

Ein übergeordnetes Variationsprinzip für den Fehlerabgleich der Finite-Element-Methode

Udo Meißner

Als theoretische Grundlage für die Methode der Finiten Elemente wird ein übergeordnetes Variationsprinzip vorgestellt. Es behandelt den Fehlerabgleich zwischen der numerischen Approximationslösung und der exakten Lösung des Elastizitätsproblems. Bei der Anwendung auf iterative Gleichungslöser ergeben sich daraus die Grundlagen der Gradientenverfahren. Durch Kontrolle der Approximationsfehler können optimale Lösungsstrategien für adaptive FEM-Algorithmen entwickelt werden.

1 Einleitung

Für die Herleitung theoretischer Grundlagen und die Algorithmenbildung diskreter numerischer Methoden bilden Variationsprinzip der Mechanik eine fundamentale Ausgangsbasis. Für die Deformations- und Kraftgrößenmethoden, für gemischte und hybride Methoden ist die Systematik der verschiedenen, miteinander verwandten Prinzipie seit langem bekannt, vgl. Washizu (1975). Weitgehend unbekannt hingegen ist die Existenz eines übergeordneten Variationsprinzips, aus dem sich andere Variationsprinzipie und auch das Prinzip der virtuellen Arbeiten herleiten. Die Gemeinsamkeit folgt bei Approximationsverfahren aus dem Grundsatz, daß ein geeignetes Prinzip für die Konvergenz der Näherungslösung gegen die exakte Lösung verantwortlich ist.

Daraus ergeben sich die primären Fragen, wie die Zielfunktion dieser Optimierungsaufgabe lautet und welche unabhängigen Zustandsgrößen zu variieren sind. Findet man darauf eine Antwort, so ergeben sich sekundär daraus die Konvergenz- und Stabilitätseigenschaften des Verfahrens. Dies ist insbesondere für iterative Verfahren wichtig, wie z.B. die adaptiven Methoden und die iterative Gleichungslösung bei der Methode der finiten Elemente.

Der folgende Beitrag, der sich auf Deformationsmodelle beschränkt, zeigt, daß das übergeordnete Variationsprinzip auf der Methode der kleinsten Fehlerquadrate beruht. Anhand von zwei Anwendungen auf das Elastizitätsproblem der Kontinuumsmechanik und auf Lösungsalgorithmen symmetrischer Gleichungssysteme werden die grundlegenden Eigenschaften und spezifische Ergebnisse gezeigt, die mit denen bekannter Verfahren übereinstimmen.

2 Grundgleichungen

2.1 Differentialgleichungen des Kontinuums

Die mechanischen Grundgleichungen des linearen Problems sind für ein Gebiet Ω gegeben durch die bekannten Differentialgleichungen:

konstitutive Gleichungen (Stoffgesetz)

$$\tau^{\alpha\beta} = E^{\alpha\beta\gamma\delta} \epsilon_{\gamma\delta} \quad \text{in } \Omega \quad (1)$$

kinematische Feldgleichungen

$$\epsilon_{\gamma\delta} = \frac{1}{2}(v_{\gamma|\delta} + v_{\delta|\gamma}) \quad \text{in } \Omega \quad (2)$$

statische Feldgleichungen (Gleichgewichtsbedingungen)

$$\tau^{\alpha\beta}|_{\beta} + \bar{q}^{\alpha} = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (3)$$

worin $\tau^{\alpha\beta}$ den symmetrischen Spannungs-, $E^{\alpha\beta\gamma\delta}$ den symmetrischen Elastizitäts-, $\epsilon_{\gamma\delta}$ den symmetrischen Verzerrungstensor, v_{γ} den Verschiebungsvektor und \bar{q}^{α} den Vektor der Massenkraften darstellen.

Zur Lösung des Problems müssen auf dem Rand Γ des Gebiets Randbedingungen spezifiziert werden. Dies sind einerseits bezüglich der Verschiebungen auf dem Teilrand Γ_v

geometrische Randbedingungen

$$v_{\alpha} = \bar{v}_{\alpha} \quad \text{auf } \Gamma_v \subseteq \Gamma \quad (4)$$

und bezüglich der Spannungen auf dem Teilrand Γ_{σ}

statische Randbedingungen

$$\tau^{\alpha\beta}n_{\beta} = \bar{p}^{\alpha} \quad \text{auf } \Gamma_{\sigma} = \Gamma \setminus \Gamma_v \quad (5)$$

wobei \bar{v}_{α} vorgegebene Randverschiebungen, \bar{p}^{α} vorgegebene Randkräfte beinhalten und n_{β} den nach außen gerichteten Normalvektor darstellt.

Nach Erreichen der Lösung können auf dem Teilrand Γ_v die

Reaktionskräfte

$$a^{\alpha} = \tau^{\alpha\beta}n_{\beta} \quad \text{auf } \Gamma_v \quad (6)$$

ermittelt werden.

Da für beliebige Fälle eine exakte Integration der Differentialgleichungen unter gegebenen Randbedingungen nicht erreichbar ist, müssen Näherungslösungen gefunden werden, welche die unbekannte exakte Lösung bestmöglich approximieren.

2.2 FEM - Approximation

Mit der Methode der finiten Elemente wird das Gesamtgebiet Ω bekanntermaßen in Teilgebiete Ω_e zerlegt. Für jedes Teilgebiet können geeignete Approximationsfunktionen \hat{v}_{α} , $\hat{\tau}^{\alpha\beta}$ der Feldgrößen gewählt werden:

Approximation der Verschiebungen

$$v_{\alpha} = \hat{v}_{\alpha} + \tilde{v}_{\alpha} \quad \text{in } \Omega_e \quad (7)$$

Approximation der Spannungen

$$\tau^{\alpha\beta} = \hat{\tau}^{\alpha\beta} + \tilde{\tau}^{\alpha\beta} \quad \text{in } \Omega_e \quad (8)$$

worin \tilde{v}_{α} und $\tilde{\tau}^{\alpha\beta}$ die Approximationsfehler darstellen.

Wegen der Konsistenz- und Konvergenzsicherung unterliegt die Auswahl der Approximationsfunktionen den strengen Anforderungen von Taylor-Reihen.

Bei der reinen Deformationsmethode werden für den Verschiebungsansatz im allgemeinen Polynomreihen p -ter Ordnung gewählt, die in Abhängigkeit vom Diskretisierungsmaßstab h wegen der Restgliedabschätzung die

Ordnung des Approximationsfehlers (Abbruchfehler)

$$\tilde{v}_\alpha = \mathcal{O}(h^{p+1}) \quad (9)$$

zeigen, wenn bezüglich der exakten Lösung entsprechende Regularitätsbedingungen gelten, vgl. Babuška/Szabó (1982).

Wegen der Differentiation in Gleichung (2) ergeben sich bei Deformationsmodellen die Spannungen (1) als Sekundärergebnisse aus den Verschiebungen mit der geringeren Approximationsqualität von

$$\tilde{\tau}^{\alpha\beta} = \mathcal{O}(h^p) \quad (10)$$

Betrachtet man Gleichung (7) und Gleichung (8), so stellen sich folgende Fragen:

- Mit welcher Zielfunktion werden die Approximationsfehler zwischen exakter und genäherter Lösung minimiert?
- Welche der beiden Approximationsfehler werden primär zum Minimum gemacht?

Mit der Kenntnis der allgemein bekannten Arbeitsprinzipie, des Prinzips vom Minimum der potentiellen Energie und des Prinzips der virtuellen Arbeiten, findet man darauf keine Antwort.

Der Mechanismus, der die Approximationsfehler im vorliegenden Fall linearer Systeme minimiert, erklärt sich hingegen aus einem übergeordneten Variationsprinzip, das auf dem Verfahren der kleinsten Fehlerquadrate basiert, Meißner/Menzel (1989).

3 Übergeordnetes Variationsprinzip

Für Deformations- und Kraftgrößenmodelle, gemischte und hybride Modelle sind die Familien und Zusammenhänge der verschiedenen Variationsprinzipie allgemein bekannt. Im folgenden wird ein übergeordnetes Variationsprinzip vorgestellt, das auf den Approximationen (7, 8) beruht und als Grundlage der Methode der finiten Elemente dient. Aus diesem übergeordneten Variationsprinzip erklären sich u.a. fundamentale Eigenschaften der a posteriori Fehler, die adaptiven Verfahren zugrunde liegen. Der Kürze wegen beschränken sich die folgenden Ausführungen lediglich auf reine Deformationsmodelle.

Zunächst wird die Behauptung aufgestellt, daß das

übergeordnete Variationsfunktional

$$\begin{aligned} \hat{E} &= \frac{1}{2} \sum_e \iiint (v_{\alpha|\beta} - \hat{v}_{\alpha|\beta}) E^{\alpha\beta\gamma\delta} (v_{\gamma|\delta} - \hat{v}_{\gamma|\delta}) d\Omega \\ &= \frac{1}{2} \sum_e \iiint_{\Omega_e} \tilde{v}_{\alpha|\beta} E^{\alpha\beta\gamma\delta} \tilde{v}_{\gamma|\delta} d\Omega \geq 0 \end{aligned} \quad (11)$$

den Approximationsfehler zwischen unbekannter exakter Lösung und FEM-Näherungslösung bei positiv definitem Elastizitätstensor minimiert. Aus Gleichung (2) ist ersichtlich, daß es sich dann um ein Fehlerquadratprinzip handelt, das den Approximationsfehler der Verzerrungen im Sinne der kleinsten Fehlerquadrate minimiert. Wegen Gleichung (1) ist die Approximationslösung bezüglich der Spannung so geartet, daß die FEM-Näherung die exakte Lösung "umhüllt".

Als notwendige Bedingung für die Existenz des Fehlerminimums gilt das Verschwinden der ersten Variation

$$\delta \hat{E} = \frac{\partial E}{\partial \hat{v}_{\alpha|\beta}} \delta \hat{v}_{\alpha|\beta} = 0 \quad (12)$$

Daraus folgt mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes unter Verwendung der Gleichungen (1, 2, 3, 5, 6) das bekannte *Prinzip der virtuellen Arbeiten*

$$\begin{aligned} \delta \hat{E} &= \sum_e \iint_{\Gamma_\sigma} \delta \hat{v}_\alpha (\hat{\tau}^{\alpha\beta} n_\beta - \bar{p}^\alpha) d\Gamma \\ &+ \sum_e \iint_{\Gamma_\sigma} \delta \hat{v}_\alpha (\hat{\tau}^{\alpha\beta} n_\beta - a^\alpha) d\Gamma \\ &- \sum_e \iiint_{\Omega_e} \delta \hat{v}_\alpha (\hat{\tau}^{\alpha\beta} |_\beta n_\beta + \bar{q}^\alpha) d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (13)$$

Bei Deformationsmodellen führt diese Gleichung nur zu den richtigen statischen Übergangsbedingungen auf allen Innenrändern, wenn die *Kompatibilität der Verschiebungsansätze*

$$\begin{aligned} \hat{v}_\alpha^{links} &= \hat{v}_\alpha^{rechts} \\ \delta \hat{v}_\alpha^{links} &= \delta \hat{v}_\alpha^{rechts} \end{aligned} \quad \text{auf } \sum_e \Gamma_\sigma \setminus \Gamma_\sigma \quad (14)$$

eingehalten ist. Wegen der unbekanntenen Reaktionskräfte muß darüber hinaus auch die Kompatibilität des Verschiebungsfeldes auf den Außenrändern

$$\begin{aligned} \hat{v}_\alpha &= \bar{v}_\alpha \\ \delta \hat{v}_\alpha &= 0 \end{aligned} \quad \text{auf } \Gamma_v \quad (15)$$

gesichert sein.

Damit leitet sich aus Gleichung (13) die *Steifigkeitsbeziehung des Gesamtsystems*

$$\delta \mathbf{V}^T (\mathbf{K} \mathbf{V} - \mathbf{F}) = 0 \quad (16)$$

her, in der wegen Gleichung (15) die Auflagerbedingungen bereits eingearbeitet sind, so daß die symmetrische Steifigkeitsmatrix \mathbf{K} positiv definit ist.

Nach der Berechnung des Verschiebungsfeldes können stets die *Fehlerlasten*

$$\hat{\tau}^{\alpha\beta} n_\beta - \bar{p}^\alpha = -\bar{p}^\alpha \quad \text{auf } \sum_e \Gamma_\sigma \quad (17)$$

$$\hat{\tau}^{\alpha\beta} |_\beta + \bar{q}^\alpha = \bar{q}^\alpha \quad \text{in } \Omega_e \quad (18)$$

a posteriori ermittelt und über dem FEM-Netz graphisch dargestellt werden.

Gleichung (13) orthogonalisiert diese Fehlerlasten in Bezug zu den virtuellen Verschiebungen

$$\delta \hat{E} = - \sum_e \iint_{\Gamma_\sigma} \delta \hat{v}_\alpha \bar{p}^\alpha d\Gamma - \sum_e \iint_{\Gamma_v} \delta \hat{v}_\alpha \bar{a}^\alpha d\Gamma - \sum_e \iiint_{\Omega_e} \delta \hat{v}_\alpha \bar{q}^\alpha d\Omega = 0 \quad (19)$$

Diese fundamentale Beziehung ist Grundlage der FEM-Fehlerindikatoren, vgl. Babuška/Miller (1984), Meißner/Wibbeler (1991), Zienkiewicz/Zhu (1992). Sie gilt ebenso wie Gleichung (13) wegen der Beliebigkeit der virtuellen Verschiebungen auch für den speziellen Fall $\delta \hat{v}_\alpha = \hat{v}_\alpha$.

Setzt man die auf der Basis der Gleichung (13) unter Nutzung von Gleichung (16) erzielte Lösung daher in das Ausgangsfunktional (11) ein, so ergibt sich mit den Formänderungsenergien

$$\Pi_{(i)} = \frac{1}{2} \sum_e \iiint_{\Omega_e} v_{\alpha|\beta} E^{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\gamma|\delta} d\Omega \quad (20)$$

$$\hat{\Pi}_{(i)}^{min} = \frac{1}{2} \sum_e \iiint_{\Omega_e} \hat{v}_{\alpha|\beta} E^{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{v}_{\gamma|\delta} d\Omega \quad (21)$$

die wichtige *Schränkeneigenschaft*

$$\boxed{\hat{E}_{min} = \Pi_{(i)} - \hat{\Pi}_{(i)}^{min} \geq 0} \quad (22)$$

der FEM-Approximation. Die Näherungslösung konvergiert in energetischer Hinsicht stets von unten gegen die exakte Lösung. Deformationsmodelle sind in diesem Sinne stets zu steif.

Das Minimum (22) ist allgemein als *Energienorm*

$$\boxed{\|v_{\alpha} - \hat{v}_{\alpha}\|_E = (2 \hat{E}_{min})^{\frac{1}{2}}} \quad (23)$$

bekannt und als energetisches Fehlermaß bei numerischen FEM-Auswertungen gebräuchlich.

Die *hinreichende Bedingung*

$$\delta^2 \hat{E} = \frac{\partial^2 \hat{E}}{\partial \hat{v}_{\alpha|\beta} \partial \hat{v}_{\gamma|\delta}} \delta \hat{v}_{\alpha|\beta} \delta \hat{v}_{\gamma|\delta} > 0 \quad (24)$$

für die Existenz des Fehlerminimums des Variationsfunktionals (11)

$$\delta^2 \hat{E} = \sum_e \iiint_{\Omega_e} \hat{v}_{\alpha|\beta} E^{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{v}_{\gamma|\delta} d\Omega > 0 \quad (25)$$

ist wegen der quadratischen Form, der Beliebigkeit der virtuellen Verschiebungen und bei Einhaltung der Randbedingungen (15) für unverschiebliche Systeme unmittelbar erfüllt.

Aus dem übergeordneten Variationsprinzip (11,12) leitet sich schließlich auch das *Prinzip vom Minimum der potentiellen Energie* ab. Definiert man mit Gleichung (20)

$$\begin{aligned} \hat{\Pi} &= \hat{E} - \Pi_{(i)} \\ &= \frac{1}{2} \sum_e \iiint_{\Omega_e} \hat{v}_{\alpha|\beta} E^{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{v}_{\gamma|\delta} d\Omega \\ &\quad - \sum_e \iiint_{\Omega_e} \hat{v}_{\alpha|\beta} E^{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\gamma|\delta} d\Omega \end{aligned} \quad (26)$$

so folgt mit Anwendung des Gaußschen Integralsatzes und nach Einsetzen von Gleichung (3, 5, 6) das bekannte *Funktional der potentiellen Energie*

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\Pi} &= \frac{1}{2} \sum_e \iiint_{\Omega_e} \hat{v}_{\alpha|\beta} E^{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{v}_{\gamma|\delta} d\Omega \\ &\quad - \sum_e \iint_{\Gamma_{\sigma}} \hat{v}_{\alpha} \bar{p}^{\alpha} d\Gamma - \sum_e \iint_{\Gamma_v} \hat{v}_{\alpha} a^{\alpha} d\Gamma \\ &\quad - \sum_e \iiint_{\Omega_e} \hat{v}_{\alpha} \bar{q}^{\alpha} d\Omega \end{aligned}} \quad (27)$$

dessen erste Variation

$$\boxed{\delta \hat{\Pi} = 0} \quad (28)$$

für konservative Kräfte ebenfalls auf Gleichung (13) führt. Setzt man diese Gleichung wieder in das Funktional (26) ein, so ergibt sich als *Minimum der potentiellen Energie*

$$\hat{\Pi}_{min} = -\frac{1}{2} \sum_e \iiint_{\Omega_e} \hat{v}_{\alpha|\beta} E^{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{v}_{\gamma|\delta} d\Omega \quad (29)$$

4 Iterative Gleichungslöser

Für die Auflösung algebraischer Gleichungssysteme mit symmetrischer, positiv definiten Koeffizientenmatrix nach Gleichung (16) bieten Gradientenverfahren mit konjugierten Gradienten (CG-Verfahren) und vorkonditionierten Koeffizientenmatrizen (PCG-Verfahren) wegen des reduzierten numerischen Aufwandes gegenüber exakten Gleichungslösern (Cholesky-, Gauß-Elimination) erhebliche Vorteile, vgl. Hackbusch (1991), Schwarz (1991).

Für das Verständnis der Gradientenverfahren ist das übergeordnete Variationsprinzip ebenfalls von fundamentaler Bedeutung. Das Variationsfunktional (11) wird entsprechend abgewandelt, um nun den Fehler bei der Lösung des Gleichungssystems zu erfassen.

4.1 Gradientenverfahren

Für die iterative Lösung des Gleichungssystems (16) kann als *Fehlerfunktional*

$$E = \frac{1}{2} (\mathbf{V}^T - \mathbf{X}^T) \mathbf{K} (\mathbf{V} - \mathbf{X}) \geq 0 \quad (30)$$

formuliert werden, worin \mathbf{X} die Approximation der unbekannt exakten Lösung

$$\mathbf{V} = \mathbf{X} + \tilde{\mathbf{X}} \quad (31)$$

darstellt und mit $\tilde{\mathbf{X}}$ der Fehler bei der Lösung des Gleichungssystems betrachtet wird. Hinsichtlich der Steifigkeitsbeziehung (16) liefert die Approximation das *Residuum*

$$\mathbf{R} = -\mathbf{K}\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{K}(\mathbf{X} - \mathbf{V}) = \mathbf{K}\mathbf{X} - \mathbf{F} \quad (32)$$

Die erste Variation des Funktionals

$$\begin{aligned} \delta E &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{X}^T} \delta \mathbf{X} \\ &= -\delta \mathbf{X}^T \mathbf{K} (\mathbf{V} - \mathbf{X}) \end{aligned} \quad (33)$$

$$\delta E = \delta \mathbf{X}^T \mathbf{R} \quad (34)$$

ergibt die *Methode des steilsten Abstiegs* für δE , wenn man zur Verbesserung der Approximation

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}_0 + \lambda \Delta \mathbf{X} \quad (35)$$

das Residuum

$$\Delta \mathbf{X} = \delta \mathbf{X} = -\mathbf{R} \quad (36)$$

wählt.

Zur Bestimmung der *optimalen Schrittweite* λ wird das Funktional (30) erneut verwendet

$$E = \frac{1}{2} (\mathbf{V}^T - \mathbf{X}_0^T - \lambda \Delta \mathbf{X}^T) \mathbf{K} (\mathbf{V} - \mathbf{X}_0 - \lambda \Delta \mathbf{X}) \geq 0 \quad (37)$$

Die notwendige Bedingung für die Existenz des Minimums

$$\begin{aligned}\delta E &= \frac{\partial E}{\partial \lambda} \delta \lambda \\ &= -\delta \lambda \Delta \mathbf{X}^T \mathbf{K}(\mathbf{V} - \mathbf{X}_0 - \lambda \Delta \mathbf{X}) = 0\end{aligned}\quad (38)$$

führt mit Gleichung (36) über

$$\mathbf{R}^T \mathbf{K}(\mathbf{V} - \mathbf{X}_0 + \lambda \mathbf{R}) = 0$$

auf die bekannte Bestimmungsgleichung

$$\boxed{\lambda = \mathbf{R}^T \mathbf{R} / \mathbf{R}^T \mathbf{K} \mathbf{R}} \quad (39)$$

des Gradientenverfahrens.

Setzt man Gleichung (38) in Gleichung (37) ein, so ergibt sich mit den Gleichungen (32, 30, 36) als *Minimum des Fehlerfunctionals*

$$\boxed{\begin{aligned}E_{min} &= E_0 - \frac{1}{2} \lambda \mathbf{R}^T \mathbf{R} \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{R}^T (\mathbf{K}^{-1} - \lambda \mathbf{I}) \mathbf{R} \geq 0\end{aligned}} \quad (40)$$

das die Konvergenzrate des Approximationsschrittes zeigt. Die exakte Lösung würde unmittelbar mit der Lösung des *speziellen Eigenwertproblems*

$$E_{min} = 0$$

erzielt.

4.2 Präkonditioniertes Gradientenverfahren

Wählt man in den Gleichungen (34, 35, 36) zur Verbesserung der Approximation hingegen eine *Präkonditionierung des Residuums*

$$\boxed{\Delta \mathbf{X} = \delta \mathbf{X} = -\mathbf{C}^{-1} \mathbf{R}} \quad (41)$$

durch eine symmetrische, positiv definite Koeffizientenmatrix \mathbf{C} , so ergibt sich aus Gleichung (37) das *Fehlerfunktional*

$$\boxed{E = \frac{1}{2} (\mathbf{V}^T - \mathbf{X}_0^T + \lambda \mathbf{R}^T \mathbf{C}^{-1}) \mathbf{K} (\mathbf{V} - \mathbf{X}_0 + \lambda \mathbf{C}^{-1} \mathbf{R}) \geq 0} \quad (42)$$

Als *optimale Schrittweite* folgt daraus

$$\boxed{\lambda = \mathbf{R}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{R} / (\mathbf{R}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{K} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{R})} \quad (43)$$

Das *Minimum des Fehlerfunctionals*

$$\boxed{\begin{aligned}E_{min} &= E_0 - \frac{1}{2} \lambda \mathbf{R}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{R} \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{R}^T (\mathbf{K}^{-1} - \lambda \mathbf{C}^{-1}) \mathbf{R} \geq 0\end{aligned}} \quad (44)$$

wird gegenüber Gleichung (40) erheblich verbessert, wenn die Inverse \mathbf{C}^{-1} des Präkonditionierers die Inverse der Gesamtsteifigkeitsmatrix "bestmöglich" approximiert. Auch hier würde die exakte Lösung mit

$$E_{min} = 0$$

über die Lösung des *allgemeinen Eigenwertproblems* direkt erreicht.

4.3 Präkonditioniertes konjugiertes Gradientenverfahren

Für das konjugierte Gradientenverfahren sind *zwei aufeinanderfolgende Approximationsschritte*

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_1 &= \mathbf{X}_0 + \lambda_1 \Delta \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{X} &= \mathbf{X}_1 + \lambda \Delta \mathbf{X} \end{aligned} \quad (45)$$

für die Konstruktion der neuen Lösung \mathbf{X} zu betrachten. Gleichung (32) liefert dafür die beiden *Residuen*

$$\boxed{\mathbf{R}_0 = \mathbf{K}\mathbf{X}_0 - \mathbf{F} = -\mathbf{K}(\mathbf{V} - \mathbf{X}_0)} \quad (46)$$

$$\boxed{\mathbf{R}_1 = \mathbf{K}\mathbf{X}_1 - \mathbf{F} = -\mathbf{K}(\mathbf{V} - \mathbf{X}_0 - \lambda_1 \Delta \mathbf{X}_1)} \quad (47)$$

mit

$$\boxed{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_0 = \lambda_1 \mathbf{K} \Delta \mathbf{X}_1} \quad (48)$$

Zur *Minimierung des Fehlers* zwischen exakter Lösung und Näherungslösung wird wiederum das *Fehlerfunktional* (30) verwendet.

$$\boxed{E = \frac{1}{2}(\mathbf{V}^T - \mathbf{X}_0^T - \lambda_1 \Delta \mathbf{X}_1^T - \lambda \Delta \mathbf{X}^T)\mathbf{K}(\mathbf{V} - \mathbf{X}_0 - \lambda_1 \Delta \mathbf{X}_1 - \lambda \Delta \mathbf{X}) \geq 0} \quad (49)$$

Gemäß Gleichung (34) ergibt sich aus den Gleichungen (46, 47) für den *Abstieg*

$$\delta E_1 = \Delta \mathbf{X}^T \mathbf{R}_1 = \Delta \mathbf{X}^T \mathbf{R}_0 + \lambda_1 \Delta \mathbf{X}^T \mathbf{K} \Delta \mathbf{X}_1 \quad (50)$$

Um die neue Suchrichtung $\Delta \mathbf{X}$ gegenüber dem reinen Gradientenverfahren, vgl. Gleichung (36), zu modifizieren, wird üblicherweise mit

$$\boxed{\Delta \mathbf{X}^T \mathbf{K} \Delta \mathbf{X}_1 = 0} \quad (51)$$

eine *konjugierte Richtung* $\Delta \mathbf{X}$ gewählt, die \mathbf{K} -orthogonal zur Suchrichtung $\Delta \mathbf{X}_1$ des vorherigen Iterationsschrittes ist. Dazu wird die alte Suchrichtung mit dem Residuum \mathbf{R}_1 unter Berücksichtigung der Vorkonditionierung linear kombiniert

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{X} &= \rho \Delta \mathbf{X}_1 - \mathbf{C}^{-1} \mathbf{R}_1 \\ &= \frac{\rho}{\lambda_1} \mathbf{K}^{-1}(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_0) - \mathbf{C}^{-1} \mathbf{R}_1 \end{aligned} \quad (52)$$

Mit den Gleichungen (51, 48) folgt daraus die *Orthogonalitätsbedingung*

$$\begin{aligned} \rho &= \mathbf{R}_1^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{K} \Delta \mathbf{X}_1 / \Delta \mathbf{X}_1^T \mathbf{K} \Delta \mathbf{X}_1 \\ &= \lambda_1 \mathbf{R}_1^T \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_0) / (\mathbf{R}_1^T - \mathbf{R}_0^T) \mathbf{K}^{-1}(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_0) \end{aligned} \quad (53)$$

Mit Gleichung (47) kann das Funktional (49) umgeformt werden in

$$E = E_1 + \lambda \mathbf{R}_1^T \Delta \mathbf{X} + \frac{1}{2} \lambda^2 \Delta \mathbf{X}^T \mathbf{K} \Delta \mathbf{X} \quad (54)$$

mit

$$E_1 = \frac{1}{2} \mathbf{R}_1^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{R}_1 \quad (55)$$

Als notwendige Bedingung für die Existenz des Minimums gilt

$$\begin{aligned}\delta E &= \frac{\partial E}{\partial \lambda} \delta \lambda \\ &= \delta \lambda (\mathbf{R}_1^T \Delta \mathbf{X} + \lambda \Delta \mathbf{X}^T \mathbf{K} \Delta \mathbf{X}) = 0\end{aligned}\quad (56)$$

woraus sich die *optimale Schrittweite*

$$\boxed{\lambda = -\mathbf{R}_1^T \Delta \mathbf{X} / \Delta \mathbf{X}^T \mathbf{K} \Delta \mathbf{X}}\quad (57)$$

ergibt.

Setzt man Gleichung (56) in das Funktional (54) ein, so folgt als Minimalwert

$$E_{min} = E_1 - \frac{1}{2} \lambda^2 \Delta \mathbf{X}^T \mathbf{K} \Delta \mathbf{X} \geq 0\quad (58)$$

bzw.

$$E_{min} = E_1 + \frac{1}{2} \lambda \mathbf{R}_1^T \Delta \mathbf{X} \geq 0\quad (59)$$

Setzt man schließlich die Gleichungen (55, 52, 48, 53) ein, so folgt als *Minimum des Fehlerfunktionals*

$$E_{min} = \frac{1}{2} \mathbf{R}_1^T \left[\mathbf{K}^{-1} - \lambda \mathbf{C}^{-1} \left(\mathbf{I} - \mathbf{K} \frac{\Delta \mathbf{X}_1 \otimes \mathbf{X}_1^T}{\Delta \mathbf{X}_1^T \mathbf{K} \Delta \mathbf{X}_1} \right) \right] \mathbf{R}_1$$

$$\boxed{E_{min} = \frac{1}{2} \mathbf{R}_1^T \left[\mathbf{K}^{-1} - \lambda \mathbf{C}^{-1} \left(\mathbf{I} - \frac{(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_0) \otimes (\mathbf{R}_1^T - \mathbf{R}_0^T)}{(\mathbf{R}_1^T - \mathbf{R}_0^T) \mathbf{K}^{-1} (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_0)} \mathbf{K}^{-1} \right) \right] \mathbf{R}_1 \geq 0}\quad (60)$$

Gegenüber den Gleichungen (40, 44) sorgt darin der zweite Klammerausdruck für die bekannte Steigerung der Konvergenzrate des CG-Verfahrens, vgl. Hackbusch (1991).

5 Zusammenfassung

Das vorgestellte Variationsprinzip minimiert das Variationsfunktional nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate. Anhand von zwei FEM-Anwendungen wurde gezeigt, daß mit diesem übergeordneten Prinzip auf einfache und direkte Art und Weise die grundlegenden Gleichungen bekannter Verfahren hergeleitet werden können. Von besonderem Vorteil sind dabei das direkte Verständnis der Approximationseigenschaften und die Ergebnisse der Schranken- und Konvergenzeigenschaften, die aus dem Minimalprinzip folgen. Neben der Ableitung theoretischer Grundlagen kann das Variationsprinzip auch unmittelbar für die Aufstellung numerischer Algorithmen der adaptiven FE-Verfahren verwendet werden, vgl. Wibbeler (1995). Es bietet bei iterativen Methoden große Vorteile gegenüber herkömmlichen Verfahren, wenn Anfangs- bzw. Zwischenlösungen geeignete Schätzungen darstellen. Wie gezeigt wurde, erzwingt das Minimalprinzip auch dann die Konvergenz gegen die exakte Lösung. Im Zusammenwirken von adaptiven Verfahren und iterativen Gleichungslösungsmethoden kann damit eine optimale Lösungsstrategie entwickelt werden, wenn die Approximationsfehler der Diskretisierung und die Fehler der Gleichungslösung gemeinsam betrachtet werden, um den FEM-Algorithmus insgesamt zu steuern.

Literatur

1. Babuška, I.; Miller, A.: The Postprocessing Approach in the Finite Element Method, Int. J. Num. Meth. Engrg., 20, (1984).
2. Babuška, I.; Szabó, B.: On the Rates of Convergence of the Finite Element Method, Int. J. Num. Meth. Engrg., 18, (1982).

3. Hackbusch, W.: Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme, Teubner Studienbücher Mathematik, (1991).
4. Meißner, U.; Menzel, A.: Die Methode der finiten Elemente, Springer-Verlag Berlin, (1989).
5. Meißner, U.; Wibbeler, H.: A Least Square Principle for the a posteriori Computation of Finite Element Approximation Errors, Comp. Meth. Appl. Mech. and Engrg., 85, (1991).
6. Schwarz, H.R.: Methode der finiten Elemente, Teubner Studienbücher Mathematik, (1991).
7. Washizu, K.: Variational Methods in Elasticity and Plasticity, Pergamon Press, (1975).
8. Wibbeler, H.: Entwicklung eines adaptiven Finite-Element-Modells zur Simulation seegangsinduzierter Strömungen in geschütteten Wellenbrechern, Berichte des Instituts für numerische Methoden und Informatik im Bauwesen ,TH Darmstadt, Nr. 1/1995.
9. Zienkiewicz, O.C.; Zhu, J.Z.: The Superconvergent Patch Recovery and a posteriori Error Estimates, Int. J. Num. Meth. Engrg., 33, (1992).

Anschrift: Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Udo Meißner, TH Darmstadt, Institut für Numerische Methoden und Informatik im Bauwesen, Petersenstr. 13, D-64287 Darmstadt, e-mail: sekretariat@iib.bauwesen.th-darmstadt.de