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}) : \mathbf{C}^{-1} : (\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}) \, d\mathbf{x} - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} \, d\mathbf{x}. \end{aligned} \tag{2.41}$$

Nun berücksichtigen wir die spezielle Struktur von \mathbf{C} und $\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}$ und gelangen von (2.41) zu

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \int_{\Omega} \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \mathbf{C}^{-1} : \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} \, d\mathbf{x} \\
&= \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}) : \mathbf{C}^{-1} : (\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}) \, d\mathbf{x} - \mu \int_{\Omega} |\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}|^2 \, d\mathbf{x} \\
&= \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}) : (\mathbf{C}^{-1} \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}) \, d\mathbf{x} - \mu \int_{\Omega} |\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}|^2 \, d\mathbf{x} \\
&= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(\text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{1}{3} \text{tr}(\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \mathbf{I} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} \right) \\
&\quad : \left(\frac{1}{2\mu} \text{dev}(\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}) + \frac{1}{9\kappa} \text{tr}(\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} \right) \, d\mathbf{x} - \mu \int_{\Omega} |\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}|^2 \, d\mathbf{x} \\
&= \frac{1}{4\mu} \int_{\Omega} |\text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}|^2 \, d\mathbf{x} + \frac{1}{18\kappa} \int_{\Omega} (\text{tr}(\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}))^2 \, d\mathbf{x} - \mu \int_{\Omega} |\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}|^2 \, d\mathbf{x} .
\end{aligned} \tag{2.42}$$

Mit den Betrachtungen aus (2.42) erhalten wir direkt eine untere Schranke

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n, \mathbf{m}^n) &= \frac{1}{4\mu} \int_{\Omega} |\text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}|^2 \, d\mathbf{x} + \frac{1}{18\kappa} \int_{\Omega} (\text{tr}(\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}))^2 \, d\mathbf{x} \\
&\quad - \mu \int_{\Omega} |\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}|^2 \, d\mathbf{x} + \frac{1}{4\mu L_c^2} \int_{\Omega} |\mathbf{m}|^2 \, d\mathbf{x} \\
&\geq -\mu \int_{\Omega} |\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}|^2 \, d\mathbf{x} .
\end{aligned} \tag{2.43}$$

Des Weiteren liefert mit $\boldsymbol{\eta}^n \in \mathbf{K}_{\text{sym}}^n$

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n, \mathbf{m}^n) &= \mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^n, \mathbf{m}^n) - \frac{1}{4\mu_c} \int_{\Omega} |\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n|^2 \, d\mathbf{x} \\
&\leq \mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^n, \mathbf{m}^n) \leq \mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\boldsymbol{\eta}^n, 0)
\end{aligned}$$

die obere Schranke. Ferner erhalten wir nun aus (2.43) mittels

$$\begin{aligned}
& \mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n, \mathbf{m}^n) + \mu \|\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}\|^2 \\
&= \frac{1}{4\mu} \int_{\Omega} |\text{dev sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}|^2 + \frac{1}{18\kappa} \int_{\Omega} (\text{tr}(\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}))^2 \, d\mathbf{x} \geq 0
\end{aligned}$$

leicht die letzte Aussage des Lemmas. □

Lemma 2.27 *Es gelte die Annahme 2.25. Es gilt für $\boldsymbol{\eta}^n \in \mathbf{K}_{\text{sym}}^n$ die Abschätzung*

$$\|\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n\|^2 \leq 2\mu_c \left(\frac{1}{2\mu} \|\text{dev } \boldsymbol{\eta}^n + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}\|^2 + \frac{1}{9\kappa} \|\text{tr}(\boldsymbol{\eta}^n)\|^2 \right) .$$

Beweis. Wir erhalten direkt aus Lemma 2.26

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\boldsymbol{\eta}^n, 0) &= \frac{1}{4\mu} \int_{\Omega} |\text{dev } \boldsymbol{\eta}^n + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}|^2 d\mathbf{x} + \frac{1}{18\kappa} \int_{\Omega} (\text{tr}(\boldsymbol{\eta}^n))^2 d\mathbf{x} - \mu \|\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}\|^2 \\ &\geq \mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^n, \mathbf{m}^n) = \mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n, \mathbf{m}^n) + \frac{1}{4\mu_c} \int_{\Omega} |\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n|^2 d\mathbf{x} \\ &\geq -\mu \|\boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}\|^2 + \frac{1}{4\mu_c} \|\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n\|^2 . \end{aligned}$$

□

Lemma 2.28 *Es gelte die Annahme 2.25. Es gilt mit einer von μ_c unabhängigen Konstante $c > 0$ die Abschätzung*

$$\|\mathbf{m}^n\| \leq c \mu_c .$$

Beweis. Wir setzen $\bar{B} = \bar{A}^n \in W_{\Gamma}$ in (2.25d) und erhalten

$$\int_{\Omega} \mathbf{m}^n : D\bar{A}^n d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n : \bar{A}^n d\mathbf{x} .$$

Daraus folgt mithilfe der Ungleichung von Cauchy-Schwarz bzw. Poincaré-Friedrichs

$$\|\mathbf{m}^n\|^2 \leq 2\mu L_c^2 \|\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n\| \|\bar{A}^n\| \leq 2\mu L_c^2 C \|\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n\| \|D\bar{A}^n\| = C \|\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n\| \|\mathbf{m}^n\|$$

und weiter mit $\boldsymbol{\eta}^n \in \mathbf{K}_{\text{sym}}^n$ nach Lemma 2.27 die Abschätzung

$$\|\mathbf{m}^n\|^2 \leq C^2 \|\text{skew } \hat{\boldsymbol{\sigma}}^n\|^2 \leq C^2 2\mu_c \left(\frac{1}{2\mu} \|\text{dev } \boldsymbol{\eta}^n + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}\|^2 + \frac{1}{9\kappa} \|\text{tr}(\boldsymbol{\eta}^n)\|^2 \right)$$

die Aussage. □

Für das folgende Theorem benötigen wir noch die Bilinearform der perfekten Plastizität. Diese ist definiert auf $\mathbf{S}_{\text{sym}} \times \mathbf{S}_{\text{sym}}$ durch

$$\begin{aligned} d(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}) &= \int_{\Omega} \frac{1}{2\mu} \text{dev } \boldsymbol{\sigma} : \text{dev } \boldsymbol{\tau} d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{1}{3(2\mu + 3\lambda)} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \text{tr}(\boldsymbol{\tau}) d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\tau} d\mathbf{x} . \end{aligned} \tag{2.44}$$

Unter der Annahme 2.25 existiert eine eindeutig Lösung des inkrementellen dualen Problems der perfekten Plastizität:

Finde $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{K}_{\text{sym}}^n$, sodass

$$\frac{1}{2} d(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}) + \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} : \boldsymbol{\sigma} d\mathbf{x} \tag{2.45a}$$

minimal ist. Wir bezeichnen die Lösung von (2.45a) mit $\boldsymbol{\sigma}_0^n$, welche durch die variationelle Ungleichung

$$d(\boldsymbol{\sigma}_0^n, \boldsymbol{\sigma}_0^n - \boldsymbol{\tau}) \leq - \int_{\Omega} (\boldsymbol{\sigma}_0^n - \boldsymbol{\tau}) : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} d\mathbf{x} , \quad \boldsymbol{\tau} \in \mathbf{K}_{\text{sym}}^n , \tag{2.45b}$$

charakterisiert ist.

Lemma 2.29 *Unter der Annahme 2.25 sind die beiden Formulierungen (2.45a) und (2.45b) äquivalent.*

Beweis. Wir können das gleichmäßig konvexe Funktional (2.45a) auch in der Form

$$\frac{1}{2}d(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}) + d(\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}, \boldsymbol{\sigma}) ,$$

oder kurz

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma})_{\mathbf{C}^{-1}} + (\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}, \boldsymbol{\sigma})_{\mathbf{C}^{-1}} \quad (2.46)$$

darstellen. Außerdem besitzt das Funktional

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}\|_{\mathbf{C}^{-1}}^2 &=: (\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}, \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1})_{\mathbf{C}^{-1}} \\ &= (\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma})_{\mathbf{C}^{-1}} + 2(\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}, \boldsymbol{\sigma})_{\mathbf{C}^{-1}} + (\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1}, \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1})_{\mathbf{C}^{-1}} \end{aligned}$$

die gleiche Minimalstelle wie (2.46), ebenso $\|\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} + \boldsymbol{\sigma}\|_{\mathbf{C}^{-1}}$. Nach dem Projektionsatz A.1 ist die Lösung der Minimierungsaufgabe

$$\inf_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{K}_{\text{sym}}^n} \|\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1} + \boldsymbol{\sigma}\|_{\mathbf{C}^{-1}}$$

eindeutig durch $\boldsymbol{\sigma}_0^n = \mathbf{P}_{\mathbf{K}_{\text{sym}}^n}(-\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_p^{n-1})$ gegeben und durch die variationelle Ungleichung (2.45b) charakterisiert. \square

Ebenso können wir über das duale Problem der Cosserat-Plastizität (2.25) die Lösung beschreiben: Finde $(\boldsymbol{\sigma}_0^n, 0) \in \mathbf{S}_{\text{sym}} \times \mathbf{M}$ mit

$$\mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\boldsymbol{\sigma}_0^n, 0) \leq \mathcal{D}_{\text{incr}}^n(\boldsymbol{\tau}, 0) , \quad \boldsymbol{\tau} \in \mathbf{K}_{\text{sym}}^n . \quad (2.47)$$

Es bezeichne $\boldsymbol{\sigma}_0^n \in \mathbf{S}_{\text{sym}}$ die Lösung des inkrementellen dualen Problems der perfekten Plastizität.

Theorem 2.30 *Es bezeichne $\|\cdot\|$ die Norm in \mathbf{S} . Ist die schwache safe-load Bedingung erfüllt, dann konvergiert das Cosserat-Modell für $\mu_c \rightarrow 0$ gegen die perfekt-plastische Lösung im inkrementellen Problem, d. h. es gilt*

$$\lim_{\mu_c \rightarrow 0} \|\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mu_c}^n - \boldsymbol{\sigma}_0^n\| = 0 . \quad (2.48)$$

Beweis. Wir zitieren ausführlich den Beweis in [NCMW07].

Sei μ_c^j eine monoton fallende Nullfolge und bezeichne $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mu_c^j}^n$ die Lösung des dualen Cosserat-Inkrementproblem (2.25) zu μ_c^j .

Wegen Lemma 2.26 ist $\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mu_c^j}^n$ gleichmäßig beschränkt und es existiert eine schwach-konvergente Teilfolge, die wir ebenfalls mit $\text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mu_c^j}^n$ bezeichnen. Wir bezeichnen den schwachen Limes mit $\boldsymbol{\sigma}_*^n \in \mathbf{S}_{\text{sym}}$, d. h.

$$\lim_{j \rightarrow \infty} (\boldsymbol{\tau}, \text{sym } \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mu_c^j}^n) = (\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\sigma}_*^n) \text{ für alle } \boldsymbol{\tau} \in (\mathbf{S}_{\text{sym}})' = \mathbf{S}_{\text{sym}} .$$

Aus $\hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n \in \mathbf{K}^n$ und der Abgeschlossenheit von \mathbf{K}^n folgt $\sigma_*^n \in \mathbf{K}^n$ fast überall in Ω . Ferner gilt $\sigma_*^n \in \mathbf{K}_{\text{sym}}^n$, denn aus Lemma 2.27 und (2.25c) folgt für alle $\mathbf{v} \in \mathbf{V}_\Gamma$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \sigma_*^n : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \ell^n[\mathbf{v}] &= \lim_{j \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \text{sym } \sigma_{\mu_c^j}^n : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \ell^n[\mathbf{v}] \\ &= \lim_{j \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \text{skew } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n : D\mathbf{v} \, d\mathbf{x} \\ &\leq \lim_{j \rightarrow \infty} \|\text{skew } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n\| \|D\mathbf{v}\| \leq C \|D\mathbf{v}\| \lim_{j \rightarrow \infty} \sqrt{\mu_c^j} = 0 . \end{aligned}$$

Die Lösung des dualen Cosserat-Inkrementproblem (2.25) ist charakterisiert durch

$$\begin{aligned} d(\hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n, \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n - \tau) + \frac{1}{2\mu_c} \int_{\Omega} |\text{skew } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n|^2 \, d\mathbf{x} + \frac{1}{2\mu L_c^2} \int_{\Omega} |\mathbf{m}_{\mu_c^j}^n|^2 \, d\mathbf{x} \\ \leq - \int_{\Omega} (\hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n - \tau) : \varepsilon_p^{n-1} \, d\mathbf{x} , \quad \tau \in \mathbf{K}^n , \end{aligned} \quad (2.49)$$

Durch Grenzübergang erhalten wir aus (2.49)

$$d(\sigma_*^n, \sigma_*^n) \leq \liminf_{j \rightarrow \infty} d(\text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n, \text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n) \leq d(\sigma_*^n, \tau) - \int_{\Omega} (\sigma_*^n - \tau) : \varepsilon_p^{n-1} \, d\mathbf{x} . \quad (2.50)$$

(2.50) stimmt mit (2.45b) überein und daher ist σ_*^n Lösung des dualen Problems der perfekten Plastizität. Aus der Eindeutigkeit der Lösung folgt $\sigma_*^n = \sigma_0^n$.

Nachdem nun die schwache Konvergenz gezeigt ist, zeigen wir nun die normweise Konvergenz. Dazu setzen wir $\tau = \sigma_0^n$ in die variationelle Ungleichung (2.49) ein und erhalten

$$\begin{aligned} d(\text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n, \text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n - \sigma_0^n) &\leq - \int_{\Omega} (\hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n - \sigma_0^n) : \varepsilon_p^{n-1} \, d\mathbf{x} , \\ d(\text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n, \text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n) &\leq d(\text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n, \sigma_0^n) - \int_{\Omega} (\hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n - \sigma_0^n) : \varepsilon_p^{n-1} \, d\mathbf{x} , \\ d(\text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n, \text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n) - d(\text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n, \sigma_0^n) &\leq - \int_{\Omega} (\hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n - \sigma_0^n) : \varepsilon_p^{n-1} \, d\mathbf{x} . \end{aligned} \quad (2.51)$$

Mit der Identität

$$\begin{aligned} d(\text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n - \sigma_0^n, \text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n - \sigma_0^n) \\ = d(\text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n, \text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n) - 2d(\text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n, \sigma_0^n) + d(\sigma_0^n, \sigma_0^n) \end{aligned}$$

und unter Verwendung von (2.51) folgt die Abschätzung

$$\begin{aligned} 0 &\leq d(\text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n - \sigma_0^n, \text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n - \sigma_0^n) \\ &\leq - \int_{\Omega} (\hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n - \sigma_0^n) : \varepsilon_p^{n-1} \, d\mathbf{x} - d(\text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n, \sigma_0^n) + d(\sigma_0^n, \sigma_0^n) , \end{aligned}$$

und nach Grenzübergang $j \rightarrow \infty$ folgt aus der schwachen Konvergenz

$$d(\text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n - \sigma_0^n, \text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n - \sigma_0^n) \leq \liminf_{j \rightarrow \infty} d(\sigma_0^n - \text{sym } \hat{\sigma}_{\mu_c^j}^n, \sigma_0^n) = 0$$

Da $d(\cdot, \cdot)$ ein Skalarprodukt in $L_2(\Omega, \text{Sym}(3))$ ist, folgt daraus die Behauptung. \square

3 Ein paralleles Programmiermodell

Für die numerische Realisierung und Implementierung der in Abschnitt 2.5 bzw. 5.1 aufgeführten Algorithmen zur Lösung der nichtlinearen Cosserat-Modelle aus Abschnitt 1.3 bzw. 1.4 verwenden wir die parallele Finite-Elemente-Software M++ [Wie04, Wie09].

In diesem Kapitel stellen wir im ersten Abschnitt das M++ zugrunde liegende parallele Programmiermodell vor und beschreiben dann im zweiten Abschnitt ein Mehrgitterverfahren zur Lösung des linearen Gleichungssystems in Schritt S5) des Algorithmus aus Abschnitt 2.5.

Die Software M++ unterstützt parallele Mehrgitterverfahren in einem gut abgegrenzten parallelen Programmiermodell und enthält zahlreiche lineare Iterationsverfahren, z. B. CG, BiCGStab, GMRES und auch Schnittstellen zu externen Lösern, wie z. B. SuperLU [DEG⁺99]. Ebenso sind Integratoren für gewöhnliche Differentialgleichungen und nichtlineare Löser Bestandteil der Bibliothek.

Die mit M++ erzielten numerischen Ergebnisse sind in in Kapitel 4 bzw. 7 aufgeführt.

3.1 Parallele Finite Elemente

Distributed Point objects. Wir stellen nun das verwendete parallele Programmiermodell vor. Es ist das grundlegende Konzept für die praktische Realisierung der in dieser Arbeit in M++ implementierten Modellen und Algorithmen. Das parallele Programmiermodell geht auf Arbeiten der UG-Gruppe [BBJ⁺97, BBJ⁺98, B JL⁺99, B JL⁺00, B JL⁺01] zurück. Wir zitieren in diesem Abschnitt die Definitionen und Ausführungen wie sie in [Wie09] dargestellt sind.

Paralleles Gitter Modell. Wir betrachten ein paralleles Gitter $(\mathcal{C}, \mathcal{V}, \mathcal{E}, \mathcal{F})$ mit Zellen \mathcal{C} , Ecken \mathcal{V} , Kanten \mathcal{E} und Seitenflächen \mathcal{F} . Sei $C \in \mathcal{C}$, dann bezeichnen wir mit $\mathcal{V}_C, \mathcal{E}_C, \mathcal{F}_C$ jeweils die Menge der Ecken, Kanten bzw. Seitenflächen von C , sodass

$$\mathcal{V} = \bigcup_{C \in \mathcal{C}} \mathcal{V}_C, \quad \mathcal{E} = \bigcup_{C \in \mathcal{C}} \mathcal{E}_C, \quad \mathcal{F} = \bigcup_{C \in \mathcal{C}} \mathcal{F}_C.$$

Als globale Identifizierung der parallel verteilten Objekte verwenden wir jeweils den Mittelpunkt als Schlüssel einer Hashtabelle. Die Menge aller Ecken, Kanten-, Seitenflächen- bzw. Zellmittelpunkte bezeichnen wir mit \mathcal{Z} , und für eine Zelle C entsprechend mit $\mathcal{Z}_C = \mathcal{V}_C \cup \mathcal{E}_C \cup \mathcal{F}_C$.

Auf der Prozessormenge $\mathcal{P} = \{1, \dots, P\}$ definieren wir eine Lastverteilung der Zellen \mathcal{C} durch die Abbildung $\text{dest} : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{P}$. Bezeichnen wir mit $\mathcal{C}^p = \{C \in \mathcal{C} : \text{dest}(C) = p\}$ die Menge der Zellen auf Prozessor p , so erhalten wir eine disjunkte Zerlegung $\mathcal{C} = \bigcup_{p \in \mathcal{P}} \mathcal{C}^p$. Ausgehend von den Mengen \mathcal{C}^p definieren wir weiter

$$\mathcal{V}^p = \bigcup_{C \in \mathcal{C}^p} \mathcal{V}_C, \quad \mathcal{E}^p = \bigcup_{C \in \mathcal{C}^p} \mathcal{E}_C, \quad \mathcal{F}^p = \bigcup_{C \in \mathcal{C}^p} \mathcal{F}_C, \quad \mathcal{Z}^p = \bigcup_{C \in \mathcal{C}^p} \mathcal{Z}_C.$$

Natürlich sind die Zerlegungen

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}^1 \cup \dots \cup \mathcal{V}^P, \quad \mathcal{E} = \mathcal{E}^1 \cup \dots \cup \mathcal{E}^P, \quad \mathcal{F} = \mathcal{F}^1 \cup \dots \cup \mathcal{F}^P, \quad \mathcal{Z} = \mathcal{Z}^1 \cup \dots \cup \mathcal{Z}^P,$$

im Allgemeinen nicht disjunkt, was im Folgenden auch einer sorgfältigen Behandlung bedarf. Für die Menge der Hashschlüssel \mathcal{Z} definieren wir die mengenwertige Abbildung

$$\pi : \mathcal{Z} \rightarrow 2^{\mathcal{P}}, \tag{3.1}$$

welche jedem Hashschlüssel $z \in \mathcal{Z}$ eine Prozessorliste bzw. ein Element aus der Potenzmenge von \mathcal{P} zuordnet. Die Einschränkung von π auf \mathcal{Z}^p bezeichnen wir mit π^p , d. h. $\pi^p = \pi|_{\mathcal{Z}^p}$.

Parallele Finite Elemente. Ein Finite-Elemente-Gitter $\bar{\Omega}$ wird durch eine Zerlegung

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{C \in \mathcal{C}} \bar{\Omega}_C$$

repräsentiert, hierbei ist $\Omega_C \subset \mathbb{R}^3$ das Innere der Zelle C , sodass $\bar{\Omega}_C = \text{conv}\{\mathcal{V}_C\}$. Parallel verteilt auf die Prozessoren $1, \dots, P$ erhalten wir eine nichtüberlappende Gebietszerlegung

$$\Omega^1 \cup \dots \cup \Omega^P, \quad \Omega^p = \text{int} \bigcup_{C \in \mathcal{C}^p} \bar{\Omega}_C,$$

von Ω mit dem parallelen Interface

$$\Gamma^P = \bigcup_{p, q \in \mathcal{P}} \Gamma^{pq}, \quad \Gamma^{pq} = \partial\Omega^p \cap \partial\Omega^q.$$

Wir bezeichnen mit $V = \text{span}\{\phi_i : i \in \mathcal{I}\}$ den Finite-Elemente-Raum mit der Basis ϕ_i , hierbei bezeichnet \mathcal{I} die zugehörige Indexmenge. Jeder Basisfunktion ϕ_i ist eine duale Basisfunktion $\phi'_i \in V'$ zugeordnet, sodass gilt: $\langle \phi'_i, \phi_k \rangle = \delta_{ik}$. Des Weiteren ist jedem Index $i \in \mathcal{I}$ ein Knoten $z_i \in \bar{\Omega}$ und eine Komponente k_i (für das Cosserat-Modell $k_i \in \{1, 2, \dots, 6\}$) zugehörige.

Wir bezeichnen mit $\mathcal{N} = \{z_i : i \in \mathcal{I}\}$ die Menge der Knoten. Für unser paralleles Programmiermodell gelte stets $\mathcal{N} \subset \mathcal{Z}$, sodass die Abbildung π in (3.1) auch auf \mathcal{I} definiert werden kann. Es bezeichne $\mathcal{I} = \mathcal{I}^1 \cup \dots \cup \mathcal{I}^P$ die überlappende Zerlegung der Indizes mit $\mathcal{I}^p = \{i \in \mathcal{I} : p \in \pi(z_i)\}$ und $N^p = \#\mathcal{I}^p$ die Anzahl der Indizes auf Prozessor p . Die Nummerierung der Indexmengen \mathcal{I}^p kann parallel unabhängig erfolgen, es wird keine globale Nummerierung benötigt. Die Identifizierung der Indizes erfolgt eindeutig über das Paar (z_i, k_i) .

Eine Finite-Elemente-Funktion $v = \sum_{i \in \mathcal{I}} v_i \phi_i \in V$ wird eindeutig durch ihren Koeffizientenvektor $(v_i)_{i \in \mathcal{I}}$ mit $v_i = \langle \phi'_i, v \rangle$ repräsentiert. Analog repräsentieren wir ein diskretes Funktional $f = \sum_{i \in \mathcal{I}} f_i \phi'_i \in V'$ durch seinen Koeffizientenvektor $(f_i)_{i \in \mathcal{I}}$ mit $f_i = \langle f, \phi_i \rangle$. Für die Realisierung paralleler Finite-Elemente ist es unerlässlich, klar zwischen Repräsentanten von Finite-Elemente-Funktionen und diskreter Funktionale zu unterscheiden. Dazu führen wir zwei Vektordarstellungen ein, die konsistente bzw. additive Darstellung von Vektoren.

Konsistente Darstellung von Vektoren: Der Koeffizientenvektor $(v_i)_{i \in \mathcal{I}}$ einer Finite-Elemente-Funktion $v \in V$ wird im parallelen Rechnen durch seine lokalen Einschränkungen $(v_i^p)_{i \in \mathcal{I}^p} \in \mathbb{R}^{N^p}$ repräsentiert, wodurch eine Abbildung

$$E : V \longrightarrow \underline{V}^P := \prod_{p \in \mathcal{P}} \mathbb{R}^{N^p} \quad (3.2)$$

definiert ist. Der Koeffizientenvektor muss dabei konsistent sein, d. h. die Werte von v müssen auf dem parallelen Interface Γ^P übereinstimmen. Wir definieren deswegen den Raum

$$\underline{V} = \{v \in \underline{V}^P : v_i^p = v_i^q \text{ für } q \in \pi^p(i)\}. \quad (3.3)$$

Additive Darstellung von Vektoren: Im parallelen Rechnen werden diskrete Funktionale (und auch Systemmatrizen) nur auf den entsprechenden Teilgebieten Ω^p ausgewertet.

3 Ein paralleles Programmiermodell

Dadurch ergibt sich eine lokale Darstellung $\underline{f}^p = (f_i^p)_{i \in \mathcal{I}^p} \in \mathbb{R}^{N^p}$. Wird der volle Koeffizientenvektor $(f_i)_{i \in \mathcal{I}}$ benötigt, so müssen die einzelnen Beiträge kommuniziert bzw. eingesammelt werden

$$\underline{f}_i = \sum_{p \in \pi(i)} \underline{f}_i^p .$$

Wir definieren daher für die Darstellung von Funktionalen aus V' den Quotientenraum

$$\underline{V}' = \underline{V}^{\mathcal{P}} / \underline{V}^0 ,$$

mit

$$\underline{V}^0 = \{ \underline{f} \in \underline{V}^{\mathcal{P}} : \sum_{p \in \pi(i)} f_i^p = 0 , i \in \mathcal{I} \} .$$

Die duale Paarung

$$\underline{v} \cdot \underline{f} = \sum_{p \in \mathcal{P}} \underline{v}^p \cdot \underline{f}^p , \quad \underline{v} \in \underline{V} , \underline{f} \in \underline{V}'$$

ist wohldefiniert auf $\underline{V} \times \underline{V}'$ und wir können den adjungierten Operator bzgl. der Einbettung E aus (3.2) durch

$$\begin{aligned} E' : \underline{V}' &\longrightarrow V' \\ \underline{f} &\longmapsto f_j = \sum_{p \in \mathcal{P}} \sum_{i \in \mathcal{I}^p} f_i^p \phi_i' . \end{aligned} \tag{3.4}$$

definieren. Die Abbildung (3.4) ist nicht injektiv, um dennoch einen eindeutigen parallelen Repräsentanten eines Funktionals aus V' zu erhalten, setzen wir $p = \min \pi(i)$ als den Master Prozessor eines Index i . Die Indexmenge

$$\tilde{\mathcal{I}}^p = \left\{ i \in \mathcal{I}^p : p = \min \pi(i) \right\}$$

definiert eine nicht überlappende Zerlegung

$$\mathcal{I} = \tilde{\mathcal{I}}^1 \cup \dots \cup \tilde{\mathcal{I}}^{\mathcal{P}} .$$

Damit definieren wir den Raum

$$\begin{aligned} \tilde{\underline{V}}' &= \left\{ \underline{f} = (f^p)_{p \in \mathcal{P}} \in \underline{V}' : f_i^p = 0 \text{ für } p \neq \min \pi(i) \right\} \\ &= \left\{ \underline{f} = (f^p)_{p \in \mathcal{P}} \in \underline{V}' : f_i^p = 0 \text{ für } i \notin \tilde{\mathcal{I}}^p \right\} , \end{aligned}$$

sodass die Einschränkung von E' auf $\tilde{\underline{V}}'$ injektiv ist.

Für konsistente Vektoren $\underline{v} \in \underline{V}$ und additive Vektoren $\underline{f} \in \underline{V}'$ mit ihrer parallel eindeutigen Darstellung $\tilde{\underline{f}} \in \tilde{\underline{V}}'$ definieren wir die Normen

$$\|\underline{v}\|_{\underline{V}} = \sqrt{\sum_{p \in \mathcal{P}} \sum_{i \in \tilde{\mathcal{I}}^p} |v_i^p|^2},$$

$$\|\underline{f}\|_{\underline{V}'} = \|\tilde{\underline{f}}\|_{\tilde{\underline{V}}'} = \|\tilde{\underline{f}}\|_{\underline{V}^{\mathcal{P}}} = \sqrt{\sum_{p \in \mathcal{P}} \|\tilde{\underline{f}}\|^2},$$

welche unabhängig von der Lastverteilung sind.

Additive Darstellung von Operatoren:

Sei \mathbf{V} ein Hilbert Raum und $a(\cdot, \cdot) : \mathbf{V} \times \mathbf{V} \rightarrow \mathbb{R}$ eine elliptische Bilinearform. Wir definieren einen Operator $\mathbf{A} : \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V}'$ durch $\langle \mathbf{A}\mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle = a(\mathbf{v}, \mathbf{w})$ für $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbf{V}$. Sei $V \subset \mathbf{V}$ ein Finite-Elemente-Raum und bezeichne $A : V \rightarrow V'$ die Galerkin-Approximation

$$\langle Av, w \rangle = a(v, w), \quad v, w \in V.$$

In unserer Anwendung kann die Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ additiv über Zellen aufgesplittet werden

$$a(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \sum_{C \in \mathcal{C}} a_C(\mathbf{v}, \mathbf{w}), \quad \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbf{V}.$$

Ferner verwenden wir in dieser Arbeit nur Basisfunktionen ϕ_i mit lokalem Träger, so dass $a_C(\phi_i, \phi_k) \neq 0$ nur für $z_i, z_k \in \mathcal{N}_C := \mathcal{N} \cap \bar{\Omega}_C$ vorkommen kann. Unter diesen Voraussetzungen können die lokalen Steifigkeitsmatrizen $\underline{A}^p = (A_{i,k}^p)_{i,k \in \mathcal{I}^p}$ durch

$$\underline{A}_{i,k}^p = \sum_{C \in \mathcal{C}^p} a_C(\phi_i, \phi_k)$$

berechnet werden. Damit kann die Matrixdarstellung $\underline{A} : \underline{V} \rightarrow \underline{V}'$ des Operators A mit $A = E' \circ \underline{A} \circ E$ durch $\underline{A} = (\underline{A}^p)_{p \in \mathcal{P}}$ mittels

$$A\phi_i = \sum_{p \in \mathcal{P}} \sum_{k \in \mathcal{I}^p} A_{i,k}^p \phi_k'$$

angegeben werden. So kann ohne parallele Kommunikation die Wirkung von A auf einen konsistenten Vektor $\underline{v} \in \underline{V}$ berechnet werden, das Ergebnis ist ein additiver Vektor

$$\underline{f} = \underline{A}\underline{v} = (\underline{A}^p \underline{v}^p)_{p \in \mathcal{P}} \in \underline{V}'.$$

Parallele lineare Algebra. Das vorgestellte Programmiermodell erlaubt es, vorhandene Algorithmen auf einfache und effiziente Weise zu parallelisieren. Dafür notwendig sind im Wesentlichen nur zwei parallele Routinen, welche die Darstellung eines Vektors zwischen konsistent und additiv wechseln.

3 Ein paralleles Programmiermodell

Die oben eingeführte eindeutig additive Darstellung eines Vektors wird durch die folgende Routine gewonnen:

$$\begin{aligned} \text{collect} : \quad \underline{V}' &\longrightarrow \underline{\tilde{V}}' , \\ \underline{f} &\longmapsto \text{collect}(\underline{f})_i^p = \begin{cases} \sum_{q \in \pi(i)} f_i^q & p = \min \pi(i) , \\ 0 & \text{sonst} . \end{cases} \end{aligned}$$

Korrekturen in iterativen Lösungsverfahren werden durch konsistente Vektoren repräsentiert. Aus nichtkonsistenten lokalen Korrekturen wird durch die Routine

$$\begin{aligned} \text{accumulate} : \quad \underline{V}^{\mathcal{P}} &\longrightarrow \underline{V} , \\ \underline{c} &\longmapsto \text{accumulate}(\underline{c})_i^p = \sum_{q \in \pi(i)} c_i^q . \end{aligned}$$

eine parallele konsistente Korrektur erzeugt. Durch die beiden Routinen collect und accumulate können nun die für den parallelen linearen Löseprozess notwendigen Operatoren leicht aus den nichtparallelen Operatoren konstruiert werden. Diskrete Differentialoperatoren $A : V \longrightarrow V'$ werden durch parallel verteilte, additive Matrizen $\underline{A} : \underline{V} \longrightarrow \underline{V}'$ durch die Wirkung

$$\underline{A}\underline{v} = \text{collect}(\underline{A}^p \underline{v}^p) , \quad \underline{v} \in \underline{V}$$

ausgeführt. Vorkonditionierer $B : V' \longrightarrow V$ werden durch parallele Operatoren $\underline{B} : \underline{V}' \longrightarrow \underline{V}$ repräsentiert und mit

$$\underline{B}\underline{f} = \text{accumulate}(\underline{B}^p \underline{f}^p) , \quad \underline{f} \in \underline{V}'$$

realisiert. In unserer Anwendung sind die Differentialoperatoren selbstadjungiert, und bei der Verwendung des CG-Verfahren als linearen Löser muss der Vorkonditionierer selbstadjungiert sein. Daher benötigen wir auch den adjungierten Vorkonditionierer $B' : V' \longrightarrow V$. Dieser wird parallel durch den transponierten Operator $\underline{B}^T : \underline{V}' \longrightarrow \underline{V}$ mit

$$\underline{B}^T = \text{collect}^T \circ (\underline{B}^p)^T \circ \text{accumulate}$$

dargestellt, hierbei ist

$$\begin{aligned} \text{collect}^T : \quad \underline{V}^{\mathcal{P}} &\longrightarrow \underline{V} , \\ \underline{c} &\longmapsto \text{collect}^T(\underline{c})_i^p = c_i^{\min \pi(i)} . \end{aligned}$$

3.2 Ein paralleles Mehrgitterverfahren

Wir nehmen nun an, dass wir eine Hierarchie von geschichteten Räumen $V_0 \subset V_1 \subset \dots \subset V_J$ haben, wobei V_j einen Finite-Elemente-Raum zu einem zulässigen Gitter $(\mathcal{C}_j, \mathcal{V}_j, \mathcal{E}_j, \mathcal{F}_j)$ mit maximaler Gitterweite $h_j = 2^{-j}h_0$ bezeichne. Das Gitter $(\mathcal{C}_j, \mathcal{V}_j, \mathcal{E}_j, \mathcal{F}_j)$ entstehe dabei durch j -malige uniforme Verfeinerung von $(\mathcal{C}_0, \mathcal{V}_0, \mathcal{E}_0, \mathcal{F}_0)$. Ist das Gitter $(\mathcal{C}_0, \mathcal{V}_0, \mathcal{E}_0, \mathcal{F}_0)$ parallel verteilt, kann die Verfeinerung und die Erstellung der Abbildung π_j aus (3.1) für $j = 1, \dots, J$ ohne Kommunikation erfolgen.

Die Prolongation $I_j : V_{j-1} \rightarrow V_j$ ist im parallelen Rechnen durch verteilte Prolongationsmatrizen $\underline{I}_j : \underline{V}_{j-1} \rightarrow \underline{V}_j$ mit

$$\underline{I}_j \underline{v}_{j-1} = (\underline{I}_j^p \underline{v}_{j-1}^p), \quad \underline{v} \in \underline{V}_{j-1},$$

definiert, wobei $\underline{I}_j \in \mathbb{R}^{N_j^p \times N_{j-1}^p}$.

Die Restriktion $I_j' : V_j' \rightarrow V_{j-1}'$ kann mit den transponierten Prolongationsmatrizen $\underline{I}_j^T : \underline{V}_j' \rightarrow \underline{V}_{j-1}'$ durch die Wirkung

$$\underline{I}_j^T \underline{f}_j = \text{collect} \left((\underline{I}_j^p)^T \underline{f}_j^p \right), \quad \underline{f}_j \in \underline{V}_j'$$

definiert werden.

Wir definieren nun einen parallelen Mehrgittervorkonditionierer $\underline{B}_J^{\text{mg}}$, welcher rekursiv konstruiert wird. Auf dem Grobgitter verwenden wir $\underline{B}_0^{\text{mg}} \approx \underline{A}_0^{-1}$. In unseren Anwendungen sind die Grobgitter klein und bestehen aus höchstens 256 Zellen. Für die verwendeten Cosserat-Modelle ergeben sich abhängig von der verwendeten Diskretisierung damit in drei Raumdimensionen ungefähr 10 000 bis 30 000 Unbekannte (vgl. Tabellen 7.3, 7.4 und 7.5) und wir können durch Einsammeln der Matrix \underline{A}_0 die Grobgitterkorrektur mit \underline{A}_0^{-1} exakt berechnen.

Für $j = 1, \dots, J$ definieren wir einen additiven (gedämpften) Glätter $\underline{R}_j : \underline{V}_j' \rightarrow \underline{V}_j$ mit Block-Gauß-Seidel-Verfahren \underline{R}_j^p auf jedem Prozessgebiet, d. h.

$$\underline{R}_j = \theta \sum_{p \in \mathcal{P}} \underline{R}_j^p$$

mit einem Dämpfungsparameter $\theta \in (0, 1]$. Die lokalen Glätter \underline{R}_j^p werden basierend auf einer Indexzerlegung $\mathcal{I}_j^p = \mathcal{I}_{j,1}^p \cup \dots \cup \mathcal{I}_{j,K_j^p}^p$ definiert. Wir verwenden insbesondere die triviale Zerlegung

$$\mathcal{I}_{j,z_i}^p = \{i\},$$

oder die nichtüberlappende Punkt-Block-Zerlegung

$$\mathcal{I}_{j,z}^p = \{i \in \mathcal{I}_j^p : z_i = z\}.$$

Wir setzen $N_{j,k}^p = \#\mathcal{I}_{j,k}^p$ und es bezeichnen $\underline{I}_{j,k}$ die triviale Prolongationsmatrix. Dann definieren wir die akkumulierte Galerkin Restriktion des Operators \underline{A}_j durch

$$\underline{A}_{j,k}^p = (\underline{I}_{j,k}^p)^T \text{accumulate} (\underline{A}_j^p) \underline{I}_{j,k}^p.$$

3 Ein paralleles Programmiermodell

Jeder Block $I_{j,k}^p$ für $k = 1, \dots, K_j^p$ wird exakt berechnet, d. h. $R_{j,k}^p = (\underline{A}_{j,k}^p)^{-1}$. Mit den eingeführten Matrizen können wir nun den Glätter \underline{R}_j durch seine Wirkung $\underline{c}_j = \underline{R}_j \underline{f}_j$ für alle $\underline{f}_j \in \underline{V}'$ definieren:

- S1) Setze $\underline{c}_j^{p,0} = 0$ für alle Prozessoren $p \in \mathcal{P}$.
- S2) Berechne für alle $p \in \mathcal{P}$ die lokale Korrektur $\underline{c}_j^{K_j^p}$ durch die Schleife
- i) $\underline{f}_{j,k}^p = (\underline{I}_{j,k}^p)^T (\underline{f}_j^p - \text{accumulate}(\underline{A}_{j,k}^p) \underline{c}_j^{p,k-1})$
 - ii) $\underline{c}_j^{p,k} = \underline{c}_j^{p,k-1} + \underline{I}_{j,k}^p \underline{R}_{j,k}^p \underline{f}_{j,k}^p$
- für $k = 1, \dots, K_j^p$.
- S3) Setze $\underline{c}_j^p = \theta \text{accumulate}(\underline{c}_j^{p,K_j^p})$.

In Schritt S2) sollte das Ergebnis von $\text{accumulate}(\underline{A}_{j,k}^p)$ nur einmal berechnet werden und lokal abgespeichert werden, dann ist die Schleife ohne weitere parallele Kommunikation durchführbar.

Damit können wir nun das verwendete parallele Mehrgitterverfahren für $J \in \mathbb{N}$ angeben.

- S1) Gegeben sei $\underline{f}_J \in \underline{V}'_J$. Setze $j = J$.
- S2) Setze $\underline{c}_j^0 = 0$. Für $m = 0, \dots, M - 1$ berechne
- i) $\underline{w}_j^{m+1} = \underline{R}_j \underline{f}_j$,
 - ii) $\underline{c}_j^{m+1} = \underline{c}_j^m + \underline{w}_j^{m+1}$,
 - iii) $\underline{f}_j^{m+1} = \underline{f}_j^m - \underline{A}_j \underline{w}_j^{m+1}$.
- Setze $\underline{f}_j = \underline{f}_j^M$ und $\underline{c}_j = \underline{c}_j^M$.
- S3) Berechne $\underline{f}_{j-1} = \underline{I}_j^T \underline{f}_j$ und setze $j = j - 1$.
- S4) Falls $j = 0$, dann setze $\underline{c}_0 = \underline{A}_0^{-1} \underline{f}_0$, $j = j + 1$ und gehe zu S5).
Andernfalls gehe zu S2).
- S5) Setze $\underline{w}_j = \underline{I}_j \underline{c}_{j-1}$, $\underline{c}_j = \underline{c}_j + \underline{w}_j$ und $\underline{f}_j = \underline{f}_j - \underline{A}_j \underline{w}_j$.
- S6) Setze $\underline{c}_j^0 = 0$. Für $m = 0, \dots, M - 1$ berechne
- i) $\underline{w}_j^{m+1} = \underline{R}_j^T \underline{f}_j$,
 - ii) $\underline{c}_j^{m+1} = \underline{c}_j^m + \underline{w}_j^{m+1}$,
 - iii) $\underline{f}_j^{m+1} = \underline{f}_j^m - \underline{A}_j \underline{w}_j^{m+1}$.
- Setze $\underline{f}_j = \underline{f}_j^M$ und $\underline{c}_j = \underline{c}_j^M$.
- S7) Falls $j = J$, dann ist die Mehrgitterkorrektur durch \underline{c}_J gegeben.
Andernfalls setze $j = j + 1$ und gehe zu S5).

4 Numerische Ergebnisse für das infinitesimale Modell

In diesem Kapitel präsentieren wir die Ergebnisse unserer numerischen Experimente mit dem in Abschnitt 2.5 angegebenen Algorithmus zur Lösung des primalen Problems der infinitesimalen Cosserat-Plastizität. Für die Implementierung und Realisierung der numerischen Simulationen wurde die in Kapitel 3 konzeptionell vorgestellte parallele Finite-Elemente-Software M++ [Wie04] verwendet. Die technische Spezifikation der verwendeten Parallelcluster sind im Anhang Abschnitt H aufgeführt.

4.1 Geometrie und Problemstellung für eine Scheibe mit Loch

In diesem Abschnitt definieren wir ein Testproblem für unseren Algorithmus zur Lösung des infinitesimalen plastischen Cosserat-Modell. Der Zugversuch wurde bereits in [LWW02, Wie99] für perfekte Plastizität verwendet. Bis auf Abschnitt 4.2 verwenden wir in allen Experimenten eine 3D-Konfiguration, welche wir im folgenden nun angeben. Die 2D Konfiguration ergibt sich daraus durch Projektion auf die x_1x_2 -Ebene. Wir betrachten als Geometrie ein Achtel einer Scheibe mit Loch (siehe Abb. 4.1), durch Spiegelung an allen drei Raumachsen entsteht daraus die Geometrie einer Scheibe mit Loch. Symmetriebetrachtungen führen zu der folgenden Wahl von Dirichletrandwerte:

$$\begin{aligned} u_1(t, \mathbf{x}) &= 0, & \bar{A}_2(t, \mathbf{x}) &= 0, & \bar{A}_3(t, \mathbf{x}) &= 0, & t \in T, & \mathbf{x} \in \{\mathbf{y} \in \partial\Omega : y_1 = 10\}, \\ u_2(t, \mathbf{x}) &= 0, & \bar{A}_1(t, \mathbf{x}) &= 0, & \bar{A}_3(t, \mathbf{x}) &= 0, & t \in T, & \mathbf{x} \in \{\mathbf{y} \in \partial\Omega : y_2 = 0\}, \\ u_3(t, \mathbf{x}) &= 0, & \bar{A}_1(t, \mathbf{x}) &= 0, & \bar{A}_2(t, \mathbf{x}) &= 0, & t \in T, & \mathbf{x} \in \{\mathbf{y} \in \partial\Omega : y_3 = 0\}. \end{aligned}$$

Hierbei bezeichne $T = [0, \hat{T}]$ das Simulationsintervall. Durch die Wahl einer Neumann-Randbedingung bringen wir am oberen Ende eine Flächenkraft auf. Die Flächenkraft wählen wir gemäß

$$\ell(t, \mathbf{v}) = t \int_{\Gamma_N} \mathbf{t}_N(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v} \, da, \quad \mathbf{t}_n(\mathbf{x}) = (0, 100, 0)^T.$$

Für die verschiedenen Konvergenzuntersuchungen in Abschnitt 4.5 definieren wir einige spezielle Punkte aus Ω , das sind (siehe Abb. 4.1)

$$\begin{aligned} P_2 &= (9, 0, 0)^T, & P_4 &= (10, 10, 0)^T, & P_5 &= (0, 10, 9)^T, & P_7 &= (6.2, 3.8, 0)^T, \\ P_{12} &= (9, 0, 1)^T, & P_{14} &= (10, 10, 1)^T, & P_{17} &= (6.2, 3.8, 1)^T. \end{aligned}$$

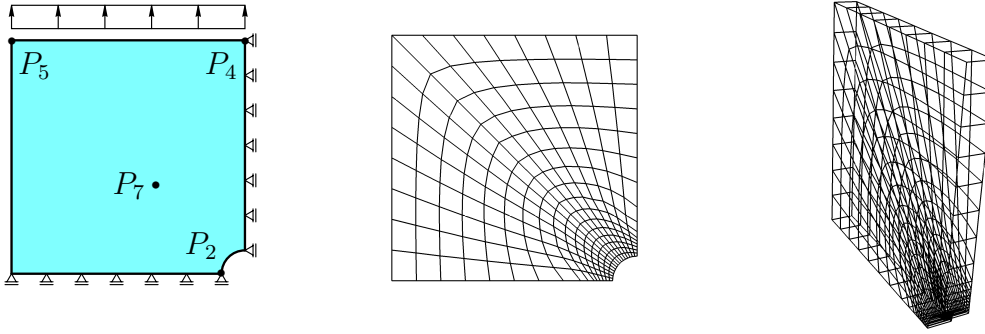


Abbildung 4.1: Geometrie, Randbedingungen in der Draufsicht und das Grobgitter für die Lochscheibe in 3D mit $\Omega = ((0, 10) \times (0, 10) \setminus B_1(10, 0)) \times (0, 1)$.

4.2 Einfluss der Cosserat-Parameter auf den Löseprozess

Am Beispiel der Lochscheibe in 2D untersuchen wir den Einfluss der Cosserat-Parameter auf den nichtlinearen Löser, sowie den linearen Multilevel Löser. Dabei betrachten wir den Zugtest an der Lochscheibe in 2D, welche wir mit Viereckselementen Q1/Q1, Q2/Q2 und Q2/Q1 diskretisieren. Wir erhöhen dabei sukzessive die Last, bis wir den Zeitparameter $t = 4.5$ erreichen. Die Rechnungen wurden auf den Parallelrechnern OTTO und IC1 durchgeführt, die technische Beschreibung der Rechner ist im Anhang Abschnitt H aufgeführt. Die Materialparameter sind, wenn nicht anders angegeben, wie in Tabelle 4.1 gewählt.

Der Kopplungsparameter μ_c

Zuerst fixieren wir den internen Längenparameter L_c und variieren nur μ_c . Wir wollen nun untersuchen in welcher Weise μ_c den nichtlinearen sowie linearen Löseprozess beeinflusst. Wir präsentieren hier ausschließlich Ergebnisse unter Verwendung der einfachen Q1/Q1-Elemente. Die Tabellen 4.2, 4.3 und 4.4 zeigen deutlich, dass für großes μ_c , das Newton-Verfahren weniger als ein Drittel der Iterationsschritte benötigt als im Vergleich zu sehr kleinen Werten von μ_c . Ebenso stellen wir fest, dass die Anzahl der Iterationen

Lamé Konstante	λ	110743.82	[N/mm ²]
Schermodulus	μ	80193.80	[N/mm ²]
Cosserat-Kopplungskonstante	μ_c	80.1938	[N/mm ²]
Cosserat interne Länge	L_c	0.0282843	[mm]
Fließspannung	K_0	450.00	[N/mm ²]

Tabelle 4.1: Materialparameter für das Testproblem.

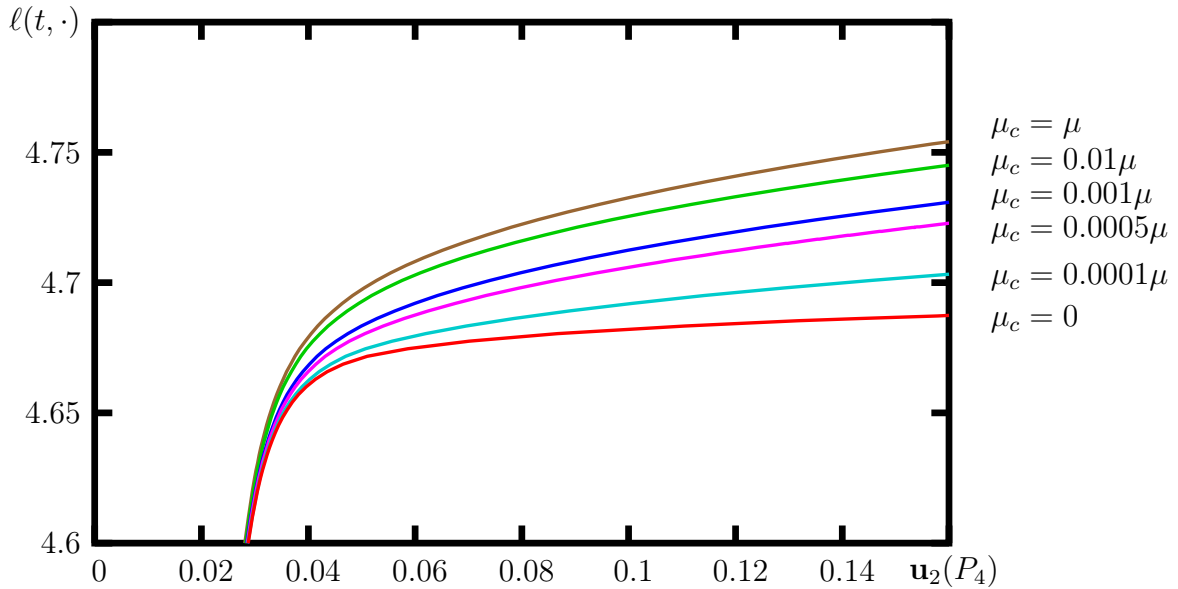


Abbildung 4.2: Last-Verschiebungs-Diagramm für verschiedene Werte von μ_c am Beispiel der Lochscheibe in 2D nach viermaliger uniformer Verfeinerung mit 198 147 Unbekannten [NCMW07]. Die Verschiebungskomponente \mathbf{u}_2 wird im Punkt P_4 ausgewertet. Wir beobachten monotone Konvergenz der Punktauswertung bzgl. $\mu_c \rightarrow 0$ und stellen an den drei Kurven $\mu_c = 0.0005\mu$, $\mu_c = 0.0001\mu$ und $\mu_c = 0$ (Prandtl-Reuß-Plastizität) fest, dass die Konvergenz wegen $\sqrt{\frac{1}{5}} \approx 0.44$ asymptotisch wie $\sqrt{\mu_c}$ erfolgt.

4.2 Einfluss der Cosserat-Parameter auf den Löseprozess

Anzahl der Zellen	262 144	1 048 576	4 194 304
Anzahl der Prozessoren	32	43	64
Parallelrechner	IC1	OTTO	IC1
Anzahl der Unbekannten	789 507	3 151 875	12 595 203
Gesamtzeit	0 : 07 h	0 : 26 h	1 : 10 h
Lastschritte	90	90	90
Anzahl der Newton-Schritte	180	204	219
Anzahl der Mehrgitter-Zyklen	1047	1175	1247

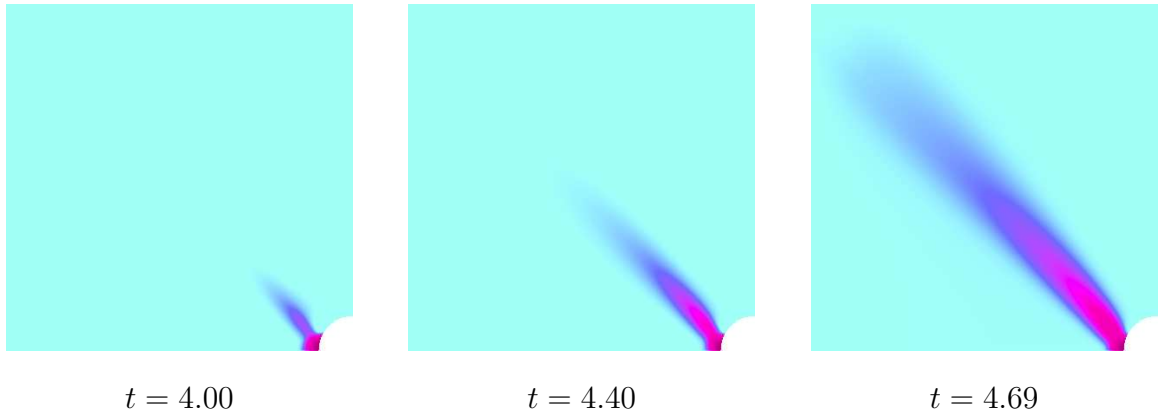
Tabelle 4.2: Laufzeit- und Leistungsübersicht der Implementierung für das Beispiel der Lochscheibe in 2D mit Q1/Q1-Diskretisierung und die Cosserat-Parameter: $\mu_c = 80193.8$ und $L_c = 0.282843$.

Anzahl der Zellen	262 144	1 048 576	4 194 304
Anzahl der Prozessoren	32	43	64
Parallelrechner	IC1	OTTO	IC1
Anzahl der Unbekannten	789 507	3 151 875	12 595 203
Gesamtzeit	0 : 26 h	1 : 45 h	7 : 44 h
Lastschritte	91	96	97
Anzahl der Newton-Schritte	270	338	364
Anzahl der Mehrgitter-Zyklen	5104	7999	10835

Tabelle 4.3: Laufzeit- und Leistungsübersicht der Implementierung für das Beispiel der Lochscheibe in 2D mit Q1/Q1-Diskretisierung und die Cosserat-Parameter: $\mu_c = 80.1938$ und $L_c = 0.282843$.

des linearen Löser bis zur Konvergenz einem noch größeren Einfluss unterliegt. Die Anzahl der notwendigen Mehrgitter-Zyklen für die Berechnungen auf dem feinsten Gitter mit über vier Millionen Unbekannten steigt auf das zehnfache an, wenn wir μ_c von μ auf $10^{-6}\mu$ herabsetzen. Dies spiegelt die Tatsache wieder, dass der verwendete lineare Löser nicht robust für den Grenzfall der perfekten Plastizität ist. Denn die Wahl $\mu_c = 0$, entspricht wie in Abschnitt 2.6 ausgeführt, dem perfekt plastischen Modell.

elasto-plastisches Cosserat-Modell ($\mu_c = \mu$)



Prandtl-Reuß-Plastizität ($\mu_c = 0$)

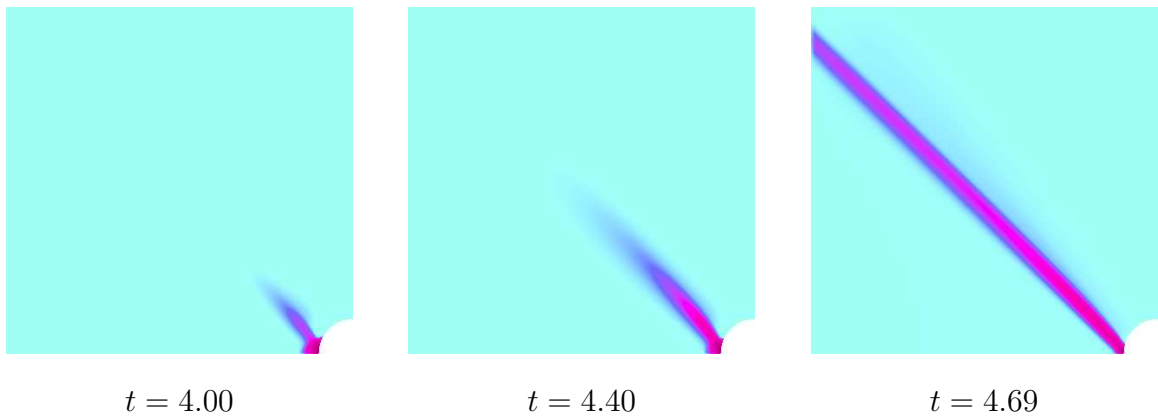


Abbildung 4.3: Vergleich der effektiven plastischen Verzerrung für die Cosserat-Kopplungskonstanten $\mu_c = \mu$ und $\mu_c = 0$ am Beispiel der Lochscheibe in 2D nach viermaliger uniformer Verfeinerung mit 198 147 Unbekannten [NCMW07]. Betrachten wir zuerst die Grafiken für das Prandtl-Reuß-Modell (unten), so sehen wir bei einer Erhöhung der Zuglast von $t = 4$ bis $t = 4.69$ die Ausbildung eines scharfen Scherbandes, welches sich von der Singularität der einspringenden Ecke rechts unten am Loch bis links oben erstreckt. Die Grenzlast ist erreicht. Vergleichen wir dies mit den Ergebnissen des elasto-plastischen Cosserat-Modells (oben), so stellen wir für $t \leq 4.4$ kaum Unterschiede fest. Erst in der Nähe der Grenzlast des perfekt plastischen Modells zeigt das Cosserat-Modell ein diffuseres Scherband mit weniger harten Grenzen. Dies demonstriert die höhere Regularität der Lösung des Cosserat-Modells.

4.2 Einfluss der Cosserat-Parameter auf den Löseprozess

Anzahl der Zellen	262 144	1 048 576	4 194 304
Anzahl der Prozessoren	32	43	64
Parallelrechner	IC1	OTTO	IC1
Anzahl der Unbekannten	789 507	3 151 875	12 595 203
Gesamtzeit	0 : 27 h	1 : 46 h	8 : 46 h
Lastschritte	91	95	99
Anzahl der Newton-Schritte	266	332	378
Anzahl der Mehrgitter-Zyklen	5143	8094	12371

Tabelle 4.4: Laufzeit- und Leistungsübersicht der Implementierung für das Beispiel der Lochscheibe in 2D mit Q1/Q1-Diskretisierung und die Cosserat-Parameter: $\mu_c = 0.0801938$ und $L_c = 0.282843$.

4 Numerische Ergebnisse für das infinitesimale Modell

Anzahl der Zellen	262 144	1 048 576	4 194 304
Anzahl der Prozessoren	32	43	64
Parallelrechner	IC1	OTTO	IC1
Anzahl der Unbekannten	789 507	3 151 875	12 595 203
Gesamtzeit	0 : 21 h	1 : 07 h	3 : 46 h
Lastschritte	90	91	92
Anzahl der Newton-Schritte	243	277	284
Anzahl der Mehrgitter-Zyklen	3996	4767	5043

Tabelle 4.5: Laufzeit- und Leistungsübersicht der Implementierung für das Beispiel der Lochscheibe in 2D mit Q1/Q1-Diskretisierung und die Cosserat-Parameter: $\mu_c = 80193.8$ und $L_c = 0.002828$.

Anzahl der Zellen	262 144	1 048 576	4 194 304
Anzahl der Prozessoren	32	43	64
Parallelrechner	IC1	OTTO	IC1
Anzahl der Unbekannten	789 507	3 151 875	12 595 203
Gesamtzeit	0 : 27 h	1 : 49 h	8 : 38 h
Lastschritte	91	96	98
Anzahl der Newton-Schritte	268	339	371
Anzahl der Mehrgitter-Zyklen	5205	8517	12129

Tabelle 4.6: Laufzeit- und Leistungsübersicht der Implementierung für das Beispiel der Lochscheibe in 2D mit Q1/Q1-Diskretisierung und die Cosserat-Parameter: $\mu_c = 0.0801938$ und $L_c = 0.002828$.

Die charakteristische Länge L_c

Wir halten nun μ_c fest und untersuchen den Einfluss des internen Längenparameters L_c . Ist μ_c groß genug, so hat die Erhöhung von L_c einen positiven Einfluss auf die nichtlineare Konvergenz, wie ein Vergleich von Tabelle 4.2 und 4.5 aufzeigt. Andererseits ist aus den Tabellen 4.4 und 4.6 kaum eine Änderung des Konvergenzverhaltens in Abhängigkeit von L_c ersichtlich, wenn μ_c sehr klein ist, weder im linearen noch nichtlinearen Löser.

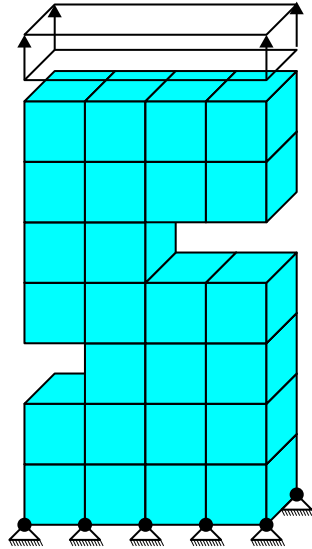


Abbildung 4.4: Geometrie, Randbedingungen und Grobgitter für eine polygonale 3D Geometrie. Die Geometrie besteht aus einem Quader mit zwei Einkerbungen, wir haben $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ mit $\text{conv } \bar{\Omega} = [0, 4] \times [0, 2] \times [0, 7]$. Auf der Oberseite wird eine Flächenkraft durch Neumann-Randbedingungen in den Verschiebungen durch $\ell(t, v) = t \int_{\Gamma_N} v_3(\mathbf{x}) da$ aufgebracht. Durch homogene Dirichlet-Randbedingungen wird die Unterseite sowohl in den Verschiebungen als auch in den Mikrorotationen fixiert, sonst verwenden wir natürliche Randbedingung. Das dargestellte Grobgitter besteht aus 25 Hexaedern der Kantenlänge 1. Für die Berechnung verwenden wir ein Grobgitter mit 50 Zellen, welches durch verdoppeln in die Tiefe (x_2 -Richtung) entsteht.

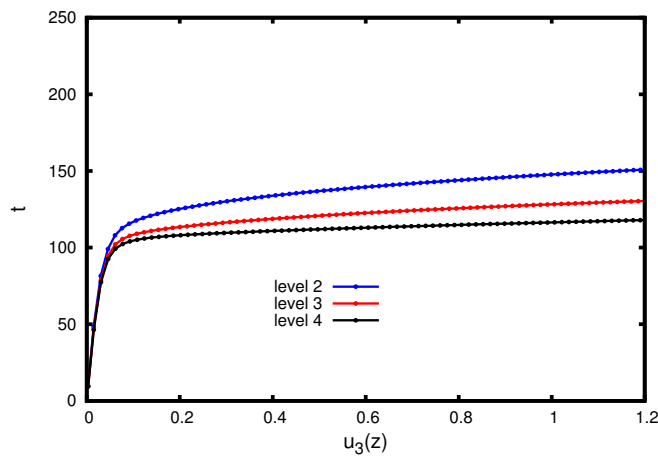


Abbildung 4.5: Last-Verschiebungs-Diagramm für den Quader mit Einkerbungen aus Abbildung 4.4 nach zwei-, drei- bzw. viermaliger uniformer Verfeinerung mit bis zu 1 311 751 Unbekannten in den Verschiebungen und Mikrorotationen. Wir wählen die Cosserat-Parameter $\mu_c = 0.0001\mu$ und $L_c = 0.01$. Wir beobachten lineare Konvergenzordnung.

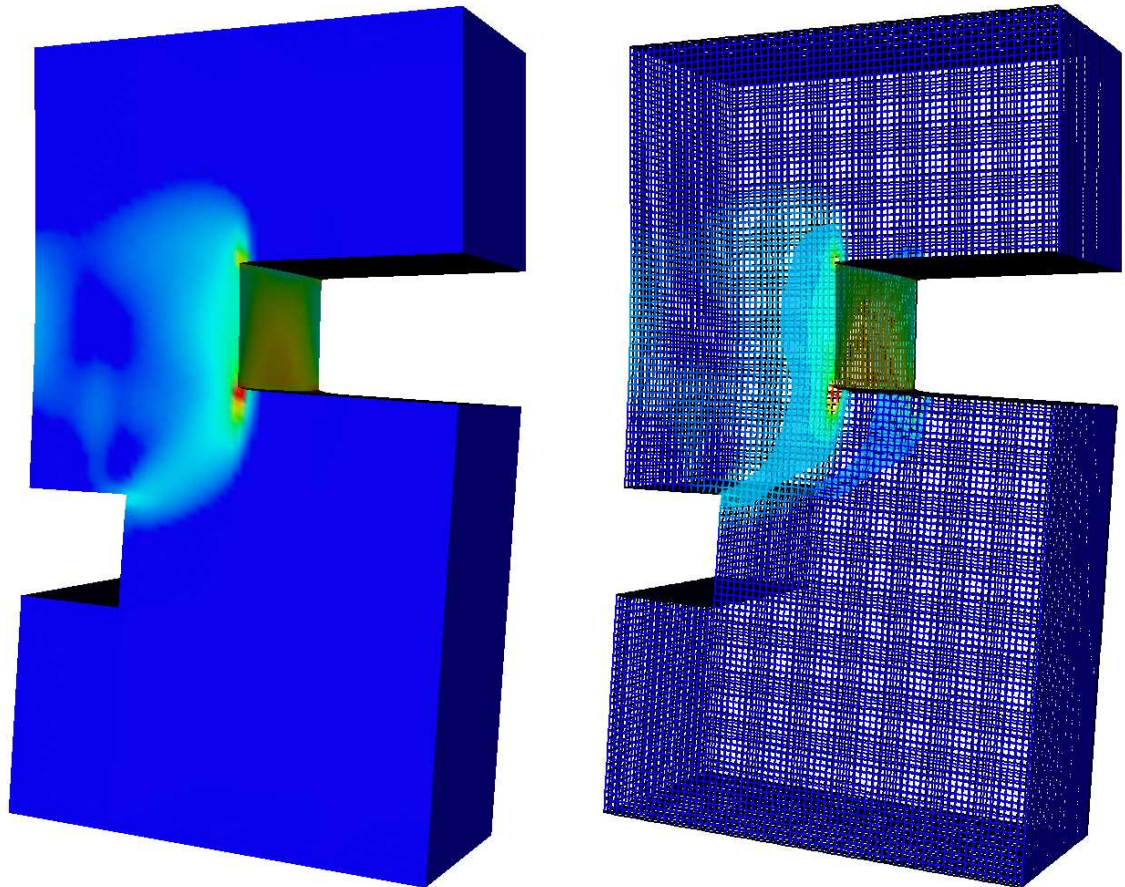


Abbildung 4.6: Effektive plastische Verzerrung für das Beispiel aus Abbildung 4.4. Zwischen den einspringenden Kanten bildet sich ein Scherband aus.

Anzahl der Zellen	65 536	262 144	1 048 576
Anzahl der Prozessoren	16	32	128
Parallelrechner	IC1	IC1	IC1
Anzahl der Unbekannten	461 315	1 840 131	7 350 275
Gesamtzeit	0 : 43 h	1 : 35 h	1 : 31 h
Lastschritte	90	91	91
Anzahl der Newton-Schritte	244	262	275
Anzahl der Mehrgitter-Zyklen	5014	5359	5260

Tabelle 4.7: Laufzeit- und Leistungsübersicht der Implementierung für das Beispiel der Lochscheibe in 2D mit Q2/Q1-Diskretisierung und die Cosserat-Parameter: $\mu_c = 80193.8$ und $L_c = 0.002828$.

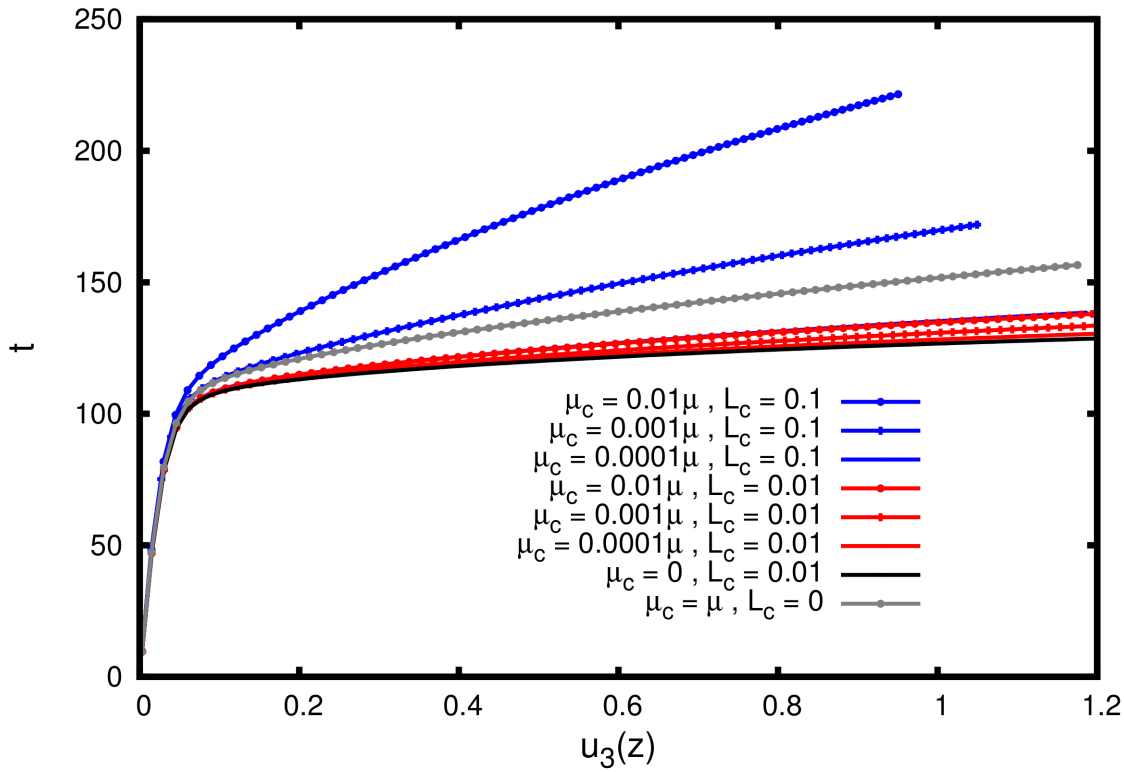


Abbildung 4.7: Last-Verschiebungs-Diagramm für den Quader mit Einkerbungen aus Abbildung 4.4 nach dreimaliger uniformer Verfeinerung mit 174 727 Unbekannten in den Verschiebungen und Mikrorotationen für verschiedene Cosserat-Parameter μ_c und L_c mit Q1/Q1-Elementen. Für festes μ_c und $L_c \rightarrow \infty$ beobachten wir, dass das Material sich steifer verhält. Aufgrund der speziellen Wahl der Diskretisierung erhalten wir für $\mu_c = 0$ und $L_c \neq 0$ (schwarze Kurve) einerseits und andererseits für $\mu_c \neq 0$ und $L_c = 0$ (graue Kurve) unterschiedliche Ergebnisse im voll-diskreten Problem, obwohl die beiden Spezialfälle in der kontinuierlichen Beschreibung gleiche Verschiebungen liefern. Mit den gewählten Basisfunktionen kann $\text{skew } D\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \overline{\mathbf{A}}(\mathbf{x})$ nicht erreicht werden.

Anzahl der Zellen	65 536	262 144	1 048 576
Anzahl der Prozessoren	16	32	128
Parallelrechner	IC1	IC1	IC1
Anzahl der Unbekannten	592 899	2 365 443	9 449 475
Gesamtzeit	0 : 58 h	1 : 59 h	2 : 01 h
Lastschritte	90	90	91
Anzahl der Newton-Schritte	245	253	277
Anzahl der Mehrgitter-Zyklen	4745	4794	4932

Tabelle 4.8: Laufzeit- und Leistungsübersicht der Implementierung für das Beispiel der Lochscheibe in 2D mit Q2/Q2-Diskretisierung und die Cosserat-Parameter: $\mu_c = 80193.8$ und $L_c = 0.002828$.

Die Diskretisierungen Q1/Q1, Q2/Q2 und Q2/Q1

Wir wollen nun durch Resultate numerischer Experimente untersuchen, welchen Einfluss verschiedene Diskretisierung auf den verwendeten Lösungsalgorithmus haben in Bezug auf den linearen Löser und die Laufzeit des Programms. Wir kombinieren dabei Grunddiskretisierungen, welche wir dann für die Verschiebungen bzw. Mikrorotationen kombinieren. Die Grunddiskretisierungen sind bilineare (2D) bzw. trilineare (3D) finite Element Räume, welche wir mit der Bezeichnung Q1 abkürzen, und andererseits bi-quadratische (2D) bzw. triquadratische (3D) Serendipity finite Element Räume mit der Bezeichnung Q2. In den Experimente untersuchen wir nun drei Kombination:

- Q1/Q1-Elemente: Verschiebungen \mathbf{u} und Mikrorotationen \bar{A} werden beide mit Q1 diskretisiert. Für die Approximation der Volumen- bzw. Randintegrale verwenden wir 8- bzw. 4-knotige Gauß-Quadraturformeln in 3D (und in 2D entsprechend 4- bzw. 2-knotige).
- Q2/Q1-Elemente: für die Verschiebungen \mathbf{u} verwenden wir Q2-Elemente und für die Mikrorotationen \bar{A} hingegen Q1-Elemente. Für die numerische Integration verwenden wir in 3D 27 bzw. 9 Stützstellen (und in 2D 8 bzw. 4).
- Q2/Q2-Elemente: \mathbf{u} und \bar{A} werden beide mit Q2 diskretisiert. Die Integration wird wie bei Q2/Q1-Elementen durchgeführt.

Wir halten nun beide Cosserat-Parameter fest und variieren nur die aufgeführten Diskretisierungen. In den Tabellen 4.5, 4.7 und 4.8 sind die Resultate aufgelistet. Vergleichen wir Q2/Q1-Elemente mit Q2/Q2-Elemente, so fällt auf, dass die gemischten Elemente etwas mehr Mehrgitter-Zyklen bis zur Konvergenz des linearen Löfers benötigen. Vergleichen wir die Laufzeiten, so ist der Aufwand jeweils proportional zur Anzahl der Unbekannten.

4.3 Nichtlineare Konvergenz

Da das Nullstellenproblem (2.13) strikt semiglatt ist (vgl. Abschnitt 2.4), erwarten wir für das Newton-Verfahren lokal quadratische Konvergenz. Unsere numerischen Ergebnisse zeigen dieses Konvergenzverhalten wenn der plastische Bereich nahezu identifiziert ist (Tabelle 4.9). Für die Berechnung haben wir das lineare Gleichungssystem, vgl. S5) in 2.5 mit einer Toleranz $\varepsilon = 10^{-12}$ gelöst.

t	Residuum (Anzahl der plastifizierten Gaußpunkte)									
1.000	8.5+01	(0)	6.0-11	(0)						
1.250	2.1+01	(72)	7.3-01	(0)	1.3-11	(0)				
1.500	9.6-02	(72)	5.3-03	(70)	1.8-06	(70)	1.3-11	(70)		
1.510	2.2-02	(87)	4.1-05	(87)	4.7-10	(87)				
1.576	1.4-01	(345)	6.8-03	(338)	1.0-04	(337)	1.9-10	(337)		
1.642	2.2-01	(772)	7.8-03	(785)	1.4-04	(789)	6.2-10	(789)		
1.707	2.8-01	(1295)	2.5-02	(1286)	8.7-05	(1287)	4.9-10	(1287)		
1.773	2.8-01	(1818)	1.3-02	(1856)	4.4-04	(1857)	4.7-09	(1857)	1.8-11	(1857)
1.838	2.8-01	(2448)	8.1-03	(2482)	1.2-04	(2484)	5.8-10	(2484)		
1.904	3.0-01	(3073)	1.0-02	(3136)	1.3-06	(3136)	1.8-11	(3136)		
1.969	3.1-01	(3758)	6.8-03	(3816)	2.8-05	(3817)	3.3-11	(3817)		
2.035	3.0-01	(4473)	7.0-03	(4526)	7.4-05	(4527)	1.5-09	(4527)	1.9-11	(4527)
2.100	3.0-01	(5220)	1.3-02	(5282)	9.1-05	(5284)	3.2-10	(5284)		
2.165	3.1-01	(5956)	1.3-02	(6065)	3.3-05	(6066)	1.0-10	(6066)		
2.231	3.1-01	(6757)	1.5-02	(6849)	8.7-06	(6850)	2.1-11	(6850)		
2.296	3.1-01	(7578)	1.2-02	(7695)	4.1-06	(7696)	2.1-11	(7696)		
2.361	3.1-01	(8488)	1.7-02	(8613)	1.9-05	(8614)	2.3-11	(8614)		
2.426	3.1-01	(9430)	2.0-02	(9579)	7.7-05	(9583)	1.2-10	(9583)		
2.491	3.2-01	(10442)	1.7-02	(10590)	7.1-05	(10592)	3.9-10	(10592)		
2.556	3.2-01	(11501)	2.3-02	(11688)	8.9-05	(11694)	2.7-10	(11694)		
2.620	3.3-01	(12662)	2.4-02	(12851)	1.0-04	(12855)	4.2-10	(12855)		
2.685	3.4-01	(13937)	2.9-02	(14151)	8.7-05	(14157)	2.6-10	(14157)		
2.750	3.5-01	(15370)	2.6-02	(15564)	2.6-04	(15571)	1.4-09	(15571)	2.5-11	(15571)
2.814	3.7-01	(16964)	2.8-02	(17161)	3.7-04	(17169)	3.6-09	(17169)	2.7-11	(17169)
2.878	3.8-01	(18747)	2.9-02	(18992)	5.9-04	(19004)	1.5-08	(19004)	2.6-11	(19004)
2.942	4.1-01	(20896)	2.7-02	(21119)	3.0-04	(21129)	1.4-09	(21129)	2.6-11	(21129)
3.006	4.4-01	(23436)	3.0-02	(23673)	7.0-04	(23690)	2.9-05	(23692)	7.4-11	(23692)
3.070	4.7-01	(26541)	3.5-02	(26759)	6.5-04	(26777)	6.0-06	(26778)	2.8-11	(26778)
3.133	5.2-01	(30251)	3.9-02	(30523)	1.1-03	(30550)	5.7-05	(30551)	1.6-10	(30551)
3.196	5.8-01	(34681)	4.6-02	(34971)	3.4-03	(35010)	1.3-05	(35010)	3.0-11	(35010)
3.259	6.5-01	(39675)	5.6-02	(40026)	2.8-03	(40071)	9.1-07	(40070)	3.0-11	(40070)
3.321	7.2-01	(45289)	5.4-02	(45657)	2.9-03	(45692)	4.4-05	(45693)	3.4-10	(45693)
3.382	8.0-01	(51432)	6.3-02	(51866)	4.2-03	(51929)	2.9-05	(51932)	4.6-11	(51932)
3.443	8.9-01	(58253)	8.5-02	(58797)	3.7-03	(58873)	1.5-05	(58874)	4.8-11	(58874)
3.502	1.0+00	(66546)	9.8-02	(66248)	5.6-03	(66341)	6.8-05	(66346)	1.3-10	(66346)
3.560	1.2+00	(73599)	1.3-01	(74246)	8.8-03	(74363)	1.7-04	(74368)	9.1-10	(74368)
3.617	1.4+00	(81892)	1.9-01	(82542)	1.2-02	(82685)	4.1-04	(82692)	6.2-09	(82692)
3.671	1.6+00	(90479)	2.3-01	(91233)	1.5-02	(91409)	4.6-04	(91425)	2.4-06	(91426)
3.723	1.9+00	(98940)	2.9-01	(99716)	2.2-02	(99877)	6.8-04	(99884)	1.4-08	(99884)
3.772	2.1+00	(107451)	3.6-01	(108323)	2.5-02	(108544)	1.9-03	(108557)	9.3-06	(108556)
3.817	2.2+00	(116151)	4.4-01	(117205)	2.8-02	(117430)	9.8-04	(117442)	7.2-06	(117443)
3.857	2.4+00	(124954)	5.1-01	(126058)	3.4-02	(126313)	1.1-03	(126330)	4.4-05	(126332)
3.893	2.5+00	(133707)	5.2-01	(134991)	3.7-02	(135290)	1.6-03	(135313)	1.9-06	(135315)
3.924	2.5+00	(142135)	5.4-01	(143509)	4.0-02	(143823)	4.3-04	(143839)	9.4-10	(143839)
3.950	2.5+00	(150203)	5.4-01	(151560)	4.9-02	(151916)	1.4-03	(151945)	1.9-05	(151947)
3.973	2.5+00	(157917)	5.0-01	(159379)	3.8-02	(159699)	1.3-03	(159712)	2.7-08	(159712)
3.992	2.4+00	(165107)	4.3-01	(166475)	4.2-02	(166784)	1.7-03	(166810)	1.4-07	(166810)
4.009	2.3+00	(171929)	4.1-01	(173356)	2.6-02	(173579)	1.7-03	(173594)	5.4-08	(173594)
4.023	2.2+00	(178207)	3.5-01	(179503)	2.6-02	(179735)	8.4-04	(179750)	1.5-08	(179750)
4.035	2.1+00	(184016)	3.2-01	(185316)	2.1-02	(185509)	1.2-03	(185520)	1.5-05	(185521)
4.046	2.0+00	(189493)	3.1-01	(190717)	1.7-02	(190914)	1.2-04	(190920)	4.5-10	(190920)
4.056	1.8+00	(194494)	2.7-01	(195665)	1.4-02	(195833)	2.2-04	(195841)	4.9-10	(195841)
4.065	1.7+00	(199270)	2.2-01	(200369)	1.3-02	(200494)	4.0-04	(200499)	5.7-09	(200499)

Tabelle 4.9: Konvergenzgeschichte für die 3D-Lochscheibe nach zwei Verfeinerungen mit 302 250 Unbekannten und 442 368 Gaußpunkten in 16 384 Zellen und Q1/Q1-Elementen.

4.4 Parallele Skalierbarkeit

Wir wollen in diesem Abschnitt die Effizienz der parallelen Skalierung des implementierten Algorithmus testen. Wir halten dafür die Modellparameter konstant, wählen eine feste Zeitreihe und untersuchen wie sich für verschiedene Gitterweiten und Anzahl verwendeter Prozessoren die Laufzeit ändert. Für die Berechnungen bevorzugen wir ein vorkonditioniertes CG-Verfahren. Der Vorkonditionierer wird durch ein Mehrgitterverfahren realisiert, als Glätter wird eine symmetrisierte Punkt-Block-Gauß-Seidel-Iteration mit fünf Vor- bzw. Nachglättungsschritten auf den einzelnen Prozessorgebieten verwendet. Die Gesamtkorrektur wird dann gedämpft ($\rho = 0.9$), additiv zusammengesetzt. Die linearen Teilprobleme wurden inexakt gelöst, mit einer relativen Fehlertoleranz von 10^{-3} . Die absolute Genauigkeit betrug $\varepsilon = 10^{-11}$. Die Grobgitterkorrektur wurde mit einem vorkonditionierten GMRES-Verfahren generiert, wobei als Vorkonditionierer ein über Prozessorgebiete überlappendes SuperLU Verfahren Einsatz fand oder ein direkter paralleler Löser. Die relative Genauigkeit der iterativen Grobgitterkorrektur betrug 10^{-4} und absolut 10^{-15} .

In den Tabellen 4.10, 4.11 und 4.12 sind die Ergebnisse der Studie aufgeführt. Alle diese Rechnungen wurde auf dem Institutscluster IC1 des Karlsruher Institut für Technologie (KIT) durchgeführt. Die technische Spezifikation ist in Anhang H beschrieben. Als Modellproblem verwenden wir die Lochscheibe in 3D mit einer Q1/Q1-Diskretisierung. Tabelle 4.10 zeigt die Effizienz des verwendeten parallelen Programmiermodells und den optimalen Aufwand des Mehrgitterverfahren. Die Laufzeit bleibt nahezu konstant, wenn wir uniform verfeinern und für die Verachtfachung der Unbekannten achtmal soviel Prozessoren verwenden. Die Ergebnisse in Tabelle 4.11 zeigen, dass für eine konstante Problemgröße, nicht beliebig viele Prozessoren effizient eingesetzt werden können. Im Anhang B sind weitere Ergebnisse der numerischen Skalierbarkeitsstudie insbesondere auch für die gemischte Q2/Q1-Diskretisierung aufgeführt.

Verfeinerungslevel	#Prozessoren	#Zellen	#Unbekannte	Zeit	Scaleup
2	1	16 384	126 750	2:22h	2.10
3	8	131 072	898 614	4:58h	
4	64	1 048 576	6 736 998	6:28h	1.30
5	512	8 388 608	52 107 462	7:13h	1.12

Tabelle 4.10: Skalierungsverhalten für ein konstantes Verhältnis von Anzahl der eingesetzten Prozessoren und Anzahl der Zellen für die Q1/Q1-Diskretisierung. Als Testbeispiel wurde eine volle numerische Simulation für die Lochscheibe in 3D durchgeführt, bis nach 100 Zeitschritten die Hälfte der Gaußpunkte plastifiziert sind. Als Scaleup (parallele Skalierbarkeit) bezeichnen wir hier den Laufzeitquotienten $T_{8|\mathcal{P}|}(8|\mathcal{C}|)/T_{|\mathcal{P}|}(|\mathcal{C}|)$, wobei $|\mathcal{P}|$ bzw. $|\mathcal{C}|$ die Anzahl der Prozessoren bzw. Zellen bezeichnet. Die Berechnungen wurden dabei auf dem Institutscluster IC1 des Karlsruher Institut für Technologie (KIT) durchgeführt.

#Prozessoren	Zeit	Laufzeitverhältnis
32	2:06h	1.91
64	1:06h	
128	0:35h	1.89
256	0:19h	1.84

Tabelle 4.11: In der Tabelle sind die Ergebnisse für festgehaltene Problemgröße mit 898 614 Unbekannten nach dreimaliger uniformer Verfeinerung für eine unterschiedliche Anzahl an Prozessoren auf der IC1 dargestellt.

Verfeinerungslevel	#Zellen	#Unbekannte	Zeit	Scaleup
2	16 384	126 750	0:04h	4.75
3	131 072	898 614	0:19h	
4	1 048 576	6 736 998	2:26h	7.68
5	8 388 608	52 107 462	20:55h	8.60

Tabelle 4.12: Hier sind die Resultat für verschieden feine Gitter bei der Verwendung von 256 Prozessoren des Institutsclusters IC1 aufgelistet.

4.5 Konvergenzstudie der Orts- und Zeitdiskretisierung

Wir wollen nun die Konvergenzordnung der numerischen Berechnung experimentell untersuchen. Dabei vergleichen wir die Werte der Lochscheibe 3D für den Zeitpunkt $t = 4$ anhand verschiedener Zeitreihen und Gitterweiten. Dabei wurde die Zeitreihe aus Abschnitt 4.3 verwendet und dann durch Einfügen von Zwischenschritten verfeinert. Wir geben nun die Ergebnisse für die beiden Diskretisierungen Q1/Q1 und Q2/Q1 an. Die Differenz zwischen verschiedenen Zeitreihen bei fester Gitterweite sind immer hochgestellt abzulesen. Umgekehrt sind die Differenzen im Ort als Index angegeben.

Lastintegral - Oberflächenintegral. In den Tabellen 4.13 und 4.14 betrachten wir die Konvergenz des Oberflächenintegrals

$$100 \int_{\Gamma_N} u_2 \, d\mathbf{a} .$$

Beide Diskretisierungen zeigen eine lineare Konvergenzordnung für das implizite Euler-Verfahren an, dabei ist die absolute Größenordnung der Differenz bei den Q1/Q1-Elemente etwas geringer. Im Ort zeigt sich eine Konvergenzgeschwindigkeit zwischen linearer und quadratischer Ordnung, die bei den Q2/Q1-Elemente viel besser ist als bei Q1/Q1-Elementen. Betrachten wir die letzte Spalte mit 392 Zeitschritten. Wir machen die Saturationsannahme, dass nach drei uniformen Verfeinerungen im Ort (letzte Zeile) bereits der asymptotischen Konvergenzbereich erreicht ist. Die Differenz also bei jeder weiteren Verfeinerung um einen Faktor $\frac{1}{4}$ abnimmt. Unter dieser Annahme erhalten wir den Wert 21.645 ± 0.0005 . Um mit der einfachen Q1/Q1-Diskretisierung diese Genauigkeit zu erreichen muss noch mindestens einmal verfeinert werden. Als Faustregel leiten wir ab, dass für Q1/Q1 mindestens zwei Verfeinerungen mehr notwendig sind, um im Lastintegral die Genauigkeit von Q2/Q1 zu erreichen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
16 384	21.5802092	21.5796164 ^{-5.93e-04}	21.5793152 ^{-3.01e-04}
131 072	21.6263510 _{+4.61e-02}	21.6257285 ^{-6.22e-04} _{+4.61e-02}	21.6254126 ^{-3.16e-04} _{+4.61e-02}
1 048 576	21.6408534 _{+1.45e-02}	21.6402182 ^{-6.35e-04} _{+1.45e-02}	21.6398959 ^{-3.22e-04} _{+1.45e-02}

Tabelle 4.13: Asymptotische Konvergenz für $100 \int_{\Gamma_N} u_2 \, d\mathbf{a}$ mit Q1/Q1-Elementen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
2 048	21.6365641	21.6359329 ^{-6.31e-04}	21.6356128 ^{-3.20e-04}
16 384	21.6449771 _{+8.41e-03}	21.6443361 _{+8.40e-03} ^{-6.41e-04}	21.6440110 _{+8.40e-03} ^{-3.25e-04}
131 072	21.6462301 _{+1.25e-03}	21.6455894 _{+1.25e-03} ^{-6.41e-04}	21.6452645 _{+1.25e-03} ^{-3.25e-04}

Tabelle 4.14: Asymptotische Konvergenz für $100 \int_{\Gamma_N} u_2 \, d\mathbf{a}$ mit Q2/Q1-Elementen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
16 384	0.00056672	0.00057024 ^{+3.52e-06}	0.00057203 ^{+1.79e-06}
131 072	0.00044850 _{-1.18e-04}	0.00045260 ^{+4.10e-06} _{-1.18e-04}	0.00045469 ^{+2.09e-06} _{-1.17e-04}
1 048 576	0.00041409 _{-3.44e-05}	0.00041839 ^{+4.30e-06} _{-3.42e-05}	0.00042058 ^{+2.19e-06} _{-3.41e-05}

Tabelle 4.15: Asymptotische Konvergenz für $u_1(P_2)$ mit Q1/Q1-Elementen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
2 048	0.00038363	0.00038805 ^{+4.42e-06}	0.00039031 ^{+2.26e-06}
16 384	0.00039170 ^{+8.07e-06}	0.00039609 ^{+4.39e-06} _{+8.04e-06}	0.00039832 ^{+2.23e-06} _{+8.01e-06}
131 072	0.00039919 ^{+7.49e-06}	0.00040359 ^{+4.40e-06} _{+7.50e-06}	0.00040583 ^{+2.24e-06} _{+7.51e-06}

Tabelle 4.16: Asymptotische Konvergenz für $u_1(P_2)$ mit Q2/Q1-Elementen.

Punktauswertung von Verschiebung, Mikrorotation und Spannung. Wie in der Visualisierung der Ergebnisse in Abschnitt 4.6 zu sehen ist, beginnt die Plastifizierung in der Ecke P_2 . Daher konzentrieren wir uns zuerst auf die Auswertung der primalen Variablen in diesem Punkt.

Betrachten wir die Tabellen 4.15 und 4.16), so stellen wir fest, dass die Konvergenz der Verschiebungen im Ort für Q1/Q1-Elemente zwischen linearer und quadratischer Konvergenzordnung liegt. Die gemischte Diskretisierung ist absolut etwas besser, allerdings ist keine Konvergenz zu erkennen. Die absoluten Werte scheinen jedoch besser zu sein als bei Q1/Q1. Denn die Differenz zwischen Level 2 und Level 3 liegt bei Q1/Q1-Elementen unabhängig von der gewählten Zeitreihe bei ungefähr $1.2 \cdot 10^{-4}$, hingegen bei Q2/Q1-Elementen bei ungefähr $8.0 \cdot 10^{-6}$ zwischen Level 1 und Level 2. Die einfache Q1/Q1-Diskretisierung liefert bessere Ergebnisse. Eine adaptive Problembehandlung mit lokaler Gitterverfeinerung ist hier notwendig.

Für die Mikrorotationen betrachten wir die Tabellen 4.17 und 4.18. Vergleichen wir die Ergebnisse von zwei aufeinanderfolgenden Halbierungen der Gitterweite, so halbiert sich die Differenz.

Bei den Ergebnisse für die Spannungsauswertung im zu P_7 nächstgelegenen Quadraturpunkt P'_7 ergibt sich ein ähnliches Bild (vgl. Tab. 4.19 und 4.19).

Im Anhang C sind weiter Ergebnisse der numerischen Konvergenzstudie aufgelistet.

4.5 Konvergenzstudie der Orts- und Zeitdiskretisierung

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
16 384	0.0003737375	0.0003734473 ^{-2.90e-07}	0.0003733006 ^{-1.47e-07}
131 072	0.0003821780 ^{+8.44e-06}	0.0003819283 ^{-2.50e-07} _{+8.48e-06}	0.0003818021 ^{-1.26e-07} _{+8.50e-06}
1 048 576	0.0003816529 ^{-5.25e-07}	0.0003814339 ^{-2.19e-07} _{-4.94e-07}	0.0003813233 ^{-1.11e-07} _{-4.79e-07}

Tabelle 4.17: Asymptotische Konvergenz für $\bar{A}_2(P_{12})$ mit Q1/Q1-Elementen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
2 048	0.0003988434	0.0003985906 ^{-2.53e-07}	0.0003984628 ^{-1.28e-07}
16 384	0.0003874725 ^{-1.14e-05}	0.0003872601 ^{-2.12e-07} _{-1.13e-05}	0.0003871527 ^{-1.07e-07} _{-1.13e-05}
131 072	0.0003817207 ^{-5.75e-06}	0.0003815214 ^{-1.99e-07} _{-5.74e-06}	0.0003814207 ^{-1.01e-07} _{-5.73e-06}

Tabelle 4.18: Asymptotische Konvergenz für $\bar{A}_2(P_{12})$ mit Q2/Q1-Elementen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
16 384	-66.990	-66.983 ^{+7.00e-03}	-66.979 ^{+4.00e-03}
131 072	-68.568 ^{-1.58e+00}	-68.551 ^{+1.70e-02} _{-1.57e+00}	-68.543 ^{+8.00e-03} _{-1.56e+00}
1 048 576	-68.836 ^{-2.68e-01}	-68.818 ^{+1.80e-02} _{-2.67e-01}	-68.808 ^{+1.00e-02} _{-2.65e-01}

Tabelle 4.19: Asymptotische Konvergenz für $\sigma_{xx}(p'_7)$ mit Q1/Q1-Elementen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
2 048	-68.860	-68.845 ^{+1.50e-02}	-68.837 ^{+8.00e-03}
16 384	-68.998 ^{-1.38e-01}	-68.983 ^{+1.50e-02} _{-1.38e-01}	-68.976 ^{+7.00e-03} _{-1.39e-01}
131 072	-68.818 ^{+1.80e-01}	-68.800 ^{+1.80e-02} _{+1.83e-01}	-68.791 ^{+9.00e-03} _{+1.85e-01}

Tabelle 4.20: Asymptotische Konvergenz für $\sigma_{xx}(p'_7)$ mit Q2/Q1-Elementen.

4.6 Grafiken

Zur Überprüfung der Symmetrieeigenschaften der Lösung, insbesondere für die Mikrorotationen, haben wir eine Simulation der ganzen Lochscheibe als reines Neumann-Randwertproblem durchgeführt. Es ist in der Grafik 4.8 gut zu erkennen, dass die Dirichletrandwerte für die Mikrorotationen für die Achtel Lochscheibe in Abschnitt 4.1 mit den Symmetrieeigenschaften der Lösung für die volle Lochscheibe übereinstimmen.

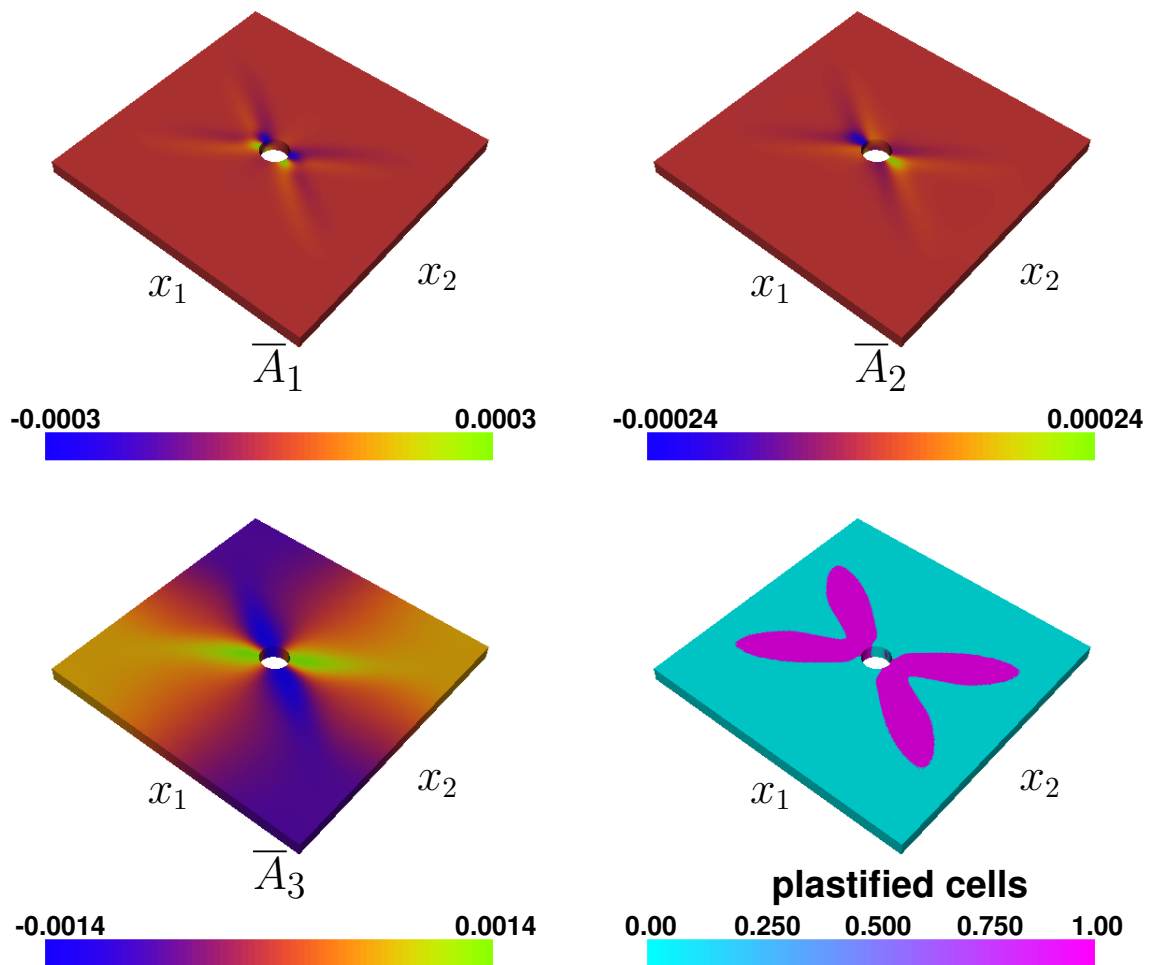
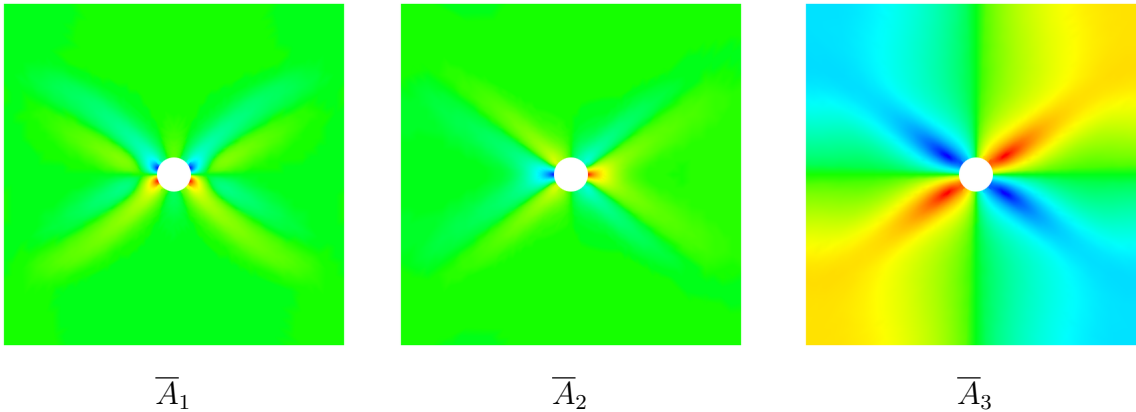


Abbildung 4.8: Berechnung der vollen Lochscheibe in 3D $\Omega = ((0, 20) \times (-10, 10) \setminus B_1(10, 0)) \times (-1, 1)$ mit reinen Neumann-Randbedingungen. Die Symmetrieeigenschaften sind gut zu erkennen, wir haben $\bar{A}_2(\mathbf{x}) = \bar{A}_3(\mathbf{x}) = 0$ für $\mathbf{x} \in \{\mathbf{y} \in \partial\Omega : y_1 = 10\}$, $\bar{A}_1(\mathbf{x}) = \bar{A}_3(\mathbf{x}) = 0$ für $\mathbf{x} \in \{\mathbf{y} \in \partial\Omega : y_2 = 0\}$ und $\bar{A}_1(\mathbf{x}) = \bar{A}_2(\mathbf{x}) = 0$ für $\mathbf{x} \in \{\mathbf{y} \in \partial\Omega : y_3 = 0\}$.

Volle Lochscheibe in 3D mit ausschließlich Neumann-Randbedingungen



Ein Achtel der Lochscheibe in 3D mit Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen

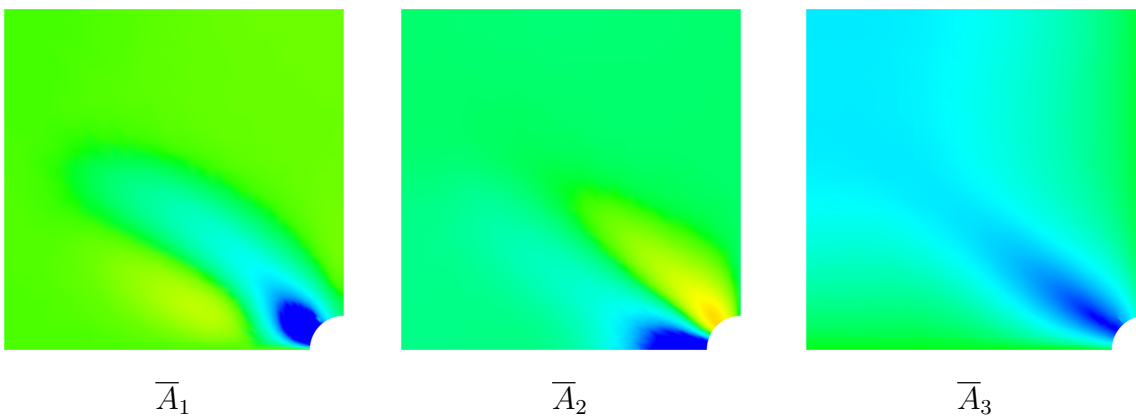
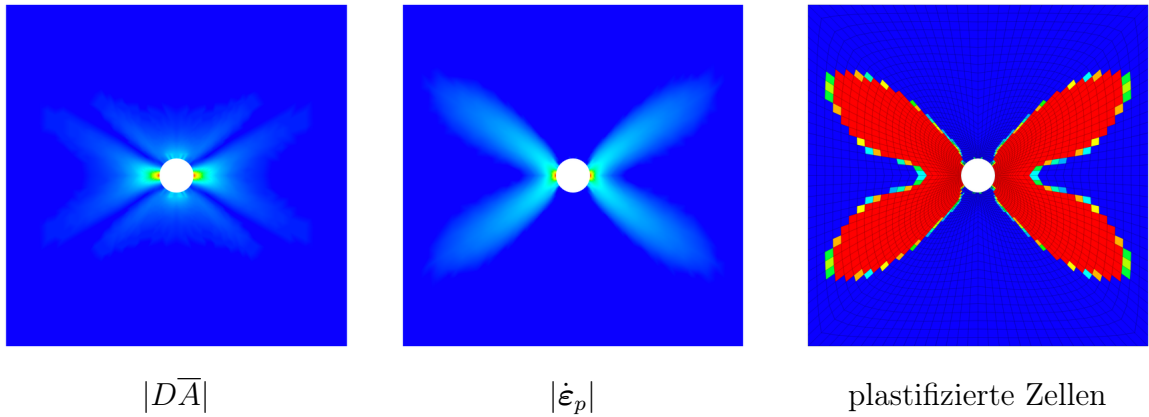


Abbildung 4.9: Darstellung der Mikrorotationen für den Zugversuch mit reinen Neumann-Randbedingungen zur Überprüfung der Dirichlet-Randbedingungen in \bar{A}_1 , \bar{A}_2 und \bar{A}_3 bei der Problemreduktion auf ein Achtel der Lochscheibe. Die Ergebnisse stimmen überein.

Volle Lochscheibe in 3D mit ausschließlich Neumann-Randbedingungen



Ein Achtel der Lochscheibe in 3D mit Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen

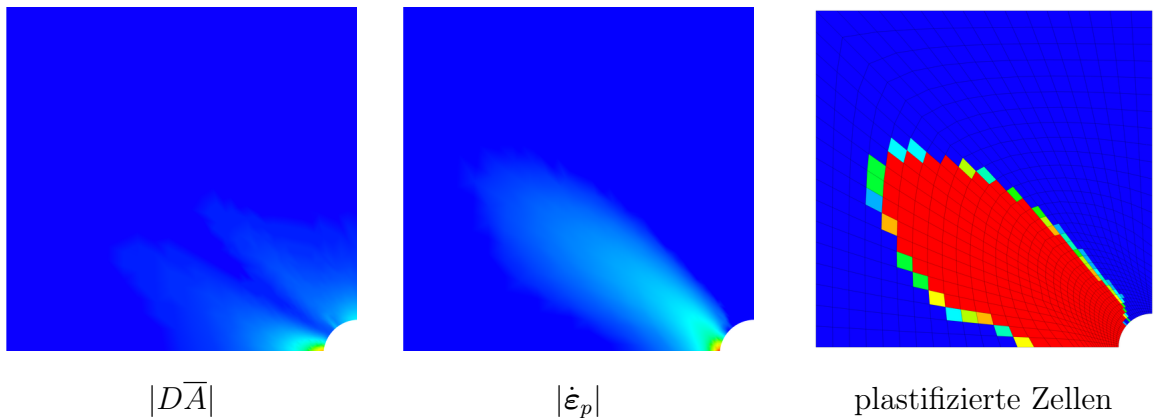


Abbildung 4.10: Darstellung der Norm des Gradienten der Mikrorotationen $|\overline{D\bar{A}}|$, der Norm der plastischen Verzerrungsrate $|\dot{\epsilon}_p|$ und der plastifizierten Zellen für die Überprüfung der Dirichlet-Randbedingungen bei Problemreduktion von voller Lochscheibe in 3D auf ein Achtel Lochscheibe. Die Ergebnisse stimmen überein.

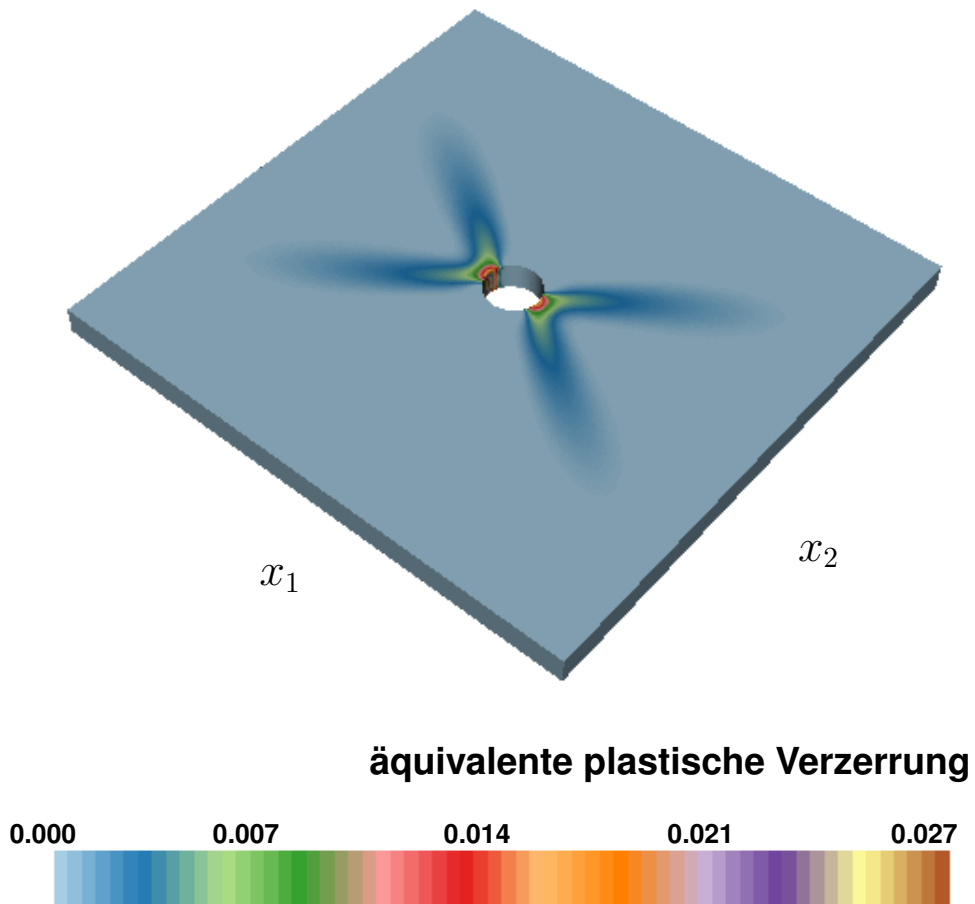


Abbildung 4.11: Berechnung der vollen Lochscheibe in 3D mit reinen Neumann-Randbedingungen.

4 Numerische Ergebnisse für das infinitesimale Modell

5 Minimierung auf Mannigfaltigkeiten

In diesem Kapitel geben wir ein Newton-Verfahren zur Minimierung auf Riemannschen Mannigfaltigkeiten an, wobei die Newton-Korrektur eine Geodätische in Richtung eines geeigneten Tangentialvektors ist. Wir zeigen, dass der Satz von Newton-Kantorovich für diese Problemstellung übertragen werden kann, sodass unter gewissen Bedingungen lokal quadratische Konvergenz zu einem lokalen Minimum hin garantiert werden kann. Die numerischen Ergebnisse präsentieren wir dann in Kapitel 7 in der Anwendung auf ein Cosserat Modell.

Das Newton-Verfahren ist eine häufig verwendete Methode zur Lösung von nichtlinearen Nullstellenproblemen und zur Minimierung von Funktionalen im Euklidischen Raum. In den letzten Jahren haben bereits einige Autoren untersucht, wie Newton-Verfahren auf Riemannsche Mannigfaltigkeiten angewandt werden können (siehe z. B. [FS02, ABG07, MM02, OW00, EAS98, Mah96, ADM⁺02] und die darin angegebenen Referenzen).

Die zentrale Idee ist eine konsistente Korrektur entlang einer Geodätischen in Richtung eines geeigneten Vektors aus dem Tangentialraum, in dem die Newton-Linearisierung statt findet. Die bekannten Konvergenzresultate (Satz von Newton-Kantorovich) lassen sich auf Mannigfaltigkeiten übertragen.

Wir betrachten in unserer Darstellung direkt die Minimierungsaufgabe. Wir formulieren ein globalisiertes Newton-Verfahren für solch ein Problem und präsentieren einen Algorithmus für die numerische Realisierung. Anschließend zeigen wir lokal quadratische Konvergenz durch Anpassung des Satzes von Newton-Kantorovich. Eine genaue Analyse des Beweises von [FS02] zeigt zusätzlich, dass unter geeigneten Voraussetzungen an die Startiterierte, die Hesseform in der Lösung positiv definit ist, sodass die Lösung ein striktes lokales Minimum ist.

5.1 Newton-Verfahren zur Minimierung

Sei M eine Riemannsche Mannigfaltigkeit der Dimension m mit Metrik $\langle \cdot, \cdot \rangle$, und sei $f: M \rightarrow \mathbb{R}$ ein glattes Funktional auf M . Wir betrachten das Minimierungsproblem

$$p \in M: \quad f(p) = \min!$$

Zur Beschreibung des Newton-Algorithmus linearisieren wir das Problem im Tangentialraum $T_p M$. Dazu definieren wir für einen Vektor $v \in T_p M$ die geodätische Kurve $\gamma_v: [0, T] \rightarrow M$ mit Startpunkt $p = \gamma_v(0)$ und Richtung $\dot{\gamma}_v(0) = v$. Dies definiert die Exponentialabbildung $\exp_p(v) := \gamma_v(1)$ auf

$$\mathcal{D}_p = \{v \in T_p M: \gamma_v \text{ ist definiert für alle } t \in [0, 1]\}.$$

Ferner setzen wir $\mathcal{V}_p = \exp_p(\mathcal{D}_p) \subset M$.

Damit konstruieren wir ein Newton-Verfahren auf der Mannigfaltigkeit M :

Wähle Startpunkt $p_0 \in M$, und für jeden Schritt $n = 0, 1, 2, \dots$ betrachten wir das lokale Problem

$$v \in \mathcal{D}_{p_n}: \quad f(\exp_{p_n}(v)) = \min!$$

Zur Berechnung der Newton-Korrektur definieren wir $f_{p_n}: \mathcal{D}_{p_n} \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$f_{p_n}(v) := f(\exp_{p_n}(v)), \quad (5.1)$$

und betrachten die Taylor-Entwicklung

$$f_{p_n}(v) = f_{p_n}^{(0)} + f_{p_n}^{(1)}[v] + \frac{1}{2} f_{p_n}^{(2)}[v, v] + \dots \quad (5.2)$$

mit

$$\begin{aligned} f_{p_n}^{(0)} &= f_{p_n}(0) = f(p_n), \\ f_{p_n}^{(1)}[v] &= Df_{p_n}(0)[v] \\ f_{p_n}^{(2)}[v, v] &= D^2 f_{p_n}(0)[v, v]. \end{aligned}$$

Für die Auswertung von $f_{p_n}^{(l)}$ mit $l = 0, 1, 2$ werden wir im nächsten Abschnitt geeignete Koordinaten (sogenannte Normalkoordinaten) einführen.

Dann lösen wir die lineare Gleichung

$$v_n \in T_{p_n} M: \quad f_{p_n}^{(2)}[v_n, w] = -f_{p_n}^{(1)}[w], \quad w \in T_{p_n} M. \quad (5.3)$$

Falls eine Lösung existiert und $v_n \in \mathcal{D}_{p_n}$ ist, erhalten wir die nächste Iterierte zu

$$p_{n+1} = \exp_{p_n}(v_n). \quad (5.4)$$

Andernfalls ersetzen wir v_n durch $s_n v_n$ mit einem geeigneten Dämpfungsparameter $s_n \in (0, 1]$.

Hilfsmittel aus der Riemannsche Geometrie. Für die folgenden Beschreibungen benötigen wir einige Grundbegriffe der Riemannschen Geometrie wie sie in Standardlehrbüchern nachzulesen sind. Insbesondere haben wir die Bücher [dC92, Jos95, Küh99, O’N83, Hel78, Lee97, Cha06] verwendet.

Sei M eine Riemannsche Mannigfaltigkeit mit Metrik $\langle \cdot, \cdot \rangle$ und sei $f: M \rightarrow \mathbb{R}$ ein glattes Funktional auf M . Wir bezeichnen mit $\mathcal{X}(M)$ die Menge aller ∞ -oft differenzierbaren Vektorfelder von M und mit $\mathcal{D}(M)$ den Ring der reellwertigen ∞ -oft differenzierbaren Funktionen auf M .

Definition 5.1 (kovariante Ableitung) Sei

$$\begin{aligned} \nabla : \mathcal{X}(M) \times \mathcal{X}(M) &\longrightarrow \mathcal{X}(M) \\ (X, Y) &\longmapsto \nabla_X Y \end{aligned}$$

eine Abbildung, sodass für alle Vektorfelder $X, Y, Z \in \mathcal{X}(M)$ und reellwertige Funktionen $f, g \in \mathcal{D}(M)$ die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

$$\nabla_{fX+gY} Z = f \nabla_X Z + g \nabla_Y Z \quad (\text{Linearität im unteren Argument}) \quad (5.5a)$$

$$\nabla_X (Y + Z) = \nabla_X Y + \nabla_X Z \quad (\text{Additivität im oberen Argument}) \quad (5.5b)$$

$$\nabla_X (fY) = f \nabla_X Y + X(f)Y \quad (\text{Produktregel im oberen Argument}) \quad (5.5c)$$

Für eine reellwertige Funktion stimmen Differential und kovariante Ableitung überein, d. h. $df = \nabla f$ und insbesondere $\nabla f(X) = \nabla_X f = X(f)$.

Satz 5.2 (Levi-Civita) Sei M eine Riemannsche Mannigfaltigkeit mit Metrik $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Dann existiert genau eine kovariante Ableitung ∇ , sodass für alle Vektorfelder $X, Y, Z \in \mathcal{X}(M)$ die Bedingungen

$$\nabla_X Y - \nabla_Y X = [X, Y] \quad (\text{Symmetrie oder Torsionsfreiheit}) \quad (5.6a)$$

$$X \langle Y, Z \rangle = \langle \nabla_X Y, Z \rangle + \langle Y, \nabla_X Z \rangle \quad (\text{Verträglichkeit mit der Metrik}) \quad (5.6b)$$

erfüllt sind (vergleiche Abschnitt D im Anhang). Wir nennen diese kovariante Ableitung *Levi-Civita-Zusammenhang* oder auch *Riemannscher Zusammenhang*.

Beweis. [dC92, Theorem 3.6] □

Definition 5.3 (Christoffel-Symbole) Seien U eine offene Menge im \mathbb{R}^m und $x : U \rightarrow M$ ein Karte von $V = x(U) \subset M$. Sei $p \in V$. Dann existieren Vektorfelder $\frac{\partial}{\partial x_k} \in \mathcal{X}(V)$ ($k = 1, \dots, m$), und die $\frac{\partial}{\partial x_k}|_p$ bilden eine Basis von $T_p M$. Es existiert ein Isomorphismus

$$z \in \mathbb{R}^m \mapsto \sum_k z_k \frac{\partial}{\partial x_k} \Big|_p \in T_p M. \quad (5.7)$$

Wir nennen die Funktionen $\Gamma_{ij}^k : V \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$\nabla_{\frac{\partial}{\partial x_i}} \frac{\partial}{\partial x_j} = \sum_k \Gamma_{ij}^k \frac{\partial}{\partial x_k} \quad (5.8)$$

Christoffel-Symbole.

Bemerkung 5.4 Nach Definition (5.8) gilt $\Gamma_{ij}^k = \Gamma_{ji}^k$.

Satz 5.5 Es existiert eine Karte $x : U \rightarrow M$ mit $0 \in U \subset \mathbb{R}^m$ offen, $x(0) = p$ und $\Gamma_{ij}^k(p) = 0$. Wir nennen sie Normalkoordinaten.

Dann existiert eine offene Menge $\mathcal{U}_p \subset U$ mit $0 \in \mathcal{U}_p$ sodass für alle $z \in \mathcal{U}_p$

$$v(z) = \sum_k z_k \frac{\partial}{\partial x_k} \Big|_p \in \mathcal{D}_p \tag{5.9}$$

gilt, und dass

$$\exp_p(v(z)) = x(z) \in \mathcal{V}_p \tag{5.10}$$

erfüllt ist.

Definition 5.6 Der Gradient

$$\text{grad } f : M \rightarrow TM, \quad p \mapsto \text{grad } f(p)$$

ist definiert durch

$$\langle \text{grad } f, X \rangle = \nabla_X f, \quad \forall X \in \mathcal{X}(M).$$

Die 1-Form $df \in TM^*$ ist definiert durch

$$\langle df(p), v \rangle_{T_p M^* \times T_p M} = \langle \text{grad } f(p), v \rangle_p, \quad \forall v \in T_p M.$$

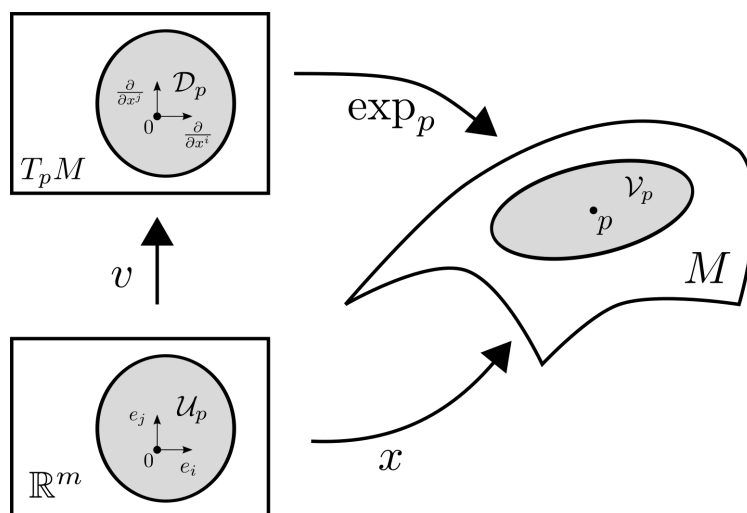


Abbildung 5.1: Normalkoordinaten

Satz 5.7 Betrachten wir die Funktion

$$F : \mathcal{U}_p \longrightarrow \mathbb{R}, \quad z \longmapsto F(z) = f\left(\exp_p\left(\sum_{i=1}^m z_i \frac{\partial}{\partial x_i}\Big|_p\right)\right), \quad (5.11)$$

dann gilt

$$\left\langle \text{grad } f(p), \frac{\partial}{\partial x_i}\Big|_p \right\rangle_p = (\nabla_{\partial_{x_i}} f)_p = \partial_i F(0).$$

Definition 5.8 Wir definieren nun $\text{Hess } f \in L(TM, TM)$ (die Hessesche von f) durch

$$\langle \text{Hess } f X, Y \rangle_{TM \times TM} = \langle \nabla_X \text{grad } f, Y \rangle_{TM \times TM}.$$

In Normalkoordinaten lässt sich die Hessesche auswerten (vgl. [Jos95, Abschnitt 3.3]).

Satz 5.9 Bei Verwendung von Normalkoordinaten als lokale Koordinaten gilt für die in (5.11) eingeführte Funktion

$$\left\langle \text{Hess } f(p) \frac{\partial}{\partial x_i}\Big|_p, \frac{\partial}{\partial x_j}\Big|_p \right\rangle_p = \partial_i \partial_j F(0).$$

Formulierung des Gauß-Newton-Verfahren mithilfe von Größen der Riemannschen Geometrie. Für ein gegebenes glattes Funktional $f : M \longrightarrow \mathbb{R}$ ist eine notwendige Bedingung für ein lokales Minimum

$$p \in M: \quad df(p) = 0.$$

Anstelle der 1-Form bevorzugen wir das zugehörige Vektorfeld $\text{grad } f$. Damit können wir das Newton-Verfahren für das Problem

$$p \in M: \quad \text{grad } f(p) = 0$$

mit Vektorfeldern betrachten. Dafür benötigen wir die Hessesche als zweite Ableitung und definieren den folgenden Algorithmus: Wähle Startpunkt $p_0 \in M$, und berechne v_n mit

$$\langle \text{Hess } f(p_n) v_n, w \rangle_{p_n} = -\langle \text{grad } f(p_n), w \rangle_{p_n}, \quad w \in T_{p_n} M. \quad (5.12)$$

Falls $v_n \in \mathcal{D}_{p_n}$, dann setze $p_{n+1} = \exp_{p_n}(v_n)$.

Wir müssen noch nachweisen, dass die Berechnung des Newton-Inkrementes v_n mit der Gleichung (5.12) äquivalent zur Berechnung in (5.3) ist. Dafür verwenden wir Normalkoordinaten.

Wähle zu p_n eine Karte $x_n : \mathcal{U}_{p_n} \longrightarrow \mathcal{V}_{p_n}$, die Normalkoordinaten in $T_{p_n} M$ definiert. Setze

$$F_n(z) = f(x_n(z)).$$

5 Minimierung auf Mannigfaltigkeiten

Dann gilt für $f_{p_n}(v) = f(\exp_{p_n}(v))$ die Identität

$$f_{p_n}(v(z)) = F_n(z) ,$$

und wir haben für die Ableitungen

$$\begin{aligned} \langle \text{grad } f(p_n), \frac{\partial}{\partial x_i} \rangle_{p_n} &= Df_{p_n}(0) \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \Big|_{p_n} \right] = \partial_i F_n(0) , \\ \langle \text{Hess } f(p_n) \frac{\partial}{\partial x_i} \Big|_{p_n}, \frac{\partial}{\partial x_j} \Big|_{p_n} \rangle &= D^2 f_{p_n}(0) \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \Big|_{p_n}, \frac{\partial}{\partial x_j} \Big|_{p_n} \right] = \partial_i \partial_j F_n(0) . \end{aligned}$$

(vgl. Satz 5.7 und 5.9).

Wenn die Hessematrix $D^2 F_n(0)$ regulär ist, lässt sich $z_n \in \mathbb{R}^m$ mit

$$D^2 F_n(0) z_n = -\nabla F_n(0) \tag{5.13}$$

berechnen. Wenn $z_n \in \mathcal{U}_n$, gilt für $v_n = \sum_{k=1}^m z_{n,k} \frac{\partial}{\partial x_k} \Big|_{p_n}$ die Gleichung (5.12).

5.2 Newton-Analysis

Wir übertragen den Beweis von [FS02].

Seien $p \in M$ und $v \in \mathcal{D}_p$. Wir definieren die geodätische Kurve

$$\gamma: [0, 1] \longrightarrow M, \quad \gamma(0) = p, \quad \dot{\gamma}(0) = v,$$

d. h. $\gamma(t) = \exp_p(tv)$. Ferner führen wir einen Paralleltransport entlang γ durch

$$P_{\gamma,0,1}: T_p M \longrightarrow T_{\gamma(1)} M \quad (5.14)$$

ein, mit der Eigenschaft $P_{\gamma,0,t+s} = P_{\gamma,t,t+s}P_{\gamma,0,t}$. Die kovariante Ableitung in Richtung $\dot{\gamma}(t) \in T_{\gamma(t)}M$ kann dann mit der Formel

$$\begin{aligned} \text{Hess } f(\gamma(t))\dot{\gamma}(t) &= \nabla_{\dot{\gamma}(t)} \text{grad } f(\gamma(t)) \\ &= \lim_{s \rightarrow 0} \left(P_{\gamma,t,t+s}^{-1} \text{grad } f(\gamma(t+s)) - \text{grad } f(\gamma(t)) \right) \end{aligned} \quad (5.15)$$

ausgewertet werden (vgl. [dC92, Ex. 2.2]).

Lemma 5.10

$$\langle \text{grad } f(\gamma(1)), P_{\gamma,0,1}w \rangle_{\gamma(1)} - \langle \text{grad } f(p), w \rangle_p = \int_0^1 \langle \text{Hess } f(\gamma(t))P_{\gamma,0,t}v, P_{\gamma,0,t}w \rangle_{\gamma(t)} dt \quad (5.16)$$

Beweis. Wir definieren die Funktion $\psi(t) = \langle \text{grad } f(\gamma(t)), P_{\gamma,0,t}w \rangle_{\gamma(t)}$ mit $w \in T_p M$. Damit erhalten wir unter Verwendung von (5.15)

$$\begin{aligned} \psi'(t) &= \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} \left(\psi(t+s) - \psi(t) \right) \\ &= \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} \left(\langle \text{grad } f(\gamma(t+s)), P_{\gamma,0,t+s}w \rangle_{\gamma(t+s)} - \langle \text{grad } f(\gamma(t)), P_{\gamma,0,t}w \rangle_{\gamma(t)} \right) \\ &= \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} \left(\langle \text{grad } f(\gamma(t+s)), P_{\gamma,t,t+s}P_{\gamma,0,t}w \rangle_{\gamma(t+s)} - \langle \text{grad } f(\gamma(t)), P_{\gamma,0,t}w \rangle_{\gamma(t)} \right) \\ &= \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} \langle P_{\gamma,t,t+s}^{-1} \text{grad } f(\gamma(t+s)) - \text{grad } f(\gamma(t)), P_{\gamma,0,t}w \rangle_{\gamma(t)} \\ &= \langle \text{Hess } f(\gamma(t))\dot{\gamma}(t), P_{\gamma,0,t}w \rangle_{\gamma(t)} = \langle \text{Hess } f(\gamma(t))P_{\gamma,0,t}v, P_{\gamma,0,t}w \rangle_{\gamma(t)}, \end{aligned}$$

und dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung das Ergebnis [FS02, Gl. (2.4)]

$$\begin{aligned} \langle \text{grad } f(\gamma(1)), P_{\gamma,0,1}w \rangle_{\gamma(1)} - \langle \text{grad } f(p), w \rangle_p &= \psi(1) - \psi(0) = \int_0^1 \psi'(t) dt \\ &= \int_0^1 \langle \text{Hess } f(\gamma(t))P_{\gamma,0,t}v, P_{\gamma,0,t}w \rangle_{\gamma(t)} dt. \end{aligned}$$

□

5 Minimierung auf Mannigfaltigkeiten

Damit können wir nun den Satz von Newton-Kantorovich für die Minimierung auf Riemannschen Mannigfaltigkeiten bzgl. der Riemannschen Metrik

$$d(p, q) := \inf_{\alpha \in C(p, q)} \int_0^1 \|\dot{\alpha}(t)\|_{\alpha(t)} dt ,$$

wobei $C(p, q)$ die Menge der stückweise glatten Kurven $\alpha: [0, 1] \rightarrow M$ mit $\alpha(0) = p$ und $\alpha(1) = q$ bezeichnet, formulieren. Wir setzen $d(p, q) = \infty$, falls p und q nicht durch eine Kurve verbunden werden können.

Im folgenden nehmen wir an, dass der metrische Raum (M, d) vollständig ist. Nach dem Satz von Hopf-Rinow, siehe z. B. [dC92, Abschnitt 7.2] oder [Lee97, Theorem 6.13], ist eine zusammenhängende Mannigfaltigkeit genau dann vollständig, wenn sie geodätisch vollständig ist, d. h. wenn alle Geodätischen $\gamma(t)$ mit beliebigem Startpunkt $p \in M$ für alle $t \in \mathbb{R}$ existieren. Dies ist in unserer Anwendung mit $M = \mathbb{R}^{N_1} \times SO(3)^{N_2}$ (oder auch $M = SL(3)^N$) erfüllt (vgl. Anhang E).

Satz 5.11 *Sei $p_0 \in M$ und die folgenden Bedingungen seien erfüllt:*

- a) $|\langle \text{grad } f(p_0), w \rangle_{p_0}| \leq \eta \|w\|_{p_0}$ für alle $w \in T_{p_0}M$,
- b) $\langle \text{Hess } f(p_0)w, w \rangle_{p_0} \geq \beta \|w\|_{p_0}^2$ für alle $w \in T_{p_0}M$,
- c) $K \subset \mathcal{V}_p$ für $p \in K$, wobei $K := \{p \in M : d(p, p_0) \leq r\}$ und $r = 2\eta/\beta$,
- d) $\text{Hess } f$ ist lokal Lipschitz, d. h. für jede Geodätische $\gamma: [a, b] \rightarrow K$ zwischen zwei Punkten $\gamma(a) = p$ und $\gamma(b) = q$ gilt die Abschätzung

$$\left| \langle \text{Hess } f(q)P_{\gamma, a, b}w, P_{\gamma, a, b}w' \rangle_q - \langle \text{Hess } f(p)w, w' \rangle_p \right| \leq \lambda \|w\|_p \|w'\|_p d(p, q)$$

für alle $w, w' \in T_pM$,

- e) $2\eta\lambda < \beta^2$.

Dann gilt: die Iterierten der Newton-Folge p_n sind wohldefiniert und bilden eine Cauchy Folge in K mit Grenzwert $p^* \in K$, und es gilt die Abschätzung

$$d(p^*, p_0) \leq t^* := \frac{r}{1 + \sqrt{1 - 2\eta\lambda/\beta^2}} = \frac{2\eta}{\beta + \sqrt{\beta^2 - 2\eta\lambda}} < r$$

und

$$d(p^*, p_n) \leq \frac{\beta}{\lambda} 2^{-k} \left(\frac{2\lambda\eta}{\beta^2} \right)^{2^k} .$$

Des Weiteren gilt

$$\langle \text{Hess } f(p^*)w, w \rangle_{p^*} \geq \left(\beta - \lambda d(p^*, p_0) \right) \|w\|_{p^*}^2 \quad \text{für } w \in T_{p^*}M . \quad (5.17)$$

Das Newton-Verfahren konvergiert quadratisch und p^* ist eine isolierte Minimalstelle von f in K .

Für den Beweis verwenden wir (wie üblich) eine Majorante, die durch das Newton-Verfahren, angewandt auf das folgende polynomiale Problem, erzeugt wird.

Lemma 5.12 *Das Newton-Verfahren für*

$$Q(t) = \eta - \beta t + \frac{\lambda}{2} t^2$$

mit Startwert $t_0 = 0$ erfüllt nach Definition

$$t_{n+1} = t_n - \frac{Q(t_n)}{Q'(t_n)} = t_n - \frac{\lambda t_n^2 - 2\beta t_n + 2\eta}{2\lambda t_n - 2\beta} = t_n + \frac{\lambda(t_n - t_{n-1})^2}{2(\beta - \lambda t_n)}. \quad (5.18)$$

Das letzte Gleichheitszeichen gilt dabei für $n \geq 1$ und $t_1 = \frac{\eta}{\beta}$. Falls $2\eta\lambda \leq \beta^2$ ist die Newton-Folge (t_n) monoton wachsend mit

$$\lim_{n \rightarrow \infty} t_n = t^* := \frac{2\eta}{\beta + \sqrt{\beta^2 - 2\eta\lambda}}. \quad (5.19)$$

Falls $2\eta\lambda < \beta^2$, so gilt zusätzlich die Abschätzung

$$t^* - t_n \leq \frac{\beta}{\lambda} 2^{-n} C^{2^n} \text{ mit } C = \frac{\lambda}{\beta} t^* \leq \frac{2\lambda\eta}{\beta^2}. \quad (5.20)$$

Beweis. [Zei93, Abschnitt 5.2] □

Wir beweisen zuerst den folgenden Satz.

Satz 5.13 *Seien $p_0 \in M$ und die Bedingungen aus Satz 5.11 erfüllt.*

Dann erfüllen die Folgenglieder der Newton-Folge

$$p_{n+1} = \exp_{p_n}(v_n),$$

$$\text{wobei } v_n \in T_{p_n}M \text{ mit } \langle \text{Hess } f(p_n)v_n, w \rangle_{p_n} = -\langle \text{grad } f(p_n), w \rangle_{p_n} \text{ für alle } w \in T_{p_n}M,$$

unter Verwendung der Folge (t_n) aus Lemma 5.12, die Abschätzungen

$$\langle \text{Hess } f(p_n)w, w \rangle_{p_n} \geq \left(\beta - \lambda d(p_n, p_0) \right) \|w\|_{p_n}^2 \quad \text{für } w \in T_{p_n}M, \quad (5.21a)$$

$$\|v_n\|_{p_n} \leq t_{n+1} - t_n, \quad (5.21b)$$

$$d(p_{n+1}, p_0) \leq t_{n+1}. \quad (5.21c)$$

Beweis Satz 5.13. Wir führen den Beweis durch vollständige Induktion.

Beginnen wir mit dem Induktionsanfang für $n = 0$. Wegen Bedingung b) aus Satz 5.11 folgt direkt Abschätzung (5.21a) und ferner, dass das lineare Gleichungssystem

$$\langle \text{Hess } f(p_0)v_0, w \rangle_{p_0} = -\langle \text{grad } f(p_0), w \rangle_{p_0} \text{ für alle } w \in T_{p_0}M \quad (5.22)$$

5 Minimierung auf Mannigfaltigkeiten

eine eindeutige Lösung $v_0 \in T_{p_0}M$ besitzt. Des Weiteren erhalten wir aus Bedingung b) von Satz 5.11, sowie Gleichung (5.22) und Bedingung a) die Ungleichungen

$$\beta \|v_0\|_{p_0}^2 \leq \langle \text{Hess } f(p_0)v_0, v_0 \rangle_{p_0} \leq |\langle \text{grad } f(p_0), v_0 \rangle_{p_0}| \leq \eta \|v_0\|_{p_0} ,$$

und die Abschätzungen $\|v_0\|_{p_0} \leq \frac{\eta}{\beta} = t_1 - t_0$ und $d(p_1, p_0) = \|v_0\|_{p_0} \leq t_1$ folgen direkt.

Insbesondere ist $p_1 \in K$.

Wir nehmen nun an, dass die Aussagen des Satzes (5.21a)–(5.21c) für $n - 1$ richtig sind und zeigen nun in mehreren Schritten, dass dann die Aussagen auch für n richtig sind.

Schritt 1:

Sei $q \in K$, d. h. $d(p_0, q) \leq r$. Wegen Bedingung c) ist $q \in \mathcal{V}_{p_0}$, und es existiert ein Vektor $v \in \mathcal{D}_{p_0} \subset T_{p_0}M$ mit $q = \exp_{p_0}(v)$. Wenden wir nun die Lipschitz-Bedingung d) auf die Geodätische $\gamma(s) = \exp_{p_0}(sv)$ an, so erhalten wir

$$|\langle \text{Hess } f(q)P_{\gamma,0,1}w, P_{\gamma,0,1}w \rangle_q - \langle \text{Hess } f(p_0)w, w \rangle_{p_0}| \leq \lambda \|w\|_{p_0}^2 d(p_0, q), \quad w \in T_{p_0}M ,$$

also insbesondere

$$\langle \text{Hess } f(q)P_{\gamma,0,1}w, P_{\gamma,0,1}w \rangle_q \geq \langle \text{Hess } f(p_0)w, w \rangle_{p_0} - \lambda \|w\|_{p_0}^2 d(p_0, q) .$$

Weiter folgt unter Verwendung von b) und der Tatsache, dass der Paralleltransport eine Isometrie ist, die Abschätzung

$$\langle \text{Hess } f(q)P_{\gamma,0,1}w, P_{\gamma,0,1}w \rangle_q \geq (\beta - \lambda d(q, p_0)) \|P_{\gamma,0,1}w\|_q^2, \quad w \in T_{p_0}M ,$$

also

$$\langle \text{Hess } f(q)\tilde{w}, \tilde{w} \rangle_q \geq (\beta - \lambda d(q, p_0)) \|\tilde{w}\|_q^2, \quad \tilde{w} \in T_qM . \quad (5.23)$$

Ferner gilt wegen e) auch $\lambda d(q, p_0) \leq \lambda r < \beta$, d. h. $\beta - \lambda d(q, p_0) > 0$.

Schritt 2:

Gemäß Induktionsannahme sei $p_n \in K$. Aus Schritt 1) für $q = p_n$ folgt, dass das lineare Gleichungssystem

$$\langle \text{Hess } f(p_n)v_n, w \rangle_{p_n} = -\langle \text{grad } f(p_n), w \rangle_{p_n} \text{ für alle } w \in T_{p_n}M$$

eine eindeutige Lösung $v_n \in T_{p_n}M$ besitzt. Aus (5.23) erhalten wir außerdem (mit $\tilde{w} = v_n$) für das Newton-Inkrement die Abschätzung

$$\|v_n\|_{p_n} \leq \frac{\|\text{grad } f(p_n)\|_{p_n}}{\beta - \lambda d(p_n, p_0)} . \quad (5.24)$$

Schritt 3:

Seien $p_n, p_{n-1} \in K$ und es bezeichne $v_{n-1} \in T_{p_{n-1}}M$ die Lösung der Newton-Gleichung

$$\langle \text{Hess } f(p_{n-1})v_{n-1}, w \rangle_{p_{n-1}} = -\langle \text{grad } f(p_{n-1}), w \rangle_{p_{n-1}} \text{ für alle } w \in T_{p_{n-1}}M , \quad (5.25)$$

sowie $\gamma(s) = \exp_{p_{n-1}}(sv_{n-1})$ die Geodätische von p_{n-1} nach p_n . Wir erhalten aus (5.25), (5.16), Bedingung d) von Satz 5.11 und $d(p_{n-1}, \gamma(s)) = s \|v_{n-1}\|_{p_{n-1}}$ für $w \in T_{p_{n-1}}M$

$$\begin{aligned}
& |\langle \text{grad } f(p_n), P_{\gamma,0,1}w \rangle_{p_n}| \\
&= |\langle \text{grad } f(p_n), P_{\gamma,0,1}w \rangle_{p_n} - \langle \text{grad } f(p_{n-1}), w \rangle_{p_{n-1}} - \langle \text{Hess } f(p_{n-1})v_{n-1}, w \rangle_{p_{n-1}}| \\
&= \left| \int_0^1 (\langle \text{Hess } f(\gamma(s))P_{\gamma,0,s}v_{n-1}, P_{\gamma,0,s}w \rangle_{\gamma(s)} - \langle \text{Hess } f(p_{n-1})v_{n-1}, w \rangle_{p_{n-1}}) ds \right| \\
&\leq \int_0^1 |\langle \text{Hess } f(\gamma(s))P_{\gamma,0,s}v_{n-1}, P_{\gamma,0,s}w \rangle_{\gamma(s)} - \langle \text{Hess } f(p_{n-1})v_{n-1}, w \rangle_{p_{n-1}}| ds \\
&\leq \int_0^1 \lambda \|v_{n-1}\|_{p_{n-1}} \|w\|_{p_{n-1}} s \|v_{n-1}\|_{p_{n-1}} ds = \frac{1}{2} \lambda \|v_{n-1}\|_{p_{n-1}}^2 \|w\|_{p_{n-1}} .
\end{aligned}$$

Daraus folgt direkt

$$\begin{aligned}
\| \text{grad } f(p_n) \|_{p_n} &= \sup_{\|w'\|_{p_n}=1} |\langle \text{grad } f(p_n), w' \rangle_{p_n}| \\
&= \sup_{\|w\|_{p_{n-1}}=1} |\langle \text{grad } f(p_n), P_{\gamma,0,1}w \rangle_{p_n}| \leq \frac{\lambda}{2} \|v_{n-1}\|_{p_{n-1}}^2 .
\end{aligned} \tag{5.26}$$

Schritt 4:

Wir setzen (5.26) in (5.24) und erhalten

$$\|v_n\|_{p_n} \leq \frac{\lambda \|v_{n-1}\|_{p_{n-1}}^2}{2(\beta - \lambda d(p_n, p_0))} . \tag{5.27}$$

Nun verwenden wir (5.18) und erhalten die Abschätzung

$$\|v_n\|_{p_n} \leq \frac{\lambda (t_n - t_{n-1})^2}{2(\beta - \lambda t_n)} = t_{n+1} - t_n .$$

Damit können wir nun den letzten Beweisschritt zeigen. Wir haben

$$d(p_{n+1}, p_0) \leq d(p_{n+1}, p_n) + d(p_n, p_0) = \|v_n\|_{p_n} + d(p_n, p_0) \leq t_{n+1} < t^* \leq r ,$$

und somit $p_{n+1} \in K$. □

Beweis Satz 5.11.

Wir zeigen zuerst, dass die Folge (p_n) eine Cauchy-Folge in M ist. Für $n \leq m$ erhalten wir mit der Dreiecksungleichung der Metrik $d(\cdot, \cdot)$, und Abschätzung (5.21b) aus Satz 5.13 die Ungleichung

$$d(p_n, p_m) \leq \sum_{i=n}^{m-1} d(p_i, p_{i+1}) = \sum_{i=n}^{m-1} \|v_i\|_{p_i} \leq \sum_{i=n}^{m-1} (t_{i+1} - t_i) = t_m - t_n .$$

Dadurch überträgt sich die Tatsache, dass (t_n) eine Cauchy-Folge ist, direkt auf die Folge (p_n) . Da wir M als vollständig vorausgesetzt haben, existiert daher der Grenzwert p^* der Folge (p_n) und es gilt

$$d(p^*, p_0) \leq \sum_{n=0}^{\infty} \|v_n\| \leq \sum_{n=0}^{\infty} (t_{n+1} - t_n) = t^* < r ,$$

5 Minimierung auf Mannigfaltigkeiten

d. h. $p^* \in K$. Ebenso erhalten wir unter Verwendung von Lemma 5.12,

$$d(p^*, p_n) \leq \sum_{i=n}^{\infty} \|v_i\| \leq \sum_{i=n}^{\infty} (t_{i+1} - t_i) = t^* - t_n \leq \frac{\beta}{\lambda} 2^{-n} C^{2^n}$$

mit $C = \frac{\lambda}{\beta} t^* \leq \frac{2\lambda\eta}{\beta^2}$.

Abschließend beweisen wir noch (5.17). Dazu verwenden wir Schritt 1) aus dem Beweis von Satz 5.13. Für $q = p^* \in K$ erhalten wir direkt

$$\langle \text{Hess } f(p^*)w, w \rangle_{p^*} \geq (\beta - \lambda d(p^*, p_0)) \|w\|_{p^*}^2, \quad w \in T_{p^*}M,$$

wobei $\beta - \lambda d(p^*, p_0) > 0$. Es gilt also insbesondere

$$\langle \text{Hess } f(p^*)w, w \rangle_{p^*} > 0, \quad w \in T_{p^*}M \setminus \{0\}.$$

Sei $v \in \mathcal{D}_{p^*}$ und bezeichne $\gamma(t) = \exp_{p^*}(tv)$, dann gilt [Jos95, Gl. 3.3.50] für $q = \gamma(1) \in K$ mit $p^* \neq q$

$$\frac{d^2}{dt^2} f(\gamma(t)) = \langle \text{Hess } f(\gamma(t))P_{\gamma,0,t}v, P_{\gamma,0,t}v \rangle_q > 0 \text{ für alle } t \in [0, 1].$$

Andererseits haben wir wegen (5.26)

$$\frac{d}{dt} f(\gamma(t))|_{t=0} = \langle \text{grad } f(p^*), v \rangle_{p^*} = 0,$$

und somit erhalten wir

$$\begin{aligned} f(q) &= f(p^*) + \int_0^1 \frac{d}{dt} f(\gamma(t)) dt = f(p^*) + \int_0^1 \left(\frac{d}{dt} f(\gamma(t)) - \frac{d}{dt} f(\gamma(t))|_{t=0} \right) dt \\ &= f(p^*) + \int_0^1 \int_0^t \frac{d^2}{ds^2} f(\gamma(s)) ds dt > f(p^*). \end{aligned}$$

□

6 Numerische Behandlung finiter Cosserat-Elastizität

Wir geben nun einen kurzen Ausblick in die numerische Behandlung eines elastischen, geometrisch exakten Cosserat-Modell aus [Nef05], wie wir es in Abschnitt 1.4 beschrieben haben. Dieses Modell wurde mit einem veränderten Krümmungsterm bereits in [Mün07] untersucht. Darin werden die Rotationen (orthogonale Matrizen mit positiver Determinante) mithilfe von Quaternionen beschrieben. Für die vorliegende Arbeit haben wir allerdings eine andere Beschreibung für die Rotationen gewählt. Dieser Zugang ist für die hier vorgestellte Anwendung nicht direkt den Quaternionen überlegen, allerdings lässt sich unser Ansatz auch auf andere Matrixgruppen übertragen. Dies könnte z. B. für die Anwendung in einem finiten plastischen Materialmodell interessant sein, in dem die plastische Verzerrung multiplikativ mit einem Element der speziellen linearen Gruppe verknüpft ist.

Das Verfahren aus Kapitel 5 kann insbesondere auf Matrix Lie-Gruppen angewendet werden, in denen die Lie-Algebra der schiefssymmetrischen Matrizen und die Geodätischen durch die Matrixexponentialfunktion direkt verfügbar sind. Dennoch ist die dazu notwendige Berechnung der Ableitungen von Funktionalen auf Matrix Lie-Gruppen eine Herausforderung, und ein entsprechender Kalkül muss dafür entwickelt werden. In unserer Darstellung zeigen wir in $SO(N)$ wie die Ableitungen systematisch berechnet werden können. Später in Kapitel 7 präsentieren wir numerische Ergebnisse für ein Cosserat Modell, die das Konvergenzverhalten der Methode veranschaulichen.

In einem ersten Schritt formulieren wir für das Minimierungsproblem (1.27) notwendige Bedingungen erster Ordnung, als kritische Stelle des Funktionals. Dadurch findet auch in gewisser Weise ein Wechsel von der nichtlinearen Struktur der Produktmannigfaltigkeit der $SO(3)$ auf die Tangentialmannigfaltigkeit, mit einer Vektorraumstruktur, statt. Im Anschluss daran wenden wir das beschriebene Newton-Verfahren zur Minimierung an.

6.1 Variationelle Formulierung in Finite-Element-Räumen

Wir betrachten das Gesamtenergiefunktional

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(\mathbf{u}, \bar{R}) &= \int_{\Omega} \mu |\text{sym}(\bar{U}(\mathbf{x}) - I)|^2 d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \mu_c |\text{skew}(\bar{U}(\mathbf{x}))|^2 d\mathbf{x} \\ &+ \int_{\Omega} \frac{\lambda}{4} \left((\det F(\mathbf{x}) - 1)^2 + \left(\frac{1}{\det F(\mathbf{x})} - 1 \right)^2 \right) d\mathbf{x} \\ &+ \int_{\Omega} \mu L_c^2 |\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} - t_n \int_{\Omega} \mathbf{t}_N \cdot \mathbf{u} da . \end{aligned}$$

aus (1.27a) mit den in Problem (1.27) aus Kapitel 1 eingeführten Bezeichnungen

$$F = \mathbf{I} + D\mathbf{u} , \quad \bar{U} = \bar{R}^T F , \quad \boldsymbol{\kappa} = \bar{R}^T D_{\mathbf{x}} \bar{R} .$$

Zur leichteren Berechnung verwenden wir die Identität $|\bar{R}^T D_{\mathbf{x}} \bar{R}| = |D_{\mathbf{x}} \bar{R}|$ und betrachten das Problem

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(\mathbf{u}, \bar{R}) &= \tilde{\mathcal{I}}(\bar{U}, F, \hat{\boldsymbol{\kappa}}, \mathbf{u}) = \int_{\Omega} \mu |\text{sym}(\bar{U}(\mathbf{x}) - I)|^2 d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \mu_c |\text{skew}(\bar{U}(\mathbf{x}))|^2 d\mathbf{x} \\ &+ \int_{\Omega} \frac{\lambda}{4} \left((\det F(\mathbf{x}) - 1)^2 + \left(\frac{1}{\det F(\mathbf{x})} - 1 \right)^2 \right) d\mathbf{x} \quad (6.1) \\ &+ \int_{\Omega} \mu L_c^2 |\hat{\boldsymbol{\kappa}}(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} - t_n \int_{\Omega} \mathbf{t}_N \cdot \mathbf{u} da . \end{aligned}$$

mit den Bezeichnungen

$$F = \mathbf{I} + D\mathbf{u} , \quad (6.2a)$$

$$\bar{U} = \bar{R}^T F , \quad (6.2b)$$

$$\hat{\boldsymbol{\kappa}} = D_{\mathbf{x}} \bar{R} . \quad (6.2c)$$

Um eine variationelle Formulierung zu erhalten verwenden wir nun die in (5.1) bzw. (5.11) eingeführte Parametrisierung über die Exponentialabbildung und definieren ausgehend von einer Näherungslösung $(\mathbf{u}_n, \bar{R}_n) \in H^1(\Omega, \mathbb{R}^3) \times H^1(\Omega, SO(3))$ die Funktion

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_n : \quad H^1(\Omega, \mathbb{R}^3) \times T_{\bar{R}_n} H^1(\Omega, SO(3)) &\longrightarrow \mathbb{R} , \\ (\mathbf{w}, \bar{C}) &\longmapsto \mathcal{I}(\mathbf{u}_n + \mathbf{w}, \exp(\bar{C} \bar{R}_n^T) \bar{R}_n) , \end{aligned} \quad (6.3)$$

wobei wir formal

$$T_{\bar{R}_n} H^1(\Omega, SO(3)) \cong H^1(\Omega, T_{\bar{R}_n} SO(3)) \cong H^1(\Omega, \mathfrak{so}(3) R_n) \cong H^1(\Omega, \mathfrak{so}(3)) R_n$$

verwenden. In (6.3) haben wir verwendet, dass für die Lie-Gruppe $SO(3)$ die Exponentialabbildung für $\bar{C}(\mathbf{x}) \in T_{\bar{R}(\mathbf{x})} SO(3) \cong T_{\mathbf{I}} SO(3) \bar{R}(\mathbf{x}) = \mathfrak{so}(3) \bar{R}(\mathbf{x})$ durch

$$\exp_{\bar{R}(\mathbf{x})}(\bar{C}(\mathbf{x})) = \exp(\bar{C}(\mathbf{x}) \bar{R}(\mathbf{x})^T) \bar{R}(\mathbf{x}) , \quad \mathbf{x} \in \Omega$$

gegeben ist, wobei \exp die matrixwertige Exponentialfunktion bezeichnet.

Für die Realisierung des Newton-Verfahren aus Abschnitt 5.1 benötigen wir die Ableitungen $D\mathcal{I}_n(\mathbf{w}, \bar{C})$ und $D^2\mathcal{I}_n(\mathbf{w}, \bar{C})$ der Funktion (6.3) an der Stelle $(\mathbf{w}, \bar{C}) = (\mathbf{0}, 0)$, welche wir mithilfe der Kettenregel aus den Ableitungen

$$\begin{aligned}
 & D\tilde{\mathcal{I}}(\bar{U}, F, \hat{\boldsymbol{\kappa}}, \mathbf{u})[\bar{V}, G, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}] \\
 &= \int_{\Omega} 2\mu \operatorname{sym}(\bar{U}(\mathbf{x}) - \mathbf{I}) : \bar{V}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} 2\mu_c \operatorname{skew}(\bar{U}(\mathbf{x})) : \bar{V}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\
 &+ \int_{\Omega} \frac{\lambda}{2} \frac{(\det F(\mathbf{x}) - 1)(\det F(\mathbf{x}) + 1)(\det^2 F(\mathbf{x}) - \det F(\mathbf{x}) + 1)}{\det^2 F(\mathbf{x})} \operatorname{tr}(G(\mathbf{x})F^{-1}(\mathbf{x})) \, d\mathbf{x} \\
 &+ \int_{\Omega} 2\mu L_c^2 \hat{\boldsymbol{\kappa}}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} - t_n \int_{\Omega} \mathbf{t}_N \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{a} .
 \end{aligned} \tag{6.4}$$

und

$$\begin{aligned}
 & D^2\tilde{\mathcal{I}}(\bar{U}, F, \hat{\boldsymbol{\kappa}}, \mathbf{u})[(\bar{V}, G, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}), (\bar{W}, H, \boldsymbol{\mu}, \mathbf{s})] \\
 &= \int_{\Omega} 2\mu \operatorname{sym}(\bar{W}(\mathbf{x})) : \bar{V}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} 2\mu_c \operatorname{skew}(\bar{W}(\mathbf{x})) : \bar{V}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\
 &+ \int_{\Omega} \frac{\lambda}{2} \left((2(\det F(\mathbf{x}))^2 - \det F(\mathbf{x}) - (\det F(\mathbf{x}))^{-1} + 2(\det F(\mathbf{x}))^{-2}) \right. \\
 &\quad \cdot \operatorname{tr}(H(\mathbf{x})F^{-1}(\mathbf{x})) \operatorname{tr}(G(\mathbf{x})F^{-1}(\mathbf{x})) \\
 &\quad - \frac{(\det F(\mathbf{x}) - 1)(\det F(\mathbf{x}) + 1)(\det^2 F(\mathbf{x}) - \det F(\mathbf{x}) + 1)}{\det^2 F(\mathbf{x})} \\
 &\quad \left. \cdot \operatorname{tr}(G(\mathbf{x})F^{-1}(\mathbf{x})H(\mathbf{x})F^{-1}(\mathbf{x})) \right) d\mathbf{x} \\
 &+ \int_{\Omega} 2\mu L_c^2 \boldsymbol{\mu}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} ,
 \end{aligned} \tag{6.5}$$

berechnen. Für eine ausführliche Darstellung der Ableitungen des Volumenterms verweisen wir auf Abschnitt F im Anhang.

Wir definieren ausgehend von (6.2) durch den Austausch

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u} &\leftarrow \mathbf{u}_n + \mathbf{w} , \\
 R &\leftarrow \exp(\bar{C}\bar{R}_n^T)\bar{R}_n
 \end{aligned}$$

die Tensorfunktionen

$$F_n(\mathbf{w}) = \mathbf{I} + D\mathbf{u}_n + D\mathbf{w} , \quad \mathbf{w} \in \mathbb{R}^3 , \tag{6.6a}$$

$$\bar{U}_n(\mathbf{w}, \bar{C}) = \bar{R}_n^T \exp(-\bar{C}\bar{R}_n^T)(\mathbf{I} + D\mathbf{u}_n + D\mathbf{w}) , \quad (\mathbf{w}, \bar{C}) \in \mathbb{R}^3 \times \mathfrak{so}(3)\bar{R}_n , \tag{6.6b}$$

$$\hat{\boldsymbol{\kappa}}_n(\bar{C}) = D_{\mathbf{x}}(\exp(\bar{C}\bar{R}_n^T)\bar{R}_n) , \quad \bar{C} \in \mathfrak{so}(3)\bar{R}_n \tag{6.6c}$$

und bestimmen die Ableitungen von (6.6) an der Stelle $(\mathbf{w}, \bar{C}) = (\mathbf{0}, 0)$. Wir erhalten mit Lemma D.3

$$\bar{R}_n^{(0)} := \bar{R}_n, \quad (6.7a)$$

$$\bar{R}_n^{(1)}[\bar{A}] := \bar{A}, \quad \bar{A} \in \mathfrak{so}(3)\bar{R}_n \quad (6.7b)$$

$$\bar{R}_n^{(2)}[\bar{A}, \bar{B}] := \frac{1}{2}(\bar{A}\bar{R}_n^T\bar{B} + \bar{B}\bar{R}_n^T\bar{A}), \quad \bar{A}, \bar{B} \in \mathfrak{so}(3)\bar{R}_n \quad (6.7c)$$

für die Tensorfunktion (6.6a)

$$F_n^{(0)} := F_n(\mathbf{0}) = \mathbf{I} + D\mathbf{u}_n, \quad (6.7d)$$

$$F_n^{(1)}[\mathbf{v}] := DF_n(\mathbf{0})[\mathbf{v}] = D\mathbf{v}, \quad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3 \quad (6.7e)$$

$$F_n^{(2)}[\mathbf{v}, \mathbf{s}] := D^2F_n(\mathbf{0})[\mathbf{v}, \mathbf{s}] = 0, \quad \mathbf{v}, \mathbf{s} \in \mathbb{R}^3 \quad (6.7f)$$

und für (6.6b) mit der Produktregel von Leibniz

$$\bar{U}_n^{(0)} := \bar{U}_n(\mathbf{0}, 0) = \bar{R}_n^T F_n, \quad (6.7g)$$

$$\begin{aligned} \bar{U}_n^{(1)}[\mathbf{v}, \bar{A}] &:= D\bar{U}_n(\mathbf{0}, 0)[\mathbf{v}, \bar{A}] \\ &= \bar{A}^T F_n + \bar{R}_n^T F_n^{(1)}[\mathbf{v}] \\ &= \bar{A}^T F_n + \bar{R}_n^T D\mathbf{v}, \quad (\mathbf{v}, \bar{A}) \in \mathbb{R}^3 \times \mathfrak{so}(3)\bar{R}_n, \end{aligned} \quad (6.7h)$$

$$\begin{aligned} \bar{U}_n^{(2)}[(\mathbf{v}, \bar{A}), (\mathbf{s}, \bar{B})] &:= D^2\bar{U}_n(\mathbf{0}, 0)[(\mathbf{v}, \bar{A}), (\mathbf{s}, \bar{B})] \\ &= \bar{R}_n^{(2)}[\bar{A}, \bar{B}]F_n + \bar{R}_n^{(1)}[\bar{A}]F_n^{(1)}[\mathbf{v}] + \bar{R}_n^{(1)}[\bar{B}]F_n^{(1)}[\mathbf{s}] \\ &= \frac{1}{2}(\bar{A}\bar{R}_n^T\bar{B} + \bar{B}\bar{R}_n^T\bar{A})F_n + \bar{A}D\mathbf{v} + \bar{B}D\mathbf{s} \\ &\quad (\mathbf{v}, \bar{A}), (\mathbf{s}, \bar{B}) \in \mathbb{R}^3 \times \mathfrak{so}(3)\bar{R}_n. \end{aligned} \quad (6.7i)$$

und für (6.6c) mit Satz F.5 aus Abschnitt F im Anhang

$$\boldsymbol{\kappa}_n^{(0)} = D_{\mathbf{x}}\bar{R}_n, \quad (6.7j)$$

$$\boldsymbol{\kappa}_n^{(1)}[\bar{A}] = D_{\mathbf{x}}\bar{A}, \quad (6.7k)$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\kappa}_n^{(2)}[\bar{A}, \bar{B}] &= \frac{1}{2} \left(\bar{A}\bar{R}_n^T D_{\mathbf{x}}\bar{B} + \bar{B}\bar{R}_n^T D_{\mathbf{x}}\bar{A} \right. \\ &\quad \left. + D_{\mathbf{x}}\bar{A}\bar{R}_n^T\bar{B} + D_{\mathbf{x}}\bar{B}\bar{R}_n^T\bar{A} \right. \\ &\quad \left. + \bar{A}(D_{\mathbf{x}}\bar{R}_n)^T\bar{B} + \bar{B}(D_{\mathbf{x}}\bar{R}_n)^T\bar{A} \right) \\ &\quad \bar{A}, \bar{B} \in H^1(\Omega, \mathfrak{so}(3))\bar{R}_n. \end{aligned} \quad (6.7l)$$

Nun berücksichtigen wir die spezielle Darstellung $\bar{C} \in T_{\bar{R}}SO(3) \cong T_{\mathbf{I}}SO(3)\bar{R}$ und ersetzen die Bezeichnungen

$$\begin{aligned} \bar{A} &\leftarrow \bar{A}\bar{R}_n, \\ \bar{B} &\leftarrow \bar{B}\bar{R}_n \end{aligned}$$

in (6.7) und erhalten, unter Vernachlässigung der präzisen Darstellung der Argumente, für $\bar{A}, \bar{B} \in H^1(\Omega, \mathfrak{so}(3))$

$$\bar{R}_n^{(0)} := \bar{R}_n, \quad (6.8a)$$

$$\bar{R}_n^{(1)}[\bar{A}] := \bar{A} \bar{R}_n, \quad (6.8b)$$

$$\bar{R}_n^{(2)}[\bar{A}, \bar{B}] := \frac{1}{2}(\bar{A} \bar{B} + \bar{B} \bar{A}) \bar{R}_n, \quad (6.8c)$$

$$\bar{U}_n^{(0)} := \bar{R}_n^T F_n, \quad (6.8d)$$

$$\bar{U}_n^{(1)}[\mathbf{v}, \bar{A}] := R_n^T (D\mathbf{v} - \bar{A} F_n), \quad (6.8e)$$

$$\bar{U}_n^{(2)}[(\mathbf{v}, \bar{A}), (\mathbf{s}, \bar{B})] := \frac{1}{2}(\bar{A} \bar{B} + \bar{B} \bar{A}) \bar{R}_n F_n + \bar{A} \bar{R}_n D\mathbf{v} + \bar{B} \bar{R}_n D\mathbf{s} \quad (6.8f)$$

$$\boldsymbol{\kappa}_n^{(0)} := D_{\mathbf{x}} \bar{R}_n, \quad (6.8g)$$

$$\boldsymbol{\kappa}_n^{(1)}[\bar{A}] := D_{\mathbf{x}}(\bar{A} \bar{R}_n), \quad (6.8h)$$

$$\boldsymbol{\kappa}_n^{(2)}[\bar{A}, \bar{B}] := \frac{1}{2} D_{\mathbf{x}}((\bar{A} \bar{B} + \bar{B} \bar{A}) \bar{R}). \quad (6.8i)$$

In der letzten Gleichung haben wir dabei unter Verwendung von

$$\bar{R}_n (D_{\mathbf{x}} \bar{R}_n)^T = -D_{\mathbf{x}} \bar{R}_n \bar{R}_n^T$$

wie folgt umgeformt:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\kappa}_n^{(2)}[\bar{A}, \bar{B}] &:= \frac{1}{2} \left(\bar{A} D_{\mathbf{x}}(\bar{B} \bar{R}_n) + \bar{B} D_{\mathbf{x}}(\bar{A} \bar{R}_n) \right. \\ &\quad + D_{\mathbf{x}}(\bar{A} \bar{R}_n) \bar{R}_n^T \bar{B} \bar{R}_n + D_{\mathbf{x}}(\bar{B} \bar{R}_n) \bar{R}_n^T \bar{A} \bar{R}_n \\ &\quad \left. + \bar{A} \bar{R}_n (D_{\mathbf{x}} \bar{R}_n)^T \bar{B} \bar{R}_n + \bar{B} \bar{R}_n (D_{\mathbf{x}} \bar{R}_n)^T \bar{A} \bar{R}_n \right) = \frac{1}{2} D_{\mathbf{x}}((\bar{A} \bar{B} + \bar{B} \bar{A}) \bar{R}). \end{aligned}$$

Mit (6.7d)–(6.7f), (6.8), (6.4) und (6.5) erhalten wir nun für die erste und zweite Variation von \mathcal{I}_n aus (6.3) das Ergebnis

$$D\mathcal{I}_n(\mathbf{0}, 0)[\mathbf{v}, \bar{A}] = D\tilde{\mathcal{I}}\left(\bar{U}_n^{(0)}, F_n^{(0)}, \hat{\boldsymbol{\kappa}}_n^{(0)}, \mathbf{0}\right)\left[\bar{U}_n^{(1)}[\mathbf{v}, \bar{A}], F_n^{(1)}[\mathbf{v}], \hat{\boldsymbol{\kappa}}_n^{(1)}[\bar{A}], \mathbf{v}\right], \quad (6.9)$$

bzw.

$$\begin{aligned} &D^2\mathcal{I}_n(\mathbf{0}, 0)[(\mathbf{v}, \bar{A}), (\mathbf{s}, \bar{B})] \\ &= D^2\tilde{\mathcal{I}}\left(\bar{U}_n^{(0)}, F_n^{(0)}, \hat{\boldsymbol{\kappa}}_n^{(0)}, \mathbf{0}\right)\left[\left(\bar{U}_n^{(1)}[\mathbf{v}, \bar{A}], F_n^{(1)}[\mathbf{v}], \hat{\boldsymbol{\kappa}}_n^{(1)}[\bar{A}], \mathbf{v}\right), \left(\bar{U}_n^{(1)}[\mathbf{s}, \bar{B}], F_n^{(1)}[\mathbf{s}], \hat{\boldsymbol{\kappa}}_n^{(1)}[\bar{B}], \mathbf{s}\right)\right] \\ &\quad + D\tilde{\mathcal{I}}\left(\bar{U}_n^{(0)}, F_n^{(0)}, \hat{\boldsymbol{\kappa}}_n^{(0)}, \mathbf{0}\right)\left[\bar{U}_n^{(2)}[(\mathbf{v}, \bar{A}), (\mathbf{s}, \bar{B})], F_n^{(2)}[\mathbf{v}, \mathbf{s}], \hat{\boldsymbol{\kappa}}_n^{(2)}[\bar{A}, \bar{B}], \mathbf{0}\right]. \end{aligned} \quad (6.10)$$

6.2 Diskretisierung im Ort

Für die Diskretisierung im Ort verwenden wir eine Finite-Elemente-Methode welche Basisfunktionen in Vektorräumen vorsieht. Die Hauptschwierigkeit der Umsetzung auf das finite Cosserat-Modell betrifft im wesentlichen die Umsetzung des inkrementellen Updates, welches Element einer Tangentialmannigfaltigkeit ist, auf die Matrixgruppe. Über die Schwierigkeiten und Lösungsansätze der Interpolation ist in [SVQ86, JC98] nachzulesen.

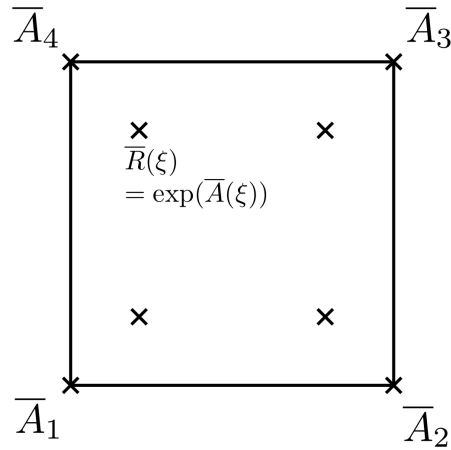


Abbildung 6.1: **Interpolation der Knotenwerte in $\mathfrak{so}(3)$** : Zur einfacheren Darstellung betrachten wir ein Viereckselement in 2D mit vier Gaußpunkten. Dargestellt sind die Werte \bar{A}_k der Finite-Element-Funktion \bar{A} an den Knoten, mit $\bar{A}_k \in \mathfrak{so}(3)$. Die Auswertung von \bar{A} bzw. $\partial_{x_i}\bar{A}$ innerhalb der Zelle als lineare Kombination von \bar{A}_k bzw. $\partial_{x_i}\bar{A}_k$ ist aufgrund der linearen Struktur des Tangentialraums wohldefiniert. Wir definieren durch $\bar{R}(\xi) = \exp(\bar{A}(\xi)) \in SO(3)$ eine Funktion \bar{R} vom Referenzgebiet in die spezielle orthogonale Gruppe. Der Gradient ergibt sich durch Kettenregel zu $\partial_{x_i}\bar{R}(\xi) = d\exp_{\bar{A}(\xi)}^r(\partial_{x_i}\bar{A}(\xi)) \exp(\bar{A}(\xi))$. Die Knotenwerte \bar{A}_k werden durch die Newton-Korrektur $\Delta\bar{A}_k$ verbessert und durch $\bar{A}_k \leftarrow \log(\exp(\Delta\bar{A}_k) \exp(\bar{A}_k))$ ersetzt.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden insbesondere drei verschiedene Ansätze verfolgt.

- 1.) Die Rotation \bar{R}_k im Knoten wird durch eine schiefsymmetrische Matrix \bar{A}_k mit $\bar{R}_k = \exp(\bar{A}_k)$ repräsentiert (vgl. Abb. 6.1). Die Interpolation über das Zellengebiet erfolgt im Vektorraum der schiefsymmetrischen Matrizen gemäß

$$\begin{aligned}\bar{R}(\xi) &= \exp(\bar{A}(\xi)) \\ \partial_{x_i}\bar{R}(\xi) &= d\exp_{\bar{A}(\xi)}^r(\partial_{x_i}\bar{A}(\xi)) \bar{R}(\xi).\end{aligned}$$

Das Newton-Update wird dann durch

$$\bar{A}_k^{n+1} = \log(\exp(\Delta\bar{A}_k) \exp(\bar{A}_k^n))$$

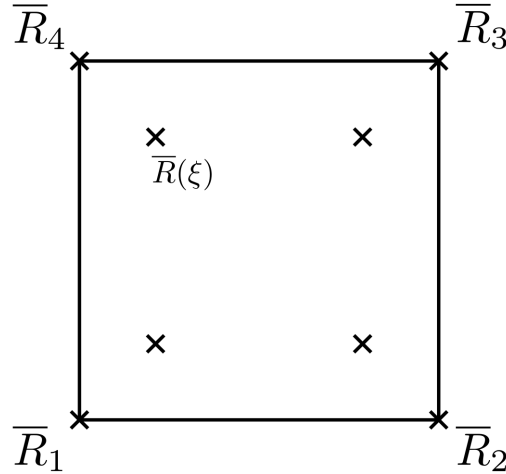


Abbildung 6.2: **Interpolation der Knotenwerte in $\mathbb{R}^{3 \times 3}$** : Dargestellt sind die Werte \bar{R}_k der Finite-Element-Funktion \bar{R} an den Knoten, mit $\bar{R}_k \in SO(3) \subset \mathbb{R}^{3 \times 3}$. Die Auswertung von \bar{R} bzw. $\partial_{x_i} \bar{R}$ innerhalb der Zelle als lineare Kombination von \bar{R}_k bzw. $\partial_{x_i} \bar{R}_k$ wird unter Vernachlässigung der Gruppenstruktur durchgeführt. Die Elemente der $SO(3)$ werden in den linearen Raum $\mathbb{R}^{3 \times 3}$ eingebettet. Die Knotenwerte \bar{R}_k werden durch die Newton-Korrektur $\Delta \bar{A}_k$ verbessert und durch $\bar{R}_k \leftarrow \exp(\Delta \bar{A}_k) \bar{R}_k$ ersetzt.

ausgeführt.

- 2.) Es ist $SO(3) \subset GL(3) \subset \mathbb{R}^{3 \times 3}$. Die Rotationen \bar{R} werden als Finite-Elemente-Funktion mit Wertebereich $\mathbb{R}^{3 \times 3}$ betrachtet und in den Knoten abgespeichert (vgl. Abb. 6.2). Für die Quadratur interpolieren wir im Vektorraum $\mathbb{R}^{3 \times 3}$ und vernachlässigen die Gruppenstruktur. Die Werte $\bar{R}(\xi)$ und $\partial_{x_i} \bar{R}(\xi)$ ergeben sich direkt aus der Finite-Elemente-Funktion.

Das Update durch die Newton-Korrektur $\Delta \bar{A}$ geschieht in den Knoten durch

$$\bar{R}_k^{n+1} = \exp(\Delta \bar{A}_k) \bar{R}_k^n . \quad (6.11)$$

- 3.) Die Rotationen und deren räumlicher Gradienten werden in den Quadraturpunkten abgespeichert (vgl. Abb. 6.3). Somit ist keine Interpolation während des Aufstellens der Systemmatrix notwendig.

Die Newton-Korrektur muss hierbei für jeden Quadraturpunkt ausgeführt werden,

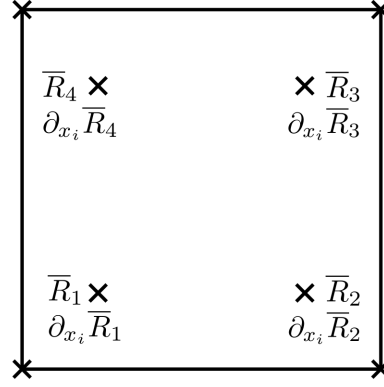


Abbildung 6.3: **Daten im Quadraturpunkt:** Dargestellt sind die Werte \bar{R}_k und $\partial_{x_i}\bar{R}_k$ in den Quadraturpunkten. Diese Werte werden zu Beginn der Simulation auf $\bar{R}_k^0 \equiv \mathbf{I}$ und $\partial_{x_i}\bar{R}_k^0 \equiv 0$ gesetzt, dafür ist es notwendig in der Gleichgewichtslage zu starten. Durch die Newton-Korrektur $\Delta\bar{A}(\xi)$ werden die Daten im Quadraturpunkt verbessert und durch $\bar{R}_k \leftarrow \exp(\Delta\bar{A}(\xi))\bar{R}_k$ bzw. $\partial_{x_i}\bar{R}_k \leftarrow d\exp_{\Delta\bar{A}(\xi)}^r(\partial_{x_i}\Delta\bar{A}(\xi))\bar{R}_k + \exp(\Delta\bar{A}(\xi))\partial_{x_i}\bar{R}_k$ ersetzt.

und insbesondere auch für den Gradienten der Rotationen

$$\begin{aligned}\bar{R}_k^{n+1} &= \bar{R}^{n+1}(\xi_k) = \exp(\Delta A(\xi_k))\bar{R}^n(\xi_k) \\ &= \exp(\Delta A(\xi_k))\bar{R}_k^n, \\ \partial_{x_i}\bar{R}_k^{n+1} &= \partial_{x_i}\bar{R}^{n+1}(\xi_k) \\ &= d\exp_{\Delta\bar{A}(\xi_k)}^r(\partial_{x_i}\Delta\bar{A}(\xi_k))\bar{R}^{n+1}(\xi_k) + \exp(\Delta\bar{A}(\xi_k))\partial_{x_i}\bar{R}^n(\xi_k) \\ &= d\exp_{\Delta\bar{A}(\xi_k)}^r(\partial_{x_i}\Delta\bar{A}(\xi_k))\bar{R}_k^{n+1} + \exp(\Delta\bar{A}(\xi_k))\partial_{x_i}\bar{R}_k^n\end{aligned}$$

durchgeführt.

Dieser Ansatz ist nur möglich, wenn die numerische Simulation im Gleichgewichtszustand mit $\bar{R}^0 = \mathbf{I}$ und $\partial_{x_i}\bar{R}^0 = 0$ beginnt. Die Berücksichtigung von Dirichlet-Randbedingung für die Rotationen ist schwieriger als in den anderen beiden Fällen.

6.3 Algorithmus

Um eine numerische Approximation der Lösung des finiten Cosserat-Modells aus Abschnitt 1.4 zu erhalten, wählen wir den in Abschnitt 5.1 beschriebenen Algorithmus. Für die Berechnung von $D_{\mathbf{x}}\bar{R}$ in den Gaußpunkten verwenden wir die in Abbildung 6.1 dargestellte Methode.

S0) Wähle $n_{\text{opt}}, L \in \mathbb{N}$, eine Zeitschrittweite Δt_1 und setze $\bar{A}_0(\mathbf{x}) = 0$ für alle $\mathbf{x} \in \mathcal{N}$, $t_0 = 0$ und $n = 1$.

S1) Setze $k = 0$, $t_n = t_{n-1} + \Delta_n$ und wähle geeignete Startwerte $\mathbf{u}_{n,0}$ und setze die Dirichlet Randwerte $\mathbf{u}_{n,0}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_D^n(\mathbf{x})$ für alle $\mathbf{x} \in \Gamma \cap \mathcal{N}$.

S2) Berechne in jedem Quadraturpunkt $\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h$

$$\begin{aligned} F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) &= \mathbf{I} + D\mathbf{u}_{n,k}(\boldsymbol{\xi}) , \\ \bar{R}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) &= \exp(\bar{A}_{n,k}(\boldsymbol{\xi})) , \\ \bar{U}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) &= R_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi})^T F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) , \\ \boldsymbol{\kappa}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) &= d \exp_{\bar{A}_{n,k}(\boldsymbol{\xi})}^r D\bar{A}_{n,k}(\boldsymbol{\xi}) \exp(\bar{A}_{n,k}(\boldsymbol{\xi})) , \\ \beta_{n,k}(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{\lambda (\det F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) - 1) (\det F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) + 1) (\det^2 F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) - \det F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) + 1)}{2 \det^2 F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi})} , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_{n,k}^{(1)}[\mathbf{v}](\boldsymbol{\xi}) &= D\mathbf{v}(\boldsymbol{\xi}) , \\ \bar{R}_n^{(1)}[\bar{B}](\boldsymbol{\xi}) &= \bar{B}(\boldsymbol{\xi}) \bar{R}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) , \\ \bar{U}_n^{(1)}[\mathbf{v}, \bar{B}](\boldsymbol{\xi}) &= \bar{R}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi})^T (D\mathbf{v}(\boldsymbol{\xi}) - \bar{B}(\boldsymbol{\xi}) F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi})) , \\ \boldsymbol{\kappa}_n^{(1)}[\bar{B}](\boldsymbol{\xi}) &= D_{\mathbf{x}}\bar{B}(\boldsymbol{\xi}) \bar{R}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) + \bar{B}(\boldsymbol{\xi}) \boldsymbol{\kappa}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) . \end{aligned}$$

S3) Berechne das Residuum $F_{n,k}[\mathbf{v}, \bar{B}]$

$$\begin{aligned} F_{n,k}[\mathbf{v}, \bar{B}] &= \int_{\Omega} 2\mu \text{sym}(\bar{U}_{n,k}^{(0)} - \mathbf{I}) : \bar{U}_{n,k}^{(1)}[\mathbf{v}, \bar{B}] \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} 2\mu_c \text{skew} \bar{U}_{n,k}^{(0)} : \bar{U}_{n,k}^{(1)}[\mathbf{v}, \bar{B}] \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Omega} \beta_{n,k} \text{tr}(F_{n,k}^{(1)}[\mathbf{v}] F_{n,k}^{(0)-1}) \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} 2\mu L_c^2 \hat{\boldsymbol{\kappa}}_{n,k}^{(0)} : \hat{\boldsymbol{\kappa}}_{n,k}^{(1)}[\bar{B}] \, d\mathbf{x} - t_n \int_{\Omega} \mathbf{t}_N \cdot \mathbf{v} \, da . \end{aligned}$$

Falls $\|F_{n,k}[\mathbf{v}, \bar{B}]\|$ klein genug, setze $\mathbf{u}^n = \mathbf{u}^{n,k}$, $\bar{A}^n = \bar{A}^{n,k}$, $\Delta t_{n+1} = \frac{n_{\text{opt}}}{k} \Delta t_n$, $n := n + 1$ und gehe zum nächsten Zeitschritt nach S1).

S4) Berechne für jeden Quadraturpunkt $\boldsymbol{\xi} \in \Xi_h$

$$\begin{aligned} \gamma_{n,k}(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{\lambda}{2} \left(2(\det F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}))^2 - \det F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) \right. \\ &\quad \left. - (\det F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}))^{-1} + 2(\det F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}))^{-2} \right) , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 F_{n,k}^{(1)}[\mathbf{w}](\boldsymbol{\xi}) &= D\mathbf{w}(\boldsymbol{\xi}) , \\
 \bar{R}_n^{(1)}[\bar{C}](\boldsymbol{\xi}) &= \bar{C}(\boldsymbol{\xi}) \bar{R}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) , \\
 \bar{U}_n^{(1)}[\mathbf{w}, \bar{C}](\boldsymbol{\xi}) &= \bar{R}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi})^T (D\mathbf{w}(\boldsymbol{\xi}) - \bar{C}(\boldsymbol{\xi}) F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi})) , \\
 \boldsymbol{\kappa}_n^{(1)}[\bar{C}](\boldsymbol{\xi}) &= D_{\mathbf{x}} \bar{C}(\boldsymbol{\xi}) \bar{R}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) + \bar{C}(\boldsymbol{\xi}) \boldsymbol{\kappa}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) , \\
 \bar{R}_{n,k}^{(2)}[\bar{B}, \bar{C}](\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{2} (\bar{B}(\boldsymbol{\xi}) \bar{C}(\boldsymbol{\xi}) + \bar{C}(\boldsymbol{\xi}) \bar{B}(\boldsymbol{\xi})) \bar{R}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) , \\
 \bar{U}_{n,k}^{(2)}[(\mathbf{v}, \bar{B}), (\mathbf{w}, \bar{C})](\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{2} (\bar{B}(\boldsymbol{\xi}) \bar{C}(\boldsymbol{\xi}) + \bar{C}(\boldsymbol{\xi}) \bar{B}(\boldsymbol{\xi})) \bar{R}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) F_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) \\
 &\quad + \bar{B}(\boldsymbol{\xi}) \bar{R}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) D\mathbf{v}(\boldsymbol{\xi}) + \bar{C}(\boldsymbol{\xi}) \bar{R}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) D\mathbf{w}(\boldsymbol{\xi}) \\
 \boldsymbol{\kappa}_{n,k}^{(2)}[\bar{B}, \bar{C}](\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{2} (D\bar{B}(\boldsymbol{\xi}) \bar{C}(\boldsymbol{\xi}) + \bar{B}(\boldsymbol{\xi}) D\bar{C}(\boldsymbol{\xi})) \\
 &\quad + D\bar{C}(\boldsymbol{\xi}) \bar{B}(\boldsymbol{\xi}) + \bar{C}(\boldsymbol{\xi}) D\bar{B}(\boldsymbol{\xi})) \bar{R}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) \\
 &\quad + \frac{1}{2} (\bar{B}(\boldsymbol{\xi}) \bar{C}(\boldsymbol{\xi}) + \bar{C}(\boldsymbol{\xi}) \bar{B}(\boldsymbol{\xi})) \boldsymbol{\kappa}_{n,k}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) .
 \end{aligned}$$

und definiere die symmetrische Bilinearform

$$\begin{aligned}
 a_{n,k}[(\mathbf{w}, \bar{C}), (\mathbf{v}, \bar{B})] &= \int_{\Omega} 2\mu \operatorname{sym}(\bar{U}_n^{(1)}[\mathbf{w}, \bar{C}]) : \bar{U}_n^{(1)}[\mathbf{v}, \bar{B}] \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \int_{\Omega} 2\mu_c \operatorname{skew}(\bar{U}_n^{(1)}[\mathbf{w}, \bar{C}]) : \bar{U}_n^{(1)}[\mathbf{v}, \bar{B}] \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \int_{\Omega} \gamma_{n,k} \operatorname{tr}(F_{n,k}^{(1)}[\mathbf{w}] F_{n,k}^{(0)-1}) \operatorname{tr}(F_{n,k}^{(1)}[\mathbf{v}] F_{n,k}^{(0)-1}) \, d\mathbf{x} \\
 &\quad - \int_{\Omega} \beta_{n,k} \operatorname{tr}(F_{n,k}^{(1)}[\mathbf{w}] F_{n,k}^{(0)-1} F_{n,k}^{(1)}[\mathbf{v}] F_{n,k}^{(0)-1}) \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \int_{\Omega} 2\mu L_c^2 \boldsymbol{\kappa}_n^{(1)}[\bar{B}] : \boldsymbol{\kappa}_n^{(1)}[\bar{C}] \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \int_{\Omega} 2\mu \operatorname{sym}(\bar{U}_{n,k}^{(0)} - \mathbf{I}) : \bar{U}_{n,k}^{(2)}[(\mathbf{v}, \bar{B}), (\mathbf{w}, \bar{C})] \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \int_{\Omega} 2\mu_c \operatorname{skew} \bar{U}_{n,k}^{(0)} : \bar{U}_{n,k}^{(2)}[(\mathbf{v}, \bar{B}), (\mathbf{w}, \bar{C})] \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \int_{\Omega} 2\mu L_c^2 \hat{\boldsymbol{\kappa}}_{n,k}^{(0)} : \hat{\boldsymbol{\kappa}}_{n,k}^{(2)}[\bar{B}, \bar{C}] \, d\mathbf{x} .
 \end{aligned}$$

S5) Berechne $(\mathbf{w}_{n,k}, \bar{C}_{n,k}) \in \mathbf{V}_{\Gamma,h} \times W_{\Gamma,h}$ als Lösung des linearen Variationsproblem

$$a_{n,k}[(\mathbf{w}_{n,k}, \bar{C}_{n,k}), (\mathbf{v}, \bar{B})] = -F_{n,k}[\mathbf{v}, \bar{B}] , \quad (\mathbf{v}, \bar{B}) \in \mathbf{V}_{\Gamma,h} \times W_{\Gamma,h} .$$

Suche minimales $l \in \{0, 1, \dots, L\}$, sodass die Abstiegsbedingung an die Energie

$$\mathcal{I}(\mathbf{u}_{n,k} + s_l \mathbf{w}_{n,k}, \exp(s_l \bar{C}_{n,k}) \exp(\bar{A}_{n,k})) \leq \mathcal{I}(\mathbf{u}_{n,k}, \exp(\bar{A}_{n,k})) \quad (6.12)$$

mit $s_l = \frac{1}{2^l}$ erfüllt ist.

Setze

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{n,k+1} &= \mathbf{u}_{n,k} + s_l \mathbf{w}_{n,k} , \\ \bar{A}_{n,k+1}(\mathbf{x}) &= \log \left(\exp(s_l \bar{C}_{n,k}(\mathbf{x})) \exp(\bar{A}_{n,k}(\mathbf{x})) \right) , \quad \mathbf{x} \in \mathcal{N} \end{aligned} \quad (6.13)$$

und gehe zum nächsten Newtonschritt mit $k := k + 1$ nach S2).

Falls kein l mit (6.12) existiert, setze $\Delta_n := 0.5\Delta_n$ und verwirfe den Zeitschritt, gehe zurück zu S1).

Diskussion des Algorithmus Für die Betrachtung des Inkrementsschritts (6.13) geben wir zwei Sätze an.

Satz 6.1 Sei $R \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ und es existiere kein negativer Eigenwert von R , d. h. für alle $\lambda \in \mathbb{C}$ und $x \in \mathbb{C}^3 \setminus \{0\}$ mit $Rx = \lambda x$ gilt: $\lambda \notin \{\lambda \in \mathbb{R} : \lambda \leq 0\}$.

Dann existiert eine eindeutige Lösung $A \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ der Gleichung $\exp(A) = R$ mit der Eigenschaft:

$$\sigma(A) \subset \{\lambda \in \mathbb{C} : -\pi < \text{Im}(\lambda) < \pi\} ,$$

wobei $\sigma(A)$ das Spektrum von A , d. h. die Vereinigung der Eigenwerte von A , bezeichne. Wir nennen $A = \log(R)$ den Logarithmus von R .

Beweis. Der Satz ist ein Spezialfall von [Hig08, Theorem 1.31]. □

Satz 6.2 Sei $A \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ mit $A = -A^T$. Dann ist A diagonalisierbar und besitzt ein rein imaginäres Spektrum, d. h. für $\lambda \in \sigma(A)$ gilt: $\text{Re}(\lambda) = 0$.

Beweis. Wegen $AA^T = -A^2 = A^T A$ ist die Matrix A normal und die Diagonalisierbarkeit von A folgt direkt. Desweiteren ist die Matrix $iA = -iA^T = (iA)^H$ hermitesch und besitzt daher ein reelles Spektrum: $\sigma(iA) \subset \mathbb{R}$, dann gilt aber $\sigma(A) \subset i\mathbb{R}$. □

Aus den angegebenen Sätzen kann abgeleitet werden, dass der angegebene Algorithmus für moderat große Rotationen sinnvoll ist. Für große Rotationen empfehlen wir daher die Verwendung der Methode aus (6.11) in Abschnitt 6.2, dazu muss der Algorithmus nur an zwei Stellen angepasst werden. In Schritt S2) ist die Berechnung von $\bar{R}_{n,k}^{(0)}$ hinfällig und $\kappa_{n,k}^{(0)}$ muss entsprechend verändert werden.

7 Numerische Ergebnisse für ein finites elastisches Cosserat-Modell

7.1 Geometrie und Problemstellung 3D

Als Benchmark-Rechnung für das elastische geometrisch exakte Cosserat Modell verwenden wir die Geometrie aus Abb. 7.1. Für unsere Berechnungen fixieren wir nun sämtliche Komponenten der Verschiebungen auf dem unteren Rand $\Gamma = \{\mathbf{x} \in \partial\Omega: \mathbf{x}_3 = 0\}$ durch homogene Dirichletrandbedingungen gemäß

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} , \quad \mathbf{x} \in \Gamma .$$

Für die Cosserat Rotationen verwenden wir freie Neumann Randbedingungen auf dem ganzen Rand $\partial\Omega$ des Gebietes. Wir führen einen Zugversuch durch, indem wir durch eine Neumann-Randbedingung eine Flächenkraft am oberen Ende $\Gamma_N = \{\mathbf{x} \in \partial\Omega: \mathbf{x}_3 = 10\}$ auftragen. Die Flächenkraft wählen wir gemäß

$$\ell(t, \mathbf{v}) = t \int_{\Gamma_N} \mathbf{t}_N(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{a} , \quad \mathbf{t}_n(\mathbf{x}) = (0, 0, -1)^T .$$

Für die verschiedenen Konvergenzuntersuchungen definieren wir einige spezielle Punkte aus Ω , das sind (vgl. Abb. 7.1)

$$\begin{aligned} P_1 &= (8.5, 24.5, 6)^T , & P_2 &= (7, 23, 9)^T , & P_3 &= (11, 27, 1)^T , \\ P_4 &= (5, 28, 10)^T , & P_5 &= (7, 32, 7)^T , & P_6 &= (6.5, 20.5, 8)^T . \end{aligned}$$

Die Materialparameter sind, wenn nicht anders angegeben, wie in Tabelle 7.1 gewählt. Für das hier untersuchte finite Cosserat-Modell ist der Fall $\mu_c = 0$ von Interesse. Im Gegensatz zum infinitesimalen Modell sind die Verschiebungen und Rotationen für diesen Fall immer noch gekoppelt.

Lamé Konstante	λ	110743.82	[N/mm ²]
Schermodulus	μ	80193.80	[N/mm ²]
Cosserat-Kopplungskonstante	μ_c	0	[N/mm ²]
Cosserat interne Länge	L_c	1	[mm]

Tabelle 7.1: Materialparameter für das Testproblem.

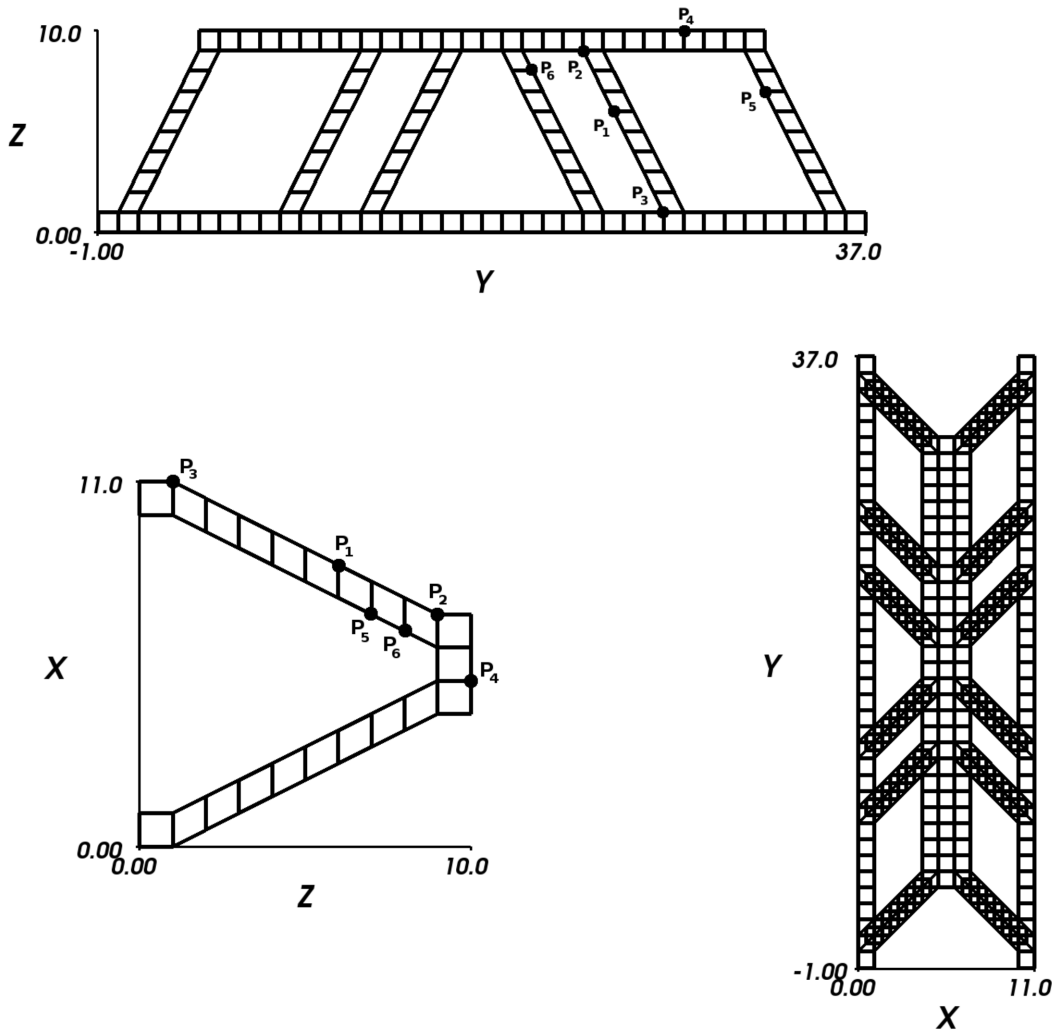


Abbildung 7.1: Grobgitter für ein Testproblem in 3D, dabei bezeichne X , Y bzw. Z die x_1 , x_2 bzw. x_3 -Richtung.

7.2 Numerische Überprüfung der Newton-Konvergenz

Für das beschriebene Problem haben wir die Konvergenz des Newton-Verfahrens untersucht (vgl. Tab. 7.2). Wir verfeinern das Testbeispiel dreimal uniform und verwenden als Diskretisierung Q1/Q1-Elemente, d. h. trilineare Ansätze in den Verschiebungen \mathbf{u} und Mikrorotationen $\bar{\mathbf{A}}$. Die finiten Rotationen $\bar{\mathbf{R}}$ sowie $\log \bar{\mathbf{R}}$ werden in den Knotenpunkten abgespeichert. In Tabelle 7.2 sind die Residuen der Verschiebungen und Mikrorotationen getrennt aufgeführt. Zeile 1 enthält das gesamte Residuum, Zeile 2 bzw. Zeile 3 den Anteil in \mathbf{u} bzw. $\bar{\mathbf{A}}$. Das lineare Gleichungssystem zur Berechnung der Newtonkorrektur wurde dabei nur inexakt gelöst. Bei einer relativen Residualreduktion von 10^{-5} oder bei einem Residuum mit Norm kleiner 10^{-10} wird der lineare Löseprozess beendet. Als Abbruchkriterium für das Newton-Verfahren haben wir das Erreichen einer absolute Residualnorm von kleiner als 10^{-8} verwendet. Es ist in Tabelle 7.2 zu erkennen, dass das Newton-Verfahren lokal quadratisch konvergiert.

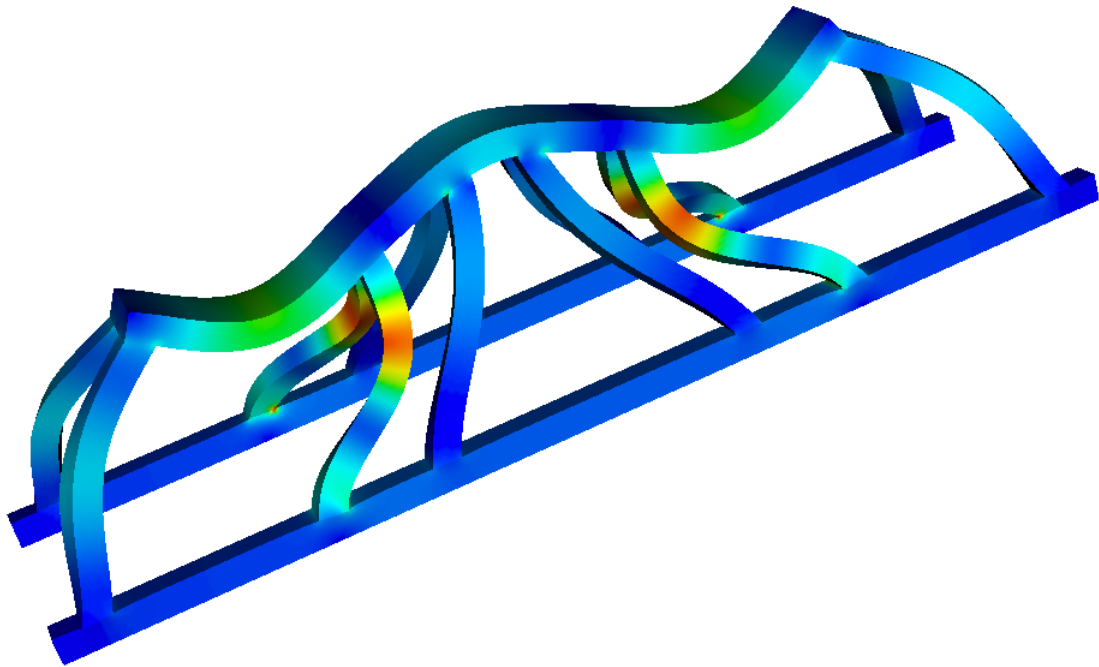


Abbildung 7.2: Deformierte Testgeometrie mit Darstellung der Norm des Gradienten der Mikrorotationen.

7.2 Numerische Überprüfung der Newton-Konvergenz

t	Residuum				
1.00e + 01	1.1 ₊₀₁	4.3 ₊₀₀	1.5 ₋₀₃	1.6 ₋₀₉	
	1.1 ₊₀₁	4.3 ₊₀₀	1.5 ₋₀₃	1.6 ₋₀₉	
	0.0 ₊₀₀	8.1 ₋₀₂	2.6 ₋₀₅	1.9 ₋₁₁	
2.67e + 01	1.9 ₊₀₁	3.6 ₋₀₂	7.4 ₋₀₇	1.4 ₋₁₀	
	1.9 ₊₀₁	3.6 ₋₀₂	7.4 ₋₀₇	1.4 ₋₁₀	
	5.1 ₋₀₁	4.7 ₋₀₄	8.9 ₋₀₉	5.4 ₋₁₂	
5.44e + 01	5.6 ₊₀₁	4.8 ₋₀₁	9.1 ₋₀₅	1.7 ₋₁₀	
	5.6 ₊₀₁	4.8 ₋₀₁	9.1 ₋₀₅	1.7 ₋₁₀	
	2.0 ₊₀₀	4.8 ₋₀₃	1.3 ₋₀₆	7.5 ₋₁₂	
1.01e + 02	1.7 ₊₀₂	1.9 ₊₀₁	6.0 ₋₀₂	2.7 ₋₀₄	2.8 ₋₁₀
	1.7 ₊₀₂	1.9 ₊₀₁	6.0 ₋₀₂	2.7 ₋₀₄	2.7 ₋₁₀
	7.1 ₊₀₀	2.0 ₋₀₁	1.0 ₋₀₃	2.3 ₋₀₆	8.7 ₋₁₁
1.51e + 02	2.8 ₊₀₂	2.2 ₊₀₁	1.0 ₋₀₁	4.7 ₋₀₄	8.0 ₋₁₀
	2.8 ₊₀₂	2.2 ₊₀₁	1.0 ₋₀₁	4.7 ₋₀₄	7.1 ₋₁₀
	1.5 ₊₀₁	6.9 ₋₀₁	2.2 ₋₀₃	7.1 ₋₀₆	3.6 ₋₁₀
...					
7.51e + 02	2.8 ₊₀₂	5.8 ₊₀₀	2.0 ₋₀₂	1.7 ₋₀₇	9.6 ₋₁₀
	2.6 ₊₀₂	5.6 ₊₀₀	2.0 ₋₀₂	2.5 ₋₀₈	9.0 ₋₁₀
	1.2 ₊₀₂	1.3 ₊₀₀	1.4 ₋₀₃	1.7 ₋₀₇	3.1 ₋₁₀
8.01e + 02	3.3 ₊₀₂	6.7 ₊₀₀	3.1 ₋₀₂	3.4 ₋₀₇	1.0 ₋₀₉
	2.9 ₊₀₂	6.5 ₊₀₀	3.1 ₋₀₂	6.4 ₋₀₈	9.6 ₋₁₀
	1.4 ₊₀₂	1.6 ₊₀₀	1.8 ₋₀₃	3.3 ₋₀₇	3.7 ₋₁₀
8.51e + 02	3.8 ₊₀₂	7.8 ₊₀₀	5.1 ₋₀₂	8.6 ₋₀₇	1.2 ₋₀₉
	3.4 ₊₀₂	7.6 ₊₀₀	5.1 ₋₀₂	2.3 ₋₀₇	1.1 ₋₀₉
	1.6 ₊₀₂	1.9 ₊₀₀	2.3 ₋₀₃	8.3 ₋₀₇	4.3 ₋₁₀
9.01e + 02	4.4 ₊₀₂	9.5 ₊₀₀	8.8 ₋₀₂	2.4 ₋₀₆	1.4 ₋₀₉
	4.0 ₊₀₂	9.2 ₊₀₀	8.8 ₋₀₂	9.8 ₋₀₇	1.2 ₋₀₉
	1.9 ₊₀₂	2.4 ₊₀₀	3.4 ₋₀₃	2.2 ₋₀₆	6.1 ₋₁₀
9.51e + 02	5.2 ₊₀₂	1.2 ₊₀₁	1.5 ₋₀₁	6.3 ₋₀₆	1.8 ₋₀₉
	4.7 ₊₀₂	1.2 ₊₀₁	1.5 ₋₀₁	3.5 ₋₀₆	1.3 ₋₀₉
	2.2 ₊₀₂	3.0 ₊₀₀	5.2 ₋₀₃	5.2 ₋₀₆	1.2 ₋₀₉
1.00e + 03	6.0 ₊₀₂	1.5 ₊₀₁	2.6 ₋₀₁	1.2 ₋₀₅	2.9 ₋₀₉
	5.5 ₊₀₂	1.4 ₊₀₁	2.6 ₋₀₁	8.0 ₋₀₆	1.4 ₋₀₉
	2.5 ₊₀₂	3.9 ₊₀₀	7.4 ₋₀₃	9.5 ₋₀₆	2.5 ₋₀₉
1.05e + 03	7.0 ₊₀₂	1.8 ₊₀₁	3.9 ₋₀₁	1.7 ₋₀₅	4.3 ₋₀₉
	6.4 ₊₀₂	1.8 ₊₀₁	3.9 ₋₀₁	1.2 ₋₀₅	1.5 ₋₀₉
	2.9 ₊₀₂	4.9 ₊₀₀	9.1 ₋₀₃	1.3 ₋₀₅	4.1 ₋₀₉
1.10e + 03	8.0 ₊₀₂	2.1 ₊₀₁	5.6 ₋₀₁	2.4 ₋₀₅	7.1 ₋₀₉
	7.3 ₊₀₂	2.0 ₊₀₁	5.6 ₋₀₁	1.8 ₋₀₅	1.7 ₋₀₉
	3.3 ₊₀₂	6.1 ₊₀₀	1.0 ₋₀₂	1.6 ₋₀₅	6.8 ₋₀₉

Tabelle 7.2: Konvergenzgeschichte des Newton-Verfahrens (1. Zeile: Gesamtresiduum, 2. Zeile: Residuum in \mathbf{u} , 3. Zeile: Residuum in \bar{A}) der Q1/Q1-Diskretisierung auf Level 3.

7.3 Konvergenz im Ort für verschiedene Diskretisierungen

In Abb. 7.4 und 7.5 untersuchen wir in Abhängigkeit der verwendeten Diskretisierung (Q1/Q1, Q2/Q2 oder Q2/Q1) die Konvergenz bei Verfeinerung im Ort. Für den Vergleich der Ergebnisse sind in den Tabellen 7.3, 7.4 und 7.5 die Anzahl der Freiheitsgrade der verschiedenen Diskretisierung aufgelistet. Abb. 7.4 und 7.5 zeigen grafisch, dass die Konvergenz der zweiten Komponente der Mikrorotation im Kontrollpunkt P_5 monoton ist. In Tabelle 7.6 wählen wir daher als Referenzwert, das Ergebnis der Q2/Q2-Diskretisierung nach dreimaliger uniformer Verfeinerung. Die einfachen Q1/Q1-Elemente liefern erst ab 967 626 Unbekannten einen Diskretisierungsfehler unter 5 Prozent, wohingegen die beiden anderen Diskretisierung bereits auf dem Grobgitter diese Genauigkeit erreichen. Die Ergebnisse bei Verwendung der Q2/Q1- bzw. Q1/Q1-Elemente zeigen vergleichbare Genauigkeit.

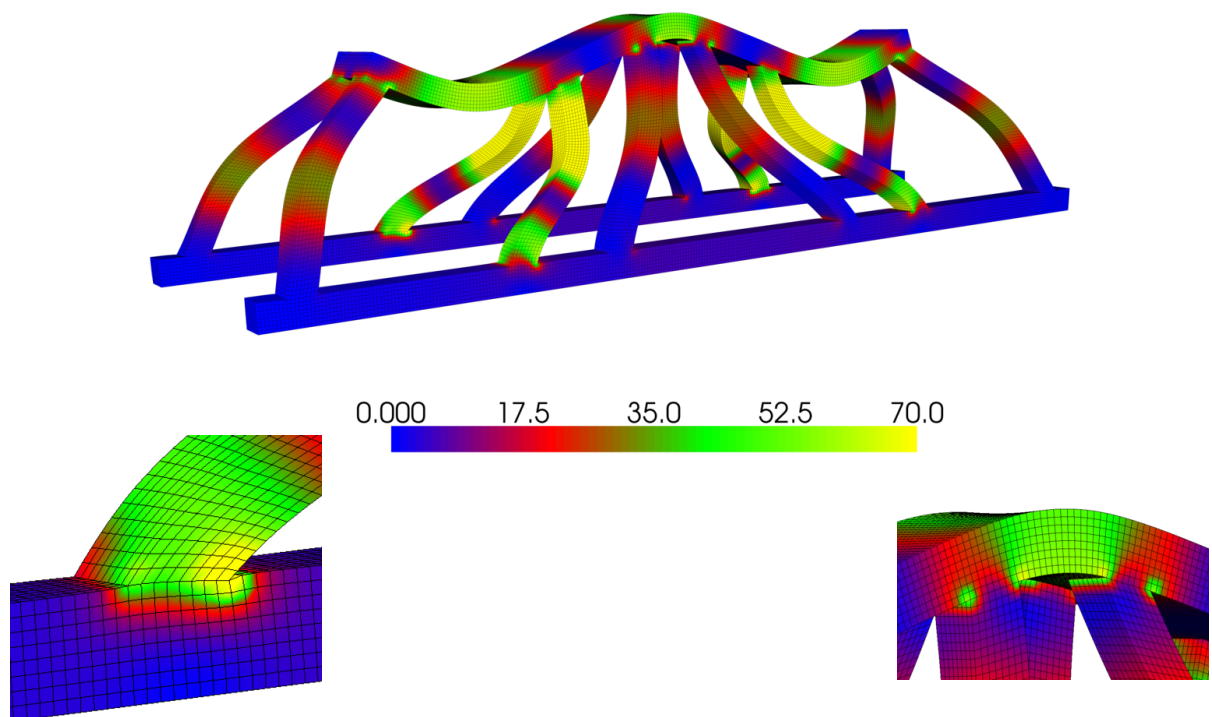


Abbildung 7.3: $\frac{1}{\text{vol}(\Omega_C)} \int_{\Omega_C} |D_{\mathbf{x}} \bar{R}(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$ nach dreimaliger uniformer Verfeinerung für $T = 1500$.

7.3 Konvergenz im Ort für verschiedene Diskretisierungen

Verfeinerungslevel	#Zellen	#DoFs (\mathbf{u}, \bar{A})	#DoFs \bar{R}
0	256	10 104	15 696
		·8	·2.5
1	2 048	25 218	37 827
		·8	·5.8
2	16 384	145 770	218 655
		·8	·6.6
3	131 072	967 626	1 451 439
		·8	·7.2
4	1 048 576	6 998 730	10 498 095

Tabelle 7.3: Freiheitsgrade der Q1/Q1-Diskretisierung für Testproblem.

Verfeinerungslevel	#Zellen	#DoFs (\mathbf{u}, \bar{A})	#DoFs \bar{R}
0	256	21 480	15 696
		·8	·2.6
1	2 048	55 530	37 827
		·8	·6.1
2	16 384	338 538	218 655
		·8	·6.9
3	131 072	2 324 106	1 451 439
		·8	·7.4
4	1 048 576	17 134 410	10 498 095

Tabelle 7.4: Freiheitsgrade der Q2/Q1-Diskretisierung für Testproblem.

Verfeinerungslevel	#Zellen	#DoFs (\mathbf{u}, \bar{A})	#DoFs \bar{R}
0	256	32 424	48 636
		·8	·2.6
1	2 048	85 842	128 763
		·8	·6.1
2	16 384	531 306	796 959
		·8	·6.9
3	131 072	3 680 586	5 520 879

Tabelle 7.5: Freiheitsgrade der Q2/Q2 Diskretisierung für Testproblem.

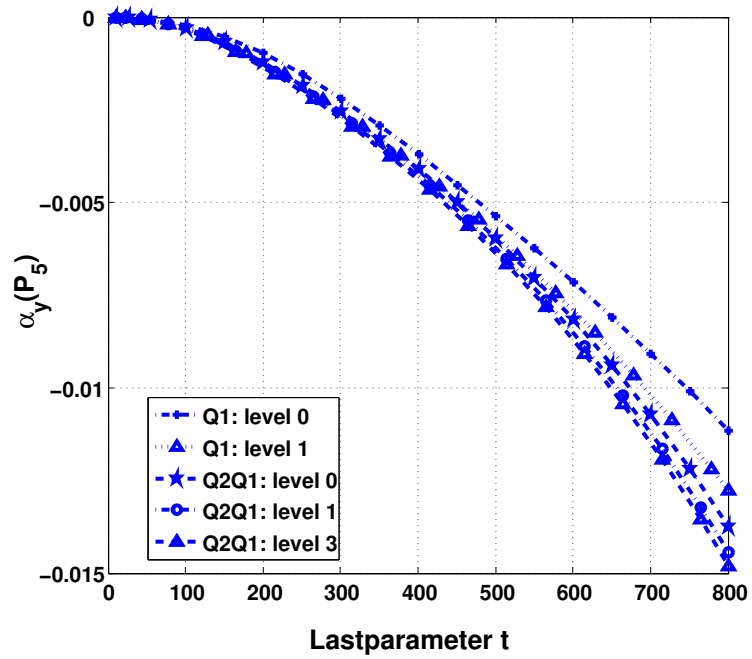


Abbildung 7.4: Konvergenz im Ort für die zweite Komponente der Mikrorotation im Punkt P_5 .

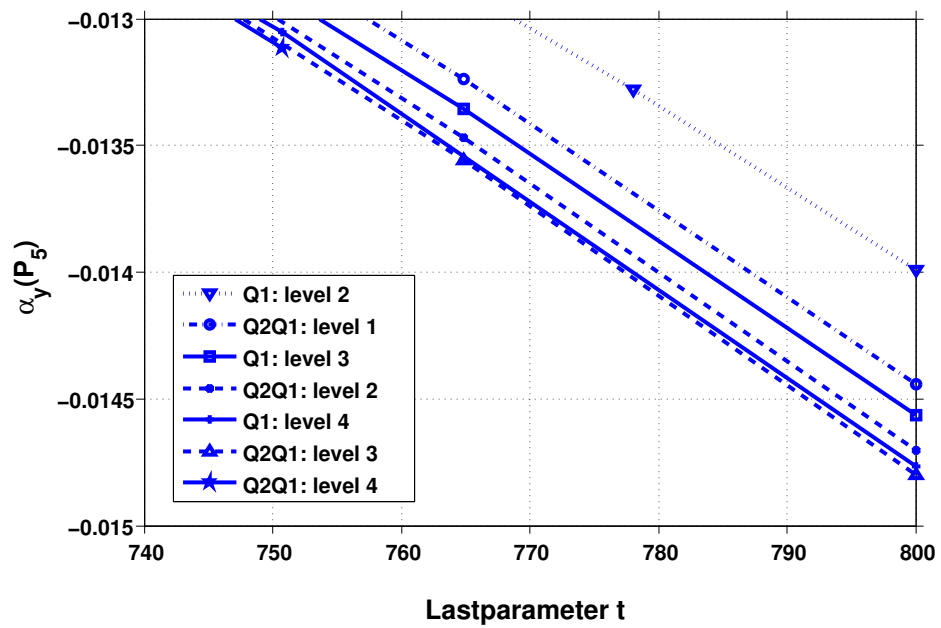


Abbildung 7.5: Konvergenz im Ort für die zweite Komponente der Mikrorotation im Punkt P_5 .

7.3 Konvergenz im Ort für verschiedene Diskretisierungen

Diskretisierung	Level	$\mathbf{u}_z(P_1)$	\approx Fehler	\approx Fehler in Prozent
Q2/Q2	3	-1.000394	*	*
Q2/Q1	3	-1.000063	0.000331	0.03
Q2/Q2	2	-0.996947	0.003447	0.34
Q2/Q1	2	-0.995935	0.004459	0.45
Q1/Q1	4	-0.995421	0.004973	0.50
Q2/Q2	1	-0.989712	0.010682	1.07
Q2/Q1	1	-0.986522	0.013872	1.39
Q1/Q1	3	-0.979658	0.020736	2.07
Q2/Q2	0	-0.971024	0.029370	2.94
Q2/Q1	0	-0.961422	0.038972	3.90
Q1/Q1	2	-0.933022	0.067372	6.73
Q1/Q1	1	-0.823055	0.177339	17.73
Q1/Q1	0	-0.638699	0.361695	36.16

Tabelle 7.6: Konvergenzuntersuchung für die z -Komponente der Verschiebung im Kontrollpunkt P_1 für die Last $t = 800$. Wir nehmen an, dass für feste Diskretisierung Q1/Q1, Q2/Q1 bzw. Q2/Q2 die Werte der Punktauswertung $\mathbf{u}_z(P_1)$ für immer feinere Gitter monoton fallend sind. Daher verwenden wir das Ergebnis der Q2/Q2-Elemente nach dreimaliger Verfeinerung als Referenzwert.

	$P = 64$	$P = 8$	$P = 1$
<hr/>			
Q1/Q1			
<hr/>			
Level 1	0.46	0.49	0.60
Level 2	0.48	0.64	1.70
Level 3	0.62	1.69	
Level 4	1.61		
<hr/>			
Q2/Q1			
<hr/>			
Level 1	0.47	0.58	1.30
Level 2	0.53	0.99	
Level 3	0.91		
<hr/>			
Q2/Q2			
<hr/>			
Level 1	0.49	0.73	2.40
Level 2	0.60	1.54	
Level 3	1.36		
<hr/>			

Tabelle 7.7: Speicherbedarf in Gigabyte pro Prozess für die numerische Simulation des finiten Cosserat Modells für die verschiedenen Diskretisierung am Beispiel der 3D Brückenkonfiguration.

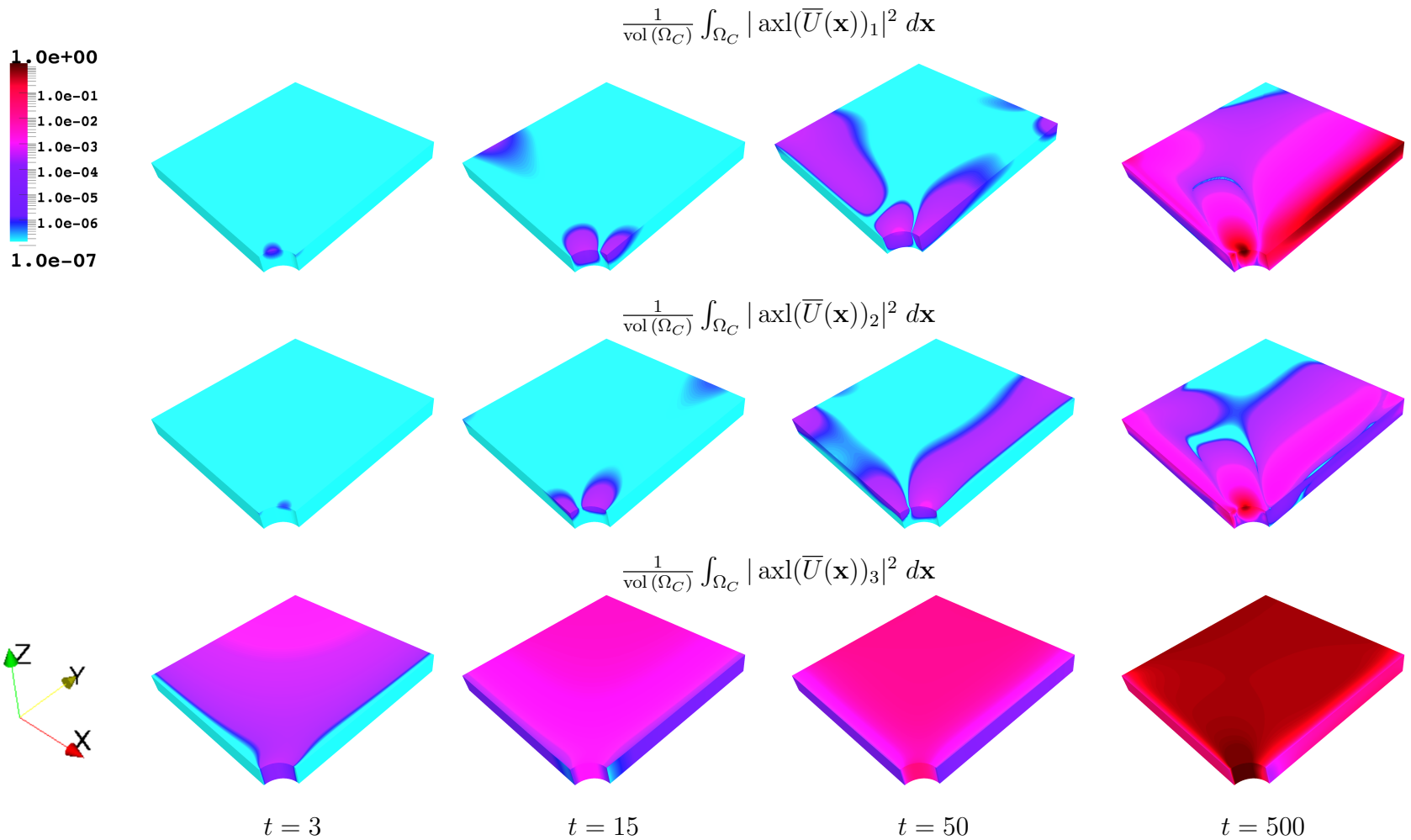


Abbildung 7.6: Numerische Simulation des in Abschnitt 1.4 beschriebenen geometrisch exakten Cosserat-Modell der Lochscheibe 3D aus Abschnitt 4.1. Randbedingungen sind wie in der Studie des infinitesimalen Modell gewählt. Hier studieren wir die Größe $\text{skew}(\bar{U}) = \text{skew}(\bar{R}^T F)$ für die Cosserat-Parameter $\mu_c = 0$ und $L_c = 0.1$. Wir verwenden Q1/Q1-Elemente auf Level 3 mit $h_{\min} \approx 0.012$ und $h_{\max} \approx 0.28$. Für $t = 500$ wird die Lochscheibe in y -Richtung um 50% gestreckt.

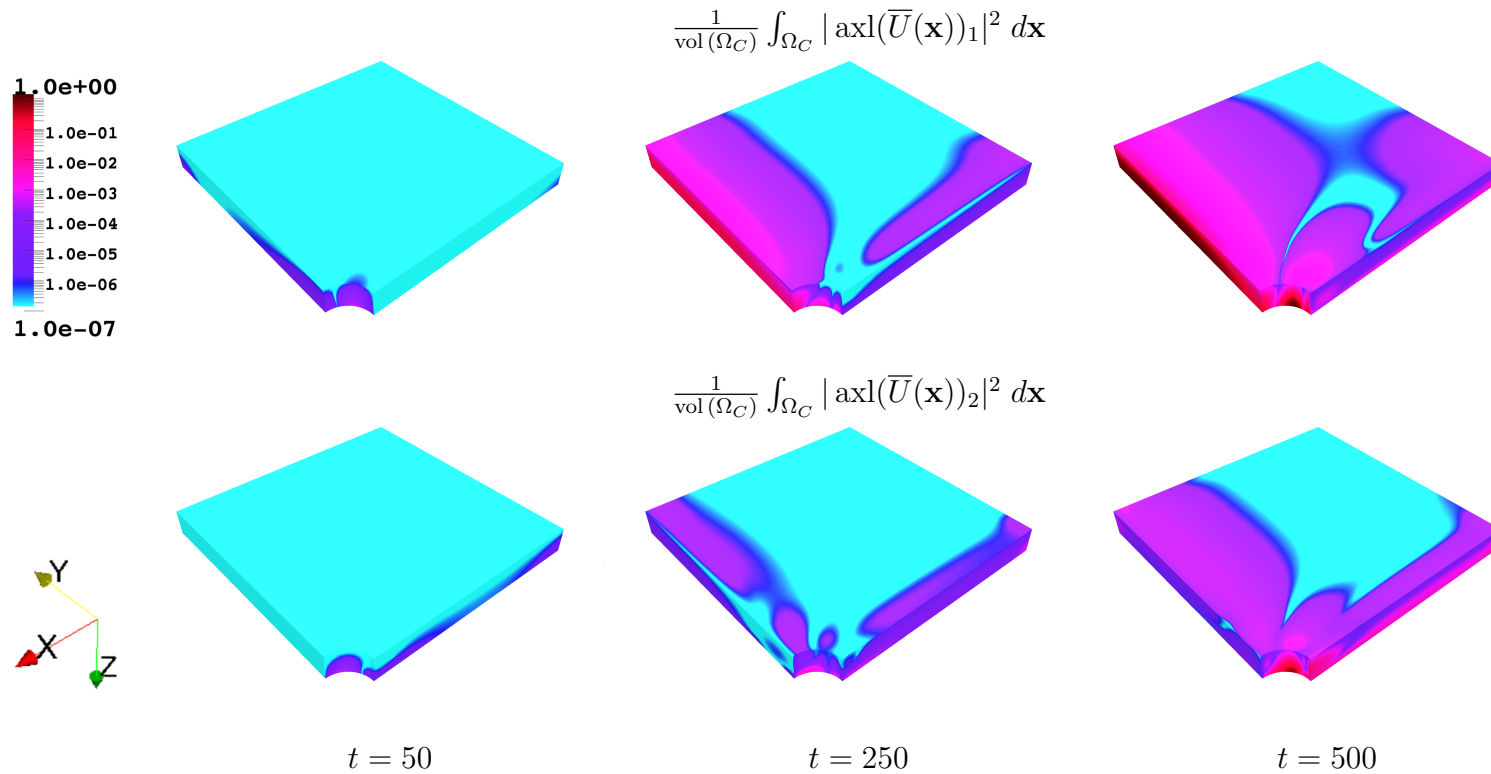


Abbildung 7.7: Numerische Simulation des in Abschnitt 1.4 beschriebenen geometrisch exakten Cosserat-Modell der Lochscheibe 3D aus Abschnitt 4.1. Randbedingungen sind wie in der Studie des infinitesimalen Modell gewählt. Hier studieren wir die Größe $\text{skew}(\bar{U}) = \text{skew}(\bar{R}^T F)$ für die Cosserat-Parameter $\mu_c = 0$ und $L_c = 0.1$. Wir verwenden Q1/Q1-Elemente auf Level 3 mit $h_{\min} \approx 0.012$ und $h_{\max} \approx 0.28$. Für $t = 500$ wird die Lochscheibe in y -Richtung um 50% gestreckt.

Anhang

A Orthogonalprojektionen und konvexe Potentiale

In Kapitel 2 wird gezeigt, dass sich das inkrementelle Problem der Cosserat-Plastizität als Minimierungsaufgabe darstellen lässt und die Äquivalenz zur variationellen Formulierung nachgewiesen. Dafür benötigen wir die folgenden Aussagen über Orthogonalprojektionen und konvexe Potenziale.

Für die weitere Betrachtung benötigen wir den Projektionssatz für konvexe Mengen.

Satz A.1 (Projektionssatz) *Sei \mathbf{H} ein (reeller) Hilbertraum mit dem Skalarprodukt $(\cdot, \cdot)_{\mathbf{H}}$ und $\mathbf{K} \subset \mathbf{H}$ nichtleer, abgeschlossen und konvex. Dann gibt es genau eine Abbildung $\mathbf{P}_{\mathbf{K}} : \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{K}$ mit*

$$\|\tau - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau)\|_{\mathbf{H}} = \inf_{\eta \in \mathbf{K}} \|\tau - \eta\|_{\mathbf{H}} \quad (\text{A.1a})$$

für alle $\tau \in \mathbf{H}$. Dabei ist für jedes $\tau \in \mathbf{H}$ das Bild $\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau) \in \mathbf{K}$ durch

$$(\tau - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau), \eta - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau))_{\mathbf{H}} \leq 0 \quad \text{für alle } \eta \in \mathbf{K} \quad (\text{A.1b})$$

charakterisiert. $\mathbf{P}_{\mathbf{K}} : \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{K}$ heißt Orthogonalprojektion von \mathbf{H} auf \mathbf{K} .

Beweis. Der Beweis findet sich in [Alt06, Projektionssatz 2.2]. □

Für den Beweis von Lemma A.3 benötigen wir eine einfache Folgerung des Projektionssatzes A.1.

Lemma A.2 *Die Orthogonalprojektion $\mathbf{P}_{\mathbf{K}}$ ist nicht-expansiv, d. h. für alle $\tau, \eta \in \mathbf{H}$ gilt:*

$$\|\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\eta)\|_{\mathbf{H}} \leq \|\tau - \eta\|_{\mathbf{H}} .$$

Beweis. Aus Ungleichung (A.1b) erhalten wir direkt

$$\begin{aligned} (\tau - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau), \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\eta) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau))_{\mathbf{H}} &\leq 0 , \\ (\eta - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\eta), \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\eta))_{\mathbf{H}} &\leq 0 , \end{aligned}$$

und damit auch, nach dem Einfügen einer komplizierten Null, das Ergebnis

$$\begin{aligned} \|\tau - \eta\|_{\mathbf{H}}^2 &= \|\tau - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau) - (\eta - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\eta)) + \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\eta)\|_{\mathbf{H}}^2 \\ &\geq 2 \left(\tau - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau) - (\eta - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\eta)), \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\eta) \right)_{\mathbf{H}} + \|\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\eta)\|_{\mathbf{H}}^2 \\ &\geq \|\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\tau) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\eta)\|_{\mathbf{H}}^2 . \end{aligned}$$

□

Lemma A.3 Sei \mathbf{H} ein (reeller) Hilbertraum. Des Weiteren sei $\mathbf{K} \subset \mathbf{H}$ eine nichtleere, abgeschlossene und konvexe Menge. Wir bezeichnen mit $\mathbf{P}_{\mathbf{K}}$ die Orthogonalprojektion von \mathbf{H} auf \mathbf{K} . Dann besitzt (mit $\boldsymbol{\tau} \in \mathbf{H}$) das Potenzial

$$\varphi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) = \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})\|_{\mathbf{H}}^2 \quad (\text{A.2})$$

die Gâteaux-Ableitung

$$D\varphi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})[\boldsymbol{\eta}] = (\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}), \boldsymbol{\eta})_{\mathbf{H}} .$$

Beweis. Wir folgen der Beweisidee in [HR99, Lemma 8.6]. Die Orthogonalprojektion ist charakterisiert durch

$$(\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}), \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}))_{\mathbf{H}} \leq 0 \text{ für alle } \boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{K} . \quad (\text{A.3})$$

(siehe Gleichung (A.1b) in Satz A.1). Die Gâteaux-Ableitung ist für $\boldsymbol{\eta} \in \mathbf{H}$ definiert durch

$$D\varphi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})[\boldsymbol{\eta}] = \lim_{t \rightarrow +0} \frac{1}{t} \left(\varphi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta}) - \varphi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) \right) .$$

Betrachten wir also die Differenz

$$\begin{aligned} & 2 \left(\varphi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta}) - \varphi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) \right) \\ &= \|\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) + \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) + t\boldsymbol{\eta} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta})\|_{\mathbf{H}}^2 - \|\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})\|_{\mathbf{H}}^2 \\ &= 2 \left(\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}), \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta}) \right)_{\mathbf{H}} \\ &\quad + 2t \left(\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}), \boldsymbol{\eta} \right)_{\mathbf{H}} \\ &\quad + \|\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) + t\boldsymbol{\eta} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta})\|_{\mathbf{H}}^2 . \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Für den letzten Summanden in (A.4) gilt wegen Lemma A.2

$$\begin{aligned} 0 &\leq \|\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) + t\boldsymbol{\eta} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta})\|_{\mathbf{H}}^2 \leq t^2 \|\boldsymbol{\eta}\|_{\mathbf{H}}^2 + \|\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta})\|_{\mathbf{H}}^2 \\ &\leq t^2 \|\boldsymbol{\eta}\|_{\mathbf{H}}^2 + \|\boldsymbol{\tau} - (\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta})\|_{\mathbf{H}}^2 \leq 2t^2 \|\boldsymbol{\eta}\|_{\mathbf{H}}^2 , \end{aligned}$$

sodass der Summand beim Grenzübergang verschwindet: $\frac{1}{t} \|\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) + t\boldsymbol{\eta} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta})\|_{\mathbf{H}}^2 \rightarrow 0$ für $t \rightarrow +0$. Für den Grenzübergang des ersten Summanden in (A.4), benötigen wir einerseits

$$\left(\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}), \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta}) \right)_{\mathbf{H}} \geq 0 ,$$

dies folgt aus Ungleichung (A.3). Andererseits gilt aber auch

$$\begin{aligned} 0 &\leq \left(\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}), \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta}) \right)_{\mathbf{H}} \\ &= - \left(\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta}) - \boldsymbol{\tau} + \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta}), \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta}) \right)_{\mathbf{H}} \\ &= - \|\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta})\|_{\mathbf{H}}^2 + \left(\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta}), \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta}) \right)_{\mathbf{H}} \\ &\leq -t \left(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta}) \right)_{\mathbf{H}} \leq |t| \|\boldsymbol{\eta}\|_{\mathbf{H}} \|\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta})\|_{\mathbf{H}} \leq |t|^2 \|\boldsymbol{\eta}\|_{\mathbf{H}}^2 \end{aligned}$$

wegen Ungleichung (A.3), sodass dieser Summand ebenfalls für $t \rightarrow +0$ verschwindet, d. h. $\frac{1}{t} \left(\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}), \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta}) \right)_{\mathbf{H}} \rightarrow 0$. Insgesamt ergibt sich

$$\lim_{t \rightarrow +0} \frac{1}{t} \left(\varphi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau} + t\boldsymbol{\eta}) - \varphi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) \right) = \left(\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}), \boldsymbol{\eta} \right)_{\mathbf{H}} .$$

□

Wir stellen nun noch ein Lemma für für Kapitel 2 bereit. Dazu definieren wir das Potenzial

$$\psi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) = \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\tau}\|_{\mathbf{H}}^2 - \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})\|_{\mathbf{H}}^2 . \quad (\text{A.5})$$

Lemma A.4 *Das Potenzial $\psi_{\mathbf{K}}$ in (A.5) ist konvex, nicht-negativ und es gilt*

$$D\psi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})[\boldsymbol{\eta}] = (\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}), \boldsymbol{\eta})_{\mathbf{H}} \quad \text{für alle } \boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\eta} \in \mathbf{H} .$$

Beweis. Aus $\psi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) = \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\tau}\|_{\mathbf{H}}^2 - \varphi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})$ folgt unter Verwendung von Lemma A.3

$$D\psi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta})[\boldsymbol{\tau}] = (\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\eta})_{\mathbf{H}} - D\varphi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta})[\boldsymbol{\tau}] = (\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta}), \boldsymbol{\tau})_{\mathbf{H}} .$$

Die Orthogonalprojektion $\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})$ von $\boldsymbol{\tau} \in \text{Sym}(3)$ ist charakterisiert durch

$$\left((\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})), (\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})) \right)_{\mathbf{H}} \leq 0 \quad \text{für alle } \boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{K} .$$

Daraus folgt für $\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\eta} \in \mathbf{H}$ die Abschätzung

$$\begin{aligned} & \psi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \psi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta}) - D\psi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta})[\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\eta}] \\ &= (\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}), \boldsymbol{\tau})_{\mathbf{H}} - \frac{1}{2} (\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}), \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}))_{\mathbf{H}} - (\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta}), \boldsymbol{\eta})_{\mathbf{H}} \\ & \quad + \frac{1}{2} (\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta}), \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta}))_{\mathbf{H}} - (\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta}), \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\eta})_{\mathbf{H}} \\ &= \left((\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta})), (\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})) \right)_{\mathbf{H}} + \frac{1}{2} \|\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta})\|_{\mathbf{H}}^2 \\ &\geq \frac{1}{2} \|\mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\eta})\|_{\mathbf{H}}^2 \geq 0 . \end{aligned}$$

Somit ist $\psi_{\mathbf{K}}$ nach Definition konvex und ferner $D\psi_{\mathbf{K}}$ monoton. Da $\boldsymbol{\sigma}^* = \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})$ eine Minimalstelle von $\varphi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\sigma}) = \|\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\sigma}\|_{\mathbf{H}}^2$ für alle $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{K}$ ist, erhalten wir wegen $\mathbf{0} \in \mathbf{K}$

$$\psi_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau}) = \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\tau}\|_{\mathbf{H}}^2 - \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\tau} - \mathbf{P}_{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\tau})\|_{\mathbf{H}}^2 \geq \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\tau}\|_{\mathbf{H}}^2 - \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\tau} - \mathbf{0}\|_{\mathbf{H}}^2 = 0 .$$

□

Für die Verwendung in Kapitel 1 führen wir noch den Satz von Lax-Milgram an.

Satz A.5 (Lax-Milgram) Sei \mathbf{K} eine abgeschlossene, konvexe Menge in einem Hilbert-Raum \mathbf{H} und

$$a : \mathbf{H} \times \mathbf{H} \longrightarrow \mathbb{R}$$

eine stetige Bilinearform. Außerdem sei $a(\cdot, \cdot)$ elliptisch, d. h. es existiert eine Konstante $c > 0$, sodass

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) \geq c \|\mathbf{u}\|_{\mathbf{H}}^2, \quad \mathbf{u} \in \mathbf{H}.$$

Ferner sei $\ell \in \mathbf{H}'$ ein stetiges lineares Funktional aus dem Dualraum von \mathbf{H} . Dann hat das Funktional

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

genau eine Minimalstelle in \mathbf{K} .

Beweis. [ET76, Remark 1.1]

□

B Studie der parallelen Skalierbarkeit für verschiedene Diskretisierungen

Anzahl der Zellen	131 072	1 048 576	8 388 608
Anzahl der Prozessoren	32	256	256
Parallelrechner	OTTO	IC1	IC1
Anzahl der Unbekannten	898 614	6 736 998	52 107 462
Anzahl der Gauß-Punkt Daten	5 242 880	41 943 040	335 544 320
Gesamtzeit	0 : 55 h	1 : 21 h	11 : 27 h
Lastschritte	49	49	49
Anzahl der Newton-Schritte	212	220	232
Anzahl der Mehrgitter-Zyklen	1743	2091	2364

Tabelle B.1: Laufzeit- und Leistungsübersicht für Q1/Q1-Elemente.

Anzahl der Zellen	1 048 576	1 048 576	1 048 576	1 048 576
Anzahl der Prozessoren	256	256	256	256
Parallelrechner	IC1	IC1	IC1	IC1
Anzahl der Unbekannten	6 736 998	6 736 998	6 736 998	6 736 998
Anzahl der Gauß-Punkt Daten	41 943 040	41 943 040	41 943 040	41 943 040
Gesamtzeit	1 : 21 h	2 : 32 h	4 : 38 h	7 : 56 h
Lastschritte	49	98	196	392
Anzahl der Newton-Schritte	220	409	767	1336
Anzahl der Mehrgitter-Zyklen	2091	3834	7118	12143

Tabelle B.2: Laufzeit- und Leistungsübersicht für Q1/Q1-Elemente.

Anzahl der Zellen	16 384	131 072	1 048 576
Anzahl der Prozessoren	72	128	256
Parallelrechner	OTTO	IC1	IC1
Anzahl der Unbekannten	302 250	2 189 646	16 618 134
Anzahl der Gauß-Punkt Daten	2 211 840	17 694 720	141 557 760
Gesamtzeit	0 : 32 h	2 : 09 h	11 : 23 h
Lastschritte	49	49	49
Anzahl der Newton-Schritte	214	222	237
Anzahl der Mehrgitter-Zyklen	2297	2911	4640

Tabelle B.3: Laufzeit- und Leistungsübersicht für Q2/Q1-Elemente.

Anzahl der Zellen	131 072	131 072	131 072	131 072
Anzahl der Prozessoren	128	128	128	32
Parallelrechner	IC1	IC1	IC1	OTTO
Anzahl der Unbekannten	2 189 646	2 189 646	2 189 646	2 189 646
Anzahl der Gauß-Punkt Daten	17 694 720	17 694 720	17 694 720	17 694 720
Gesamtzeit	2 : 09 h	3 : 32 h	6 : 29 h	37 : 12 h
Lastschritte	49	98	196	392
Anzahl der Newton-Schritte	222	420	763	1335
Anzahl der Mehrgitter-Zyklen	2911	4692	8570	14694

Tabelle B.4: Laufzeit- und Leistungsübersicht für Q2/Q1-Elemente.

C Studie der Konvergenz in h und Δt

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
16 384	0.02349189	0.02349083 ^{-1.06e-06}	0.02349030 ^{-5.30e-07}
131 072	0.02356413 ^{+7.22e-05}	0.02356303 ^{-1.10e-06} _{+7.22e-05}	0.02356247 ^{-5.60e-07} _{+7.22e-05}
1 048 576	0.02358672 ^{+2.26e-05}	0.02358560 ^{-1.12e-06} _{+2.26e-05}	0.02358504 ^{-5.60e-07} _{+2.26e-05}

Tabelle C.1: Asymptotische Konvergenz für $u_y(P_4)$ mit Q1/Q1-Elementen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
2 048	0.02358008	0.02357897 ^{-1.11e-06}	0.02357841 ^{-5.60e-07}
16 384	0.02359313 ^{+1.31e-05}	0.02359201 ^{-1.12e-06} _{+1.30e-05}	0.02359144 ^{-5.70e-07} _{+1.30e-05}
131 072	0.02359509 ^{+1.96e-06}	0.02359397 ^{-1.12e-06} _{+1.96e-06}	0.02359340 ^{-5.70e-07} _{+1.96e-06}

Tabelle C.2: Asymptotische Konvergenz für $u_y(P_4)$ mit Q2/Q1-Elementen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
16 384	0.003768278	0.003768666 ^{+3.88e-07}	0.003768864 ^{+1.98e-07}
131 072	0.003736124 ^{-3.22e-05}	0.003736530 ^{+4.06e-07} _{-3.21e-05}	0.003736736 ^{+2.06e-07} _{-3.21e-05}
1 048 576	0.003726115 ^{-1.00e-05}	0.003726528 ^{+4.13e-07} _{-1.00e-05}	0.003726738 ^{+2.10e-07} _{-1.00e-05}

Tabelle C.3: Asymptotische Konvergenz für $u_x(P_5)$ mit Q1/Q1-Elementen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
2 048	0.003728892	0.003729303 ^{+4.11e-07}	0.003729512 ^{+2.09e-07}
16 384	0.003723259 ^{-5.63e-06}	0.003723675 ^{+4.16e-07} _{-5.63e-06}	0.003723887 ^{+2.12e-07} _{-5.62e-06}
131 072	0.003722416 ^{-8.43e-07}	0.003722832 ^{+4.16e-07} _{-8.43e-07}	0.003723044 ^{+2.12e-07} _{-8.43e-07}

Tabelle C.4: Asymptotische Konvergenz für $u_x(P_5)$ mit Q2/Q1-Elementen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
16 384	-0.113479	-0.113455 ^{+2.40e-05}	-0.113443 ^{+1.20e-05}
131 072	-0.114676 _{-1.20e-03}	-0.114652 ^{+2.40e-05} _{-1.20e-03}	-0.114639 ^{+1.30e-05} _{-1.20e-03}
1 048 576	-0.115020 _{-3.44e-04}	-0.114995 ^{+2.50e-05} _{-3.43e-04}	-0.114982 ^{+1.30e-05} _{-3.43e-04}

Tabelle C.5: Asymptotische Konvergenz für $\bar{A}_x(P_{14})$ mit Q1/Q1-Elementen. Die Werte wurden aus Darstellungsgründen mit einem Faktor 1000 skaliert.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
2 048	-0.117490	-0.117465 ^{+2.50e-05}	-0.117452 ^{+1.30e-05}
16 384	-0.115756 ^{+1.73e-03}	-0.115731 ^{+2.50e-05} ^{+1.73e-03}	-0.115719 ^{+1.20e-05} ^{+1.73e-03}
131 072	-0.115301 ^{+4.55e-04}	-0.115276 ^{+2.50e-05} ^{+4.55e-04}	-0.115263 ^{+1.30e-05} ^{+4.56e-04}

Tabelle C.6: Asymptotische Konvergenz für $\bar{A}_x(P_{14})$ mit Q2/Q1-Elementen. Die Werte wurden aus Darstellungsgründen mit einem Faktor 1000 skaliert.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
16 384	0.0005813369	0.0005811710 ^{-1.66e-07}	0.0005810865 ^{-8.45e-08}
131 072	0.0005918542 ^{+1.05e-05}	0.0005916828 ^{-1.71e-07} ^{+1.05e-05}	0.0005915954 ^{-8.74e-08} ^{+1.05e-05}
1 048 576	0.0005951442 ^{+3.29e-06}	0.0005949705 ^{-1.74e-07} ^{+3.29e-06}	0.0005948819 ^{-8.86e-08} ^{+3.29e-06}

Tabelle C.7: Asymptotische Konvergenz für $\bar{A}_z(P_5)$ mit Q1/Q1-Elementen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
2 048	0.0005945986	0.0005944255 ^{-1.73e-07}	0.0005943374 ^{-8.81e-08}
16 384	0.0005962102 ^{+1.61e-06}	0.0005960353 ^{-1.75e-07} ^{+1.61e-06}	0.0005959461 ^{-8.92e-08} ^{+1.61e-06}
131 072	0.0005964065 ^{+1.96e-07}	0.0005962318 ^{-1.75e-07} ^{+1.97e-07}	0.0005961427 ^{-8.91e-08} ^{+1.97e-07}

Tabelle C.8: Asymptotische Konvergenz für $\bar{A}_z(P_5)$ mit Q2/Q1-Elementen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
16 384	-0.01794175	-0.01792692 ^{+1.48e-05}	-0.01791934 ^{+7.58e-06}
131 072	-0.01865296 _{-7.11e-04}	-0.01863044 ^{+2.25e-05} _{-7.04e-04}	-0.01861868 ^{+1.18e-05} _{-6.99e-04}
1 048 576	-0.01852486 _{+1.28e-04}	-0.01849058 ^{+3.43e-05} _{+1.40e-04}	-0.01847253 ^{+1.80e-05} _{+1.46e-04}

Tabelle C.9: Asymptotische Konvergenz für $0.5 \cdot (\sigma_{xy}(p'_7) - \sigma_{yx}(p'_7))$ mit Q1/Q1-Elementen.

Zellen	98 Schritte	196 Schritte	392 Schritte
2 048	-0.01875813	-0.01873601 ^{+2.21e-05}	-0.01872454 ^{+1.15e-05}
16 384	-0.01877614 _{-1.80e-05}	-0.01875623 ^{+1.99e-05} _{-2.02e-05}	-0.01874567 ^{+1.06e-05} _{-2.11e-05}
131 072	-0.01817638 _{+6.00e-04}	-0.01814728 ^{+2.91e-05} _{+6.09e-04}	-0.01813011 ^{+1.72e-05} _{+6.16e-04}

Tabelle C.10: Asymptotische Konvergenz für $0.5 \cdot (\sigma_{xy}(p'_7) - \sigma_{yx}(p'_7))$ mit Q2/Q1-Elementen.

D Lie-Gruppen und Lie-Algebren

In diesem Abschnitt stellen wir die für die numerische Behandlung des finiten Cosserat-Modells benötigten geometrischen Begriffe aus der Lie-Theorie zur Verfügung. Für die Lie-Theorie verwenden wir soweit möglich die Bezeichnungen aus [OW00, IMKNZ00]. Wir beschränken uns in der Darstellung ausschließlich auf Untergruppen der regulären Matrizen mit der Matrixmultiplikation als Verknüpfung.

Eine Lie-Gruppe (G, \cdot) ist einerseits eine Gruppe, andererseits lässt sie sich als (glatte) Mannigfaltigkeit interpretieren. Hierbei sind insbesondere die Gruppenverknüpfung und die Bildung der Inversen differenzierbare Funktionen. Wir bezeichnen mit \mathbf{I} das Einselement der Gruppe.

Die Tangentialmannigfaltigkeit von G in \mathbf{I} bezeichnen wir mit $\mathfrak{g} = TG|_{\mathbf{I}}$. Seien c_1, c_2 zwei glatte Kurven in G , sodass $c_1(0) = c_2(0) = \mathbf{I}$ und $c_1'(0) = A$, $c_2'(0) = B$ für $A, B \in TG|_{\mathbf{I}}$, dann definieren wir die Lie-Klammer $[\cdot, \cdot] : TG|_{\mathbf{I}} \times TG|_{\mathbf{I}} \rightarrow TG|_{\mathbf{I}}$ durch

$$[A, B] = \frac{\partial^2}{\partial t \partial s} \Big|_{t=s=0} c_1(t) c_2(s) c_1(t)^{-1} .$$

\mathfrak{g} versehen mit $[\cdot, \cdot]$ ist die zu G korrespondierende Lie-Algebra.

Lemma D.1 *Die Lie-Klammer erfüllt die folgenden Eigenschaften*

$$[A, B] = -[B, A] , \tag{D.1}$$

$$[\alpha A, \beta B] = \alpha[A, B] + \beta[A, B] , \tag{D.2}$$

$$0 = [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] . \tag{D.3}$$

Beweis. Das Lemma wurde aus [IMKNZ00, Lemma 2.4] übernommen. □
Wir definieren für $S \in G$ die Gruppenoperation

$$\begin{aligned} L_S : G &\longrightarrow G , \\ T &\longmapsto S \cdot T , \end{aligned}$$

deren Tangentialabbildung einen Isomorphismus zwischen \mathfrak{g} und $TG|_S$ bildet. Wir haben

$$L'_S(\mathfrak{g}) = TG|_S .$$

Die Exponentialabbildung

$$\begin{aligned} \exp : \mathfrak{g} &\longrightarrow G , \\ A &\longrightarrow \exp(A) , \end{aligned}$$

verbindet die Lie-Gruppe G mit der Lie-Algebra \mathfrak{g} lokal diffeomorph. Für ein Element der Lie-Algebra $A \in \mathfrak{g}$ und das links invariante Vektorfeld $X_A : T \rightarrow L'_S(A)$ bestimmen wir eine Kurve $\gamma_A(t)$ als Lösung des Anfangswertproblems

$$\begin{aligned} \gamma'_A(t) &= X_A(\gamma_A(t)) , \\ \gamma_A(0) &= \mathbf{I} . \end{aligned}$$

Die Exponentialabbildung ist dann definiert durch

$$\exp(A) = \gamma_A(1) .$$

Für $A \in \mathfrak{so}(3)$ stimmt die Exponentialabbildung mit der matrixwertigen Exponentialfunktion

$$\exp(A) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k$$

überein. Für $A, B \in \mathfrak{g}$ definieren wir das Differential der Exponentialabbildung

$$\begin{aligned} d \exp_A^l : \mathfrak{g} &\longrightarrow \mathfrak{g} \\ d \exp_A^r : \mathfrak{g} &\longrightarrow \mathfrak{g} \end{aligned}$$

mit

$$d \exp_A^l(B) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k+1)!} \operatorname{ad}_A^k(B) = B - \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{6}[A, [A, B]] - \dots \quad (\text{D.4a})$$

$$d \exp_A^r(B) = B + \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{6}[A, [A, B]] - \dots , \quad (\text{D.4b})$$

wobei $\operatorname{ad}_A^k(B) = [A, \operatorname{ad}_A^{k-1}(B)]$ für $k = 1, 2, 3, \dots$ und $\operatorname{ad}_A^0(B) = B$ mit $[A, B] = AB - BA$. Damit erhalten wir die Identitäten

$$\begin{aligned} d \exp_A^r(0) &= 0 , \\ d \exp_0^r(B) &= B \end{aligned}$$

und

$$\frac{d}{dt} \exp(A(t)) = \exp(A(t)) d \exp_{A(t)}^l(A'(t)) , \quad (\text{D.5a})$$

$$\frac{d}{dt} \exp(A(t)) = d \exp_{A(t)}^r(A'(t)) \exp(A(t)) . \quad (\text{D.5b})$$

und wir haben das

Lemma D.2 Für die Richtungsableitung des Differentials der Exponentialabbildung aus (D.5) gilt:

$$\begin{aligned} D(d \exp_A^l(A'))[B, B'] &= d \exp_A^l(B') + \frac{1}{2}(A' B - B A') \\ D(d \exp_A^r(A'))[B, B'] &= d \exp_A^r(B') + \frac{1}{2}(B A' - A' B) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} D(d \exp_A^r(A'))[B, 0] &= \frac{1}{2}(B A' - A' B) , \\ D(d \exp_A^r(A'))[0, B'] &= d \exp_A^r(B') . \end{aligned}$$

Beweis. Wir beschränken uns auf den Beweis für die erste Identität. Um insbesondere die Darstellung der Argumente übersichtlicher zu halten, definieren wir die Funktion

$$f^l(A, A') = d \exp_A^l(A') ,$$

und die zu zeigende Identität ist

$$Df^l(A, A')[B, B'] = d \exp_A^l(B') + \frac{1}{2}(A' B - B A') .$$

Betrachten wir zuerst die Variation des zweiten Arguments nach B' . Aufgrund der Linearität

$$d \exp_A^l(A' + t B') - d \exp_A^l(A') = d \exp_A^l(A' + t B' - A') = t d \exp_A^l(B')$$

folgt für festes A direkt

$$Df^l(A, \cdot)[B'] = d \exp_A^l(B') .$$

Des Weiteren erhalten wir bei Variation des ersten Arguments nach B die Differenz

$$\begin{aligned} & d \exp_{A+tB}^l(A') - d \exp_A^l(A') \\ &= A' - \frac{1}{2}[A + tB, A'] + \frac{1}{6}[A + tB, [A + tB, A']] - \dots \\ &\quad - \left(A' - \frac{1}{2}[A, A'] + \frac{1}{6}[A, [A, A']] - \dots \right) \\ &= -\frac{1}{2}[tB, A'] + \frac{1}{6}[A + tB, [A + tB, A']] - \dots \\ &\quad - \left(\frac{1}{6}[A, [A, A']] - \dots \right) \\ &= -t \frac{1}{2}[B, A'] + O(t^2) , \end{aligned}$$

und für festes A' somit

$$Df^l(\cdot, A')[B] = \frac{1}{2}(A' B - B A') .$$

□

Zwischen dem Differential der Exponentialabbildung und der Richtungsableitung der Exponentialfunktion

$$\begin{aligned} D \exp(A)[\cdot] : \mathfrak{g} &\longrightarrow TG|_{\exp(A)} , \\ B &\longmapsto \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \left(\exp(A + tB) - \exp(A) \right) , \end{aligned}$$

gilt der Zusammenhang

$$D \exp(A)[B] = L'_{\exp(A)}(d \exp_A(B)) .$$

Lemma D.3 Für die Richtungsableitung der Exponentialfunktion gilt

$$D \exp(sA)[B] = B + \frac{s}{2}(AB + BA) + O(s^2) ,$$

und insbesondere

$$\begin{aligned} D \exp(0)[B] &= B , \\ D^2 \exp(0)[B, C] &= \frac{1}{2}(BC + CB) . \end{aligned}$$

Beweis. Wir erhalten direkt

$$\begin{aligned} D \exp(sA)[B] &= L'_{\exp(sA)}(d \exp_{sA}^l(B)) \\ &= \exp(sA) \left(B - \frac{1}{2}[sA, B] + O(s^2) \right) \\ &= (\mathbf{I} + sA + O(s^2)) \left(B - \frac{1}{2}[sA, B] + O(s^2) \right) \\ &= B + s \left(AB - \frac{1}{2}(AB - BA) \right) + O(s^2) \\ &= B + \frac{s}{2}(AB + BA) + O(s^2) . \end{aligned}$$

Das gleiche Resultat erhalten wir auch unter Verwendung von $d \exp_{sA}^r(B)$, wobei die Reihenfolge in der zweiten Zeile vertauscht werden muss. Ferner gilt

$$\begin{aligned} D^2 \exp(0)[B, C] &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \left(D \exp(tC)[B] - D \exp(0)[B] \right) \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \left(\frac{t}{2}(AB + BA) + O(t^2) \right) = \frac{1}{2}(AB + BA) . \end{aligned}$$

□

E Beispiele von Matrix Gruppen

Wir beschränken uns in der Darstellung auf Untergruppen der allgemeinen linearen Gruppe

$$GL(3) := \{A \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \mid \det A \neq 0\} .$$

Es folgt nun eine knappe Darstellung der Eigenschaften von $SL(3)$ und $SO(3)$. Für die Beweise verweisen wir auf die Bücher [Hal03, DK00, HN91].

Die spezielle lineare Gruppe $SL(3)$. Die

$$SL(3) := \{A \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \mid \det A = 1\}$$

ist eine Untergruppe der allgemeinen linearen Gruppe $GL(3)$. Sie ist zusammenhängend und hat die Fundamentalgruppe $\mathbb{Z}/2$. Die $SL(3)$ ist also insbesondere nicht einfach zusammenhängend, d. h. es gibt eine Kurve in $SL(3)$, welche sich nicht stetig auf einen Punkt zusammenziehen lässt. Die spezielle lineare Gruppe ist nicht kompakt, weil nicht beschränkt. Die Lie-Algebra der $SL(3)$ ist

$$\mathfrak{sl}(3) := \{A \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \mid \operatorname{tr} A = 0\} ,$$

und es ist $\dim SL(3) = \dim \mathfrak{sl}(3) = 8$.

Die spezielle orthogonale Gruppe $SO(3)$. Die

$$SO(3) := \{A \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \mid A^T A = \mathbf{I} , \det A = 1\}$$

ist eine Untergruppe der speziellen linearen Gruppe $SL(3)$. Sie ist zusammenhängend und hat die Fundamentalgruppe $\mathbb{Z}/2$. Die $SO(3)$ ist also insbesondere nicht einfach zusammenhängend. Die spezielle orthogonale Gruppe ist kompakt, d. h. vollständig und beschränkt. Die Fundamentalgruppe ist $\mathbb{Z}/2$. Die Lie-Algebra der $SO(3)$ ist

$$\mathfrak{so}(3) := \{A \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \mid A^T = -A\} ,$$

und es ist $\dim SO(3) = \dim \mathfrak{so}(3) = 3$.

F Elementare Ableitungen von matrixwertigen Funktionen

In diesem Abschnitt stellen wir einige Ableitungen für Kapitel 6 zur Verfügung. Wir berechnen nun die Ableitung des Volumenterm

$$W_{\text{vol}}(F) = \frac{\lambda}{4} \left((\det F - 1)^2 + \left(\frac{1}{\det F} - 1 \right)^2 \right)$$

aus (1.27h). Dazu erinnern wir die Ableitungen der Determinante und Inversen eines Tensors:

$$\begin{aligned} f_1(\bar{U}) &= \det \bar{U} , & Df_1(\bar{U})[\bar{V}] &= \text{tr}(\bar{V}\bar{U}^{-1}) \det \bar{U} , \\ f_2(\bar{U}) &= \bar{U}^{-1} , & Df_2(\bar{U})[\bar{V}] &= -\bar{U}^{-1} \bar{V} \bar{U}^{-1} , \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} g_1(x) &= (x - 1)^2 + \left(\frac{1}{x} - 1 \right)^2 , \\ Dg_1(x) &= 2x^{-3} (x - 1) (x + 1) (x^2 - x + 1) , \\ g_2(x) &= \frac{1}{2} x^{-2} (x - 1) (x + 1) (x^2 - x + 1) , \\ Dg_2(x) &= \frac{1}{2} (2x - 1 - x^{-2} + 2x^{-3}) \end{aligned}$$

Damit erhalten wir die Ableitung

$$DW_{\text{vol}}(F)[G] = \frac{\lambda}{2} \frac{(\det F - 1) (\det F + 1) (\det^2 F - \det F + 1)}{\det^2 F} \text{tr}(GF^{-1})$$

und weiter

$$\begin{aligned} D^2W_{\text{vol}}(F)[G, H] &= \frac{\lambda}{2} \left(2 \det F - 1 - (\det F)^{-2} + 2(\det F)^{-3} \right) \text{tr}(HF^{-1}) \det F \text{tr}(GF^{-1}) \\ &\quad + \frac{\lambda}{2} \frac{(\det F - 1) (\det F + 1) (\det^2 F - \det F + 1)}{\det^2 F} \text{tr}(G(-F^{-1}HF^{-1})) \\ &= \frac{\lambda}{2} \left((2(\det F)^2 - \det F - (\det F)^{-1} + 2(\det F)^{-2}) \text{tr}(HF^{-1}) \text{tr}(GF^{-1}) \right. \\ &\quad \left. - \frac{(\det F - 1) (\det F + 1) (\det^2 F - \det F + 1)}{\det^2 F} \text{tr}(GF^{-1}HF^{-1}) \right) . \end{aligned}$$

Ableitungen eines Krümmungsterms. Wir erinnern an die Identität

$$\frac{d}{dt} \left(\exp(AR^T) R \right) = d \exp_{AR^T}^r (A'R^T + A(R')^T) \exp(AR^T) R + \exp(AR^T) R'$$

und berechnen nun für festes R, R' die Richtungsableitungen der Funktion

$$f(A, A') = d \exp_{AR^T}^r (A'R^T + A(R')^T) \exp(AR^T) R + \exp(AR^T) R' \quad (\text{F.1})$$

an der Stelle $A = A' = 0$. Dazu zerlegen wir die Funktion f , und betrachten die Bestandteile getrennt.

Lemma F.1 *Die Funktionen*

$$g_1(A, A') = d \exp_{AR^T}^r (A'R^T) , \quad (\text{F.2a})$$

$$g_2(A, A') = d \exp_{AR^T}^r (A(R')^T) \quad (\text{F.2b})$$

besitzen die Ableitungen

$$\begin{aligned} Dg_1(0, 0)[B, B'] &= B'R^T , \\ D^2g_1(0, 0)[(B, B'), (C, C')] &= \frac{1}{2} \left(BR^T C'R^T - C'R^T BR^T \right) , \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(CR^T B'R^T - B'R^T CR^T \right) , \\ Dg_2(0, 0)[B, B'] &= B(R')^T , \\ D^2g_2(0, 0)[(B, B'), (C, C')] &= \frac{1}{2} \left(BR^T C(R')^T - C(R')^T BR^T \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(CR^T B(R')^T - B(R')^T CR^T \right) . \end{aligned}$$

Beweis. Wir verwenden Lemma D.2 und erhalten

$$\begin{aligned} Dg_1(A, A')[B, B'] &= \frac{1}{2} \left(BR^T A'R^T - A'R^T BR^T \right) + d \exp_{AR^T}^r (B'R^T) \\ D^2g_1(A, A')[(B, B'), (C, C')] &= \frac{1}{2} \left(BR^T C'R^T - C'R^T BR^T \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(CR^T B'R^T - B'R^T CR^T \right) \\ Dg_2(A, A')[B, B'] &= \frac{1}{2} \left(BR^T A(R')^T - A(R')^T BR^T \right) + d \exp_{AR^T}^r (B(R')^T) \\ D^2g_2(A, A')[(B, B'), (C, C')] &= \frac{1}{2} \left(BR^T C(R')^T - C(R')^T BR^T \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(CR^T B(R')^T - B(R')^T CR^T \right) \end{aligned}$$

□

Korollar F.2 *Die Funktion*

$$g(A, A') = d \exp_{AR^T}^r (A' R^T + A (R')^T) , \quad (\text{F.3})$$

besitzt die Ableitungen

$$\begin{aligned} g(0, 0) &= 0 , \\ Dg(0, 0)[B, B'] &= B' R^T + B (R')^T , \\ D^2 g(0, 0)[(B, B'), (C, C')] &= \frac{1}{2} \left(BR^T C' R^T - C' R^T B R^T \right. \\ &\quad + CR^T B' R^T - B' R^T C R^T \\ &\quad + BR^T C (R')^T - C (R')^T B R^T \\ &\quad \left. + CR^T B (R')^T - B (R')^T C R^T \right) . \end{aligned}$$

Beweis. Mit Lemma F.1 erhalten wir wegen der Linearität (vgl. (D.4))

$$d \exp_A^r (A' + B') = d \exp_A^r (A') + d \exp_A^r (B') ,$$

den Definitionen (F.2a) und (F.2b) mit $g(A, A') = g_1(A, A') + g_2(A, A')$ direkt die Aussage. \square

Korollar F.3 *Die Funktion*

$$f_1(A, A') = d \exp_{AR^T}^r (A' R^T + A (R')^T) \exp(AR^T) R \quad (\text{F.4})$$

besitzt die Ableitungen

$$\begin{aligned} f_1(0, 0) &= 0 , \\ Df_1(0, 0)[B, B'] &= (B' R^T + B (R')^T) R , \\ D^2 f_1(0, 0)[(B, B'), (C, C')] &= \frac{1}{2} \left(BR^T C' + B (R')^T C \right. \\ &\quad + CR^T B' + C (R')^T B \\ &\quad + B' R^T C + C' R^T B \\ &\quad \left. + BR^T C (R')^T R + CR^T B (R')^T R \right) . \end{aligned}$$

Beweis. Mit Korollar F.1 und Lemma D.3 erhalten wir mit

$$f_1(A, A') = g(A, A') \exp(AR^T) R$$

wegen (F.3) aus der Produktregel von Leibniz und

$$\begin{aligned} e(A) &= \exp(AR^T) , \\ e(0) &= \mathbf{I} , \\ De(0)[B] &= BR^T \end{aligned}$$

direkt die Ableitungen. Insbesondere haben wir für die zweite Ableitung

$$\begin{aligned}
D^2 f_1(0,0)[(B, B'), (C, C')] &= \frac{1}{2} \left(BR^T C' R^T - C' R^T B R^T \right. \\
&\quad + CR^T B' R^T - B' R^T C R^T \\
&\quad + BR^T C (R')^T - C (R')^T B R^T \\
&\quad \left. + CR^T B (R')^T - B (R')^T C R^T \right) R \\
&\quad + (B' R^T + B (R')^T) C R^T R \\
&\quad + (C' R^T + C (R')^T) B R^T R \\
&= \frac{1}{2} \left(BR^T C' - C' R^T B \right. \\
&\quad + CR^T B' - B' R^T C \\
&\quad + BR^T C (R')^T R - C (R')^T B \\
&\quad \left. + CR^T B (R')^T R - B (R')^T C \right) \\
&\quad + (B' R^T + B (R')^T) C \\
&\quad + (C' R^T + C (R')^T) B \\
&= \frac{1}{2} \left(BR^T C' - C' R^T B \right. \\
&\quad + CR^T B' - B' R^T C \\
&\quad + BR^T C (R')^T R - C (R')^T B \\
&\quad + CR^T B (R')^T R - B (R')^T C \\
&\quad + 2B' R^T C + 2B (R')^T C \\
&\quad + 2C' R^T B + 2C (R')^T B \left. \right) \\
&= \frac{1}{2} \left(BR^T C' \right. \\
&\quad + CR^T B' \\
&\quad + BR^T C (R')^T R \\
&\quad + CR^T B (R')^T R \\
&\quad + B' R^T C + B (R')^T C \\
&\quad \left. + C' R^T B + C (R')^T B \right)
\end{aligned}$$

□

Korollar F.4 *Die Funktion*

$$f_2(A, A') = \exp(AR^T) R', \quad (\text{F.5})$$

besitzt die Ableitungen

$$\begin{aligned} f_2(0,0) &= R' , \\ Df_2(0,0)[B, B'] &= BR^T R' , \\ D^2 f_2(0,0)[(B, B'), (C, C')] &= \frac{1}{2}(BR^T CR^T + CR^T BR^T) R' . \end{aligned}$$

Beweis. Mit Lemma D.3 erhalten wir mit

$$\begin{aligned} e(A) &= \exp(AR^T) , \\ e(0) &= \mathbf{I} , \\ De(0)[B] &= BR^T , \\ D^2 e(0)[B, C] &= \frac{1}{2}(BR^T CR^T + CR^T BR^T) \end{aligned}$$

direkt die Aussage. □

Satz F.5 Die Funktion f aus (F.1) besitzt die Richtungsableitungen

$$\begin{aligned} f(0,0) &= R' , \\ Df(0,0)[B, B'] &= B' , \\ D^2 f(0,0)[(B, B'), (C, C')] &= \frac{1}{2} \left(BR^T C' + CR^T B' \right. \\ &\quad \left. + B'R^T C + C'R^T B \right. \\ &\quad \left. + B(R')^T C + C(R')^T B \right) . \end{aligned}$$

Beweis. Es gilt $f(A, A') = f_1(A, A') + f_2(A, A')$ wegen (F.4) und (F.5). Weiter folgt aus Korollar F.3, Korollar F.4 und

$$\begin{aligned} (B'R^T + B(R')^T)R + BR^T R' &= B' + B(R')^T R + BR^T R' \\ &= B' + B(R')^T R - B(R')^T R \\ &= B' . \end{aligned}$$

die Formel für die erste Ableitung. Hierbei haben wir durch implizites Ableiten die Eigenschaft

$$R^T R = \mathbf{I} \implies (R')^T R = -R^T R'$$

verwendet. Für die zweite Ableitung haben wir

$$\begin{aligned}
 D^2 f(0, 0)[(B, B'), (C, C')] &= \frac{1}{2} \left(BR^T C' + B(R')^T C \right. \\
 &\quad + CR^T B' + C(R')^T B \\
 &\quad + B'R^T C + C'R^T B \\
 &\quad + BR^T C(R')^T R + CR^T B(R')^T R \\
 &\quad \left. + BR^T CR^T R' + CR^T BR^T R' \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left(BR^T C' + B(R')^T C \right. \\
 &\quad + CR^T B' + C(R')^T B \\
 &\quad \left. + B'R^T C + C'R^T B \right).
 \end{aligned}$$

□

G Beispiel: Minimierungsaufgabe auf $SO(3)$ und $SL(3)$

Sei $G = SO(3)$ bzw. $G = SL(3)$ eine Lie-Gruppe und $\mathfrak{g} = \mathfrak{so}(3)$ bzw. $\mathfrak{g} = \mathfrak{sl}(3)$ die korrespondierende Lie-Algebra. Wir betrachten die Minimierungsaufgabe: Für gegebenes $F \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ finde $R \in G$, sodass

$$\begin{aligned} \mathcal{I} : \quad G &\longrightarrow \mathbb{R} , \\ R &\longmapsto \mathcal{I}(R) = \frac{1}{2} |RF - \mathbf{I}|^2 \end{aligned}$$

minimal wird. Für die Realisierung des in Abschnitt 5.1 beschriebenen Algorithmus definieren wir das Inkrementproblem: Sei $R_n \in G$, finde $A \in \mathfrak{g}$, sodass

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_n : \quad \mathfrak{g} &\longrightarrow \mathbb{R} , \\ A &\longmapsto \mathcal{I}_n(A) = \frac{1}{2} |\exp(A)R_n F - \mathbf{I}|^2 \end{aligned}$$

minimal wird. Wir verwenden die Ableitungen

$$\begin{aligned} D\mathcal{I}(R)[S] &= (RF - \mathbf{I}) : SF , \\ D^2\mathcal{I}(R)[S, T] &= TF : SF , \\ D\mathcal{I}_n(0)[B] &= (R_n F - \mathbf{I}) : BR_n F , \\ D^2\mathcal{I}_n(0)[B, C] &= CR_n F : BR_n F + \frac{1}{2} (R_n F - \mathbf{I}) : (AB + BA)R_n F . \end{aligned}$$

F			R ⁰ =		
1.000000	-5.000000	3.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.000000	5.000000	3.000000	0.000000	1.000000	0.000000
-1.000000	2.000000	9.000000	0.000000	0.000000	1.000000

Newton:	d(0)= 6.4807e+00	I(0)= 6.400000000e+01
Newton:	d(1)= 3.1233e+00	I(1)= 6.143305948e+01
Newton:	d(2)= 1.8131e-01	I(2)= 6.080548852e+01
Newton:	d(3)= 3.1119e-05	I(3)= 6.080343349e+01
Newton:	d(4)= 1.7763e-15	I(4)= 6.080343349e+01

R [*] =		
0.608946	0.639794	-0.46888
-0.682741	0.723677	0.100777
0.403794	0.258756	0.877494

Tabelle G.1: Newton-Verfahren auf der Lie-Gruppe $G = SO(3)$. Wir beobachten mindestens lokal quadratische Konvergenz.

F			R ⁰ =		
1.000000	-5.000000	3.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.000000	5.000000	3.000000	0.000000	1.000000	0.000000
-1.000000	2.000000	9.000000	0.000000	0.000000	1.000000

Newton:	d(0)= 2.5806e+01	I(0)= 6.400000000e+01
Newton:	d(1)= 8.0516e+00	I(1)= 2.521865728e+01
line search 1:	d(1)= 1.2023e+01	I(1)= 4.902771930e+01
line search 2:	d(1)= 8.8291e+00	I(1)= 2.848690000e+01
Newton:	d(2)= 7.6186e+00	I(2)= 2.430536054e+01
Newton:	d(3)= 4.1893e+00	I(3)= 1.628372375e+01
Newton:	d(4)= 4.0703e-01	I(4)= 1.445072233e+01
Newton:	d(5)= 2.9371e-03	I(5)= 1.442956834e+01
Newton:	d(6)= 2.7555e-07	I(6)= 1.442956733e+01
Newton:	d(7)= 1.4881e-15	I(7)= 1.442956733e+01

R [*]		
2.31828	3.031590	-1.783290
-0.17832	0.713316	-0.178329
0.29721	0.178329	0.297215

Tabelle G.2: Newton-Verfahren auf der Lie-Gruppe $G = SL(3)$. Wir beobachten lokal quadratische Konvergenz.

H Hardware Spezifikation

Für die Implementierung und Entwicklung des Algorithmus wurde der Parallelcluster OTTO (italienisch für acht) am Lehrstuhl für wissenschaftliches Rechnen des Karlsruher Institut für Technologie (KIT) genutzt. OTTO besteht augenblicklich aus einem Verbund von elf Knoten mit je acht Kernen. Jeder Knoten besitzt 32GB Hauptspeicher (DDR2, ECC, buffered). Auf den Knoten 0 bis 8 bzw. 9 und 10 sind jeweils zwei Opteron 2352 bzw. 2376 Prozessoren von AMD eingebaut. Technische Informationen für die verwendeten Prozessoren sind in den Tabellen H.1 und H.2 aufgeführt. Die Knoten sind über ein InfiniBand-Netzwerk von Mellanox (vgl. Tab. H.3 und Tab. H.4) verbunden.

Prozessor Typ	Quad-Core AMD Opteron 2352 (Barcelona)
Anzahl der Kerne	4
CMOS-Technologie	65nm SOI
CPU Taktfrequenz in GHz	2.1
L1-Cache Größe in KB	4 x 64
L2-Cache Größe in KB	4 x 512
L3-Cache Größe in KB	2048
Stromverbrauch	75 W

Tabelle H.1: Produkt-Spezifikation des Opteron 2352 Prozessors von AMD welcher auf ma-otto00 bis ma-otto08 verwendet wird (Quelle: <http://products.amd.com>).

Prozessor Typ	Quad-Core AMD Opteron 2376 (Shanghai)
Anzahl der Kerne	4
CMOS-Technologie	45nm SOI
CPU Taktfrequenz in GHz	2.3
L1-Cache Größe in KB	4 x 128
L2-Cache Größe in KB	4 x 512
L3-Cache Größe in KB	6144
Stromverbrauch	75 W

Tabelle H.2: Produkt-Spezifikation des Opteron 2376 Prozessors von AMD welcher auf ma-otto09 und ma-otto10 verwendet wird (Quelle: <http://products.amd.com>).

Ports	24
Bandbreite	24 x 4 x 2.5GB/s
Latenzzeit	< 200 ns

Tabelle H.3: Produkt-Spezifikation des Infiniband-Switch InfiniScale III SDR (Single Data Rate) von Mellanox (Quelle: <http://www.mellanox.com>).

ASIC	ConnectX
Ports	2 x 10.0GB/s
Transfer Rate	2.5GT/s
Host Bus	PCIe 2.0 x8
Latenzzeit	< 1.2 μ s

Tabelle H.4: Produkt-Spezifikation des HCA (Host Channel Adapter) MHEH28-XTC (Single Data Rate) von Mellanox (Quelle: <http://www.mellanox.com>).

Für größere Simulationen wurde der Institutscluster IC1 am Scientific Supercomputing Center (SSC) des Karlsruher Institut für Technologie (KIT) eingesetzt. Dort sind 202 Knoten mit je acht Kernen zu einem Supercomputer verbunden. Die technische Spezifikation der eingesetzten Prozessoren stehen in Tabelle H.5. Jeder Knoten ist mit 16GB Hauptspeicher ausgestattet. Die Knoten sind über ein InfiniBand-Switch von Flextronics (F-XR430095) mit ConnectX Dual Port DDR HCA Karten (PCIe 2.0 x8 2,5GT/s) verbunden.

Prozessor Typ	Quad-Core Intel Xeon X5355 (Clovertown)
Anzahl der Kerne	4
CMOS-Technologie	65nm SOI
CPU Taktfrequenz in GHz	2.66
Cache Größe in KB	2 x 4096
Stromverbrauch	120 W

Tabelle H.5: Produkt-Spezifikation des Xeon X5355 Prozessors von Intel (Quelle: <http://www.intel.com>).

Literaturverzeichnis

- [ABG07] P.-A. Absil, C. G. Baker, and K. A. Gallivan. Trust-Region Methods on Riemannian Manifolds. *Found. Comput. Math.*, 7:303–330, 2007.
- [ADM⁺02] R. L. Adler, J.-P. Dedieu, J. Y. Margulies, M. Martens, and M. Shub. Newton’s method on Riemannian manifolds and a geometric model for the human spine. *IMA J. Numer. Anal.*, 22:359–390, 2002.
- [AH05] K. Atkinson and W. Han. *Theoretical Numerical Analysis: A Functional Analysis Framework*. Springer-Verlag, 2005.
- [Alb98] H. D. Alber. *Materials with Memory. Initial-Boundary Value Problems for Constitutive Equations with Internal Variables.*, volume 1682 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer, Berlin, 1998.
- [Alt06] H. W. Alt. *Lineare Funktionalanalysis*. Springer-Verlag, 2006.
- [BBJ⁺97] P. Bastian, K. Birken, K. Johannsen, S. Lang, N. Neuß, H. Rentz-Reichert, and C. Wieners. Ug - a flexible software toolbox for solving partial differential equations. *Comp. Vis. Sci.*, (1):27–40, 1997.
- [BBJ⁺98] P. Bastian, K. Birken, K. Johannsen, S. Lang, V. Reichenberger, H. Rentz-Reichert, C. Wieners, and G. Wittum. A parallel software-platform for solving problems of partial differential equations using unstructured grids and adaptive multigrid methods. In E. Krause and W. Jäger, editors, *High Performance Computing in Science and Engineering ’98*, pages 326–339, Berlin, 1998. Springer-Verlag.
- [Bes74] D. Besdo. Ein Beitrag zur nichtlinearen Theorie des Cosserat-Kontinuums. *Acta Mechanica*, 20:105–131, 1974.
- [BJL⁺99] P. Bastian, K. Johannsen, S. Lang, S. Nägele, V. Reichenberger und C. Wieners, G. Wittum, and C. Wrobel. Advances in High-Performance Computing: Multigrid Methods for Partial Differential Equations and its Applications. In E. Krause and W. Jäger, editors, *High Performance Computing in Science and Engineering ’99*, pages 506–519, Berlin, 1999. Springer-Verlag.
- [BJL⁺00] P. Bastian, K. Johannsen, S. Lang, V. Reichenberger, C. Wieners, G. Wittum, and C. Wrobel. Parallel solutions of partial differential equations with

- adaptive multigrid methods on unstructured grids. In E. Krause and W. Jäger, editors, *High Performance Computing in Science and Engineering '00*, pages 496–508, Berlin, 2000. Springer-Verlag.
- [BJL⁺01] P. Bastian, K. Johannsen, S. Lang, V. Reichenberger, C. Wieners, and G. Wittum. High-accuracy simulation of density driven flow in porous media. In E. Krause and W. Jäger, editors, *High Performance Computing in Science and Engineering '01*, pages 500–511, Berlin, 2001. Springer-Verlag.
- [Bra03] D. Braess. *Finite Elemente*. Springer-Verlag, 2003.
- [CC09] E. Cosserat and F. Cosserat. *Théorie des corps déformables*. Librairie Scientifique A. Hermann et Fils (Translation: Theory of deformable bodies, NASA TT F-11 561, 1968), Paris, 1909.
- [Cha06] I. Chavel. *Riemannian Geometry*. Cambridge University Press, 2006.
- [Cia88] P. G. Ciarlet. *Three-Dimensional Elasticity*, volume 1 of *Studies in Mathematics and its Applications*. Elsevier, Amsterdam, first edition, 1988.
- [dB91] R. de Borst. Simulation of strain localization: a reappraisal of the Cosserat continuum. *Engng. Comp.*, 8:317–332, 1991.
- [dB92] R. de Borst. A generalization of J_2 -flow theory for polar continua. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 103:347–362, 1992.
- [dBS91] R. de Borst and L.J. Sluys. Localisation in a Cosserat continuum under static and dynamic loading conditions. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 90:805–827, 1991.
- [dC92] M. P. do Carmo. *Riemannian geometry*, volume 19 of *Mathematics: Theory and Applications*. Birkhäuser, 1992.
- [DEG⁺99] J. W. Demmel, S. C. Eisenstat, J. R. Gilbert, X. S. Li, and J. W. H. Liu. A supernodal approach to sparse partial pivoting. *SIAM J. Matrix Analysis and Applications*, 20(3):720–755, 1999.
- [DK00] J. J. Duistermaat and J. A. C. Kolk. *Lie Groups*. Springer, 2000.
- [DL76] G. Duvaut and J.-L. Lions. *Inequalities in Mechanics and Physics*. Springer-Verlag, Berlin, 1976.
- [DS02] S. Diebels and H. Steeb. The size effect in foams and its theoretical and numerical investigation. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 458:2869–2883, 2002.
- [DSW93] A. Dietsche, P. Steinmann, and K. Willam. Micropolar elastoplasticity and its role in localization. *Int. J. Plasticity*, 9:813–831, 1993.

- [EAS98] A. Edelman, T. A. Arias, and S. T. Smith. The Geometry of Algorithms with Orthogonality Constraints. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 20:303–353, 1998.
- [Ehl02] W. Ehlers. *Porous media: theory, experiments and numerical applications*. Springer-Verlag, 2002.
- [ER04] F. Ebobisse and B. D. Reddy. Some mathematical problems in perfect plasticity. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 193:5071–5094, 2004.
- [ERDD03] W. Ehlers, E. Ramm, S. Diebels, and G. A. D’Addetta. From particle ensembles to Cosserat continua: homogenization of contact forces towards stresses and couple stresses. *International Journal of Solids and Structures*, 40:6681–6702, 2003.
- [ESD05] T. Ebinger, H. Steeb, and S. Diebels. Modeling macroscopic extended continua with the aid of numerical homogenization schemes. *Computational Materials Science*, 32:337–347, 2005.
- [ET76] I. Ekeland and R. Temam. *Convex analysis and variational problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1976.
- [FCS97] S. Forest, G. Cailletaud, and R. Sievert. A Cosserat theory for elastoviscoplastic single crystals at finite deformation. *Arch. Mech.*, 49(4):705–736, 1997.
- [FDC99] S. Forest, R. Dendievel, and G. .R. Canova. Estimating the overall properties of heterogeneous Cosserat materials. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 7:829–840, 1999.
- [FP03] F. Facchinei and J.-S. Pang. *Finite-Dimensional Variational Inequalities and Complementarity Problems*, volume 2. Springer, 2003.
- [FS02] P. P. Ferreira and B. F. Svaiter. Kantorovich’s theorem on Newton’s method in Riemannian manifolds. *Journal of Complexity*, 18:304–329, 2002.
- [GR86] V. Girault and P.-A. Raviart. *Finite element methods for Navier-Stokes equations*. Springer, 1986.
- [Hal03] B. C. Hall. *Lie Groups, Lie Algebras, and Representations*. Springer, 2003.
- [Hel78] S. Helgason. *Differential Geometry, Lie Groups, and Symmetric Spaces*. Academic Press, New York, 1978.
- [Hig08] N. J. Higham. *Functions of Matrices*. Siam, 2008.
- [HN91] J. Hilgert and K.-H. Neeb. *Lie-Gruppen und Lie-Algebren*. Vieweg, 1991.

- [HR99] W. Han and B. D. Reddy. *Plasticity: Mathematical Theory and Numerical Analysis*. Springer-Verlag, 1999.
- [IMKNZ00] A. Iserles, H. Z. Munthe Kaas, S. P. Norsett, and A. Zanna. Lie-group methods. *Acta Numerica*, pages 215–365, 2000.
- [ink] Inkscape. <http://www.inkscape.org/>.
- [IS93] I. R. Ionescu and M. Sofonea. *Functional and numerical methods in viscoplasticity*. Oxford University Press, 1993.
- [IW98] M. M. Iordache and K. Willam. Localized failure analysis in elastoplastic Cosserat continua. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 151:559–586, 1998.
- [JC98] G. Jelenic and M. A. Crisfield. Interpolation of rotational variables in nonlinear dynamics of 3d beams. *Int. J. Numer. Meth. Engrg.*, 43(7):1193–1222, 1998.
- [Joh76] C. Johnson. Existence theorems for plasticity problems. *J. Math. Pures Appl.*, 55:431–444, 1976.
- [Jos95] J. Jost. *Riemannian geometry and geometric analysis*. Springer, 1995.
- [KK02] D. Klatte and B. Kummer. *Nonsmooth Equations in Optimization*. Kluwer, 2002.
- [KZ05] A. J. Kurdila and M. Zabaranin. *Convex Functional Analysis*. Birkhäuser-Verlag, 2005.
- [Küh99] W. Kühnel. *Differentialgeometrie*. Vieweg, 1999.
- [Lee97] J. M. Lee. *Riemannian Manifolds: An Introduction to Curvature*. Springer, 1997.
- [Lip69] H. Lippmann. Eine Cosserat-Theorie des plastischen Fließens. *Acta Mech.*, 8:255–284, 1969.
- [Lub90] J. Lubliner. *Plasticity Theory*. Macmillan Publishing Company, New York, 1990.
- [LWW02] S. Lang, C. Wieners, and G. Wittum. The application of adaptive parallel multigrid methods to problems in nonlinear solid mechanics. In E. Stein, editor, *Error-Controlled Adaptive Finite Element Methods in Solid Mechanics*, pages 347–384, New-York, 2002. Wiley.
- [Mah96] R. E. Mahony. The Constrained Newton Method on a Lie Group and the Symmetric Eigenvalue Problem. *Linear Algebra and its Applications*, 248:67–89, 1996.

- [Mat79] H. Matthies. Existence theorems in thermoplasticity. *J. Méc.*, 18:695–711, 1979.
- [MM02] R. E. Mahony and J. H. Manton. The Geometry of the Newton Method on Non-Compact Lie Groups. *Journal of Global Optimization*, 23:309–327, 2002.
- [Mün07] I. Münch. *Ein geometrisch und materiell nichtlineares Cosserat-Modell – Theorie, Numerik und Anwendungsmöglichkeiten*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), <http://digbib.ubka.uni-karlsruhe.de/volltexte/1000007371>, 2007.
- [NC05] P. Neff and K. Chelmiński. Infinitesimal elastic-plastic Cosserat micropolar theory. Modelling and global existence in the rate-independent case. *Proc. Roy. Soc. Ed.*, 135 A:1017–1039, 2005.
- [NC07] P. Neff and K. Chelmiński. Well-posedness of dynamic Cosserat plasticity. *Appl. Math. Optim.*, 56:19–35, 2007.
- [NCMW07] P. Neff, K. Chelmiński, W. Müller, and C. Wieners. A solution method for an infinitesimal elasto-plastic Cosserat model. *Math. Mod. Meth. Appl. Sci. (M3AS)*, 17:1211–1239, 2007.
- [Nef03] P. Neff. Finite multiplicative elastic-viscoplastic Cosserat micropolar theory for polycrystals with grain rotations. Modelling and mathematical analysis. *Preprint 2297*, <http://wwwbib.mathematik.tu-darmstadt.de/Math-Net/Preprints/Listen/pp03.html>, 9/2003.
- [Nef04] P. Neff. *Geometrically exact Cosserat theory for bulk behaviour and thin structures. Modelling and mathematical analysis*. Habilitationsschrift, Universität Darmstadt, 2004.
- [Nef05] P. Neff. A finite-strain elastic-plastic Cosserat theory for polycrystals with grain rotations. *Int. J. Eng. Sci.*, 9/2005.
- [Nef06] P. Neff. A finite-strain elastic-plastic Cosserat theory for polycrystals with grain rotations. *Int. J. Eng. Sci.*, 44:574–594, 2006.
- [NM09] P. Neff and I. Muench. Simple shear in nonlinear Cosserat elasticity: bifurcation and induced microstructure. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 21(3):195–221, 2009.
- [O’N83] B. O’Neill. *Semi-Riemannian Geometry*. Academic Press, New York, 1983.
- [OW00] B. Owren and B. Welfert. The Newton iteration on Lie groups. *BIT*, 40:121–145, 2000.
- [par] Paraview. <http://www.paraview.org/>.

- [RV] P. Ramachandran and G. Varoquaux. The Mayavi data visualizer. <http://code.enthought.com/projects/mayavi>, 2005–.
- [RV96] M. Ristinmaa and M. Vecchi. Use of couple-stress theory in elasto-plasticity. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 136:205–224, 1996.
- [Saw67] A. Sawczuk. On the yielding of Cosserat continua. *Arch. Mech. Stosow.*, 19:471–480, 1967.
- [SH98] J. C. Simo and T. J. R. Hughes. *Computational Inelasticity*. Springer-Verlag, 1998.
- [Sim98] J. C. Simo. Topics on the numerical analysis and simulation of plasticity. In P. G. Ciarlet and J.L. Lions, editors, *Handbook of Numerical Analysis*, volume VI. Elsevier, Amsterdam, 1998.
- [SVQ86] J. C. Simo and L. Vu-Quoc. A three-dimensional finite-strain rod model. Part ii: Computational aspects. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 58(1):79–116, 1986.
- [Tem85] R. Temam. *Mathematical Problems in Plasticity*. Gauthier-Villars, Paris, 1985.
- [Wie99] C. Wieners. Multigrid methods for Prandtl-Reuß plasticity. *Numer. Lin. Alg. Appl.*, 6:457–478, 1999.
- [Wie00] C. Wieners. *Theorie und Numerik der Prandtl-Reuß-Plastizität*. Universität Heidelberg, 2000. Habilitationsschrift.
- [Wie04] C. Wieners. Distributed Point Objects. A new concept for parallel finite elements. In R. Kornhuber, R. Hoppe, J. Périaux, O. Pironneau, O. Widlund, and J. Xu, editors, *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering*, volume 40 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 175–183. Springer, 2004.
- [Wie09] C. Wieners. A geometric data structure for parallel finite elements and the application to multigrid methods with block smoothing. *IWRMM-Preprint 09/02*, <http://www.mathematik.uni-karlsruhe.de/iwrmm/seite/preprints>, 2/2009.
- [Zei93] E. Zeidler. *Nonlinear Functional Analysis and its Applications*, volume I. Springer, Berlin, 1993.

Index

- $GL(3)$, 144
- K , 10
- $SL(3)$, 144
- $SO(3)$, 27, 144
- $T_p M$, 96
- W_h , 34
- $W_{\Gamma, h}$, 34
- $W_{\Gamma, h}(\mathbf{u}_D)$, 34
- Hess, 99
- $\mathfrak{sl}(3)$, 8
- axl, 19
- dev, 8
- grad, 98
- \mathbf{V} , 7
- \mathbf{V}_{Γ} , 7
- $\mathbf{V}_{\Gamma}(\mathbf{g})$, 7
- \mathbf{V}_h , 34
- $\mathbf{V}_{\Gamma, h}$, 34
- $\mathbf{V}_{\Gamma, h}(\mathbf{u}_D)$, 34
- curl, 15
- div, 8
- Sym(3), 8
- skew, 8
- $\mathfrak{so}(3)$, 15
- sym, 8
- \mathbf{S} , 7
- \mathbf{S}_{sym} , 7
- \mathbf{C} , 8, 22
- df , 98
- \mathbf{K} , 10
- $\mathbf{K}(\ell)$, 10
- 1-Form, 98, 99

- Approximationsfehler, 39
- beschränkte Deformation, 7, 12

- Bestapproximationsfehler, 39
- Céa-Lemma, 39
- charakteristische Länge, 14
- Christoffel-Symbole, 97

- Deviator, 8
- Differentialoperator, 19
- diskrete Fließregel, 36
- Diskretisierung, 82
- Diskretisierungsfehler, 39
- Dissipationsfunktional, 23
- Drehmomententensor, 18
- duales Inkrementproblem, 52
- duales Problem, 55
- Dualnorm, 32

- einfach zusammenhängend, 144
- Elastizitätstensor, 22
- Exponentialabbildung, 96

- Fließregel, 30
- freie Energie, 9
- Frobenius-Norm, 8
- Frobenius-Skalarprodukt, 7

- Gâteaux-Ableitung, 132
- Gauß'scher Integralsatz, 9
- Gauß-Quadraturformeln, 82
- Geodätische, 101
- gleichmäßig konvex, 32

- Hencky Plastizität, 10
- Hopf-Rinow, 102

- Impulserhaltung, 8
- inf-sup-Bedingung, 10
- Infiniband, 154

inkrementelle Plastizität, 11
 Inkrementproblem, 31
 innere Energie, 30
 Institutscluster IC1, 84
 isotrope Verfestigung, 13

 Karte, 98
 KKT-Punkt, 31
 koerziv, 33
 Komplementaritätsbedingungen, 30
 Kontinuumsmechanik, 5
 Konvergenz, 39
 konvexe Analysis, 21
 konvexes Potenzial, 131
 Kornsche Ungleichung, 9
 kovariante Ableitung, 97

 Last, 20
 Lax-Milgram-Lemma, 9
 Levi-Civita, 97
 Lie-Algebra, 8
 Liniensuche, 116
 Lipschitz-stetig, 39

 Mannigfaltigkeit, 96
 Matrix Gruppe, 144
 Mikrorotationen, 15

 Newton-Kantorovich, 95, 102
 nicht-expansiv, 131
 Normalkoordinaten, 96, 98

 Orthogonalprojektion, 11, 34, 131

 parallele Skalierbarkeit, 84
 Paralleltransport, 101
 Perfekte Plastizität, 7, 59
 Plastizität, 6
 Poincaré-Friedrichs Ungleichung, 16
 Primale Formulierung, 12
 primales Problem, 55
 Produktregel von Leibniz, 110
 Projektionssatz, 131

 Q1/Q1-Element, 82
 Q2/Q1-Element, 82

 Q2/Q2-Element, 82
 Quasi-statische Plastizität, 11
 Quaternionen, 107

 Riemannsche Geometrie, 97

 Safe-Load-Bedingung, 12
 Sattelpunkt, 31
 Scaleup, 85
 Scherenergie, 10
 schwach-konvergent, 60
 Schwache safe-load Bedingung, 57
 semi-glatt, 39
 semiglatte Newton-Verfahren, 41
 Serendipity, 82
 Slater-Bedingung, 31
 Starke Konvergenz, 57
 statische Plastizität, 11
 Subdifferential, 21

 Tangentialraum, 96

 unterhalb halb stetig, 33

 variationelle Formulierung, 9
 von Mises, 10

 zulässige Menge, 57
 zulässige Spannung, 10
 zulässige Spannungen, 34