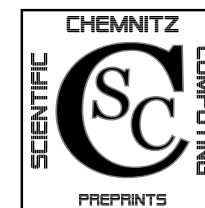


Arnd Meyer

**Programmbeschreibung
SPC-PM3-AdH-XX
Teil 2**

CSC/14-02



**Chemnitz Scientific Computing
Preprints**

Impressum:

Chemnitz Scientific Computing Preprints — ISSN 1864-0087

(1995–2005: Preprintreihe des Chemnitzer SFB393)

Herausgeber:

Professuren für
Numerische und Angewandte Mathematik
an der Fakultät für Mathematik
der Technischen Universität Chemnitz

Postanschrift:

TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik
09107 Chemnitz

Sitz:

Reichenhainer Str. 41, 09126 Chemnitz

<http://www.tu-chemnitz.de/mathematik/csc/>



TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ
Chemnitz Scientific Computing
Preprints

Arnd Meyer

Programmbeschreibung
SPC-PM3-AdH-XX
Teil 2

CSC/14-02

Zusammenfassung

Beschreibung der Finite Elemente Software-Familie

SPC – PM3 – AdH – XX

für: **Scientific Parallel Computing -**
Programm-Modul 3D – adaptiv – Hexaederelemente.

Für XX stehen die einzelnen Spezialvarianten, die hier detailliert geschildert werden.

Stand: Ende 2013

Inhaltsverzeichnis

1 Vorbemerkungen	1
2 Probleme mit transversal-isotropem Material	1
3 Gleichungen vom Sattelpunktstyp	3
4 Probleme der Thermo-Elastizität	5
5 Nichtlineare Probleme der großen Deformationen	7

Some titles in this CSC and the former SFB393 preprint series:

- 11-01 P. Benner, M.-S. Hossain, T. Stykel. Low-rank iterative methods of periodic projected Lyapunov equations and their application in model reduction of periodic descriptor systems. February 2011.
- 11-02 G. Of, G. J. Rodin, O. Steinbach, M. Taus. Coupling Methods for Interior Penalty Discontinuous Galerkin Finite Element Methods and Boundary Element Methods. September 2011.
- 12-01 J. Rückert, A. Meyer. Kirchhoff Plates and Large Deformation. April 2012.
- 12-02 A. Meyer. The Koiter shell equation in a coordinate free description. February 2012.
- 12-03 M. Balg, A. Meyer. Fast simulation of (nearly) incompressible nonlinear elastic material at large strain via adaptive mixed FEM. July 2012.
- 13-01 A. Meyer. The Koiter shell equation in a coordinate free description – extended. September 2013.
- 13-02 R. Schneider. With a new refinement paradigm towards anisotropic adaptive FEM on triangular meshes. September 2013.
- 13-03 A. Meyer. The linear Naghdi shell equation in a coordinate free description. November 2013.

The complete list of CSC and SFB393 preprints is available via
<http://www.tu-chemnitz.de/mathematik/csc/>

Author's addresses:

Arnd Meyer
TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik
09107 Chemnitz, Germany

unter Mitwirkung von:
Janine Glänzel, Dr. Martina Weise, Dr. Roman Unger, Dr. Matthias Pester,
Dr. Michael Weise

<http://www.tu-chemnitz.de/mathematik/>

- [15] R. Unger, *Obstacle Description with Radial Basis Functions for Contact Problems in Elasticity*, Preprint CSC09-01 TUChemnitz (2009).
- [16] J. Glänzel, *Kurzvorstellung der 3D-FEM Software SPC-PM3AdH-XX*, Preprint CSC09-03 TUChemnitz (2009).
- [17] M. Balg, A. Meyer *Numerische Simulation nahezu inkompressibler Materialien unter Verwendung von adaptiver, gemischter FEM*, Preprint CSC10-02 TUChemnitz (2010).
- [18] M. Weise, *Elastic Incompressibility and Large Deformations*, Dissertation, TUChemnitz, (2014).
- [19] M. Weise, A. Meyer, *Grundgleichungen für transversal isotropes Materialverhalten*, Preprint CSC10-03 TUChemnitz (2010).
- [20] M. Balg, A. Meyer, *Fast simulation of (nearly) incompressible nonlinear elastic material at large strain via adaptive mixed FEM*, Preprint CSC12-03 TUChemnitz (2012).
- [21] M. Balg, J. Lang, A. Meyer, G. Rünger, *Array-based reduction operations for a parallel adaptive FEM*, R.Keller et al(Eds.): Facing the Multicore-Challenge III 2012 Lecture Notes in Comp.Sci. Vol.7686, pp.25-36,(2013).

1 Vorbemerkungen

Der Teil 1 der Programmbeschreibung zu **SPC_PM3AdH-XX** behandelte die für alle Varianten gültigen grundlegenden Datenstrukturen und die Organisation zur effektiven Nutzung der adaptiven FEM. Hierzu wurde die Basisimplementierung **A3D_Original** erläutert, die der Lösung einfacher Reaktions-Diffusionsgleichungen oder linearer Elastizitätsgleichungen mit isotropem Material vorbehalten ist.

Im vorliegenden Teil 2 werden die daraus abgeleiteten Programm-Module zur Lösung komplizierterer Gleichungen erläutert. Hierbei handelt es sich vorrangig um die Lösung von mechanischen Deformationsproblemen mit allgemeinerem Materialverhalten oder Temperaturabhängigkeit. Alle diese Programm-Module sind aus kleinen Änderungen der Grundvariante **A3D_Original** hervorgegangen.

Die erste Verallgemeinerung betrifft das Materialverhalten der elastischen Deformationen. Der Übergang zu transversal-isotropem Material erfordert im wesentlichen die Benutzung eines Vektorfeldes der „Faserorientierung“ (**A3D-TraIso**).

Zum zweiten wird die Kopplung mit einem weiteren skalaren Feld vorgesehen. Dies ist der hydrostatische Druck bei **A3D-inkLE** (linear elastisches Material mit fast-Inkompressibilität als gemischte FEM) bzw. die Temperatur bei den Varianten der Thermoelastizität (**A3D-ThEl** für isotropes Material, **A3D-TEAni** für die Kopplung von Thermoelastizität mit transversal isotropem Material).

Zum dritten werden Nichtlinearitäten im Materialverhalten (und geometrische Nichtlinearität der großen Verzerrungen) betrachtet in **A3D-LD** (**LD** für „large deformations“) und **A3D-inkLD** (mit zusätzlicher Inkompressibilität).

2 Probleme mit transversal-isotropem Material

SPC-PM3-AdH-TraIso (in: **A3D-TraIso**)

Dieser Programmmodul ist die Erweiterung der linear elastischen Deformationsberechnung eines 3-dimensionalen Körpers unter äußeren Kräften aus dem Basismodul **A3D_Original** auf ein nicht mehr isotropes Materialgesetz.

Besonderes Kennzeichen ist die notwendige Bereitstellung eines Vektorfeldes $\mathbf{a}(x)$, das die Vorzugsrichtung („Faserorientierung“) am Punkt x des Gebietes definiert. Die zugrundeliegende Differentialgleichung ist die gleiche wie im isotropen Fall:

finde $\mathbf{u} \in \mathbb{H}^1(\Omega)^3$ (mit ev. vorgegebenen Werten auf Randstücken $\Gamma_D \subset \partial\Omega$), so dass

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = l(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{H}_D^1(\Omega)^3$$

(\mathbf{v} hat vorgegebene Werte 0 auf Γ_D),

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) \, d\Omega$$

mit dem linearen Verzerrungstensor

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) = ((\nabla \mathbf{v}) + (\nabla \mathbf{v})^T)/2.$$

Der Spannungstensor ist linear vom Verzerrungstensor $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})$ abhängig als

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) = \mathfrak{C} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})$$

und der Materialtensor 4. Stufe \mathfrak{C} hat über $\mathbf{a}(x)$ eine Ortsabhängigkeit wie in [19] ausführlich dargelegt ist:

$$\mathfrak{C} = 2\mu \mathfrak{I} + \lambda (\mathbb{1}) + \alpha (\mathbf{a}\mathbf{a}\mathbf{1} + \mathbf{1}\mathbf{a}\mathbf{a}) + 2(\mu_a - \mu) \hat{\mathfrak{C}} + \beta \mathbf{a}\mathbf{a}\mathbf{a}\mathbf{a}$$

Dabei ist $\hat{\mathfrak{C}} : \mathbf{E} = \mathbf{a}\mathbf{a} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{a}\mathbf{a} \, \forall \mathbf{E}$ und im weiteren bezeichnet stets $\mathbb{1}$ die identische Abbildung als Tensor 2. Stufe, $\mathbf{1} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{u} \, \forall \mathbf{u}$ und \mathfrak{I} die identische Abbildung als Tensor 4. Stufe, $\mathfrak{I} : \mathbf{E} = \mathbf{E} \, \forall \mathbf{E}$.

Hierbei sind die 5 Materialkonstanten

$$\mu, \mu_a, \lambda, \alpha, \beta$$

zu benutzen, die für jeden Materialbereich konstant sind. Sie werden aus 5 Ingenieurskonstanten erhalten (UP: *getmaterial*), die im Eingabefile *xxx.std* gesetzt werden. (vgl. [19] Formel (17)). Die Implementierung (siehe z. B. File *element.f*) benutzt die Voigtische Notation einer (6x6)-Matrix anstelle des Tensors \mathfrak{C} (vgl. Teil 1 Abschnitt 6.3).

Folgerichtig sind diejenigen Module gegenüber **A3D-Original** geändert, die die Berechnung des Spannungstensors benötigen (also wesentlich: *element.f*, *GetSigma.f*, *GesEstErr.f* u.ä.).

Die Orstabhängigkeit der Vektorfunktion $\mathbf{a}(x)$ erzeugt eine technische Schwierigkeit: Nicht alle Problemata können (elementorientiert) im Eingabefile gespeichert sein, sondern ein besonderer Funktionsruf der Abb. $x \rightarrow \mathbf{a}(x)$ ist als Zusatz-Unterprogramm bereitzustellen.

Hierzu wurde *FibreInfo* (in *fibrefinfo.f*) neu konzipiert, was (extrem beispielabhängig!) vom Nutzer zu spezifizieren ist. Eine einfachere Version entsteht, wenn $\mathbf{a}(x)$ in Teilgebieten (Materialbereichen) konstant gewählt wird. Dann sind wieder alle Materialdaten im Eingabefile festgelegt.

Literatur

- [1] J. Bramble, J. Pasciak, and J. Xu, *Parallel multilevel preconditioners*, Math. Comput., 55:1-22, (1990).
- [2] S. Zhang. *Multilevel schwarz methods* Numer. Math. 63:512-539,(1992).
- [3] A. Meyer, *Projected PCGM for Handling Hanging Nodes in Adaptive Finite Element Procedures*, Preprint SFB393 99-25 TUChemnitz (1999).
- [4] A. Meyer, P.Steinhorst, *Betrachtung zur Spektraläquivalenz für das Schur-Komplement im Bramble-Pasciak-CG bei piezoelektrischen Problemen*, Preprint CSC07-08 TUChemnitz (2008).
- [5] A. Meyer, P.Steinhorst, *Überlegungen zur Parameterwahl im Bramble-Pasciak-CG für gemischte FEM*, Preprint SFB393 05-07 TUChemnitz (2005).
- [6] P. Steinhorst, *Anwendung adaptiver FEM für piezoelektrische und spezielle mechanische Probleme*, Dissertation, TU Chemnitz, 2009
- [7] S. Beuchler, A. Meyer, M. Pester, *SPC-PM3AdH v 1.0 - Programmer's Manual*, Preprint SFB393 01-18 TUChemnitz (2001), (revised version, August 2003).
- [8] A. Meyer, *Projection Techniques embedded in the PCGM for Handling Hanging Nodes and Boundary Restrictions* in: Engineering Computational Technology B.H.V.Topping and Z.Bittnar, (Eds.), Saxe-Coburg Publ., Stirling, Scotland, 147-165, (2002).
- [9] M. Pester, *Bibliotheken zur Entwicklung paralleler Algorithmen - Basisroutinen für Kommunikation und Grafik*, Preprint SFB393 02-01 TUChemnitz (2002).
- [10] M. Pester, *Visualization Tools for 2D and 3D Finite Element Programs - Users Manual*, Preprint SFB393 02-02 TUChemnitz (2002).
- [11] A. Meyer, R. Unger, *Projection methods for contact problems in elasticity*, Preprint SFB393 04-04 TUChemnitz (2004).
- [12] R. Unger, *Unterraum-CG-Techniken zur Bearbeitung von Kontaktproblemen*, Dissertation TUChemnitz (2006).
- [13] A. Meyer, *Grundgleichungen und adaptive Finite-Elemente-Simulation bei „Großen Deformationen“*, Preprint CSC07-02 TUChemnitz (2007).
- [14] A. Meyer, *Error Estimators and the Adaptive Finite Element Method on Large Strain Deformation Problems*, Math.Meth.Appl.Sci.32:2148-2159,(2009)

Newton-System ist dann im Diskreten das lineare Gleichungssystem

$$A(\mathbf{u}) \delta \mathbf{u} = \mathbf{r}(\mathbf{u})$$

mit dem Residuum $\mathbf{r}(\mathbf{u})$ (analog zu $tl(\mathbf{v}) - a(\mathbf{u}; \mathbf{v}) \forall \mathbf{v}$) auf der rechten Seite. Abermals geschieht die Lösung mit BPX-vorkonditioniertem CG und die Matrixmultiplikation mit $A(\mathbf{u})$ als Summe der Elementanteile.

Die aktuelle Näherung der Knotenwerte von \mathbf{u} wird stets auf der Datenstruktur $\mathbf{X}(\text{MNode}+1 \dots 3, j) \forall j$ gehalten und also nach der Newton-Korrektur $\mathbf{u} := \mathbf{u} + \delta \mathbf{u}$ rückgespeichert (im Hauptprogramm nach dem Aufruf von *DoNewtonCor*).

Der Programmmodul

SPC-PM3-AdH-inkLD (in: **A3D-inkLD**)

ist gewissermaßen die Vereinigung von **SPC-PM3-AdH-inkLE** mit **SPC-PM3-AdH-LD**. Bei den nichtlinearen Materialgesetzen wird sich die (fast-)Inkompressibilität des Materials ebenso wie im linear elastischen durch einen sehr großen Materialparameter (z.B. D_2 in der obigen Materialfunktion) zeigen. Deshalb ist es üblich die Materialfunktion in die Summe von 2 Anteilen

$$\psi(\mathbf{C}) = \psi_D(\mathbf{C}_D) + \kappa(\psi_V(\iota))^2$$

aufzuspalten, wobei

$$\mathbf{C}_D = \mathbf{C} \iota^{-(1/3)}, \quad \iota = \det \mathbf{C}$$

der „deviatorische“ Anteil des rechten Cauchy-Green-Tensors ist. Bei zunehmender Inkompressibilität gilt nun $\kappa \rightarrow \infty$, also $\psi_V(\iota) \rightarrow 0$ (was gleichbedeutend mit $\det \mathbf{C} \rightarrow 1$ ist). Deshalb ist die zu Abschnitt 4 analoge Substitution hier

$$p = \kappa \psi_V(\iota).$$

Für die beiden Teile der Materialfunktion wird hier vorläufig

$$\psi_D(\mathbf{C}) = c_{10}(a_1 \iota^{-(1/3)} - 3), \quad \psi_V(\iota) = \ln(\iota)$$

benutzt ($\iota = \det \mathbf{C}$ wie oben), aber weitere Verallgemeinerungen sind wieder leicht durch Änderung des UP *MaterialFunction* zu erhalten. Die genauen Zusammenhänge, die resultierende Pseudo-Sattelpunktsgleichung und die Newton-Linearisierung zu einer Folge von echten Sattelpunktsgleichungen sind in der Dissertation von Martina Weise [18] ausführlich beschrieben.

Zur Finite Element Diskretisierung wird wieder das Taylor-Hood-Element bevorzugt benutzt. Hier gelten analoge Angaben wie in Abschnitt 4.

3 Gleichungen vom Sattelpunktstyp

SPC-PM3-AdH-inkLE (in: **A3D-inkLE**)

Bei linear elastischen Deformationsproblemen tritt im isotropen Fall das Materialgesetz

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu \boldsymbol{\epsilon} + \lambda(\text{tr } \boldsymbol{\epsilon})\mathbf{I}$$

auf, wobei die beiden Lamé-Konstanten μ und λ aus E (E-Modul) und ν (Querkontraktionszahl) berechnet werden als

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

Fast inkompressible Materialien haben ν nahe an 0.5, weshalb $\lambda \rightarrow \infty$ zu Fehlern in der FE-Approximation führt („volume locking“). Abhilfe schafft die Einführung des hydrostatischen Druckes $p = \lambda \text{tr } \boldsymbol{\epsilon} = \lambda \text{div } \mathbf{u}$ und der Übergang zur Sattelpunktsformulierung:

$$\begin{aligned} a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(p, \mathbf{v}) &= l(\mathbf{v}) & \forall \mathbf{v} \in \mathbb{H}_D^1(\Omega)^3 \\ b(q, \mathbf{u}) - c(p, q) &= 0 & \forall q \in L_2(\Omega), \end{aligned}$$

wobei jetzt

$$\begin{aligned} a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) &= \int_{\Omega} 2\mu \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) \, d\Omega, \\ b(p, \mathbf{u}) &= \int_{\Omega} p \text{div } \mathbf{u} \, d\Omega, \\ c(p, q) &= \int_{\Omega} \frac{1}{\lambda} p q \, d\Omega \end{aligned}$$

sind. Die FE-Diskretisierung muss in diesem Fall die LBB-Bedingungen erfüllen, so dass die Benutzung von 2 verschiedenen FE-Ansätzen für \mathbf{u} und p notwendig ist. Üblich ist die Benutzung der Taylor-Hood-Elemente (27-Knoten-triquadratische Ansätze für \mathbf{u} und 8-Knoten-trilineare Ansätze für p). Es ist aber auch triquadratisch+elementkonstant denkbar. Deshalb wurde das kleine Unterprogramm *ElemDefine* eingeführt, das die 3 INTEGER-Werte **NeX**, **NeU**, **NeP** liefert. Hierbei ist **NeX** für die gewählte Geometrie-Abbildung

„Masterelement“ $[-1, 1]^3 \longleftrightarrow$ „Wertelement“ verantwortlich:

$$x(\hat{x}) = \sum_{i=1}^{\text{NeX}} N_i(\hat{x}) x^{(i)}$$

mit $\hat{x} \in [-1, 1]^3$ und $x^{(i)}$ den **NeX** Knoten des „Wellelements“. Für **NeX** ist 8 oder 27 sinnvoll (dann sind $N_i(\hat{x})$ die trilinearen bzw. triquadratischen Formfunktionen). **NeU** definiert die \mathbf{u} -Ansatzfunktionen im Element, vorrangig ist **NeU=27·3** für die triquadratischen Ansatzfunktionen. **NeP** definiert die skalaren Ansatzfunktionen für das Feld p und darf **NeP=8** (Taylor-Hood-Elemente) oder **NeP=1** (elementkonstanter Ansatz) sein.

Die Sattelpunktsstruktur zieht die Berechnung von 3 Elementmatrizen A_{el}, B_{el}, C_{el} nach sich, die theoretisch zu den jeweiligen Gesamtsteifigkeitsmatrizen assembliert würden und das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^T & -C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{u} \\ \underline{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{b} \\ 0 \end{pmatrix}$$

für die Vektoren $\underline{u} \in \mathbb{R}^{3n}$, $\underline{p} \in \mathbb{R}^{n_p}$ der entsprechenden Knotenwerte liefern. Abermals wird A, B, C nicht assembliert, sondern die Matrix×Vektor-Multiplikationen im Löser summieren über alle Element-Anteile.

Die beiden symmetrischen Matrizen A_{el}, C_{el} sind als oberes Dreieck in die Datenstruktur **Solid(JELMatA, .)** bzw. **Solid(JELMatC, .)** eingepackt, die Rechteckmatrix $B(\text{NeU} \times \text{NeP})$ als volle Matrix auf **Solid(JELMatB, .)** (vgl. UP *assem.f*).

Zum schnellen Lösen des obigen Gleichungssystems kommt der Bramble-Pasciak-CG zur Anwendung. Grundlegende Informationen hierzu, sowie einige Verbesserungen zur Effizienzsteigerung finden sich in [6], [18].

SPC-PM3-AdH-Piezo (in: A3D-Piezo)

Bei der Betrachtung von piezo-elektrischen Materialien entsteht ein gleichartiges Gleichungssystem vom Sattelpunktstyp. Hier ist p das skalare elektrische Potential und

$$\begin{aligned} a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) &= \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) : \mathfrak{C} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) \, d\Omega \\ b(p, \mathbf{u}) &= \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) : \mathfrak{E} \cdot \nabla p \, d\Omega \\ c(p, q) &= \int_{\Omega} \nabla q \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \nabla p \, d\Omega \end{aligned}$$

mit dem Elastizitätstensor \mathfrak{C} (bisher nur isotrop: $\mathfrak{C} = 2\mu\mathfrak{J} + \lambda(\mathbb{I})$) benutzt und einem Tensor 3. Stufe \mathfrak{E} der Kopplung des Gradienten von p zur mechanischen Deformation. Genaueres zu den definierenden Eingangsgrößen ist in [6] ausgeführt. Durch obige Definition ist die Matrix C stets gut positiv definit, weshalb die

Damit muss folgende Iterationsvorschrift ausgeführt werden:

Löse

$$(1) \quad a'(\mathbf{u}; \delta\mathbf{u}, \mathbf{v}) = tl(\mathbf{v}) - a(\mathbf{u}; \mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v}$$

und

$$\mathbf{u} := \mathbf{u} + \delta\mathbf{u}.$$

Wenn

$$(*) \quad \frac{\|\delta\mathbf{u}\|}{\|\mathbf{u}\|} < \epsilon_{\text{Newton}}, \quad \text{dann } t := t + \Delta t$$

solange bis $t = 1$ erreicht ist, sonst weiter bei (1).

Die Steuerung der Newton-Schritte übernimmt die Routine *DoNewtonCor* (Datei *aNetzQ/donewtoncor.f*) sowie die Nutzer-Abfrage im Hauptprogramm.

Übliche Vorgehensweise ist folgende:

Mehrfaches Lösen der Newton-Gleichung mit genügend kleinem festen Δt . Dazu wenige Schritte (ev. totale) Netzverfeinerung. Dann wird durch Einschalten der Inkrementierung (Steuerbyte '1') der Test (*) aktiviert und t nach je 2...4 Newton-Schritten auf festgehaltenem Netz vergrößert. Dies kann automatisch durch das Steuerbyte 'A' erfolgen bis zum Erreichen von $t = 1$, wo durch Eingabe des Steuerbytes '1' die Inkrementierung wieder ausgeschaltet wird und nun wieder unter Nutzersteuerung die Newton-Konvergenz (mehrmals Byte '0') abgewartet werden sollte. Dann kann weitere Netzverfeinerung (mit konstantem $t = 1$) vorgenommen werden.

Die Finite Elemente Diskretisierung dieses Prozesses erfordert zunächst die Berechnung von $a'(\mathbf{u}; \delta\mathbf{u}, \mathbf{v})$, die aufgrund der zweifachen Abhängigkeit der $a(\cdot; \cdot)$ -Form von \mathbf{u} sich als

$$a'(\mathbf{u}; \delta\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega_0} \mathbf{E}(\mathbf{u}; \mathbf{v}) : \mathfrak{C} : \mathbf{E}(\mathbf{u}; \delta\mathbf{u}) \, d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} \text{Grad}\mathbf{v}^T : (\mathbb{T} \cdot \text{Grad}\delta\mathbf{u}) \, d\Omega_0$$

ergibt. Der "tangente" Materialtensor \mathfrak{C} entsteht durch die 2. Ableitung von $\psi(\cdot)$ nach \mathbf{C} als

$$\mathfrak{C} = 4 \left(\sum_{k,j=1}^3 \frac{\partial^2 \psi}{\partial a_k \partial a_j} [\mathbf{C}^{k-1} \mathbf{C}^{j-1}] + \frac{\partial \psi}{\partial a_2} \mathfrak{J} + \frac{\partial \psi}{\partial a_3} \hat{\mathbf{c}} \right)$$

(hier ist $\hat{\mathbf{c}} : \mathbf{E} = \mathbf{C} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{C} \quad \forall \mathbf{E}$). Deshalb werden im UP *MaterialFunction* die 2. Ableitungen von ψ bereitgestellt. Der Aufbau der (6×6) -Materialmatrix (Voigtsche Notation) aus diesen Ableitungen erfolgt im UP *MaterialTensor*.

Indem für $\delta\mathbf{u}$ und \mathbf{v} alle FE-Formfunktionen des Elements eingesetzt werden, entsteht hieraus die Elementsteifigkeitsmatrix $A_{el}(\mathbf{u})$ wie in [13] beschrieben. Das

die Richtungsableitung des Verzerrungstensors $\mathbf{E}(\mathbf{u})$ (der großen Deformation) in Richtung \mathbf{v} :

$$2\mathbf{E}(\mathbf{u}; \mathbf{v}) = \text{Grad } \mathbf{v} + \text{Grad } \mathbf{v}^T + \text{Grad } \mathbf{u} \cdot \text{Grad } \mathbf{v}^T + \text{Grad } \mathbf{v} \cdot \text{Grad } \mathbf{u}^T.$$

Das Materialgesetz manifestiert sich in der nichtlinearen Abhängigkeit des 2. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors \mathbf{T} vom rechten Cauchy-Green-Tensor \mathbf{C}

$$\mathbf{C} = (\mathbf{I} + \text{Grad } \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{I} + \text{Grad } \mathbf{u}^T) = \mathbf{I} + 2\mathbf{E}(\mathbf{u}).$$

Diese Abhängigkeit wird durch die Wahl eines Energiefunktionalis

$$W(\mathbf{C}) = \int_{\Omega_0} \psi(a_1, a_2, a_3) d\Omega_0$$

festgelegt. Die Materialfunktion ψ (Energiedichte) hängt von den Invarianten des rechten Cauchy-Green-Tensors ab, die wiederum einfache Funktionen der 3 Pseudoinvarianten $a_k = \frac{1}{k} \text{tr } \mathbf{C}^k$ sind. Deshalb ergibt sich

$$\mathbf{T} = 2 \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{C}} = 2 \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \psi}{\partial a_k} \mathbf{C}^{k-1}$$

als leicht angebar, indem eine Routine (*MaterialFunction*) aus den 3 Werten a_k alle ersten und zweiten Ableitungen von ψ generiert. Diese Routine muss bei Änderungen des Materialgesetzes ausgetauscht werden, hat aber den Vorteil, dass nur die skalaren Abbildungen

$$(a_1, a_2, a_3) \mapsto \left(\frac{\partial \psi}{\partial a_k}, \frac{\partial^2 \psi}{\partial a_k \partial a_j} \right)$$

zu implementieren sind. Wegen der Struktur von \mathbf{T} sind keine weiteren Änderungen im Programm bei Änderung des Materialgesetzes nötig. Beispielsweise ist die Funktion ψ beim gern benutzten Neo-Hooke-Material für gummi-ähnliche Materialien einfach

$$\psi(a_1, a_2, a_3) = c_{10} (a_1 - \ln(\iota) - 3) + D_2 \ln(\iota)^2, \quad \iota = \det \mathbf{C} = (a_1^3/6 - a_1 a_2 + a_3).$$

Die Lösung des nichtlinearen Systems

$$a(\mathbf{u}; \mathbf{v}) = l(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v}$$

erfolgt mit Hilfe eines inkrementellen Newton-Verfahrens. Mit $t := \Delta t$ (nach Eingabe $\Delta t = 1/M$) wird eine Folge von Newton-Iterationen generiert.

Hierzu sei $a'(\mathbf{u}; \delta \mathbf{u}, \mathbf{v})$ die erste Ableitung von $a(\mathbf{u}; \mathbf{v})$ nach \mathbf{u}

$$(\text{Newton-Linearisierung: } a(\mathbf{u} + \delta \mathbf{u}; \mathbf{v}) = a(\mathbf{u}; \mathbf{v}) + a'(\mathbf{u}; \delta \mathbf{u}, \mathbf{v}) + \mathcal{O}(\|\delta \mathbf{u}\|^2)).$$

LBB-Bedingung entfällt und gleichgradige Polynome für \mathbf{u} und p erlaubt sind. Deshalb kann *ElemDefine* im Programmmodul **SPC-PM3-AdH-Piezo** auch einfach $\text{NeP}=\text{NeX}=\text{NeIN}$ u. $\text{NeU}=3 \cdot \text{NeX}$ setzen.

4 Probleme der Thermo-Elastizität

Dieser Programmmodul dient zur Simulation von linearen thermoelastischen Problemen mit stationärem Temperaturfeld. In

$$\text{SPC-PM3-AdH-ThEl} \quad (\text{in: } \mathbf{A3D-ThEl})$$

wird die einfache Isotropie im Temperaturverhalten als auch in der mechanischen Deformation benutzt. Der Programmmodul

$$\text{SPC-PM3-AdH-TEAni} \quad (\text{in: } \mathbf{A3D-TEAni})$$

dient der anisotropen Erweiterung. Das skalare Feld $\vartheta(x)$ steht für die Temperaturverteilung im Festkörper Ω . Dann ist die Verformung durch Temperaturexpansion zusätzlich zu äußeren Kräften aus der Elastizitätsgleichung berechenbar, in die jetzt ein temperaturabhängiger Term der Dehnungs-Spannungs-Abbildung eingeht:

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}, \vartheta) = \boldsymbol{\mathfrak{C}} : (\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) - (\vartheta - \vartheta_0)\mathbf{A}).$$

Im Allgemeinfall steht $\boldsymbol{\mathfrak{C}}$ (Tensor 4. Stufe) für das Materialgesetz und der Tensor 2. Stufe \mathbf{A} für die ev. anisotrope Temperaturexpansion. Im isotropen Fall wird wieder

$$\boldsymbol{\mathfrak{C}} = 2\mu \mathcal{J} + \lambda(\mathbf{I}\mathbf{I}) \quad \text{und} \quad \mathbf{A} = \alpha \mathbf{I}$$

benutzt mit dem Temperaturexpansionskoeffizient α (Maßeinheit: 1/K). Also ergibt sich folgender 2-stufiger Prozeß:

1. Berechnung einer Temperaturverteilung $\vartheta(x)$ aus:

$$c(\vartheta, v) = l_1(v) \quad \forall v \in \mathbb{H}_D^1(\Omega)$$

(ϑ hat ev. Dirichlet-Randbedingungen auf Teilen des Randes $\Gamma_{D,1}$ und $\partial\Omega = \Gamma_{D,1} \cup \Gamma_{N,1}$)

$$c(\vartheta, v) = \int_{\Omega} \kappa \nabla \vartheta \cdot \nabla v d\Omega$$

$$l_1(v) = \int_{\Omega} q(x) v(x) d\Omega + \int_{\Gamma_{N,1}} g(x) v(x) dS$$

2. Mit dem Feld ϑ wird das Deformationsproblem gelöst:

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = b(\vartheta, \mathbf{v}) + l_2(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in (\mathbb{H}_D^1(\Omega))^3$$

(\mathbf{u} hat ev. Dirichlet-Randbedingungen auf Teilen des Randes $\Gamma_{D,2}$ und $\partial\Omega = \Gamma_{D,2} \cup \Gamma_{N,2}$)

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) : \boldsymbol{\mathcal{C}} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) d\Omega$$

$$b(\vartheta, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \vartheta \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) : \boldsymbol{\mathcal{C}} : \mathbf{A} d\Omega$$

$$l_2(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Gamma_{N,2}} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} dS - \int_{el} \vartheta_0 \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) : \boldsymbol{\mathcal{C}} : \mathbf{A} d\Omega$$

Im isotropen Fall vereinfacht sich $b(\vartheta, \mathbf{v})$ zu

$$\int_{\Omega} \vartheta \alpha (2\mu + 3\lambda) \operatorname{div} \mathbf{v} d\Omega.$$

Die FEM-Diskretisierung beider Gleichungen benutzt für \mathbf{u} und ϑ die gleichen Formfunktionen pro Element (also $\text{NeIN}=8, 20$ oder 27) und im UP *ElemDefine* wird wieder $\text{NeX} = \text{NeP} = \text{NeIN}$ und $\text{NeU} = 3 * \text{NeIN}$ gesetzt (isoparametrische Elemente). Somit werden die 3 Elementmatrizen A_{el}, B_{el} und C_{el} (zu den 3 Bilinearformen $a(\mathbf{u}, \mathbf{v}), b(\vartheta, \mathbf{v})$ und $c(\vartheta, v)$ gehörend) analog zum Programmmodul **SPC-PM3-AdH-inkLE** aufgebaut. Allerdings wird der PCG-Löser für beide Teilgleichungen einzeln aufgerufen:

1. $C\underline{\vartheta} = q$ ergibt $\underline{\vartheta}$,
2. $A\underline{\mathbf{u}} = B\underline{\vartheta} + \underline{\mathbf{b}}$ ergibt $\underline{\mathbf{u}}$.

Hier sind A, B, C wieder die (theoretischen) Assemblierungen der Elementmatrizen A_{el}, B_{el}, C_{el} . Der Knotenvektor $\underline{\mathbf{b}}$ ist z.Z. nur aus den äußeren Kräften gebildet ($l_2(\mathbf{v})$, wenn \mathbf{v} alle \mathbf{u} -Ansatzfunktionen durchläuft) und $\vartheta_0 \equiv 0$. Bei einer nicht konstanten Initialtemperatur muss $\underline{\mathbf{b}}$ noch aus den entsprechenden Elementintegralen

$$- \int_{el} \vartheta_0 \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) : \boldsymbol{\mathcal{C}} : \mathbf{A} d\Omega$$

(\forall Formfunktionen \mathbf{v} des Elements) assembliert werden.

Bemerkung zum Eingabefile:

Neben der Festlegung von $\text{NDof} = 4$ (Freiheitsgrade 1...3 sind die Verschiebungen und 4 die Temperatur) sind mehr Materialparameter nötig als in der Grundvariante. Deshalb sind im Eingabefile unter dem Schlüsselwort **#MATERIAL** in folgender Reihenfolge die folgenden Parameter (einfacher Fall: **A3D-ThEl**) anzugeben:

E-Modul, Querkontraktionszahl ν , Wärmeleitkoeffizient κ , Temperatureausdehnungskoeffizient α , Volumenlast (f_1, f_2, f_3) , Wärmequelle q .

Für den anisotropen Fall (**A3D-TEAni**) kommen weitere Parameter zur Faserinformation hinzu.

5 Nichtlineare Probleme der großen Deformationen

Der Programmmodul

SPC-PM3-AdH-LD (in: **A3D-LD**)

ist die Erweiterung von **A3D-Original** auf nichtlineare Deformationsprobleme. Diese sind gekennzeichnet durch die Beachtung der sog. "großen" oder "finiten" Verzerrungen sowie durch ein nichtlinear-elastisches Materialgesetz. Die theoretischen Grundlagen sind ausführlich in [13] dargelegt. Das Kräftegleichgewicht

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

wird im deformierten Gebiet Ω_t verstanden ($x \in \Omega_t, x = X + \mathbf{u}, X \in \Omega_0$) und ins Ausgangsgebiet Ω_0 "zurückgezogen". Dies ergibt die zu lösende nichtlineare Variationsgleichung zur Definition der Verschiebung $\mathbf{u}(X)$ als:

$$a(\mathbf{u}; \mathbf{v}) = l(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in (\mathbb{H}_D^1(\Omega_0))^3$$

mit

$$a(\mathbf{u}; \mathbf{v}) = \int_{\Omega_0} \mathbb{T}(\mathbf{C}(\mathbf{u})) : \mathbf{E}(\mathbf{u}; \mathbf{v}) d\Omega_0.$$

Wieder hat \mathbf{u} eventuell vorgegebene Dirichlet-Randdaten auf Randteilen Γ_D ($\partial\Omega_0 = \Gamma_D \cup \Gamma_N$), dort ist $\mathbf{v} \equiv 0$.

Zur Markierung von nichtlinearen Abhängigkeiten wird das Semikolon verwendet, indem alle Größen vor dem Semikolon „nichtlinear“ und alle nach dem Semikolon linear eingehen.

Der Tensor 2. Stufe $\mathbf{E}(\mathbf{u}; \mathbf{v})$ ist die Symmetrisierung von $(1 + \operatorname{Grad} \mathbf{u}) \cdot \operatorname{Grad} \mathbf{v}^T$ bzw.