

Melanie Krüger

Energie-Entropie-konsistente Zeitintegratoren für die nichtlineare Thermoviskoelastodynamik

Herausgeber: Peter Betsch

Schriftenreihe des Lehrstuhls für
Numerische Mechanik

Band VI

Energie-Entropie-konsistente Zeitintegratoren für die nichtlineare Thermoviskoelastodynamik

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Ingenieurwissenschaften

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Melanie Krüger

aus Siegen

eingereicht bei der Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät
der Universität Siegen

Siegen 2012

Hauptreferent: Prof. Dr.-Ing. Peter Betsch
Korreferenten: Prof. Dr.-Ing. Michael Groß
Prof. Dr.-Ing. Stefanie Reese

Tag der mündl. Prüfung: 26.03.2013

Impressum

Prof. Dr.-Ing. habil. Peter Betsch
Lehrstuhl für Numerische Mechanik
Universität Siegen
57068 Siegen
ISSN 1866-1203
URN urn:nbn:de:hbz:467-7312
Zugl.: Siegen, Univ., Diss., 2013

Jesus Christus spricht: Meine Kraft ist in den Schwachen mächtig!

(2. Kor. 12,9; Jahreslosung 2012)

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Lehrstuhl für numerische Mechanik der Universität Siegen im Zeitraum von 2007 bis 2012.

Zuerst möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Betsch für die Möglichkeit der Erarbeitung dieser Dissertation und die Übernahme des Hauptreferates bedanken. Ein großer Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. Michael Groß, der mir in all den Jahren mit Rat und Tat zur Seite stand. Vielen Dank Michael für die zahlreichen Diskussionen und Telefonate sowie die Übernahme eines der Korreferate.

Weiterhin möchte ich mich bei Frau Prof. Dr.-Ing. Stefanie Reese bedanken, die sich sofort bereit erklärt hat, das zweite Korreferat zu übernehmen. Danken möchte ich auch den Prüfern Herrn Prof. Dr.-Ing. Claus-Peter Fritzen und Herrn Prof. Dr.-Ing. Michael Weyrich.

Ich danke allen Mitarbeitern und Mitarbeiterinnen des Lehrstuhls für die angenehme Arbeitsatmosphäre und die freundliche Zusammenarbeit. Gerade in der "heißen" Phase der Promotion sind die richtigen Worte zur richtigen Zeit besonders wichtig. Mir werden die aufmunternden und lustigen Mahlzeiten mit "Nachtisch" sowie die Flammkuchenpartys in Erinnerung bleiben. Vielen Dank für die vielen fachlichen Diskussionen und die netten Gespräche. Besonders möchte ich mich bei dir, Gisela, für die Hilfe bei dem ganzen "Papierkram" bedanken.

Ein sehr großer Dank gilt meinem Ehemann Philipp, der meine Dissertation genauso oft gelesen hat wie ich, meinen Eltern Elke und Adolf und dem lieben Rest der Familie, die mich immer wieder ermutigt und unterstützt haben. Danke für euer Tragen durch die letzten Jahre, für eure Liebe, Gebete und Geduld mit mir - ihr seid mir eine große Hilfe gewesen.

Ebenfalls möchte ich meinen Freunden danken, die sich immer wieder Worte wie Zeitintegration, Thermoviskoelastodynamik und Konsistenz anhören mussten und nicht gemeckert haben.

Siegen, April 2013

Melanie Krüger

Zusammenfassung

Diese Arbeit befasst sich mit der Energie-Entropie-konsistenten Simulation eines thermoviskoelastischen Modellproblems und Kontinuums. Beide Systeme werden durch Poissonsche Variablen (Impuls, Konfiguration, Entropie und interne Variable) beschrieben. Durch den Impuls und die Konfiguration als eigenständige Variablen sind die Bewegungsgleichungen als Differentialgleichungen erster Ordnung gegeben. Die thermische Gleichung wird aus dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik hergeleitet. Dabei ist der Wärmefluss durch das Fouriersche Gesetz beschrieben. Die Bewegungsgleichungen und die thermische Evolutionsgleichung werden durch das konstitutive Gesetz der inneren Energie gekoppelt. Zur Beschreibung des viskosen Deformationsverhaltens wird als vierte Gleichung eine viskose Evolutionsgleichung eingeführt. Diese Gleichung basiert auf einer deformationswertigen internen Variablen und einem vierstufigen Nachgiebigkeitstensor, der für das Modellproblem auf den eindimensionalen Fall reduziert wird. Die innere Dissipation wird als quadratische Form der viskosen Mandel-Spannung dargestellt.

Die vier Differentialgleichungen erster Ordnung werden durch das weiterentwickelte *General Equation for Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling* (GENERIC) Format in eine Matrix-Vektor Schreibweise umgeformt. Im Weiteren wird dies erweitertes GENERIC Format genannt. Das erweiterte GENERIC Format liefert durch die zugehörigen Degenerationsbedingungen für isolierte Systeme spezielle strukturerhaltende Eigenschaften. Ein isoliertes System ist in diesem Fall definiert als ein adiabtes System, das keine mechanische Arbeit verrichtet. Eigenschaften eines isolierten Systems sind neben einem konstanten Impuls und Drehimpuls, eine konstante Gesamtenergie, eine zunehmende Entropie und eine abfallende Lyapunov-Funktion. Die Lyapunov-Funktion stellt ein weiteres Stabilitätskriterium für thermoviskoelastische Systeme dar.

Neu ist auch das konsistente Einbinden von externen mechanischen und thermischen Lasten. Die externen Lasten stören die zuvor beschriebenen Erhaltungseigenschaften für isolierte Systeme. In diesem Fall werden die zugehörigen Bilanzgleichungen des Systems (Konsistenzseigenschaften) betrachtet.

Die Diskretisierung in der Zeit wird für das Modellproblem und das Kontinuum mit zwei verschiedenen Integratoren durchgeführt. Zum einen wird die Mittelpunktsregel und zum anderen der erweiterte TC (*Thermodynamically Consistent*) Integrator verwendet. Der erweiterte TC Integrator wird dabei so konstruiert, dass das zugrundeliegende, erweiterte GENERIC Format die algorithmischen Erhaltungseigenschaften nach der zeitlichen

Diskretisierung für ein isoliertes System wiedergibt. Für das Kontinuum muss zusätzlich eine räumliche Diskretisierung erfolgen, welche durch die Finite-Elemente-Methode beschrieben wird. Um eine energiekonsistente Diskretisierung zu erhalten, muss für die räumliche Diskretisierung eine Projektion der Testfunktion der thermischen Evolutionsgleichung durchgeführt werden. Weiterhin wird deutlich, dass die Energiekonsistenz lediglich durch den erweiterten TC Integrator gewährleistet werden kann, der eine ausgezeichnete Stabilität bewirkt.

Die externen mechanischen und thermischen Lasten werden durch Festlagerungen, externe mechanische Lasten, thermische Zwangsbedingungen und externe thermische Lasten in das System eingebracht. Um die thermischen Zwangsbedingungen zu erfüllen, wird das Prinzip der Lagrangeschen Multiplikatoren verwendet. Bekannt geworden sind die Lagrangeschen Multiplikatoren durch die Bewegung eines Systems mit Zwangsbedingungen.

Für das Modellproblem wird das erweiterte GENERIC Format nach der Diskretisierung durch einen additiven Term der externen Lasten erweitert. Im Gegensatz dazu beinhaltet das erweiterte GENERIC Format des Kontinuums, welches hier auf die starken Formen angewendet wird, bereits die externen Lasten und liefert die nötigen schwachen Formen zur Lösung des Systems.

Die Konsistenzeigenschaften werden durch ausgewählte Simulationsbeispiele verdeutlicht, die verschiedenen Randbedingungen unterworfen werden.

Da das System von den Poissonschen Variablen nichtlinear abhängig ist, wird die monolithische Lösung mit Hilfe des Newton-Raphson-Verfahrens ermittelt. Hierbei werden zwei Newton-Raphson-Verfahren benötigt. Das eine Verfahren dient der Ermittlung der viskosen internen Variable auf lokaler Ebene bzw. auf Elementebene. Ein weiteres Verfahren wird verwendet, um das Residuum der Bewegungsgleichungen, der thermischen Evolutionsgleichung und gegebenenfalls der Projektionsgleichung auf globaler Ebene zu lösen. Dies wird auch mehrstufiges Newton-Raphson-Verfahren genannt.

Schlagwörter: erweitertes GENERIC Format, erweiterter TC Integrator, thermoviskoelastisches Modellproblem, thermoviskoelastisches Kontinuum, Poissonsche Variablen, thermomechanische Kopplung, Randbedingungen, Lagrangescher Multiplikator, interne Variable, Nachgiebigkeitstensor, Mittelpunktsregel, monolithische Lösung, Energie-Entropie-konsistent, konsistente Tangente.

Abstract

This work deals with an energy-entropy-consistent simulation of a thermoviscoelastic model problem and continuum. Both systems are described by the Poissonian variables - linear momentum, configuration, entropy and internal variable. The linear momentum and the configuration as independent variables lead to the equations of motion as differential equations of first order. The thermal evolution equation is derived by the second law of thermodynamics. The heat flux is described by Fourier's law. The equations of motion and the thermal evolution equation are linked through the constitutive equation of the internal energy. A viscous evolution equation, as fourth equation, is necessary to describe the viscous deformation behavior. This equation is based on deformation-like internal variables and a fourth order compliance tensor, which is restricted to the one-dimensional case for the model problem. The internal dissipation is given by a quadratic form of the viscous Mandel stress.

The four differential equations of first order are transformed by the refined *General Equation for Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling* (GENERIC) format into a matrix-vector notation. This format is called in the following enhanced GENERIC format. The enhanced GENERIC format yields with the related degeneracy conditions structure preservation properties for an isolated system. An isolated system is defined as an adiabatic system, which does not do mechanical work. These properties are in addition to a constant linear and angular momentum, the constant total energy, an increasing total entropy and a decreasing Lyapunov function. The last one is a stability criterion for thermoviscoelastic systems.

New is furthermore the consistent embedding of external mechanical and thermal loads. These external loads affect the aforementioned preservation properties of isolated systems. In this case the related balance equations of the system (consistency properties) are considered.

The discretization in time is done for the model problem and the continuum with two different integrators. On the one hand the midpoint-rule and on the other hand the enhanced TC (*Thermodynamically Consistent*) integrator is used. The enhanced TC integrator is constructed such, that the underlying enhanced GENERIC format reflects the algorithmic properties after the discretization in time, for an isolated system. For a continuum a discretization in space is necessary, which is given by the Finite-Element-Method. A projection of the test function of the thermal evolution equation is necessary

for an energy consistent discretization. Furthermore the energy consistency can only be guaranteed using the enhanced TC integrator, which leads to enhanced stability.

The external mechanical and thermal loads are included with fixed bearings, external mechanical loads, thermal constraints and external thermal loads. The Lagrangian multipliers are used to fulfill the thermal constraint. These Lagrangian multipliers are well known for constraining the motion of a system.

The enhanced GENERIC format will be extended for the model problem after the discretization with the external loads. In contrast to that, the enhanced GENERIC format for the continuum, which is here given in the strong evolution equations, contains the external loads. This yields the necessary weak evolution equations for the solution of the system.

The consistency properties are shown for representative numerical examples with different boundary conditions.

The coupled mechanical system under consideration is formulated in terms of the Poissonian variables. This leads to a monolithic solution with the Newton-Raphson method. Therefore, two Newton-Raphson methods are necessary, one to resolve the viscous internal variable on local (element) level and another one to resolve the equations of motion, the thermal evolution equation and if applicable the equation of projection on global level. This is called a multi-level Newton-Raphson method.

Keywords: enhanced GENERIC format, enhanced TC integrator, thermoviscoelastic model problem, thermoviscoelastic continuum, Poissonian variables, thermomechanical coupling, boundary conditions, Lagrangian multiplier, internal variable, compliance tensor, midpoint-rule, monolithic solution, energy-entropy-consistent, consistent tangent.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	xiii
Tabellenverzeichnis	xvii
1. Einleitung – Motivation	1
1.1. Gliederung der Arbeit	7
2. Thermoviskoelastisches Modellproblem	9
2.1. Anfangswertproblem des Doppelpendels	9
2.1.1. Energie, Entropie und Lyapunov-Funktion	11
2.1.2. Evolutionsgleichungen	12
2.1.3. Anfangswertproblem 1. Ordnung	15
2.1.4. Thermische Zwangsbedingung	15
2.2. Erweitertes GENERIC Format	17
2.2.1. Strukturelle Eigenschaften	19
2.3. Zeitliche Diskretisierung	24
2.3.1. Mittelpunktsregel	24
2.3.2. Erweiterter TC Integrator	27
2.3.3. Vergleich der Integratoren	31
2.3.4. Algorithmische strukturelle Eigenschaften	33
3. Numerische Beispiele des Modellproblems	39
3.1. Reine Wärmeleitung	39
3.2. Kriechversuch	42
3.3. Thermische Zwangsbedingung für das Pendel 1	44
3.4. Numerischer Vergleich der Integratoren	47
3.4.1. Referenzlösung	48
3.4.2. Weiches Material	50
3.4.3. Steifes Material	54
4. Thermoviskoelastisches Kontinuum	59
4.1. Kinematik	60
4.1.1. Konfigurationen und Bewegungen	60
4.1.2. Deformationen und Streckungen	61
4.1.3. Entropie und interne Variable	63

4.1.4.	Randbedingungen	65
4.2.	Kinetik	65
4.2.1.	Gesamtenergie	65
4.2.2.	Gesamtentropie	66
4.2.3.	Spannungen	67
4.3.	Evolutionsgleichungen	68
4.3.1.	Starke Formen	68
4.3.2.	Schwache Formen	72
4.3.3.	Thermische Zwangsbedingung	73
4.4.	Bilanzen	74
4.4.1.	Massenbilanz	74
4.4.2.	Impulsbilanz	74
4.4.3.	Drehimpulsbilanz	75
4.4.4.	Energiebilanz	75
4.4.5.	Entropiebilanz	76
4.4.6.	Bilanz der Lyapunov-Funktion	77
4.5.	Erweitertes GENERIC Format	77
4.5.1.	Thermische Zwangsbedingung	81
4.6.	Diskretisierung	81
4.6.1.	Zeitliche Diskretisierung	82
4.6.2.	Räumliche Diskretisierung	89
4.6.3.	Algorithmische strukturelle Eigenschaften	97
5.	Numerische Beispiele des Kontinuums	103
5.1.	Mechanisch und thermisch isolierte Scheibe	103
5.2.	Mechanische Dirichlet-Ränder und thermische Zwangsbedingungen	110
5.3.	Scheibe mit thermischen Neumann-Rändern	116
5.4.	Anschlagpuffer mit mechanischen Dirichlet- & Neumann-Rändern	122
6.	Auswertung und Ausblick	129
6.1.	Auswertung	129
6.2.	Ausblick	131
A.	Anhang - Neo-Hooke Modell	133
A.1.	Kompressible freie Energie	133
A.2.	Thermische freie Energie	135
A.3.	Viskose freie Energie	136
B.	Anhang - Modellproblem	137
B.1.	Innere Energie für das Modellproblem	137
B.1.1.	Lagrangesche Variablen	137
B.1.2.	Poissonsche Variablen	138

B.1.3.	Ableitungen für das Anfangswertproblem	139
B.1.4.	Ableitungen für die Tangentenmatrix	139
B.2.	Runge-Kutta-Verfahren	141
B.2.1.	Mittelpunktsregel	141
B.3.	Berechnung der partitionierten diskreten Gradienten	142
B.3.1.	Partitionierte diskrete Gradienten - $r = 1$	143
B.3.2.	Partitionierte diskrete Gradienten - $r = 3$	144
B.4.	Newton-Raphson-Verfahren des Modellproblems	145
B.4.1.	Residuum	145
B.4.2.	Tangentenmatrix	146
B.4.3.	Einträge der Tangentenmatrizen	149
B.4.4.	Zwangsbedingung	153
B.4.5.	Abbruchkriterium	154
C.	Anhang - Kontinuum	157
C.1.	Innere Energie des Kontinuums	157
C.1.1.	Ableitungen für das Anfangswertproblem	158
C.1.2.	Ableitungen für die Tangenten	159
C.2.	Viskosität und viskose Nachgiebigkeit	161
C.2.1.	Viskosität	161
C.2.2.	Viskose Nachgiebigkeit	162
C.3.	Voigt-Notation	163
C.3.1.	Skalarmultiplikation zweistufiger Tensoren	164
C.3.2.	Voigt-Notation der viskosen Evolutionsgleichung	164
C.4.	Newton-Raphson-Verfahren des Kontinuums	165
C.4.1.	Residuum	165
C.4.2.	Tangenten	166
C.4.3.	Einträge der Tangenten	170
C.4.4.	Ableitung der partitionierten diskreten Gradienten	174
C.4.5.	Zwangsbedingungen	177
C.4.6.	Abbruchkriterium	178
C.5.	Thermoelastisches System mit Lagrangeschen Variablen	179
C.5.1.	Energie und Entropie	179
C.5.2.	Evolutionsgleichungen	180
C.5.3.	Diskrete Evolutionsgleichungen	180
C.5.4.	Netzverfeinerung	182
C.5.5.	Vergleich der Lagrangeschen mit den Poissonschen Variablen	185

Abbildungsverzeichnis

2.1.	Themoviskoelastisches Doppelpendel	10
2.2.	Wärmefluss zwischen den generalisierten Maxwell-Elementen	13
2.3.	Unterteilung der Zeitachse in finite Zeitelemente	24
3.1.	Temperaturverlauf der reinen Wärmeleitung	41
3.2.	Qualitativer Verlauf eines Relaxations- und Kriechprozesses	42
3.3.	Anfangsposition des Doppelpendels für den Kriechversuch und den Kraftverlauf	43
3.4.	Längen des Doppelpendels für den Kriechversuch	44
3.5.	Gesamtenergie, Lyapunov-Funktion, Gesamtentropie und Temperaturverlauf für zwei Zeitintegratoren mit Zwangsbedingungen	45
3.6.	Bilanzen und Zusatzterm für zwei Zeitintegratoren mit Zwangsbedingungen	46
3.7.	Orbits der Massenpunkte für die Referenzlösung	48
3.8.	Temperaturverlauf, Gesamtenergie, Lyapunov-Funktion und Gesamtentropie der Referenzlösung	49
3.9.	Orbits der Massenpunkte für ein weiches Material	50
3.10.	Temperaturverlauf, Gesamtenergie, Lyapunov-Funktion und Gesamtentropie für das weiche Material	52
3.11.	Bilanzen für das weiche Material	53
3.12.	Drehimpulsbilanz für das weiche Material	54
3.13.	Orbits der Massenpunkte für ein steifes Material	54
3.14.	Temperaturverlauf, Gesamtenergie, Lyapunov-Funktion und Gesamtentropie für das steife Material	56
3.15.	Bilanzen für das steife Material	57
3.16.	Drehimpulsbilanz für das steife Material	57
4.1.	Konfigurationen des Kontinuums	60
4.2.	Tangentenvektoren des Kontinuums	61
4.3.	Deformationen des Kontinuums	62
4.4.	Zwischenkonfiguration des Kontinuums	64
4.5.	Aufteilung des mechanischen und thermischen Randes	65
4.6.	Unterteilung des Zeitintervalls in Zeitschritte	82
4.7.	Räumlich diskretisiertes Kontinuum mit Hilfe der FEM	89
4.8.	Abbildung des Referenzelementes in ein Element der Referenzkonfiguration und der Momentankonfiguration	90

5.1. Kontinuierliche und diskretisierte Scheibe mit Temperaturfeld (isoliert)	103
5.2. Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes - Mittelpunktsregel (isoliert)	105
5.3. Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes - erweiterter TC Integrator (isoliert)	106
5.4. Gesamtenergie, Gesamtentropie und Lyapunov-Funktion (isoliert)	108
5.5. Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes nach $t = 25$ s (isoliert)	109
5.6. Bilanzen (isoliert)	109
5.7. Kontinuierliche und diskretisierte Scheibe mit unisoliertem Rand (ther- mische Zwangsbedingungen)	110
5.8. Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes - Mittelpunktsregel (thermische Zwangsbedingungen)	112
5.9. Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes - erweiterter TC Integrator (thermische Zwangsbedingungen)	113
5.10. Gesamtenergie, Gesamtentropie und Lyapunov-Funktion (thermische Zwangsbedingungen)	114
5.11. Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes nach $t = 1,54$ s (thermische Zwangsbedingungen)	115
5.12. Bilanzen (thermische Zwangsbedingungen)	115
5.13. Zusatzterm (thermische Zwangsbedingungen)	116
5.14. Kontinuierliche Scheibe und diskretisierte Scheibe mit Temperaturfeld (thermische Neumann-Ränder)	117
5.15. Qualitativer Verlauf des externen Wärmeflusses	117
5.16. Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes - Mittelpunktsregel (thermische Neumann-Ränder)	118
5.17. Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes - erweiterter TC Integrator (thermische Neumann-Ränder)	119
5.18. Gesamtenergie, Gesamtentropie und Lyapunov-Funktion (thermische Neumann-Ränder)	120
5.19. Bilanzen (thermische Neumann-Ränder)	121
5.20. Anschlagpuffer eines VW Golfs für den vorderen Stoßdämpfer	122
5.21. Einzelteilzeichnung des Anschlagpuffers	123
5.22. Randbedingungen und Diskretisierung des Anschlagpuffers	123
5.23. Verlauf der z -Komponente der externen Lasten	124
5.24. Bewegung und Temperaturfeld des Anschlagpuffers	125
5.25. Bewegung und Kirchhoffsches Spannungsfeld des Anschlagpuffers	126
5.26. Bewegung und inelastisches Spannungsfeld des Anschlagpuffers	127
5.27. Gesamtenergie, Gesamtentropie und Lyapunov-Funktion des Anschlag- puffers	128
5.28. Bilanzen des Anschlagpuffers	128

C.1. Scheibe (Netzverfeinerung)	183
C.2. Gesamtenergie, Gesamtentropie und Lyapunov-Funktion - y -Koordinate und Temperatur des Punktes P	183
C.3. Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturverlaufes - Mittelpunktsregel in Lagrangeschen Variablen	185
C.4. Gesamtenergie, Gesamtentropie und Lyapunov-Funktion - y -Koordinate und Temperatur des Punktes P für die Mittelpunktsregel in Lagrange- schen Variablen und Poissonschen Variablen sowie für den erweiterten TC Integrator in Poissonschen Variablen	186

Tabellenverzeichnis

3.1. Parameter - Reine Wärmeleitung	39
3.2. Anfangswerte - Reine Wärmeleitung	41
3.3. Parameter - Kriechversuch	42
3.4. Anfangswerte - Kriechversuch	42
3.5. Parameter - Thermische Zwangsbedingung für das Pendel 1	44
3.6. Parameter - Numerischer Vergleich der Integratoren	47
3.7. Lamé-Parameter des weichen und steifen Materials	48
5.1. Lamé- und viskose Parameter (isoliert)	104
5.2. Dichte und thermische Parameter (isoliert)	107
5.3. Lamé- und viskose Parameter (thermische Zwangsbedingungen)	111
5.4. Dichte und thermische Parameter (thermische Zwangsbedingungen)	111
5.5. Lamé- und viskose Parameter (Anschlagpuffer)	124
5.6. Dichte und thermische Parameter (Anschlagpuffer)	124
C.1. Netze für die Berechnung	183
C.2. Anfangs- und Endwerte der Gesamtenergie, der Gesamtentropie und der Lyapunov-Funktion für die verschiedenen Netze	184

1. Einleitung – Motivation

Um Versuche und Testaufbauten so kostengünstig wie möglich zu gestalten, gewinnen Computersimulationen immer mehr an Attraktivität. Die Weiterentwicklung der Computerhardware ermöglicht es, sehr komplexe physikalische Systeme numerisch zu lösen. Dabei können mittlerweile auch Interaktionen der Feldgrößen untereinander, wie z.B. Temperatur und Bewegung, berücksichtigt werden. Für eine schnelle und kostengünstige Lösung sind weiterhin robuste Zeitintegratoren, die die physikalischen Struktureigenschaften exakt wiedergeben, von großer Bedeutung.

Diese Integratoren werden strukturerhaltende Zeitintegratoren genannt und gewinnen durch ihre Robustheit und Langzeitstabilität in den letzten Jahrzehnten an Bedeutung. Ein Vorteil dieser Integratoren ist, dass die Zeitschrittweite während der Simulation geändert werden kann, ohne diese Eigenschaften zu verändern. Dadurch können kritische Bereiche sehr fein aufgelöst werden und Bereiche, in denen keine großen Veränderungen geschehen, mit großen Zeitschrittweiten berechnet werden. Dies erspart sehr viel Rechenaufwand und Kosten.

Bereits in Richtmyer und Morton [88] (lineare Probleme) und Wood [111] (nichtlineare Probleme) wird der Zusammenhang zwischen der Energieerhaltung und der unbedingten numerischen Stabilität durch die Energie-Methode hergeleitet. Dabei wird die Norm des Lösungsvektors als Stabilitätskriterium verwendet, die in bestimmten Fällen die Energie des System widerspiegelt und der Methode so ihren Namen verleiht.

In dieser Arbeit wird ein Energie-Entropie-konsistenter Zeitintegrator für die Thermoviskoelastodynamik konstruiert, der die Struktureigenschaften des Systems wiedergibt. Der Zeitintegrator ermöglicht nicht nur die Erhaltung (isolierte Systeme) bzw. die konsistente Reproduktion der Energiebilanz, sondern auch die konsistente Reproduktion der Entropiebilanz. Als Stabilitätskriterium für nichtlineare Systeme der Thermoviskoelastodynamik wird die Lyapunov-Funktion herangezogen, die die Zusammenhänge zwischen Energie- und Entropiekonsistenz beschreibt.

Im Gegensatz zu konsistenten Integratoren können Standardintegratoren zu numerischen Instabilitäten (s. Simo und Tarnow [101]) führen, da sie eine oder mehrere strukturelle Konsistenzeigenschaften nicht erfüllen. Diese Instabilitäten zeichnen sich durch ein

Ansteigen der Gesamtenergie (*blow-up* Verhalten) aus. Beispielsweise führt die Verwendung der Mittelpunktsregel nach Simo et al. [102] lediglich zur Erhaltung des Impulses und Drehimpulses, aber nicht zur Energieerhaltung eines autonomen Hamiltonschen Systems. Ein weiteres Beispiel ist die Methode von Hughes et al. [40], die basierend auf der Trapezregel einen energieerhaltenden Integrator liefert, der die Drehimpulserhaltung nicht gewährleisten kann.

Um diese Instabilitäten und physikalischen Ungenauigkeiten zu vermeiden, wird immer größeren Wert auf Zeitintegratoren gelegt, die die strukturellen Eigenschaften des Systems exakt wiedergeben. In Simo und Wong [106] wird die Mittelpunktsregel für die Starrkörperrotation als Grundlage verwendet. Um die Konsistenzeigenschaften zu garantieren, wird die Mittelpunktsregel abgeändert und in konvektiven Größen dargestellt. Hierbei wird eine exponentielle Abbildung in der Rotation verwendet. In Labudde und Greenspan [50, 51] werden energiekonsistente Zeitintegratoren für einen und mehrere Massenpunkte entwickelt.

Gonzalez [20] verwendet für die nichtlineare Elastodynamik diskrete Gradienten, um die Energiekonsistenz für allgemeine Probleme zu gewährleisten und gleichzeitig die Drehimpuls- und Impulskonsistenz nicht zu zerstören. In Gonzalez [19] werden, zusätzlich zu den diskreten Gradienten, partitionierte diskrete Gradienten eingeführt, um Hamiltonsche Systeme energiekonsistent zu integrieren. Ein diskreter Gradient findet zudem Anwendung für mechanische Systeme mit Zwangsbedingungen in Betsch [4] und Betsch und Leyendecker [6].

Ein diskreter Gradient wird in der Kontaktmechanik in Hesch und Betsch [34], in der Mehrkörperdynamik in Uhlar und Betsch [109] sowie in Müller et al. [71] für gemischte Elemente behandelt. Groß et al. [28] führt einen algorithmischen Spannungstensor für höhere Genauigkeiten eines Hamiltonschen Systems ein, um die strukturellen Eigenschaften des Systems zu erhalten. Diese algorithmischen Spannungen finden auch Verwendung für die Viskoelastizität in Groß und Betsch [26], für die Thermodynamik in Groß und Betsch [27] und für die Thermoviskoelastodynamik in Groß [25].

Im Gebiet der Hypoelastizität wird eine strukturerhaltende Approximation der internen Kräfte durch Noels et al. [72, 73] eingeführt. In der Elastoplastizität ist die Arbeit von Mohr et al. [69] zu nennen. Hier wird ein algorithmischer Spannungstensor eingeführt, um die Energiekonsistenz einzufordern.

In all diesen Arbeiten wird immer wieder herausgestellt, wie robust diese strukturerhaltenden Zeitintegratoren gegenüber Standardintegratoren sind. Diese Robustheit wird durch die konsistente Wiedergabe der Drehimpulsbilanz und der Energiebilanz hervorgerufen.

Ein Energie-Entropie-konsistentes Modellproblem wird zum ersten Mal für die Thermoelastodynamik in Romero [90] und für die Thermoviskoelastodynamik in García Orden

und Romero [18] betrachtet. Letzteres wird durch ein lineares viskoses Modell beschrieben. Energie-Entropie-konsistent bedeutet in diesem Fall für ein isoliertes System eine gleichbleibende Gesamtenergie und eine stetig ansteigende Entropie. Die strukturellen Konsistenzeigenschaften werden durch den TC (*Thermodynamically Consistent*) Integrator erfüllt. Der TC Integrator basiert auf den, in Gonzalez [19] beschriebenen, partitionierten diskreten Gradienten.

In Krüger et al. [49] wird für ein thermodynamisches Doppelpendel ein Vergleich zwischen dem in Romero [90] und Groß und Betsch [27] verwendeten Integrator durchgeführt. Die Erweiterung des Modellproblems auf ein thermodynamisches Kontinuum erfolgt in Romero [91, 92] durch einen monolithischen und einen *staggered* TC Integrator. Die Temperatur ist keine primäre Variable des Systems und wird nicht räumlich approximiert. Da die Testfunktion der thermischen Gleichung der Temperatur entspricht, muss eine Projektion durchgeführt werden. Diese Projektion projiziert die Temperaturen am Gaußpunkt auf die Knotenwerte, um die Energiekonsistenz zu gewährleisten.

Die bereits beschriebenen strukturerhaltenden Zeitintegratoren unter Verwendung des diskreten Gradienten und der partitionierten diskreten Gradienten sind der Ausgangspunkt dieser Arbeit. Dabei spielen die partitionierten diskreten Gradienten eine sehr große Rolle, um einen strukturerhaltenden Zeitintegrator für ein nichtlineares, thermoviskoelastisches Modellproblem und Kontinuum zu entwickeln. Durch die Erweiterung auf ein thermoviskoelastisches System werden eine interne Variable und ein weiterer partitionierter diskreter Gradient eingeführt.

Die genannten Arbeiten lassen sich in zwei Typen von Systemen einteilen. Zum einen sind die elastischen Systeme zu nennen, die durch die Konfiguration und die Geschwindigkeit (z.B. Hughes et al. [40]) bzw. thermoelastische Systeme, die durch die Konfiguration, die Geschwindigkeit und die Temperatur beschrieben werden (z.B. Groß [25]). Diese Variablen werden als Lagrangesche Variablen definiert.

Zum anderen werden elastische Systeme durch die Konfiguration und den Impuls (z.B. Gonzalez [19]) bzw. thermoelastische Systeme durch die Konfiguration, den Impuls und die Entropie beschrieben (z.B. Romero [91, 92]). Diese Variablen entsprechen den konjugierten Größen der Lagrangeschen Variablen (s. Miehe [65], Willner [110] und Holzapfel [37]) und werden im Folgenden Poissonsche Variablen genannt.

Die Gesamtenergie eines mechanischen Systems in Poissonschen Variablen wird durch die Hamiltonsche Funktion dargestellt (s. Gonzalez [19]). Die Bewegungsgleichungen dieses Systems können in eine Matrix-Vektor-Schreibweise gebracht werden, die sogenannte Hamiltonsche Struktur. Diese Struktur liefert die Erhaltungseigenschaften eines autonomen mechanischen Systems. Für isolierte thermomechanische Systeme wird die Hamiltonsche Struktur durch Romero [91, 92] auf das von Öttinger [80] bekannte GENERIC (*General Equations for the NonEquilibrium Reversible-Irreversible Coupling*)

Format erweitert und auf die schwachen Evolutionsgleichungen angewendet. Dieses GENERIC Format fordert die Energie-, die Drehimpuls- und die Impulserhaltung sowie eine ansteigende Entropie für ein isoliertes System ein.

Das GENERIC Format für thermomechanische Systeme bildet die Grundlage des in den nächsten Kapiteln beschriebenen erweiterten GENERIC Formates für die Thermoviskoelastodynamik. Das erweiterte GENERIC Format wird auf die differentiellen Evolutionsgleichungen des Systems angewendet. Die Evolutionsgleichungen des Kontinuums werden dann in die schwachen Formen überführt und beinhalten dadurch die externen Lasten.

Die Anwendungsgebiete des GENERIC Formates sind sehr vielseitig. Das GENERIC Format wird in Grmela und Öttinger [23] und Öttinger [79] auf komplexe Fluide sowie in Öttinger und Grmela [81] auf die Hydrodynamik angewendet. Weiterhin werden die relativistische Hydrodynamik, die statistische Mechanik und die kinetische Gastheorie im GENERIC Format in Öttinger [80] beschrieben. Weitere Gebiete sind die finite anisotrope Elastizität und Viskoplastizität (s. Hütter und Tervoort [44, 45]) sowie die thermodynamische Formulierung von Festkörpern mit Wärmeleitung und Viskosität (s. Hütter und Svendsen [42]) und von viskoplastischen Festkörpern (s. Hütter und Svendsen [43]). In Mielke [68] wird dissipatives thermoelastisches Materialverhalten betrachtet. Diese Anwendungsgebiete beschränken sich jedoch lediglich auf die Herleitung der Evolutionsgleichungen im GENERIC Format.

Die ersten Arbeiten, die sich mit der zeitlichen Diskretisierung des GENERIC Formates für isolierte Systeme beschäftigen, sind die Arbeiten von Romero [90, 91, 92] (thermomechanische Systeme) und García Orden und Romero [18] (thermoviskoelastisches Modellproblem). Als energiekonsistenter Algorithmus wird der TC Integrator eingeführt.

In der vorliegenden Arbeit wird zum ersten Mal ein erweitertes GENERIC Format für nichtlineare finite thermoviskoelastische Modellprobleme und Kontinua im kontinuierlichen und diskretisierten Fall betrachtet. Zusätzlich werden externe Lasten in das System eingebunden. Die Konsistenzeigenschaften können durch den verwendeten erweiterten TC Integrator gewährleistet werden.

Die Matrix-Vektor Struktur des GENERIC Formates setzt sich aus einer antisymmetrischen Matrix, der sogenannten Poisson-Matrix (s. Landau und Lifshitz [53]) und einer symmetrischen, positiv-semidefiniten Matrix, der sogenannten Ginzburg-Landau-Matrix (s. Landau [52]), zusammen. Dabei enthält die Poisson-Matrix die reversiblen Anteile und die Ginzburg-Landau-Matrix die irreversible Anteile der Bewegung (s. Öttinger und Grmela [81], Grmela und Öttinger [23]). Das GENERIC Format ist eine wesentlich allgemeinere Form als die bis dahin bekannte Matrixformulierung von Jongschaap [46] und Jongschaap et al. [47]. Nach Öttinger [80] liefern die beiden Generatoren (Poisson-Matrix, Ginzburg-Landau-Matrix) eine größere Flexibilität in der Variablenwahl.

Die Erweiterung des GENERIC Formates für thermoviskoelastodynamische Systeme erfordert zwei zusätzliche Matrizen. Diese symmetrischen Matrizen werden auf die Poisson-Matrix und die Ginzburg-Landau-Matrix aufsummiert.

Für ein vorgegebenes Anfangswertproblem spielen die primären Variablen keine große Rolle (s. Romero [90]). Dagegen ist die Wahl für den Algorithmus von sehr großer Bedeutung. So können die primären Variablen im besten Fall eine einfache Formulierung des GENERIC Formates nach sich ziehen und im schlimmsten Fall die Degenerationbedingungen des TC Integrators stören. Romero [90] stellt die Poissonschen Variablen als sehr gut geeignete primäre Variablen dar. In Romero [92] wird der Nachteil der Poissonschen Variablen deutlich. Für ein Kontinuum können lediglich Entropie-Randbedingungen (thermischer Dirichlet-Rand) auf das System aufgebracht werden.

Dieser offensichtliche Nachteil soll in dieser Arbeit durch thermische Zwangsbedingungen (mit Hilfe Lagrangescher Multiplikatoren) behoben werden. Die Zwangsbedingungen liefern ein zu lösendes differential-algebraisches System. Die Lagrangeschen Multiplikatoren werden durch eine weitere Matrix in das erweiterte GENERIC Format eingebunden.

Zur Beschreibung des nichtlinearen thermischen Verhaltens wird das isotrope Fouriersche Gesetz der Wärmeleitung angewendet. Dies liefert einen dissipativen Term für die Wärmeleitung. Im Gegensatz dazu steht die Beschreibung der nichtklassischen Theorie der Thermoelastizität von Green und Naghdi [21]. Das viskose Verhalten wird durch die Einführung interner Variablen wiedergegeben. Diese wurden bereits in Green und Tobolsky [22] für die molekulare Theorie von Polymeren verwendet. Eine Erweiterung auf die kompressible Viskoelastizität mit internen Variablen wird in Lubliner [61] eingeführt. In Haupt [32] wird die Kontinuumsmechanik durch diese internen Variablen beschrieben, wobei die Spannung durch ein Zeitintegral gelöst wird. Dies findet weiterhin Anwendung in LeTallec et al. [57] und LeTallec und Rahier [56].

In Reese [83] werden die Konzepte der internen Variablen gegenübergestellt. Zum einen werden sehr häufig spannungswertige interne Variablen (s. Simo [95], Holzapfel [36], Holzapfel und Simo [39]) und zum anderen deformationswertige interne Variablen (s. Lion [58, 59] und Reese und Govindjee [84, 85]) verwendet.

Die deformationswertigen Variablen liefern ein allgemeineres viskoelastisches Verhalten, das als finite Viskoelastizität bezeichnet wird (s. Reese und Govindjee [84]). Hierbei können die elastischen und viskosen Netzwerke durch das Isomorphiegesetz gleichermaßen beschrieben werden. Die Evolutionsgleichung lässt sich für diese Variablen sehr leicht aufstellen. Zudem kann die thermodynamische Konsistenz sehr einfach gezeigt werden. In Hartmann [31] wird ein finites viskoelastisches Materialmodell, aufbauend auf den Arbeiten von Lion [60] und Sedlan [94], verwendet. In Lion [58, 59] und Hartmann [31] wird ein Materialmodell verwendet, das sich auf den deviatorischen Teil des

Viskositätstensors in Reese und Govindjee [84] beschränkt. Das Bergström-Boyce Modell ist eine allgemeinere Formulierung der in Reese und Govindjee [84] verwendeten Materialformulierung und wird in Dal und Kaliske [16] angewendet. Im Spezialfall gibt das Bergström-Boyce Modell den deviatorischen Anteil des in Reese und Govindjee [84] beschriebenen Materialmodells wieder.

Um eine thermodynamisch konsistente Materialmodellierung zu erreichen, muss die Entropiegleichung erfüllt werden. Dies führt bei Reese und Govindjee [84] zu einer Evolutionsgleichung, die in der Referenzkonfiguration beschrieben und in die Momentankonfiguration überführt wird. Hartmann [31] entwirft die Evolutionsgleichung in der Zwischenkonfiguration und transformiert diese auf die Referenz- und Momentankonfiguration.

In dieser Arbeit wird die viskose Evolutionsgleichung analog zu den Bewegungsgleichungen und der thermischen Gleichung auf der Referenzkonfiguration gebildet. Als geeignete interne Variable wird eine deformationswertige interne Variable verwendet. Die viskose Evolutionsgleichung wird durch einen vierstufigen viskosen Nachgiebigkeitstensors dargestellt, um eine finite Viskoelastizität zu ermöglichen und die Anforderungen an das erweiterte GENERIC Format zu erfüllen.

Als konstitutives Gesetz für thermoviskoelastisches Materialverhalten wird ein kompressibles Neo-Hooke Material (s. Rivlin [89]) verwendet. Weitere bekannte Modelle für gummiartige Stoffe sind das Mooney-Rivlin Material, welches nach Mooney [70] und Rivlin [89] benannt wurde und das Ogden Material (s. Ogden [76, 77]). Letzteres liefert durch die Beschreibung in Eigenwerten ein sehr komplexes Materialmodell. Ein Vorteil ist die hohe Anzahl der Parameter, die eine Anpassung an jedes beliebig vorgegebene Materialverhalten bieten. Anwendung findet das Ogden Material z.B. in Miehe [67], Holzapfel und Simo [38], Simo und Taylor [104] und Müller et al. [71].

Die, durch das erweiterte GENERIC Format beschriebenen, nachfolgenden Evolutionsgleichungen werden für das Modellproblem in der Zeit diskretisiert. Die Diskretisierung wird durch die Mittelpunktsregel als Standardintegrator und den erweiterten TC Integrator als Energie-Entropie-konsistenter Integrator durchgeführt und verglichen.

Das thermoviskoelastische Kontinuum wird mit den gleichen Integratoren in der Zeit diskretisiert. Zusätzlich muss das Kontinuum räumlich approximiert werden. Die räumliche Diskretisierung erfolgt mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode. Analog zu Romero [91] muss eine Projektion der Testfunktionen durchgeführt werden, um die Energiekonsistenz zu gewährleisten.

1.1. Gliederung der Arbeit

Die Arbeit gliedert sich in folgende Bestandteile:

In **Kapitel 2** wird ein thermoviskoelastisches Modellproblem betrachtet. Das Modellproblem besteht aus zwei Massenpunkten und zwei generalisierten Maxwell-Elementen im dreidimensionalen Raum. Neben der Kinematik und der Kinetik des thermoviskoelastischen Doppelpendels wird das erweiterte GENERIC Format für die Massenpunkte und die damit einhergehenden strukturellen Eigenschaften erläutert. Die zeitliche Diskretisierung des Anfangswertproblems erfolgt mit einer Mittelpunktsregel und mit dem erweiterten TC Integrator. Die strukturellen algorithmischen Eigenschaften werden erläutert.

Die numerischen Beispiele des Doppelpendels werden in **Kapitel 3** beschrieben. Als numerische Beispiele werden die reine Wärmeleitung, ein Kriechversuch, eine thermische Zwangsbedingung und der Vergleich der Mittelpunktsregel und des TC Integrators betrachtet. Der Vergleich wird dabei für ein weiches und ein steifes Materialverhalten eines isolierten Systems gezogen. Die strukturellen Eigenschaften werden zur Betrachtung der Stabilität des Systems aufgeführt.

Kapitel 4 beinhaltet die Kinematik und Kinetik eines thermoviskoelastischen Kontinuums. Hierbei werden die Evolutionsgleichungen in schwache Formen überführt und die Bilanzen des Kontinuums betrachtet. Die starken Formen werden in die Matrix-Vektor Schreibweise des erweiterten GENERIC Formates umgeschrieben und liefern durch die Energiebilanz analoge schwache Formen. Die zeitliche Diskretisierung erfolgt durch die Mittelpunktsregel und den erweiterten TC Integrator. Die räumliche Diskretisierung wird mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode durchgeführt. Weiterhin wird für die Energiekonsistenz eine Projektion der Testfunktionen im Räumlichen benötigt. Die strukturellen Eigenschaften und deren algorithmische Umsetzung werden erläutert.

In **Kapitel 5** werden die theoretischen Aspekte der Mittelpunktsregel und des erweiterten TC Integrators aus Kapitel 4 durch numerische Beispiele untermauert. Die Beispiele sind: eine mechanisch und thermisch isolierte Scheibe, eine Scheibe mit mechanischen Dirichlet-Rändern und thermischen Zwangsbedingungen, eine Scheibe mit thermischen Neumann-Rändern und ein Anschlagpuffer mit mechanischen Dirichlet- und Neumann-Rändern. Zur Betrachtung der Stabilität des Systems werden die strukturellen Eigenschaften herangezogen.

Kapitel 6 beinhaltet die Auswertung der Arbeit und einen kurzen Ausblick.

Im **Anhang A** wird das verwendete Neo-Hooke Modell vorgestellt. **Anhang B** enthält die innere Energie des Modellproblems und deren benötigte Ableitungen. Weiterhin wird die Mittelpunktsregel aus dem Runge-Kutta-Verfahren hergeleitet, die partitionierten

diskreten Gradienten berechnet und das Newton-Raphson-Verfahren mit der analytisch konsistenten Tangente beschrieben. In **Anhang C** erfolgt die Aufführung der inneren Energie des Kontinuums und der benötigten Ableitungen. Zudem werden die Viskosität und die viskose Nachgiebigkeit hergeleitet und die Voigt-Notation wird beschrieben. Anschließend folgt die Erläuterung des Newton-Raphson-Verfahrens mit der analytisch konsistenten Tangente des Kontinuums. Zum Schluss werden Lagrangesche Variablen eingeführt, die Auswirkungen einer Netzverfeinerung betrachtet und ein Vergleich zwischen Lagrangeschen und Poissonschen Variablen für ein thermoelastisches Kontinuum gezogen.

2. Thermoviskoelastisches Modellproblem

Als Einstieg in die Thermoviskoelastodynamik wird zunächst ein Doppelpendel im Raum betrachtet. Bereits in den Arbeiten von Romero [90] und Krüger et al. [49] wurde ein planares Doppelpendel mit thermoelastischen Federn eingeführt. Hierbei wird das *General Equation for Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling* (GENERIC) Format von Öttinger [80] als grundlegende Struktur verwendet. In García Orden und Romero [18] werden Massenpunkte und thermoviskoelastische Federn betrachtet.

Aufbauend auf diesen Arbeiten wird nun im Folgenden das System auf den dreidimensionalen Raum erweitert. Zusätzlich werden deformationswertige interne Variablen eingeführt, welche den viskosen Zustand wiedergeben und auf ein erweitertes GENERIC Format führen. Das rheologische Modell der Feder wird um eine Feder-Dämpfer-Reihenschaltung erweitert. Die Parallelschaltung einer Feder und einer Feder-Dämpfer-Reihenschaltung wird auch als generalisiertes Maxwell-Modell bezeichnet. Die deformationswertigen internen Variablen wurden bereits in der Arbeit von Reese [83] untersucht und mit spannungswertigen Variablen verglichen. Die Beschreibung des thermoviskoelastischen Doppelpendels liefert drei Evolutionsgleichungen für jedes Pendel, um seine Bewegung sowie das thermische und viskose Verhalten abzubilden.

Weiterhin wird die Vorgehensweise beschrieben, mit der eine thermische Zwangsbedingung integriert werden kann.

Das erweiterte GENERIC Format wird durch eine Mittelpunktsregel und den erweiterten *Thermodynamically Consistent* (TC) Integrator im Zeitlichen diskretisiert.

2.1. Anfangswertproblem des Doppelpendels

Das thermoviskoelastische Doppelpendel besteht aus zwei Massenpunkten mit den Massen m_1 und m_2 . Die Masse m_1 ist durch ein generalisiertes Maxwell-Element zur einen Seite mit einem Festlager und zur anderen Seite mit der Masse m_2 verbunden (s. Abbildung 2.1).

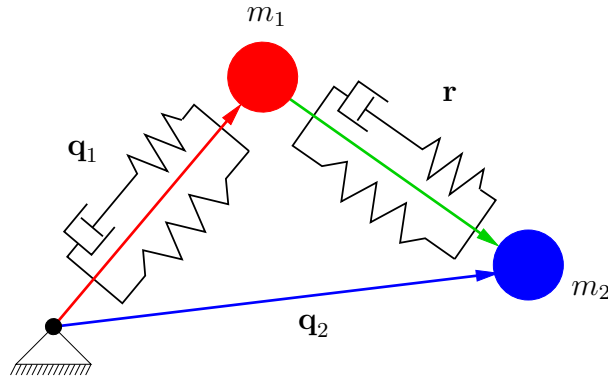


Abbildung 2.1.: Thermoviskoelastisches Doppelpendel

Die Positionsvektoren der Massenpunkte werden im Weiteren mit $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \in \mathbb{R}^3$ bezeichnet. Die Differenz beider Vektoren ist durch

$$\mathbf{r} = \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1 \quad (2.1)$$

gegeben. Die Länge der Federn im Ausgangszustand wird durch L_k , $k \in [1, 2]$ beschrieben, l_k gibt die momentane Länge der Federn wieder:

$$l_1 = \|\mathbf{q}_1\| \quad l_2 = \|\mathbf{r}\| \quad (2.2)$$

Analog lässt sich die Länge der Federn im Ausgangszustand L_k mit den Positionsvektoren im Ausgangszustand \mathbf{q}_1^0 und \mathbf{q}_2^0 bestimmen. Die Hauptstreckung f_k der Federn ist durch das Verhältnis von momentaner Länge zu Ausgangslänge gegeben (vgl. Groß [24], S. 31 ff.):

$$f_k = \frac{l_k}{L_k} \quad (2.3)$$

Als Verzerrungsmaß der Federn wird

$$c_k = f_k^2 \quad (2.4)$$

definiert. Das generalisierte Maxwell-Element besitzt eine Temperatur θ_k und eine interne Variable c_{i_k} , die als Variable für die Dämpfung gewählt wird. Die Differenz zwischen der Umgebungstemperatur θ_∞ und der Temperatur des generalisierten Maxwell-Elementes wird durch

$$\vartheta = \theta_k - \theta_\infty \quad (2.5)$$

beschrieben. Die interne Variable c_{i_k} liefert ein elastisches Verzerrungsmaß c_{e_k} , das den Zusammenhang zwischen der Verzerrung c_k und der internen Variable c_{i_k} herstellt:

$$c_{e_k} = \frac{c_k}{c_{i_k}} \quad (2.6)$$

2.1.1. Energie, Entropie und Lyapunov-Funktion

Die Gesamtenergie H des Systems setzt sich für das Doppelpendel aus den kinetischen Energien der Massenpunkte T_k und den inneren Energien der Federn e_k zusammen. Mit den Poissonschen Variablen $(\mathbf{q}_k, \mathbf{p}_k, s_k, c_{i_k})$ lässt sich die Gesamtenergie H wie folgt darstellen:

$$H = T_1(\mathbf{p}_1) + T_2(\mathbf{p}_2) + e_1(c_1, s_1, c_{i_1}) + e_2(c_2, s_2, c_{i_2}) \quad (2.7)$$

Die kinetische Energie der Massenpunkte T_k ist durch die Masse m_k und den Impuls \mathbf{p}_k des Massenpunktes gegeben:

$$T_k(\mathbf{p}_k) = \frac{1}{2m_k} \mathbf{p}_k \cdot \mathbf{p}_k \quad (2.8)$$

Die Definition für die innere Energie lautet:

$$e_k(c_k, s_k, c_{i_k}) = \psi_k(c_k, s_k, c_{i_k}) + \theta_k(c_k, s_k) s_k \quad (2.9)$$

wobei ψ_k die freie Energiefunktion des generalisierten Maxwell-Elementes darstellt. Wird ein viskoelastisches System betrachtet, gilt für die innere Energie $e_k = \psi_k$. Die Temperatur θ_k und die Entropie s_k stehen in folgendem Zusammenhang:

$$\theta_k = \frac{\partial e_k}{\partial s_k} \quad (2.10)$$

Die Gesamtentropie S des Doppelpendels ist die Summe der einzelnen Entropien s_k :

$$S = s_1 + s_2 \quad (2.11)$$

Die Lyapunov-Funktion V des Systems wird aus der Gesamtenergie H , der Umgebungstemperatur θ_∞ und der Gesamtentropie S gebildet:

$$V = H - \theta_\infty S \quad (2.12)$$

Diese Funktion stellt ein Stabilitätskriterium dar.

Bemerkung 2.1.1 Sollen für die Beschreibung des thermoviskoelastischen Systems Lagrangesche Variablen $(\mathbf{q}_k, \hat{\mathbf{v}}_k, \hat{\theta}_k, c_{i_k})$ mit den Geschwindigkeiten $\hat{\mathbf{v}}_k = \dot{\hat{\mathbf{q}}}_k$ verwendet werden, muss eine Legendre Transformation durchgeführt werden. Die Legendre Transformation der Hamiltonschen Energie in die Lagrangesche Energie $H_k(\mathbf{p}_k) \rightarrow L_k(\mathbf{v}_k)$ und die Legendre Transformation der inneren Energie zur freien Energie $e_k(c_k, s_k, c_{i_k}) \rightarrow \hat{\psi}_k(c_k, \hat{\theta}_k, c_{i_k})$ erfolgt über die Zusammenhänge:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{q}}_k &= \frac{\partial H_k}{\partial \mathbf{p}_k} \\ \theta_k &= \frac{\partial e_k}{\partial s_k} \end{aligned} \quad (2.13)$$

2. Thermoviskoelastisches Modellproblem

Diese ermöglichen es die Lagrangesche Gesamtenergie L aufzustellen:

$$L = \hat{T}_1(\hat{\mathbf{q}}_1) + \hat{T}_2(\hat{\mathbf{q}}_2) - \psi_1(c_1, \hat{\theta}_1, c_{i_1}) - \psi_2(c_2, \hat{\theta}_2, c_{i_2}) \quad (2.14)$$

Somit kann die kinetische Energie der Massenpunkte \hat{T}_k durch die Geschwindigkeiten $\hat{\mathbf{v}}_k$ wie folgt ausgedrückt werden:

$$\hat{T}_k(\hat{\mathbf{v}}_k) = \frac{1}{2} m_k \hat{\mathbf{v}}_k \cdot \hat{\mathbf{v}}_k \quad (2.15)$$

Die innere Energie der Federn \hat{e}_k wird durch die Temperaturen $\hat{\theta}_k$ dargestellt:

$$\hat{e}_k(c_k, \hat{\theta}_k, c_{i_k}) = \hat{\psi}(c_k, \theta_k, c_{i_k}) + \hat{\theta}_k \hat{s}_k(c_k, \hat{\theta}_k) \quad (2.16)$$

Es lässt sich nun folgender Zusammenhang zwischen der Entropie \hat{s}_k und der Temperatur $\hat{\theta}_k$ sowie dem Impuls $\hat{\mathbf{p}}_k$ und der Geschwindigkeit $\hat{\mathbf{v}}_k$ herstellen:

$$\hat{s}_k = -\frac{\partial \hat{\psi}_k}{\partial \hat{\theta}_k} \quad \hat{\mathbf{p}}_k = \frac{\partial L_k}{\partial \hat{\mathbf{v}}_k} \quad (2.17)$$

Bemerkung 2.1.2 Um eine Zwangsbedingung der Form

$$\phi = 0 \quad (2.18)$$

in das System zu integrieren, wird ein Energieanteil dieser Zwangsbedingung zur bereits bestehenden Gesamtenergie H hinzuaddiert. Die modifizierte Energie \tilde{H} lautet:

$$\tilde{H} = H + \lambda \phi \quad (2.19)$$

Der Parameter λ wird als Lagrangescher Multiplikator bezeichnet. Da die Zwangsbedingung Gl. (2.18) erfüllen muss, liefert der additive Term der modifizierten Energie keinen Beitrag.

2.1.2. Evolutionsgleichungen

Bewegungsgleichungen

Die mechanischen Evolutionsgleichungen (Bewegungsgleichungen) für das thermoviskoelastische Doppelpendel lauten allgemein:

$$\mathbf{F}_k^{dyn} = \mathbf{F}_k^{ext} - \mathbf{F}_k^{int} \quad (2.20)$$

Die dynamischen Kräfte $\mathbf{F}_k^{dyn} = m_k \ddot{\mathbf{q}}_k$ stehen dabei mit der Differenz der externen und internen Kräfte (\mathbf{F}_k^{ext} , \mathbf{F}_k^{int}) im Gleichgewicht. Da das Doppelpendel weder der Gravitation noch sonstigen externen Kräften unterliegt, sind die externen Kräfte null, $\mathbf{F}_k^{ext} = 0$.

Die internen Kräfte \mathbf{F}_k^{int} ergeben sich durch die Ableitung der gesamten inneren Energie $E = e_1 + e_2$ nach dem jeweiligen Positionsvektor:

$$\mathbf{F}_k^{int} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{q}_k} \quad (2.21)$$

Dadurch lauten die Bewegungsgleichungen für das Doppelpendel

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{\mathbf{q}}_1 &= -\frac{1}{2} S_1 \frac{\partial c_1}{\partial \mathbf{q}_1} - \frac{1}{2} S_2 \frac{\partial c_2}{\partial \mathbf{q}_1} \\ m_2 \ddot{\mathbf{q}}_2 &= -\frac{1}{2} S_2 \frac{\partial c_2}{\partial \mathbf{q}_2} \end{aligned} \quad (2.22)$$

mit den Ableitungen der Verzerrungen

$$\frac{\partial c_1}{\partial \mathbf{q}_1} = \frac{2}{L_1^2} \mathbf{q}_1 \quad \frac{\partial c_2}{\partial \mathbf{q}_2} = \frac{2}{L_2^2} \mathbf{r} \quad \frac{\partial c_2}{\partial \mathbf{q}_1} = -\frac{2}{L_2^2} \mathbf{r} \quad (2.23)$$

und den Spannungen S_k in den generalisierten Maxwell-Elementen:

$$S_k = 2 \frac{\partial e_k}{\partial c_k} \quad (2.24)$$

Thermische Evolutionsgleichungen

Das betrachtete System ist adiabatisch. Dies bedeutet, dass das System wärmedicht abgeschlossen ist und keine Wärme mit der Umgebung austauschen kann. Lediglich die generalisierten Maxwell-Elemente können untereinander Wärme austauschen (s. Abbildung 2.2).

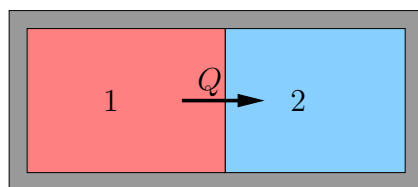


Abbildung 2.2.: Wärmefluss zwischen den generalisierten Maxwell-Elementen 1 und 2

Die Wärme, die das Teilsystem 1 pro Zeit verlässt, ist der Wärmefluss Q des Systems. Q wird in das Teilsystem 2 induziert:

$$Q = Q_2 = -Q_1 \geq 0 \quad (2.25)$$

Q_k ist somit der Wärmefluss, der in das jeweilige Teilsystem hineinströmt. Für die Beschreibung des Wärmeflusses Q zwischen zwei Punkten kann die nachfolgende Gleichung als vereinfachte Darstellung des Fourierschen Gesetzes der Wärmeleitung dienen:

$$Q = \kappa (\theta_1 - \theta_2) \quad (2.26)$$

2. Thermoviskoelastisches Modellproblem

Der Parameter $\kappa \geq 0$ ist der Wärmeleitkoeffizient und impliziert, dass Wärme in die Richtung abnehmender Temperatur geleitet wird. Mit der Festlegung, dass

$$\dot{s}_k = \frac{1}{\theta_k} (Q_k + D_k^{int}) \quad (2.27)$$

folgen daraus die beiden thermischen Evolutionsgleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{s}_1 &= \kappa \left(\frac{\theta_2}{\theta_1} - 1 \right) + \frac{D_1^{int}}{\theta_1} \\ \dot{s}_2 &= \kappa \left(\frac{\theta_1}{\theta_2} - 1 \right) + \frac{D_2^{int}}{\theta_2} \end{aligned} \quad (2.28)$$

Die viskose innere Dissipation der generalisierten Maxwell-Elemente wird durch D_k^{int} beschrieben (s. Gl. (2.31)).

Viskose Evolutionsgleichungen

Die viskosen Evolutionsgleichungen für das thermoviskoelastische Doppelpendel können aus der Betrachtung eines Kontinuums (s. Gl. (4.64)) abgeleitet werden. Hierbei wird der Nachgiebigkeitstensor \mathbb{V}^{-1} für den eindimensionalen Fall mit $n_{dim} = 1$ vereinfacht. Dadurch wird der vierstufige deviatorische Einheitstensor \mathbb{I}^{devT} zu null und der vierstufige volumetrische Einheitstensor \mathbb{I}^{vol} zu eins. Die viskosen Evolutionsgleichungen lauten somit

$$\begin{aligned} \dot{c}_{i_1} &= \frac{4}{V_1^{vol}} c_{i_1}^2 \Gamma_1 \\ \dot{c}_{i_2} &= \frac{4}{V_2^{vol}} c_{i_2}^2 \Gamma_2 \end{aligned} \quad (2.29)$$

mit dem viskosen volumetrischen Parameter $V_k^{vol} > 0$ und der Definition der viskosen Spannung

$$\Gamma_k = -\frac{\partial e_k}{\partial c_{i_k}} \quad (2.30)$$

welche die negative Ableitung der inneren Energie e_k nach den internen Variablen c_{i_k} wiedergibt. Die innere Dissipation D_k^{int} ist definiert als:

$$D_k^{int} = \Gamma_k \dot{c}_{i_k} \quad (2.31)$$

Werden die viskosen Evolutionsgleichungen aus Gl. (2.29) eingesetzt, so kann gezeigt werden, dass die Dissipation immer größer gleich null ist:

$$\begin{aligned} D_k^{int} &= \Gamma_k \left(\frac{4}{V_k^{vol}} c_{i_k}^2 \Gamma_k \right) \\ &= \frac{4}{V_k^{vol}} c_{i_k}^2 \Gamma_k^2 \geq 0 \end{aligned} \quad (2.32)$$

2.1.3. Anfangswertproblem 1. Ordnung

Die beiden Bewegungsgleichungen 2. Ordnung aus Gl. (2.22) werden für ein Anfangswertproblem 1. Ordnung durch die Beziehung

$$\dot{\mathbf{q}}_k = \frac{1}{m_k} \mathbf{p}_k \quad (2.33)$$

in vier Bewegungsgleichungen umgewandelt. Der Zustandvektor $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{16}$ fasst die Poissonschen Variablen des thermodynamischen Doppelpendels zusammen:

$$\mathbf{z} = [\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, s_1, s_2, c_{i_1}, c_{i_2}] \quad (2.34)$$

Das Anfangswertproblem kann mit den beiden Bewegungsgleichungen aus Gl. (2.33) und (2.22), der thermischen Evolutionsgleichung (2.28) und der viskosen Evolutionsgleichung (2.29) in Vektorschreibweise als

$$\dot{\mathbf{z}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{m_1} \mathbf{p}_1 \\ \frac{1}{m_2} \mathbf{p}_2 \\ -\frac{S_1}{L_1^2} \mathbf{q}_1 + \frac{S_2}{L_2^2} \mathbf{r} \\ -\frac{S_2}{L_2^2} \mathbf{r} \\ \kappa \left(\frac{\theta_2}{\theta_1} - 1 \right) + \frac{D_1^{int}}{\theta_1} \\ \kappa \left(\frac{\theta_1}{\theta_2} - 1 \right) + \frac{D_2^{int}}{\theta_2} \\ \frac{4}{V_1^{vol}} c_{i_1}^2 \Gamma_1 \\ \frac{4}{V_2^{vol}} c_{i_2}^2 \Gamma_2 \end{bmatrix} \quad (2.35)$$

mit dem Anfangswert $\mathbf{z}(t = 0) = \mathbf{z}^0$ dargestellt werden.

2.1.4. Thermische Zwangsbedingung

Im Modellproblem soll nun eine thermische Zwangsbedingung auf die Temperatur θ_1 gegeben werden. Dies lässt einen Wärmefluss über die Grenzen des Systems zu. Soll eine thermische Zwangsbedingung auf die Temperatur θ_2 erfolgen, kann analog vorgegangen werden.

2. Thermoviskoelastisches Modellproblem

Bemerkung 2.1.3 Eine sehr häufige Anwendung finden die Lagrangeschen Multiplikatoren $\boldsymbol{\lambda}$ in der Einschränkung der Bewegung eines Systems (s. Betsch und Steinmann [9], Betsch [5] und Hesch [33]). Die Bewegungsgleichung kann aus der modifizierten Hamilton-Funktion

$$\tilde{H} = H + \boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{q}) \quad (2.36)$$

hergeleitet werden. Nach Betsch und Steinmann [7] und Uhlar [108] kann aufbauend auf dem Hamiltonschen Variationsprinzip folgender Ausdruck gewonnen werden:

$$\int_{t_0}^t \left[\left(\dot{\mathbf{q}} - \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \mathbf{p}} \right) \cdot \delta \mathbf{p} - \left(\dot{\mathbf{p}} + \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \mathbf{q}} \right) \cdot \delta \mathbf{q} - \boldsymbol{\phi} \cdot \delta \boldsymbol{\lambda} \right] dt = 0 \quad (2.37)$$

Dies liefert die beiden Bewegungsgleichungen des Systems:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{H} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\nabla_{\mathbf{q}} \tilde{H} \end{aligned} \quad (2.38)$$

Wird die modifizierte Hamilton-Funktion \tilde{H} aus Gl. (2.36) eingesetzt, folgt:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \nabla_{\mathbf{p}} H \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\nabla_{\mathbf{q}} H - \boldsymbol{\lambda} \cdot \nabla_{\mathbf{q}} \boldsymbol{\phi} \end{aligned} \quad (2.39)$$

Die Zwangsbedingungen $\boldsymbol{\phi}$ müssen als zusätzliche Gleichungen gelöst werden:

$$\boldsymbol{\phi} = \mathbf{0} \quad (2.40)$$

Analog kann die thermische Zwangsbedingung für die Temperatur θ_1 in die thermische Evolutionsgleichung aufgenommen werden. Hierbei wird das Prinzip der virtuellen Temperaturen verwendet (s. Willner [110] und Hesch und Betsch [35]). Die Zwangsbedingung mit der vorgegebenen Temperatur $\bar{\theta}$ lautet:

$$\phi_1(\theta_1) = \theta_1(\mathbf{q}_1, s_1) - \bar{\theta} = 0 \quad (2.41)$$

In Bemerkung 2.1.3 werden die Zwangsbedingungen nach den primären Variablen abgeleitet, wobei die Variation des Impulses $\delta \mathbf{p}$ mit der ersten Bewegungsgleichung und somit mit dem Gradienten $\nabla_{\mathbf{p}} \tilde{H}$ in Verbindung gebracht wird. Analog wird die Variation des Positionsvektors $\delta \mathbf{q}$ mit der zweiten Bewegungsgleichung und dadurch mit dem Gradienten $\nabla_{\mathbf{q}} \tilde{H}$ verknüpft.

Die thermischen Gleichungen liefern jeweils einen Beitrag zur Energiebilanz \dot{H} mit $\theta_k \dot{s}_k$. Dies lässt den Schluss zu, dass der additive Term aus Gl. (2.19) nach den Temperaturen abgeleitet werden muss, um in die thermische Evolutionsgleichung mit aufgenommen zu

werden. Die Multiplikation mit der Temperatur θ_1 liefert den zugehörigen Energiebeitrag. Die Ableitung nach den primären Variablen \mathbf{q}_1 und s_1 wird durch die Identität

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial \mathbf{q}_1} \cdot \delta \mathbf{q}_1 + \frac{\partial \phi_1}{\partial s_1} \delta s_1 = \frac{\partial \phi_1}{\partial \theta_1} \delta \theta_1 \quad (2.42)$$

auf die Ableitung der Temperatur θ_1 zurückgeführt. Zudem wird die Variation $\delta \theta_1$ durch den konstanten Wert θ_1 ersetzt. Die sich ergebende Zwangskraft

$$\begin{aligned} Z_1 &= \lambda_1 \nabla_{\theta_1} \phi_1 \\ &= \lambda_1 \end{aligned} \quad (2.43)$$

kann als eine zeitliche Entropieänderung betrachtet werden und wird von der ersten thermischen Evolutionsgleichung subtrahiert. Die Gl. (2.35) wird für die thermische Evolutionsgleichung \dot{s}_1 mit der thermischen Zwangsbedingung erweitert:

$$\dot{s}_1 = \kappa \left(\frac{\theta_2}{\theta_1} - 1 \right) + \frac{D_1^{int}}{\theta_1} - Z_1 \quad (2.44)$$

Die Anfangswerte lauten unter Berücksichtigung der algebraischen Gleichung (2.41) $\mathbf{z}(t=0) = \mathbf{z}^0$ und $\lambda_1(t=0) = \lambda_1^0$.

2.2. Erweitertes GENERIC Format

Das *General Equation for Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling* (GENERIC) Format wurde durch die Arbeit von Öttinger [80] eingeführt. Das Anfangswertproblem wird dabei in eine Matrix-Vektor Schreibweise umgeformt, die unter genau definierten Voraussetzungen strukturelle Eigenschaften einfordert. Bereits in Romero [90] wurde das GENERIC Format zur Beschreibung eines thermoelastischen Doppelpendels verwendet. Das thermoviskoelastische Doppelpendel führt zu einer Erweiterung des GENERIC Formates. Das Anfangswertproblem wird im erweiterten GENERIC Format dargestellt als:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{z}} &= [\mathbf{L}(\mathbf{z}) + \mathbf{L}^{vis}(\mathbf{z})] \nabla H(\mathbf{z}) + [\mathbf{M}(\mathbf{z}) + \mathbf{M}^{vis}(\mathbf{z})] \nabla S(\mathbf{z}) \\ \mathbf{z}(t=0) &= \mathbf{z}^0 \end{aligned} \quad (2.45)$$

Der Gradient der Gesamtenergie $\nabla H \in \mathbb{R}^{16}$ wird mit der Summe aus einer schiefsymmetrischen Matrix $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{16 \times 16}$ und einer symmetrischen Matrix $\mathbf{L}^{vis} \in \mathbb{R}^{16 \times 16}$ multipliziert, wobei sich die symmetrische Matrix lediglich auf die viskosen internen Variablen c_{i_k} bezieht (s. hierzu auch Bornemann und Galvanetto [11]). Der Gradient der Entropie $\nabla S \in \mathbb{R}^{16}$ wird mit der Summe der beiden symmetrisch, positiv, semidefiniten Matrizen $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{16 \times 16}$ und $\mathbf{M}^{vis} \in \mathbb{R}^{16 \times 16}$ multipliziert. Die zugehörigen Degenerationsbedingungen für das erweiterte GENERIC Format lauten:

$$\nabla H \cdot \mathbf{M} = \mathbf{0} \quad \nabla S \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{L}^{vis}) = \mathbf{0} \quad (2.46)$$

2. Thermoviskoelastisches Modellproblem

Zusätzlich muss die folgende Bedingung für thermoviskoelastische Systeme erfüllt sein:

$$\nabla H \cdot \mathbf{M}^{vis} \nabla S = -\nabla H \cdot \mathbf{L}^{vis} \nabla H \quad (2.47)$$

Die Gradienten der Gesamtenergie ∇H und der Entropie ∇S sind durch die Ableitung nach dem Zustandsvektor wie folgt gegeben:

$$\nabla H = \begin{bmatrix} \frac{S_1}{L_1^2} \mathbf{q}_1 - \frac{S_2}{L_2^2} \mathbf{r} \\ \frac{S_2}{L_2^2} \mathbf{r} \\ \frac{1}{m_1} \mathbf{p}_1 \\ \frac{1}{m_2} \mathbf{p}_2 \\ \theta_1 \\ \theta_2 \\ -\Gamma_1 \\ -\Gamma_2 \end{bmatrix} \quad \nabla S = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.48)$$

Mit Hilfe der Gradienten der Gesamtenergie ∇H und der Entropie ∇S können nun die Matrizen \mathbf{L} und \mathbf{L}^{vis} aufgestellt werden

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{I}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 4} \\ -\mathbf{I}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 4} \\ \mathbf{0}^{4 \times 6} & \mathbf{0}^{4 \times 6} & \mathbf{0}^{4 \times 4} \end{bmatrix} \quad \mathbf{L}^{vis} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{14 \times 14} & \mathbf{0}^{14 \times 1} & \mathbf{0}^{14 \times 1} \\ \mathbf{0}^{1 \times 14} & -\frac{4 c_{i_1}^2}{V_1^{vol}} & 0 \\ \mathbf{0}^{1 \times 14} & 0 & -\frac{4 c_{i_2}^2}{V_2^{vol}} \end{bmatrix} \quad (2.49)$$

sowie die Matrizen \mathbf{M} und \mathbf{M}^{vis} :

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{12 \times 12} & \mathbf{0}^{12 \times 1} & \mathbf{0}^{12 \times 1} & \mathbf{0}^{12 \times 2} \\ \mathbf{0}^{1 \times 12} & \kappa \frac{\theta_2}{\theta_1} & -\kappa & \mathbf{0}^{1 \times 2} \\ \mathbf{0}^{1 \times 12} & -\kappa & \kappa \frac{\theta_1}{\theta_2} & \mathbf{0}^{1 \times 2} \\ \mathbf{0}^{2 \times 12} & \mathbf{0}^{2 \times 1} & \mathbf{0}^{2 \times 1} & \mathbf{0}^{2 \times 2} \end{bmatrix} \quad \mathbf{M}^{vis} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{12 \times 12} & \mathbf{0}^{12 \times 1} & \mathbf{0}^{12 \times 1} & \mathbf{0}^{12 \times 2} \\ \mathbf{0}^{1 \times 12} & \frac{D_1^{int}}{\theta_1} & 0 & \mathbf{0}^{1 \times 2} \\ \mathbf{0}^{1 \times 12} & 0 & \frac{D_2^{int}}{\theta_2} & \mathbf{0}^{1 \times 2} \\ \mathbf{0}^{2 \times 12} & \mathbf{0}^{2 \times 1} & \mathbf{0}^{2 \times 1} & \mathbf{0}^{2 \times 2} \end{bmatrix} \quad (2.50)$$

Bemerkung 2.2.1 Die thermische Zwangsbedingung wird durch eine Matrix $\mathbf{L}^\lambda(\lambda_1)$, welche den Lagrangeschen Multiplikator beinhaltet und einen Vektor $\nabla\phi$, der die Ableitung der Zwangsbedingung beinhaltet, in das Anfangswertproblem integriert:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{z}} &= [\mathbf{L}(\mathbf{z}) + \mathbf{L}^{vis}(\mathbf{z})] \nabla H(\mathbf{z}) + [\mathbf{M}(\mathbf{z}) + \mathbf{M}^{vis}(\mathbf{z})] \nabla S(\mathbf{z}) + \mathbf{L}^\lambda(\lambda_1) \nabla\phi \\ 0 &= \phi_1\end{aligned}\quad (2.51)$$

Die Anfangswerte lauten:

$$\mathbf{z}(t=0) = \mathbf{z}^0 \quad \lambda_1(t=0) = \lambda_1^0 \quad (2.52)$$

Die Matrix \mathbf{L}^λ und der Vektor $\nabla\phi$ sind wie folgt gegeben:

$$\mathbf{L}^\lambda = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{12 \times 12} & \mathbf{0}^{12 \times 1} & \mathbf{0}^{12 \times 3} \\ \mathbf{0}^{1 \times 12} & -\lambda_1 & \mathbf{0}^{1 \times 3} \\ \mathbf{0}^{3 \times 12} & \mathbf{0}^{3 \times 1} & \mathbf{0}^{3 \times 3} \end{bmatrix} \quad \nabla\phi = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{12 \times 1} \\ \nabla_{\theta_1}\phi_1 \\ \mathbf{0}^{3 \times 1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{12 \times 1} \\ 1 \\ \mathbf{0}^{3 \times 1} \end{bmatrix} \quad (2.53)$$

2.2.1. Strukturelle Eigenschaften

Im Folgenden werden die strukturellen Eigenschaften des erweiterten GENERIC Formates erläutert, die für die Diskretisierung von Bedeutung sind. Hierbei geht es um die Energieerhaltung, den stetigen Anstieg der Entropie sowie den stetigen Abfall der Lyapunov-Funktion für adiabatisch isolierte Systeme. Da das thermoviskoelastische Doppelpendel in einem Punkt gelagert ist, kann der Impuls nicht erhalten werden. Für das Doppelpendel kann weiterhin die Drehimpulserhaltung gezeigt werden (s. Betsch und Steinmann [8]). Werden thermische Zwangsbedingungen ins System eingebunden, hat dies Auswirkungen auf die Energiebilanz, die Entropiebilanz und die Bilanz der Lyapunov-Funktion.

Energiebilanz

Ein adiabatisch isoliertes System wie das thermoviskoelastische Doppelpendel erhält die Energie. Die Zeitableitung der Gesamtenergie \dot{H} kann durch die Multiplikation des Gradienten der Gesamtenergie ∇H und die Zeitableitung des Zustandsvektors $\dot{\mathbf{z}}$ beschrieben werden. Durch Einsetzen des Anfangswertproblems aus Gl. (2.45)₁ folgt:

$$\begin{aligned}\dot{H} &= \nabla H \cdot \dot{\mathbf{z}} \\ &= \nabla H \cdot [\mathbf{L} + \mathbf{L}^{vis}] \nabla H + \nabla H \cdot [\mathbf{M} + \mathbf{M}^{vis}] \nabla S \\ &= 0\end{aligned}\quad (2.54)$$

Hierbei werden die Schiefsymmetrie der Matrix \mathbf{L} , die Degenerationsbedingungen aus Gl. (2.46)₁ und die zusätzliche Bedingung für viskose Systeme aus Gl. (2.47) verwendet.

Beweis 2.2.1 Die Energieerhaltung des thermoviskoelastischen Pendels soll durch direktes Einsetzen der Vektoren aus Gl. (2.48) und der Matrizen aus Gl. (2.49) und Gl. (2.50) in Gl. (2.54) gezeigt werden. Da die Zeitableitung des Zustandsvektors $\dot{\mathbf{z}}$ aus Gl. (2.45)₁ bereits durch Gl. (2.35) gegeben ist, multiplizieren wir diesen Vektor mit dem Vektor ∇H aus Gl. (2.48)₁:

$$\begin{aligned} \dot{H} &= \frac{\mathbf{p}_1}{m_1} \cdot \left[\frac{S_1}{L_1^2} \mathbf{q}_1 - \frac{S_2}{L_2^2} \mathbf{r} \right] + \frac{\mathbf{p}_2}{m_2} \cdot \frac{S_2}{L_2^2} \mathbf{r} + \left[\frac{S_2}{L_2^2} \mathbf{r} - \frac{S_1}{L_1^2} \mathbf{q}_1 \right] \cdot \frac{\mathbf{p}_1}{m_1} \\ &\quad - \frac{S_2}{L_2^2} \mathbf{r} \cdot \frac{\mathbf{p}_2}{m_2} + \theta_1 \left[\kappa \left(\frac{\theta_2}{\theta_1} - 1 \right) + \frac{D_1^{int}}{\theta_1} \right] + \theta_2 \left[\kappa \left(\frac{\theta_1}{\theta_2} - 1 \right) + \frac{D_2^{int}}{\theta_2} \right] \\ &\quad - \frac{4}{V_1^{vol}} c_{i_1}^2 \Gamma_1 \Gamma_1 - \frac{4}{V_2^{vol}} c_{i_2}^2 \Gamma_2 \Gamma_2 \end{aligned} \quad (2.55)$$

Die ersten vier Terme stehen mit der Matrix \mathbf{L} in Verbindung und heben sich durch die Schiefsymmetrie gegenseitig auf. Somit folgt für die Rate der Gesamtenergie \dot{H} :

$$\begin{aligned} \dot{H} &= \kappa (\theta_2 - \theta_1 + \theta_1 - \theta_2) + D_1^{int} + D_2^{int} - \frac{4 c_{i_1}^2}{V_1^{vol}} \Gamma_1^2 - \frac{4 c_{i_2}^2}{V_2^{vol}} \Gamma_2^2 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.56)$$

Mit der Definition der inneren Dissipation D_k^{int} aus Gl. (2.32)₂ werden die letzteren vier Terme in der Summe zu null. Diese Terme stellen die zusätzliche Bedingung aus Gl. (2.47) dar. Übrig bleiben die Terme, die mit der ersten Degenerationsbedingung aus Gl. (2.46)₁ verbunden sind und somit auch wegfallen.

Bemerkung 2.2.2 Wird eine thermische Zwangsbedingung eingeführt, bleibt die Gesamtenergie nicht erhalten. Für die Energiebilanz folgt mit Gl. (2.51) und der Zwangsbedingung, welche als θ_1 abhängige Funktion betrachtet wird:

$$\begin{aligned} \dot{H} &= \nabla H \cdot \dot{\mathbf{z}} \\ &= -\theta_1 \lambda_1 \end{aligned} \quad (2.57)$$

Der Term $\theta_1 \lambda_1$ stellt die Dissipation des Systems über die Grenzen des Systems dar. Der Lagrangesche Multiplikator λ_1 kann als Entropiefluss angesehen werden.

Entropiebilanz

Für ein adiabates System folgt nach dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik, dass die Entropie für das thermoviskoelastische Doppelpendel niemals abnimmt. Weiterhin bleibt die Entropie für reversible Prozesse konstant und nimmt für einen irreversiblen Fall zu (s. Langeheinecken et al. [54]):

$$\begin{aligned} \dot{S} &= \nabla S \cdot \dot{\mathbf{z}} \\ &= \nabla S \cdot [\mathbf{L} + \mathbf{L}^{vis}] \nabla H + \nabla S \cdot [\mathbf{M} + \mathbf{M}^{vis}] \nabla S \\ &= \nabla S \cdot [\mathbf{M} + \mathbf{M}^{vis}] \nabla S \geq 0 \end{aligned} \quad (2.58)$$

Durch die zweite Degenerationsbedingung aus Gl. (2.46)₂ und die Definition der positiven, semidefiniten Matrizen \mathbf{M} und \mathbf{M}^{vis} wird der erste Term zu null und der zweite Term größer gleich null.

Beweis 2.2.2 *Gl. (2.58) lässt sich für das thermoviskoelastische Doppelpendel sehr einfach beweisen. Die Matrizen \mathbf{L} und \mathbf{L}^{vis} haben keine Einträge an den Stellen, wo der Gradient der Entropie ∇S Einträge besitzt. Somit wird die zweite Degenerationsbedingung sehr einfach erfüllt und liefert:*

$$\begin{aligned}\dot{S} &= \kappa \frac{\theta_2}{\theta_1} - \kappa + \frac{D_1^{int}}{\theta_1} - \kappa + \kappa \frac{\theta_1}{\theta_2} + \frac{D_2^{int}}{\theta_2} \\ &= \kappa \frac{(\theta_2 - \theta_1)^2}{\theta_2 \theta_1} + \frac{D_1^{int}}{\theta_1} + \frac{D_2^{int}}{\theta_2} \\ &= \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^2 \frac{1}{\theta_k} (D_{jk}^{cdu} + D_k^{int}) \geq 0\end{aligned}\tag{2.59}$$

Dabei ist die Dissipation des Wärmeaustausches D_{jk}^{cdu} definiert als:

$$D_{jk}^{cdu} = \kappa \frac{(\theta_j - \theta_k)^2}{2\theta_j} \quad j \neq k\tag{2.60}$$

Bemerkung 2.2.3 *Die thermische Zwangsbedingung der Temperatur θ_1 bedeutet eine Änderung der Entropiebilanz. Unter Verwendung der Gl. (2.51) lautet die Entropiebilanz:*

$$\dot{S} = -\lambda_1 + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^2 \frac{1}{\theta_k} (D_{jk}^{cdu} + D_k^{int})\tag{2.61}$$

Bilanz der Lyapunov-Funktion

Die Lyapunov-Funktion V ist ein Stabilitätskriterium für den Gleichgewichtszustand, welches bereits für gekoppelte thermoelastische Systeme von Armero und Simo [1] eingeführt wurde (s. auch Gurtin [29]). Gilt für die Rate der Lyapunov-Funktion \dot{V} der folgende Zusammenhang

$$\dot{V} \leq 0\tag{2.62}$$

ist der Gleichgewichtszustand stabil. Die Lyapunov-Funktion V ist somit eine stetig abnehmende Funktion. Die Zeitableitung der Lyapunov Funktion lautet:

$$\dot{V} = \dot{H} - \theta_\infty \dot{S}\tag{2.63}$$

2. Thermoviskoelastisches Modellproblem

Setzt man die Zeitableitung der Gesamtenergie H aus Gl. (2.56) und der Entropie S aus Gl. (2.59) ein, dann kann für das thermoviskoelastische Doppelpendel ein stabiler Gleichgewichtszustand gezeigt werden:

$$\begin{aligned}\dot{V} &= -\theta_\infty \dot{S} \\ &= -\theta_\infty \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^2 \frac{1}{\theta_k} (D_{jk}^{cdu} + D_k^{int}) \leq 0\end{aligned}\quad (2.64)$$

Bemerkung 2.2.4 Die Bilanz der Lyapunov-Funktion wird durch die thermische Zwangsbedingung wie folgt verändert:

$$\begin{aligned}\dot{V} &= \dot{H} - \theta_\infty \dot{S} \\ &= -(\theta_1 - \theta_\infty) \lambda_1 - \theta_\infty \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^2 \frac{1}{\theta_k} (D_{jk}^{cdu} + D_k^{int})\end{aligned}\quad (2.65)$$

Wird die Zwangsbedingung $\phi_1 = \theta_1 - \theta_\infty$ berücksichtigt, so ist zu erkennen, dass Gl. (2.65) und Gl. (2.64) identisch sind.

Drehimpulsbilanz

Der Drehimpuls \mathbf{J} ist allgemein definiert durch das Kreuzprodukt der einzelnen Positionsvektoren \mathbf{q}_k mit den Impulsvektoren \mathbf{p}_k :

$$\mathbf{J} = \sum_{k=1}^2 \mathbf{q}_k \times \mathbf{p}_k \quad (2.66)$$

Die Ableitung des Drehimpulses \mathbf{J} nach der Zeit liefert die Drehimpulsbilanz:

$$\dot{\mathbf{J}} = \sum_{k=1}^2 \dot{\mathbf{q}}_k \times \mathbf{p}_k + \mathbf{q}_k \times \dot{\mathbf{p}}_k \quad (2.67)$$

Setzt man nun die Bewegungsgleichungen in die Drehimpulsbilanz ein, dann folgt:

$$\dot{\mathbf{J}} = \sum_{k=1}^2 \frac{1}{m_k} \mathbf{p}_k \times \mathbf{p}_k + \mathbf{q}_k \times (\mathbf{F}_k^{ext} - \mathbf{F}_k^{int}) \quad (2.68)$$

Der erste Term aus Gl. (2.68) und die internen Momente

$$\begin{aligned}\mathbf{M}^{int} &= \sum_{k=1}^2 \mathbf{q}_k \times \mathbf{F}_k^{int} \\ &= -\mathbf{q}_1 \times \left(\frac{S_2}{L_2^2} (\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) - \frac{S_1}{L_1^2} \mathbf{q}_1 \right) + \mathbf{q}_2 \times \frac{S_2}{L_2^2} (\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) \\ &= \mathbf{0}\end{aligned}\quad (2.69)$$

werden durch die schiefsymmetrische Bilinearform ($\mathbf{a} \times \mathbf{b} = -\mathbf{b} \times \mathbf{a}$) für beliebige Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} zu null. Für die Drehimpulsbilanz folgt, dass die Ableitung des Drehimpulses nach der Zeit $\dot{\mathbf{J}}$ mit den externen Momenten $\mathbf{M}^{ext} = \sum_{k=1}^2 \mathbf{q}_k \times \mathbf{F}_k^{ext}$ im Gleichgewicht ist:

$$\dot{\mathbf{J}} = \mathbf{M}^{ext} \quad (2.70)$$

Greifen keine externen Kräfte \mathbf{F}_k^{ext} am System an, wird der Drehimpuls erhalten:

$$\dot{\mathbf{J}} = \mathbf{0} \quad (2.71)$$

Bemerkung 2.2.5 Die Drehimpulserhaltung basiert auf der Invarianz der inneren Energie gegenüber den Drehungen. Dies bedeutet, dass die Drehung eines Körpers oder Massenpunktes über eine Rotationsmatrix \mathbf{Q}_α keine Veränderungen der inneren Energie hervorruft:

$$\begin{aligned} E(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, s_1, s_2, c_{i_1}, c_{i_2}) &= e_1(c_1, s_1, c_{i_1}) + e_2(c_2, s_2, c_{i_2}) \\ &= E(\mathbf{Q}_\alpha \mathbf{q}_1, \mathbf{Q}_\alpha \mathbf{q}_2, s_1, s_2, c_{i_1}, c_{i_2}) \end{aligned} \quad (2.72)$$

In der Arbeit von Simo et al. [102] wird, um die Invarianz zu zeigen, ein axialer Vektor $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^3$ mit der Beziehung $\hat{\boldsymbol{\xi}} \mathbf{a} = \boldsymbol{\xi} \times \mathbf{a}$ definiert, wobei $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$ ein beliebiger Vektor und $\hat{\boldsymbol{\xi}} \in so(3)$ eine schiefsymmetrische Matrix ist. Wird nun eine beliebige Rotation mit der Rotationsmatrix $\mathbf{Q}_\alpha = \exp(\alpha \hat{\boldsymbol{\xi}}) \in SO(3)$ um den Winkel $\alpha \in \mathbb{R}$ aufgebracht und nach dem Winkel abgeleitet, folgt:

$$\begin{aligned} 0 &= \left. \frac{d}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} E(\exp(\alpha \hat{\boldsymbol{\xi}}) \mathbf{q}_1, \exp(\alpha \hat{\boldsymbol{\xi}}) \mathbf{q}_2, s_1, s_2, c_{i_1}, c_{i_2}) \\ &= \boldsymbol{\xi} \cdot \sum_{k=1}^2 \mathbf{q}_k \times \frac{\partial E}{\partial \mathbf{q}_k} \end{aligned} \quad (2.73)$$

Dies gilt für einen beliebigen axialen Vektor $\boldsymbol{\xi}$ und liefert Gl. (2.69).

Impulsbilanz

Weiterhin lässt sich die Impulsbilanz für das Doppelpendel aufstellen. Der Impuls \mathbf{L} ist durch die Impulse der Massenpunkte \mathbf{p}_k gegeben:

$$\mathbf{L} = \sum_{k=1}^2 \mathbf{p}_k \quad (2.74)$$

Die Ableitung des Impulses \mathbf{p} nach der Zeit liefert die Impulsbilanz:

$$\dot{\mathbf{L}} = \sum_{k=1}^2 \mathbf{F}_k^{ext} - \mathbf{F}_k^{int} \quad (2.75)$$

Durch die Lagerung des Doppelpendels entspricht die Summe der internen Kräfte gerade den Reaktionskräften des Lagers

$$\sum_{k=1}^2 \mathbf{F}_k^{int} = \frac{S_1}{L_1^2} \mathbf{q}_1 \quad (2.76)$$

welche nicht zu null werden. Der Impuls kann durch die Lagerung und die damit einhergehenden Reaktionskräfte nicht erhalten werden.

2.3. Zeitliche Diskretisierung

Die zeitliche Diskretisierung des thermoviskoelastischen Systems soll die strukturellen Eigenschaften aus dem Unterkapitel 2.2.1 beinhalten. Um die Unterschiede zwischen impuls- und drehimpulserhaltenden Standardintegratoren und strukturerhaltenden Integratoren zu verdeutlichen, wird ein Vergleich zwischen der Mittelpunktsregel und der Erweiterung des *Thermodynamically Consistent* (TC) Integrators aus Romero [90] gezogen. Sowohl die Mittelpunktsregel als auch der erweiterte TC Integrator sind implizite Einschrittverfahren.

$$\mathcal{I} = \begin{array}{ccccccc} & h_1 & h_2 & h_3 & \dots & h_{n_{tp}-2} & h_{n_{tp}-1} \\ | & | & | & | & \dots & | & | \\ 0 & t_2 & t_3 & t_4 & \dots & t_{n_{tp}-2} & t_{n_{tp}-1} & T \end{array}$$

Abbildung 2.3.: Unterteilung der Zeitachse in finite Zeitelemente

Für die zeitliche Diskretisierung wird die Zeitachse im Intervall $\mathcal{I} = [0, T]$ in finite Zeitelemente mit dem Zeitintervall $\mathcal{I}_n = [t_n, t_{n+1}]$ unterteilt (s. Abbildung 2.3). Die Zeitschrittweite h_n ist somit durch die Grenzen des Zeitintervalls gegeben:

$$h_n = t_{n+1} - t_n \quad (2.77)$$

Der Index $n = [1, \dots, n_{tp}]$ korrespondiert mit den betreffenden Zeitpunkten t_n .

2.3.1. Mittelpunktsregel

Die Mittelpunktsregel ist ein implizites Runge-Kutta-Verfahren mit dem Butcher-Tableau (s. Jung und Langer [48]):

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 1 \end{array} \quad (2.78)$$

Ein allgemeines Anfangswertproblem mit der Funktion \mathbf{f} und der Struktur

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{z}} &= \mathbf{f}(\mathbf{z}) \\ \mathbf{z}(t=0) &= \mathbf{z}^0 \end{aligned} \quad (2.79)$$

wird mit der Mittelpunktsregel wie folgt approximiert (s. Anhangkapitel B.2):

$$\frac{\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n}{h_n} = \mathbf{f} \left(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (2.80)$$

Der Index $[\cdot]_{n+\frac{1}{2}}$ bedeutet, dass diese Variable am Mittelpunkt ausgewertet wird. Die Rechenvorschrift lautet:

$$[\cdot]_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} ([\cdot]_n + [\cdot]_{n+1}) \quad (2.81)$$

Wird nun das Anfangswertproblem aus Gl. (2.45) im Zeitintervall \mathcal{I}_n über die Zeit t durch die Mittelpunktsregel diskretisiert, dann folgt:

$$\frac{\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n}{h_n} = [\mathbf{L} + \mathbf{L}^{vis}] \nabla \mathbf{H} + [\mathbf{M} + \mathbf{M}^{vis}] \nabla \mathbf{S} \quad (2.82)$$

Die Matrizen \mathbf{L} , \mathbf{L}^{vis} , \mathbf{M} und \mathbf{M}^{vis} werden nun am Mittelpunkt des Zustandsvektors $\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}$ ausgewertet und durch die diskreten Matrizen \mathbf{L} , \mathbf{L}^{vis} , \mathbf{M} und \mathbf{M}^{vis} beschrieben:

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{I}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 4} \\ -\mathbf{I}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 4} \\ \mathbf{0}^{4 \times 6} & \mathbf{0}^{4 \times 6} & \mathbf{0}^{4 \times 4} \end{bmatrix} \quad \mathbf{L}^{vis} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{14 \times 14} & \mathbf{0}^{14 \times 1} & \mathbf{0}^{14 \times 1} \\ \mathbf{0}^{1 \times 14} & -\frac{4c_{i_1, n+\frac{1}{2}}^2}{V_1^{vol}} & 0 \\ \mathbf{0}^{1 \times 14} & 0 & -\frac{4c_{i_2, n+\frac{1}{2}}^2}{V_2^{vol}} \end{bmatrix} \quad (2.83)$$

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{12 \times 12} & \mathbf{0}^{12 \times 1} & \mathbf{0}^{12 \times 1} & \mathbf{0}^{12 \times 2} \\ \mathbf{0}^{1 \times 12} & \kappa \frac{\theta_{2, \frac{1}{2}}}{\theta_{1, \frac{1}{2}}} & -\kappa & \mathbf{0}^{1 \times 2} \\ \mathbf{0}^{1 \times 12} & -\kappa & \kappa \frac{\theta_{1, \frac{1}{2}}}{\theta_{2, \frac{1}{2}}} & \mathbf{0}^{1 \times 2} \\ \mathbf{0}^{2 \times 12} & \mathbf{0}^{2 \times 1} & \mathbf{0}^{2 \times 1} & \mathbf{0}^{2 \times 2} \end{bmatrix} \quad \mathbf{M}^{vis} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{12 \times 12} & \mathbf{0}^{12 \times 1} & \mathbf{0}^{12 \times 1} & \mathbf{0}^{12 \times 2} \\ \mathbf{0}^{1 \times 12} & \frac{D_{1, \frac{1}{2}}^{int}}{\theta_{1, \frac{1}{2}}} & 0 & \mathbf{0}^{1 \times 2} \\ \mathbf{0}^{1 \times 12} & 0 & \frac{D_{2, \frac{1}{2}}^{int}}{\theta_{2, \frac{1}{2}}} & \mathbf{0}^{1 \times 2} \\ \mathbf{0}^{2 \times 12} & \mathbf{0}^{2 \times 1} & \mathbf{0}^{2 \times 1} & \mathbf{0}^{2 \times 2} \end{bmatrix} \quad (2.84)$$

Der Index $[\cdot]_{\frac{1}{2}}$ verweist darauf, dass diese Größe eine zeitlich diskrete Größe ist und noch definiert werden muss. Für die Temperaturen $\theta_{k, \frac{1}{2}}$ und die innere Dissipation $D_{k, \frac{1}{2}}^{int}$ gilt:

$$\theta_{k, \frac{1}{2}} = \frac{\partial e_k}{\partial s_k} \left(c_{k, \frac{1}{2}}, s_{k, n+\frac{1}{2}}, c_{i_{k, n+\frac{1}{2}}} \right) \quad (2.85)$$

$$D_{k, \frac{1}{2}}^{int} = \frac{4}{V_k^{vol}} c_{i_{k, n+\frac{1}{2}}}^2 \Gamma_{k, \frac{1}{2}}^2$$

2. Thermoviskoelastisches Modellproblem

Die diskreten Verzerrungen lauten

$$c_{1\frac{1}{2}} = \frac{\|\mathbf{q}_{1_{n+\frac{1}{2}}}\|^2}{L_1^2} \quad c_{2\frac{1}{2}} = \frac{\|\mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}}\|^2}{L_2^2} \quad (2.86)$$

wobei hier die Auswertung am Mittelpunkt des Vektors $\mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}}$ gerade der Differenz der beiden Positionsvektoren am Mittelpunkt entspricht:

$$\mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{q}_{2_{n+\frac{1}{2}}} - \mathbf{q}_{1_{n+\frac{1}{2}}} \quad (2.87)$$

Die zeitliche Diskretisierung des Gradienten der Gesamtenergie ∇H und der Entropie ∇S führt auf die diskreten Vektoren ∇H und ∇S :

$$\nabla H = \begin{bmatrix} \frac{S_{1\frac{1}{2}}}{L_1^2} \mathbf{q}_{1_{n+\frac{1}{2}}} - \frac{S_{2\frac{1}{2}}}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} \\ \frac{S_{2\frac{1}{2}}}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} \\ \frac{1}{m_1} \mathbf{p}_{1_{n+\frac{1}{2}}} \\ \frac{1}{m_2} \mathbf{p}_{2_{n+\frac{1}{2}}} \\ \theta_{1\frac{1}{2}} \\ \theta_{2\frac{1}{2}} \\ -\Gamma_{1\frac{1}{2}} \\ -\Gamma_{2\frac{1}{2}} \end{bmatrix} \quad \nabla S = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.88)$$

Die Auswertung der diskreten Spannungen $S_{k\frac{1}{2}}$ und $\Gamma_{k\frac{1}{2}}$ am Mittelpunkt des Zustandsvektors $\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}$ ergeben:

$$S_{k\frac{1}{2}} = 2 \frac{\partial e_k}{\partial c_k} \left(c_{k\frac{1}{2}}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right) \quad (2.89)$$

$$\Gamma_{k\frac{1}{2}} = -\frac{\partial e_k}{\partial c_{i_k}} \left(c_{k\frac{1}{2}}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right)$$

2.3.2. Erweiterter TC Integrator

Der erweiterte TC Integrator basiert auf den von Gonzalez [19] eingeführten G-äquivalenten diskreten Ableitungen. Diese G-äquivalenten diskreten Ableitungen werden in Invarianten definiert, um die Energiebilanz zu gewährleisten und dabei sowohl die Drehimpulsbilanz als auch die Impulsbilanz nicht zu beeinflussen. Nach Gonzalez [19] erfüllt die G-äquivalente diskrete Ableitung $D^G F$ einer Funktion F folgende Gleichung

$$\begin{aligned} F_{n+1} - F_n &= D^G F(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \cdot (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) \\ &= DF(\boldsymbol{\pi}_n, \boldsymbol{\pi}_{n+1}) \cdot (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n) \end{aligned} \quad (2.90)$$

mit:

$$D^G F(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) = DF(\boldsymbol{\pi}_n, \boldsymbol{\pi}_{n+1}) \cdot \nabla \boldsymbol{\pi} \left(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (2.91)$$

DF bezeichnet dabei den diskreten Gradienten der Funktion F , der zur Erhaltung von Gl. (2.90) führt. Dieser diskrete Gradient lässt sich wiederum in partitionierte diskrete Gradienten überführen, welche die Basis des erweiterten TC Integrators bilden:

$$\begin{aligned} DF(\boldsymbol{\pi}_n, \boldsymbol{\pi}_{n+1}) \cdot (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n) &= \sum_{k=1}^8 DF_k (\pi_{k_{n+1}} - \pi_{k_n}) \\ &= D\mathbf{F} (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n) \end{aligned} \quad (2.92)$$

Die einzelnen partitionierten diskreten Gradienten lassen sich für skalare Invarianten in dem Vektor $D\mathbf{F}$ zusammenfassen. Die Ableitung der Invarianten nach dem Zustandsvektor $\nabla \boldsymbol{\pi}$ multipliziert mit der Differenz der Zustandsvektoren $\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n$ ergibt die Differenz der Invarianten $\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n$.

Für das thermoviskoelastische Doppelpendel setzt sich der Vektor der Invarianten aus acht Invarianten zusammen:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\pi} &= [\pi_1 \quad \pi_2 \quad \pi_3 \quad \pi_4 \quad \pi_5 \quad \pi_6 \quad \pi_7 \quad \pi_8]^T \\ &= [c_1 \quad c_2 \quad \|\mathbf{p}_1\|^2 \quad \|\mathbf{p}_2\|^2 \quad s_1 \quad s_2 \quad c_{i_1} \quad c_{i_2}]^T \end{aligned} \quad (2.93)$$

Der Vektor der partitionierten diskreten Gradienten für die Gesamtenergie H und die Entropie S lauten:

$$D\mathbf{H} = [D_{c_1} e_1 \quad D_{c_2} e_2 \quad D_{\|\mathbf{p}_1\|^2} T_1 \quad D_{\|\mathbf{p}_2\|^2} T_2 \quad D_{s_1} e_1 \quad D_{s_2} e_2 \quad D_{c_{i_1}} e_1 \quad D_{c_{i_2}} e_2]^T \quad (2.94)$$

$$D\mathbf{S} = [0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad D_{s_1} s_1 \quad D_{s_2} s_2 \quad 0 \quad 0]^T$$

Die partitionierten diskreten Gradienten der Gesamtenergie $D\mathbf{H}$ lassen sich in diskrete partitionierte Gradienten der inneren Energie De_k für die Invarianten c_k , s_k und c_{i_k} und in partitionierte diskrete Gradienten der kinetischen Energie DT_k für das Skalarprodukt

2. Thermoviskoelastisches Modellproblem

der Impulse $\|\mathbf{p}_k\|^2$ aufteilen. Das Anfangswertproblem wird durch die Vektoren der G-äquivalenten diskreten Gradienten beschrieben:

$$\frac{\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n}{h_n} = [\mathbf{L} + \mathbf{L}^{vis}] \mathbf{D}^G \mathbf{H} + [\mathbf{M} + \mathbf{M}^{vis}] \mathbf{D}^G \mathbf{S} \quad (2.95)$$

Die Vektoren der G-äquivalenten diskreten Gradienten $\mathbf{D}^G \mathbf{H}$ und $\mathbf{D}^G \mathbf{S}$ setzen sich somit aus den partitionierten diskreten Gradienten $\mathbf{D}\mathbf{H}$ bzw. $\mathbf{D}\mathbf{S}$ und der Matrix $\nabla \boldsymbol{\pi}$ zusammen:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^G \mathbf{H}(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) &= \mathbf{D}\mathbf{H} \cdot \nabla \boldsymbol{\pi} \left(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}} \right) \\ \mathbf{D}^G \mathbf{S}(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) &= \mathbf{D}\mathbf{S} \cdot \nabla \boldsymbol{\pi} \left(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (2.96)$$

Die diskreten Matrizen \mathbf{L} , \mathbf{L}^{vis} , \mathbf{M} und \mathbf{M}^{vis} sind bereits aus Gl. (2.83) und Gl. (2.84) bekannt. Die Inhalte der Matrizen werden für den erweiterten TC Integrator wie folgt angepasst:

$$\begin{aligned} \theta_{k\frac{1}{2}} &= \mathbf{D}_{s_k} e_k \\ D_{k\frac{1}{2}}^{int} &= \frac{4}{V_k^{vol}} c_{i_k n+\frac{1}{2}}^2 \Gamma_{k\frac{1}{2}}^2 \end{aligned} \quad (2.97)$$

Die diskreten inelastischen Spannungen sind gegeben durch:

$$\Gamma_{k\frac{1}{2}} = -\mathbf{D}_{c_{i_k}} e_k \quad (2.98)$$

Die Ableitungen der Invarianten $\boldsymbol{\pi} \in \mathbb{R}^8$ nach dem Zustandsvektor $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{16}$ und die anschließende Auswertung am Mittelpunkt des Zustandsvektors $\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}$ liefert die folgende Matrix $\nabla \boldsymbol{\pi} \in \mathbb{R}^{8 \times 16}$:

$$\nabla \boldsymbol{\pi} \left(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}} \right) = \begin{bmatrix} \frac{2}{L_1^2} \mathbf{q}_{1 n+\frac{1}{2}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0}^{3 \times 4} \\ -\frac{2}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} & \frac{2}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0}^{3 \times 4} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & 2 \mathbf{p}_{1 n+\frac{1}{2}} & \mathbf{0} & \mathbf{0}^{3 \times 4} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & 2 \mathbf{p}_{2 n+\frac{1}{2}} & \mathbf{0}^{3 \times 4} \\ \mathbf{0}^{4 \times 1} & \mathbf{0}^{4 \times 1} & \mathbf{0}^{4 \times 1} & \mathbf{0}^{4 \times 1} & \mathbf{I}^{4 \times 4} \end{bmatrix} \quad (2.99)$$

Beweis 2.3.1 *Es soll anhand des thermoviskoelastischen Doppelpendels kurz gezeigt werden, dass die Beziehung*

$$\nabla \boldsymbol{\pi} \left(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}} \right) (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) = \boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n \quad (2.100)$$

gilt. Setzt man die Matrix aus Gl. (2.99) ein, folgt:

$$\begin{bmatrix}
 \frac{2}{L_1^2} \mathbf{q}_{1_{n+\frac{1}{2}}} \cdot (\mathbf{q}_{1_{n+1}} - \mathbf{q}_{1_n}) \\
 \frac{2}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} \cdot (\mathbf{q}_{2_{n+1}} - \mathbf{q}_{2_n} - \mathbf{q}_{1_{n+1}} + \mathbf{q}_{1_n}) \\
 2 \mathbf{p}_{1_{n+\frac{1}{2}}} \cdot (\mathbf{p}_{1_{n+1}} - \mathbf{p}_{1_n}) \\
 2 \mathbf{p}_{2_{n+\frac{1}{2}}} \cdot (\mathbf{p}_{2_{n+1}} - \mathbf{p}_{2_n}) \\
 s_{1_{n+1}} - s_{1_n} \\
 s_{2_{n+1}} - s_{2_n} \\
 c_{i_{1_{n+1}}} - c_{i_{1_n}} \\
 c_{i_{2_{n+1}}} - c_{i_{2_n}}
 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
 \frac{\|\mathbf{q}_{1_{n+1}}\|^2 - \|\mathbf{q}_{1_n}\|^2}{L_1^2} \\
 \frac{\|\mathbf{r}_{n+1}\|^2 - \|\mathbf{r}_n\|^2}{L_2^2} \\
 \|\mathbf{p}_{1_{n+1}}\|^2 - \|\mathbf{p}_{1_n}\|^2 \\
 \|\mathbf{p}_{2_{n+1}}\|^2 - \|\mathbf{p}_{2_n}\|^2 \\
 s_{1_{n+1}} - s_{1_n} \\
 s_{2_{n+1}} - s_{2_n} \\
 c_{i_{1_{n+1}}} - c_{i_{1_n}} \\
 c_{i_{2_{n+1}}} - c_{i_{2_n}}
 \end{bmatrix} \quad (2.101)$$

Mit der Definition der Verzerrungen c_k aus Gl. (2.4) folgt die Differenz der Invarianten $\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n$.

Partitionierte diskrete Gradienten

Die partitionierten diskreten Gradienten für das Doppelpendel sollen im Folgenden aufgeführt werden. Dazu wird zunächst die Spannung $S_{k_{\frac{1}{2}}}$ durch die partitionierten diskreten Gradienten ausgedrückt:

$$S_{k_{\frac{1}{2}}} = 2 D_{c_k} e_k \quad (2.102)$$

Die partitionierten diskreten Gradienten der kinetischen Energie $D_{\|\mathbf{p}_k\|^2} T_k$ und der Entropie $D_{s_k} s_k$ werden nach dem Anhangkapitel B.3.1 gebildet. Da die Invarianten π_k des thermoviskoelastischen Doppelpendels Skalare sind, werden $D_{\|\mathbf{p}_k\|^2} T_k$ und $D_{s_k} s_k$ durch Gl. (B.45) bestimmt. Für die partitionierten diskreten Gradienten $D_{\|\mathbf{p}_k\|^2} T_k$ und $D_{s_k} s_k$ folgt:

$$\begin{aligned}
 D_{\pi_3} T_1 &= \frac{T_1(\pi_{3_{n+1}}) - T_1(\pi_{3_n})}{\pi_{3_{n+1}} - \pi_{3_n}} & D_{\pi_5} s_1 &= \frac{s_{1_{n+1}} - s_{1_n}}{\pi_{5_{n+1}} - \pi_{5_n}} \\
 D_{\pi_4} T_2 &= \frac{T_2(\pi_{4_{n+1}}) - T_2(\pi_{4_n})}{\pi_{4_{n+1}} - \pi_{4_n}} & D_{\pi_6} s_2 &= \frac{s_{2_{n+1}} - s_{2_n}}{\pi_{6_{n+1}} - \pi_{6_n}}
 \end{aligned} \quad (2.103)$$

Die Definition der kinetischen Energie T_k aus Gl. (2.8) und die Definition der Invarianten $\pi_5 = s_1$ und $\pi_6 = s_2$ liefern die folgenden konstanten Werte für die partitionierten

2. Thermoviskoelastisches Modellproblem

diskreten Gradienten:

$$D_{\|\mathbf{p}_k\|^2} T_k = \frac{1}{2m_k} \quad D_{s_k} s_k = 1 \quad (2.104)$$

Gemäß Anhangkapitel B.3.2 werden die partitionierten diskreten Gradienten $D_{\pi_l} e_k$ mit $l = [1, 5, 7]$ für $k = 1$ und $l = [2, 6, 8]$ für $k = 2$ gebildet. Da die Invarianten Skalare sind, kann nach Gl. (B.51) vorgegangen werden. Die partitionierten diskreten Gradienten der inneren Energie $D_{\pi_l} e_k$ lauten somit

$$\begin{aligned} D_{c_k} e_k &= \frac{e_{k_{n+1}} - e_k(c_{k_n}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}})}{2(c_{k_{n+1}} - c_{k_n})} + \frac{e_k(c_{k_{n+1}}, s_{k_n}, c_{i_{k_n}}) - e_{k_n}}{2(c_{k_{n+1}} - c_{k_n})} \\ D_{s_k} e_k &= \frac{e_k(c_{k_n}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}}) - e_k(c_{k_n}, s_{k_n}, c_{i_{k_{n+1}}})}{2(s_{k_{n+1}} - s_{k_n})} \\ &\quad + \frac{e_k(c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_n}}) - e_k(c_{k_{n+1}}, s_{k_n}, c_{i_{k_n}})}{2(s_{k_{n+1}} - s_{k_n})} \\ D_{c_{i_k}} e_k &= \frac{e_k(c_{k_n}, s_{k_n}, c_{i_{k_{n+1}}}) - e_{k_n}}{2(c_{i_{k_{n+1}}} - c_{i_{k_n}})} + \frac{e_{k_{n+1}} - e_k(c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_n}})}{2(c_{i_{k_{n+1}}} - c_{i_{k_n}})} \end{aligned} \quad (2.105)$$

mit den Abkürzungen:

$$e_{k_n} = e_k(c_{k_n}, s_{k_n}, c_{i_{k_n}}) \quad e_{k_{n+1}} = e_k(c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}}) \quad (2.106)$$

Für den Grenzfall, dass $\pi_{k_n} = \pi_{k_{n+1}}$, ändern sich lediglich die partitionierten diskreten Gradienten $D_{\pi_l} e_k$, da $D_{\|\mathbf{p}_k\|^2} T_k$ und $D_{s_k} s_k$ konstant sind. Die partitionierten diskreten Gradienten $D_{\pi_l} e_k$ werden im Grenzfall folgendermaßen ausgewertet:

$$\begin{aligned} D_{c_k} e_k &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial e_k}{\partial c_k} \left(c_{k_{n+\frac{1}{2}}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}} \right) + \frac{\partial e_k}{\partial c_k} \left(c_{k_{n+\frac{1}{2}}}, s_{k_n}, c_{i_{k_n}} \right) \right] \\ D_{s_k} e_k &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial e_k}{\partial s_k} \left(c_{k_n}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_{n+1}}} \right) + \frac{\partial e_k}{\partial s_k} \left(c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_n}} \right) \right] \\ D_{c_{i_k}} e_k &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial e_k}{\partial c_{i_k}} \left(c_{k_n}, s_{k_n}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right) + \frac{\partial e_k}{\partial c_{i_k}} \left(c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.107)$$

2.3.3. Vergleich der Integratoren

Sowohl die Mittelpunktsregel aus dem Kapitel 2.3.1 als auch der erweiterte TC Integrator aus Kapitel 2.3.2 liefern die folgende Struktur für das Anfangswertproblem:

$$\frac{\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n}{h_n} = \begin{bmatrix} \frac{1}{m_1} \mathbf{p}_{1_{n+\frac{1}{2}}} \\ \frac{1}{m_2} \mathbf{p}_{2_{n+\frac{1}{2}}} \\ -\frac{S_{1_{\frac{1}{2}}}}{L_1^2} \mathbf{q}_{1_{n+\frac{1}{2}}} + \frac{S_{2_{\frac{1}{2}}}}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} \\ -\frac{S_{2_{\frac{1}{2}}}}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} \\ \kappa \left(\frac{\theta_{2_{\frac{1}{2}}}}{\theta_{1_{\frac{1}{2}}}} - 1 \right) + \frac{D_{1_{\frac{1}{2}}}^{int}}{\theta_{1_{\frac{1}{2}}}} \\ \kappa \left(\frac{\theta_{1_{\frac{1}{2}}}}{\theta_{2_{\frac{1}{2}}}} - 1 \right) + \frac{D_{2_{\frac{1}{2}}}^{int}}{\theta_{2_{\frac{1}{2}}}} \\ \frac{4 c_{i1_{n+\frac{1}{2}}}^2}{V_1^{vol}} \Gamma_{1_{\frac{1}{2}}} \\ \frac{4 c_{i2_{n+\frac{1}{2}}}^2}{V_2^{vol}} \Gamma_{2_{\frac{1}{2}}} \end{bmatrix} \quad (2.108)$$

Die Anfangswerte des Zustandsvektors lauten $\mathbf{z}_n(t=0) = \mathbf{z}_n^0$.

Die zeitliche Diskretisierung des thermoviskoelastischen Doppelpendels durch die Mittelpunktsregel muss mittels der Spannungen $S_{k_{\frac{1}{2}}}$ und $\Gamma_{k_{\frac{1}{2}}}$ aus Gl. (2.89) ausgewertet werden. Die Temperaturen $\theta_{k_{\frac{1}{2}}}$ sowie die inneren Dissipationen $D_{k_{\frac{1}{2}}}^{int}$ sind für die Mittelpunktsregel durch Gl. (2.85) gegeben. Die Verzerrungen werden durch Gl. (2.86) berechnet.

Wird das thermoviskoelastische Doppelpendel durch den erweiterten TC Integrator beschrieben, erfolgt die Auswertung der Spannungen $S_{k_{\frac{1}{2}}}$ und $\Gamma_{k_{\frac{1}{2}}}$ nach Gl. (2.102) und Gl. (2.98). Die Temperaturen $\theta_{k_{\frac{1}{2}}}$ und die inneren Dissipationen $D_{k_{\frac{1}{2}}}^{int}$ werden nach Gl. (2.97) berechnet.

Bemerkung 2.3.1 Die zeitliche Diskretisierung der Matrix \mathbf{L}^λ und des Vektors $\nabla\phi$ für die thermische Zwangsbedingung sind wie folgt gegeben:

$$\mathbf{L}^\lambda = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{12 \times 12} & \mathbf{0}^{12 \times 1} & \mathbf{0}^{12 \times 3} \\ \mathbf{0}^{1 \times 12} & -\lambda_{1_{n,n+1}} & \mathbf{0}^{1 \times 3} \\ \mathbf{0}^{3 \times 12} & \mathbf{0}^{3 \times 1} & \mathbf{0}^{3 \times 3} \end{bmatrix} \quad \nabla\phi = \nabla^G\phi = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{12 \times 1} \\ 1 \\ \mathbf{0}^{3 \times 1} \end{bmatrix} \quad (2.109)$$

Der Lagrangesche Multiplikator $\lambda_{1_{n,n+1}}$ ist über den Zeitschritt konstant. Die Ableitung der Zwangsbedingung ist für die Mittelpunktsregel $\nabla\phi$ und den erweiterten TC Integrator $\nabla^G\phi$ konstant und identisch. Die Zwangsbedingung wird am momentanen Zeitknoten $n+1$ eingefordert

$$\phi_{1_{n+1}} = \theta_{1_{n+1}} - \bar{\theta} = 0 \quad (2.110)$$

um die Energie durch die Zwangsbedingung nicht zu verändern:

$$\tilde{H}_{n+1} = H_{n+1} + \lambda_{1_{n,n+1}} \phi_{1_{n+1}} \quad (2.111)$$

Die zeitliche Diskretisierung der thermischen Gleichung \dot{s}_1 wird daher wie folgt erweitert:

$$\frac{s_{1_{n+1}} - s_{1_n}}{h_n} = \kappa \left(\frac{\theta_{2_{\frac{1}{2}}}}{\theta_{1_{\frac{1}{2}}}} - 1 \right) + \frac{D_{1_{\frac{1}{2}}}^{int}}{\theta_{1_{\frac{1}{2}}}} - \lambda_{1_{n,n+1}} \quad (2.112)$$

Lösung des diskreten Anfangswertproblems

Das implizite, nichtlineare Anfangswertproblem aus Gl. (2.108) wird durch eine iterative Bestimmung des momentanen Zustandsvektors \mathbf{z}_{n+1} mittels des Newton-Raphson-Verfahrens gelöst. Das Newton-Raphson-Verfahren benötigt einen geeigneten Startwert \mathbf{z}_{n+1}^0 , um den Wert \mathbf{z}_{n+1} einer Funktion \mathbf{R} zu bestimmen, der die Bedingung $\mathbf{R}(\mathbf{z}_{n+1}) = \mathbf{0}$ erfüllt. Aufgrund dieser Bedingung wird \mathbf{R} häufig als Residuum (das Zurückgebliebene) bezeichnet. Die Iterationsvorschrift lautet

$$\mathbf{z}_{n+1}^{k+1} = \mathbf{z}_{n+1}^k - \mathbf{K}^{-1}(\mathbf{z}_{n+1}^k) \mathbf{R}(\mathbf{z}_{n+1}^k) \quad (2.113)$$

mit der Tangentenmatrix $\mathbf{K} = \partial\mathbf{R}/\partial\mathbf{z}_{n+1}$ des Residuums. Die Iterationsvorschrift wird solange durchlaufen, bis der Betrag des Abbruchkriteriums A_{krit} eine vorgegebene Toleranz ε unterschreitet:

$$|A^{krit}| \leq \varepsilon \quad (2.114)$$

Die Bestimmung von \mathbf{R} , die daraus resultierende Tangentenmatrix \mathbf{K} für das Doppelpendel und das Abbruchkriterium A^{krit} werden im Anhangkapitel B.4 behandelt.

2.3.4. Algorithmische strukturelle Eigenschaften

Impulsbilanz

Die diskrete Impulsbilanz kann aus Gl. (2.74) hergeleitet werden:

$$\mathbf{L}_{n+1} - \mathbf{L}_n = \sum_{k=1}^2 (\mathbf{p}_{k_{n+1}} - \mathbf{p}_{k_n}) \quad (2.115)$$

Wird die zweite Bewegungsgleichung aus Gl. (2.108) eingesetzt, welche bereits externe Kräfte vernachlässigt ($\mathbf{F}_{k_{\frac{1}{2}}}^{ext} = \mathbf{0}$), dann folgt für die Impulsbilanz:

$$\mathbf{L}_{n+1} - \mathbf{L}_n = -h_n \frac{S_{1_{\frac{1}{2}}}}{L_1^2} \mathbf{q}_{1_{n+\frac{1}{2}}} \quad (2.116)$$

Der Impuls der Mittelpunktsregel sowie des erweiterten TC Integrator kann durch die feste Lagerung des Doppelpendels nicht erhalten werden ($\mathbf{L}_{n+1} \neq \mathbf{L}_n$).

Drehimpulsbilanz

Für den Beweis der algorithmischen Drehimpulserhaltung wird der aktuelle Drehimpuls \mathbf{J}_{n+1} nach Gl. (2.66) aus dem aktuellen Positionsvektor $\mathbf{q}_{k_{n+1}}$ und dem aktuellen Impulsvektor $\mathbf{p}_{k_{n+1}}$ berechnet:

$$\mathbf{J}_{n+1} = \sum_{k=1}^2 \mathbf{q}_{k_{n+1}} \times \mathbf{p}_{k_{n+1}} \quad (2.117)$$

Wird der aktuelle Positionsvektor $\mathbf{q}_{k_{n+1}}$ mit der ersten diskreten Bewegungsgleichung aus Gl. (2.108) ersetzt, folgt für den Drehimpuls unter Beachtung der Schiefsymmetrie des Kreuzproduktes:

$$\mathbf{J}_{n+1} = \sum_{k=1}^2 \left(\mathbf{q}_{k_n} \times \mathbf{p}_{k_{n+1}} + \frac{h_n}{2 m_k} \mathbf{p}_{k_n} \times \mathbf{p}_{k_{n+1}} \right) \quad (2.118)$$

Der aktuelle Impuls $\mathbf{p}_{k_{n+1}}$ kann mit der zweiten Bewegungsgleichung aus Gl. (2.108) ersetzt werden. Dies liefert die diskrete Drehimpulsbilanz:

$$\mathbf{J}_{n+1} - \mathbf{J}_n = h_n \sum_{k=1}^2 \left(\mathbf{q}_{k_n} + \frac{h_n}{2 m_k} \mathbf{p}_{k_n} \right) \times \left(\mathbf{F}_{k_{\frac{1}{2}}}^{ext} - \mathbf{F}_{k_{\frac{1}{2}}}^{int} \right) \quad (2.119)$$

Des Weiteren werden zwei vektorwertige Multiplikationen durchgeführt. Zum einen betrifft dies die erste Bewegungsgleichung, welche mit der Differenz der externen und internen Kräfte $\mathbf{F}_{k_{\frac{1}{2}}}^{ext} - \mathbf{F}_{k_{\frac{1}{2}}}^{int}$ multipliziert wird, zum anderen die zweite Bewegungsgleichung,

2. Thermoviskoelastisches Modellproblem

welche mit $\frac{1}{m_k} \mathbf{p}_{k_n}$ auf beiden Seiten vormultipliziert wird. Werden beide Ergebnisse anschließend aufsummiert, kann folgender Zusammenhang für die diskrete Drehimpulsbilanz hergestellt werden:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{n+1} - \mathbf{J}_n &= h_n \sum_{k=1}^2 \left[\mathbf{q}_{k_n} + \frac{1}{2} (\mathbf{q}_{k_{n+1}} - \mathbf{q}_{k_n}) \right] \times \left(\mathbf{F}_{k_{\frac{1}{2}}}^{ext} - \mathbf{F}_{k_{\frac{1}{2}}}^{int} \right) \\ &= h_n \sum_{k=1}^2 \mathbf{q}_{k_{n+\frac{1}{2}}} \times \left(\mathbf{F}_{k_{\frac{1}{2}}}^{ext} - \mathbf{F}_{k_{\frac{1}{2}}}^{int} \right) \end{aligned} \quad (2.120)$$

Analog zu Gl. (2.69) kann für die Mittelpunktsregel und den erweiterten TC Integrator gezeigt werden, dass das Moment der diskreten internen Kräfte zu null wird:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^2 \mathbf{q}_{k_{n+\frac{1}{2}}} \times \mathbf{F}_{k_{\frac{1}{2}}}^{int} &= \mathbf{q}_{1_{n+\frac{1}{2}}} \times \left(\frac{S_{1_{\frac{1}{2}}}}{L_1^2} \mathbf{q}_{1_{n+\frac{1}{2}}} - \frac{S_{2_{\frac{1}{2}}}}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} \right) + \mathbf{q}_{2_{n+\frac{1}{2}}} \times \frac{S_{2_{\frac{1}{2}}}}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} \\ &= \mathbf{0} \end{aligned} \quad (2.121)$$

Greifen keine äußeren Kräfte $\mathbf{F}_{k_{\frac{1}{2}}}^{ext}$ an, wird die algorithmische Drehimpulserhaltung durch die beiden Integratoren gewährleistet.

Energiebilanz

Die algorithmische Energiebilanz für die Mittelpunktsregel und den TC Integrator hat die Struktur:

$$H_{n+1} - H_n = \mathbf{w} \cdot (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) \quad (2.122)$$

Der Vektor \mathbf{w} steht bei der Mittelpunktsregel für $\mathbf{w} = \nabla H$ und beim TC Integrator für die G-äquivalente diskrete Ableitung $\mathbf{w} = D^G H$. Setzt man nun die bekannten Vektoren ∇H bzw. $D^G H$ und $\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n$ ein, liefert dies die Energiebilanz:

$$\begin{aligned} H_{n+1} - H_n &= \frac{S_{1_{\frac{1}{2}}}}{L_1^2} \mathbf{q}_{1_{n+\frac{1}{2}}} (\mathbf{q}_{1_{n+1}} - \mathbf{q}_{1_n}) + \frac{S_{2_{\frac{1}{2}}}}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} (\mathbf{q}_{2_{n+1}} - \mathbf{q}_{2_n} - \mathbf{q}_{1_{n+1}} + \mathbf{q}_{1_n}) \\ &\quad + \frac{1}{m_1} \mathbf{p}_{1_{n+\frac{1}{2}}} (\mathbf{p}_{1_{n+1}} - \mathbf{p}_{1_n}) + \frac{1}{m_2} \mathbf{p}_{2_{n+\frac{1}{2}}} (\mathbf{p}_{2_{n+1}} - \mathbf{p}_{2_n}) \\ &\quad + \theta_{1_{\frac{1}{2}}} (s_{1_{n+1}} - s_{1_n}) + \theta_{2_{\frac{1}{2}}} (s_{2_{n+1}} - s_{2_n}) \\ &\quad - \Gamma_{1_{\frac{1}{2}}} (c_{i_{1_{n+1}}} - c_{i_{1_n}}) - \Gamma_{2_{\frac{1}{2}}} (c_{i_{2_{n+1}}} - c_{i_{2_n}}) \end{aligned} \quad (2.123)$$

Die Bilanz der kinetischen Energie $T_{n+1} - T_n$ wird durch die zweite Zeile der letzten Gleichung beschrieben:

$$T_{n+1} - T_n = \frac{1}{m_1} \mathbf{p}_{1_{n+\frac{1}{2}}} (\mathbf{p}_{1_{n+1}} - \mathbf{p}_{1_n}) + \frac{1}{m_2} \mathbf{p}_{2_{n+\frac{1}{2}}} (\mathbf{p}_{2_{n+1}} - \mathbf{p}_{2_n}) \quad (2.124)$$

Wenn keine äußeren Kräfte angreifen, dann bleibt lediglich die folgende Forderung für die Bilanz der inneren Energie:

$$E_{n+1} - E_n = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} S_{1\frac{1}{2}} \\ \frac{1}{2} S_{2\frac{1}{2}} \\ \theta_{1\frac{1}{2}} \\ \theta_{2\frac{1}{2}} \\ -\Gamma_{1\frac{1}{2}} \\ -\Gamma_{2\frac{1}{2}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_{1_{n+1}} - c_{1_n} \\ c_{2_{n+1}} - c_{2_n} \\ s_{1_{n+1}} - s_{1_n} \\ s_{2_{n+1}} - s_{2_n} \\ c_{i_{1_{n+1}}} - c_{i_{1_n}} \\ c_{i_{2_{n+1}}} - c_{i_{2_n}} \end{bmatrix} \quad (2.125)$$

Die Gl. (2.125) kann von der Mittelpunktsregel für die gewählte, hochgradig nichtlineare innere Energie (s. Anhangkapitel B.1) nicht erfüllt werden. Der erweiterte TC Integrator ist für die Gültigkeit dieser Gleichung konstruiert worden (s. Gl. (2.90)).

Bemerkung 2.3.2 *Die thermische Zwangsbedingung liefert für die algorithmische Energiebilanz unter Verwendung von Zwangsbedingungen zum momentanen Zeitknoten die Gleichung:*

$$H_{n+1} - H_n = \mathbf{w} \cdot (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) \quad (2.126)$$

Dabei muss im Anfangswertproblem die Gl. (2.112) verwendet werden. Die Mittelpunktsregel kann die innere Energie nicht im Sinne von Gl. (2.125) erhalten, dadurch gilt die folgende Beziehung lediglich für den TC Integrator:

$$H_{n+1} - H_n = -h_n \lambda_{1_{n,n+1}} \theta_{1\frac{1}{2}} \quad (2.127)$$

Entropiebilanz

Die algorithmische Entropiebilanz wird aus Gl. (2.58) gewonnen, wobei der Platzhalter \mathbf{w}_S für die Mittelpunktsregel den Gradienten ∇S und für den TC Integrator die G-äquivalenten diskreten Gradienten $D^G S$ wiedergibt:

$$S_{n+1} - S_n = \mathbf{w}_S \cdot (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) \quad (2.128)$$

2. Thermoviskoelastisches Modellproblem

Beide Integratoren liefern die gleiche Struktur für die Entropiebilanz, wenn \mathbf{w}_S und die diskreten thermischen Evolutionsgleichungen aus Gl. (2.108) eingesetzt werden:

$$\begin{aligned} S_{n+1} - S_n &= h_n \left(\kappa \frac{\theta_{2\frac{1}{2}}}{\theta_{1\frac{1}{2}}} - \kappa + \frac{D_{1\frac{1}{2}}^{int}}{\theta_{1\frac{1}{2}}} - \kappa + \kappa \frac{\theta_{1\frac{1}{2}}}{\theta_{2\frac{1}{2}}} + \frac{D_{2\frac{1}{2}}^{int}}{\theta_{2\frac{1}{2}}} \right) \\ &= h_n \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^2 \frac{1}{\theta_{k\frac{1}{2}}} \left(D_{jk\frac{1}{2}}^{cd} + D_{k\frac{1}{2}}^{int} \right) \geq 0 \end{aligned} \quad (2.129)$$

Die diskrete Dissipation der Wärmeleitung $D_{jk\frac{1}{2}}^{cd}$ ist definiert als:

$$D_{jk\frac{1}{2}}^{cd} = \kappa \frac{(\theta_{j\frac{1}{2}} - \theta_{k\frac{1}{2}})^2}{2\theta_{j\frac{1}{2}}} \quad (2.130)$$

Die Entropiebilanz wird sowohl für die Mittelpunktsregel als auch für den erweiterten TC Integrator erhalten.

Bemerkung 2.3.3 *Mit der thermischen Zwangsbedingung folgt für die algorithmische Entropiebilanz unter Verwendung der Gl. (2.112):*

$$S_{n+1} - S_n = -h_n \lambda_{1_{n,n+1}} + h_n \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^2 \frac{1}{\theta_{k\frac{1}{2}}} \left(D_{jk\frac{1}{2}}^{cd} + D_{k\frac{1}{2}}^{int} \right) \quad (2.131)$$

Lyapunov Funktion

Da die Bilanz der Gesamtenergie und die Bilanz der Entropie bereits durch die Gl. (2.125) und Gl. (2.129) gegeben sind, folgt für die diskrete Lyapunov-Funktion:

$$V_{n+1} - V_n = H_{n+1} - H_n - \theta_\infty (S_{n+1} - S_n) \leq 0 \quad (2.132)$$

Die Energiebilanz wird von dem erweiterten TC Integrator erfüllt und die Entropiebilanz wird von beiden Integratoren erhalten. Dies lässt den Schluss zu, dass die Bilanz der Lyapunov Funktion lediglich von dem erweiterten TC Integrator erfüllt werden kann. Daraus ergibt sich folgende Gleichung:

$$V_{n+1} - V_n + h_n \theta_\infty \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^2 \frac{1}{\theta_{k\frac{1}{2}}} \left(D_{jk\frac{1}{2}}^{cd} + D_{k\frac{1}{2}}^{int} \right) = 0 \quad (2.133)$$

Bemerkung 2.3.4 Die thermische Zwangsbedingung liefert mit Gl. (2.112) für die algorithmische Bilanz der Lyapunov-Funktion:

$$\begin{aligned} V_{n+1} - V_n &= H_{n+1} - H_n - \theta_\infty (S_{n+1} - S_n) \\ &= -h_n \lambda_{1_{n,n+1}} \left(\theta_{1_{\frac{1}{2}}} - \theta_\infty \right) - h_n \theta_\infty \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^2 \frac{1}{\theta_{k_{\frac{1}{2}}}} \left(D_{jk_{\frac{1}{2}}}^{edu} + D_{k_{\frac{1}{2}}}^{int} \right) \end{aligned} \quad (2.134)$$

Diese kann, wie bereits für das System ohne Zwangsbedingungen erwähnt, nur für den TC Integrator erfüllt werden. Ein Nachteil der Erfüllung der Zwangsbedingung am momentanen Zeitknoten ist, dass der erste Term nicht zu null werden kann, wenn die Zwangsbedingung

$$\phi_{1_{n+1}} = \theta_{1_{n+1}} - \theta_\infty \quad (2.135)$$

lautet. Eine Auswertung der Zwangsbedingung am Mittelpunkt der Temperaturen $\theta_{1_{\frac{1}{2}}}$

$$\phi_{1_{\frac{1}{2}}} = \theta_{1_{\frac{1}{2}}} - \theta_\infty \quad (2.136)$$

würde die algorithmische Lyapunov-Bilanz erhalten, aber dafür die Gesamtenergie im momentanen Zeitknoten verändern.

3. Numerische Beispiele des Modellproblems

In diesem Kapitel sollen die Ergebnisse des Modellproblems veranschaulicht werden. Zunächst wird auf die reine Wärmeleitung des Modellproblems eingegangen, um das thermische Verhalten des Doppelpendels besser zu verstehen. Danach erfolgt die nähere Betrachtung des viskosen Verhaltens durch einen Kriechversuch. Weiterhin wird die Auswirkung einer thermischen Zwangsbedingung auf das Pendel untersucht und zum Schluss erfolgt der Vergleich des thermoviskoelastischen Doppelpendels hinsichtlich zweier verschiedener Integratoren.

3.1. Reine Wärmeleitung

Der Begriff reine Wärmeleitung bedeutet, dass die Wärmeleitung nicht von der Bewegung des Systems beeinflusst wird. Durch die reine Wärmeleitung des Doppelpendels kann für den Temperaturverlauf $\theta_k(t)$ eine analytische Lösung gefunden werden, die im Weiteren genauer erläutert werden soll.

Um das thermoviskoelastische Doppelpendel in ein Doppelpendel mit reiner Wärmeleitung zu überführen, werden der Kopplungsparameter β_k und die Lamé-Parameter λ_{e_k} und μ_{e_k} für die freie viskose Energie ψ_k^{vis} zu null gesetzt. Dadurch wird die Viskosität des Doppelpendels unterbunden und die Bewegung des Doppelpendels ist unabhängig vom Temperaturverlauf. Die Lamé-Parameter λ_k und μ_k der freien kompressiblen Energie ψ_k^{com} , die Wärmekapazitäten k_k und die Viskositätsparameter V_k^{vol} werden wie folgt gewählt:

$$\begin{array}{llll}
 \lambda_1 = 3 \text{ kJ} & \mu_1 = 750 \text{ J} & k_1 = 1,5 \frac{\text{kJ}}{\text{K}} & V_1^{vol} = 500 \text{ Js} \\
 \lambda_2 = 300 \text{ J} & \mu_2 = 75 \text{ J} & k_2 = 1,5 \frac{\text{kJ}}{\text{K}} & V_2^{vol} = 500 \text{ Js}
 \end{array}$$

Tabelle 3.1.: Parameter - Reine Wärmeleitung

3. Numerische Beispiele des Modellproblems

Die Referenztemperatur entspricht der Raumtemperatur von $\theta_\infty = 300$ K. Durch die Wahl der Lamé-Parameter $\lambda_{e_k} = 0$ und $\mu_{e_k} = 0$ wird die innere Dissipation D_k^{int} zu null. Dadurch folgt für die thermischen Evolutionsgleichungen aus Gl. (2.28)

$$\begin{aligned}\dot{s}_1 &= \kappa \left(\frac{\theta_2}{\theta_1} - 1 \right) \\ \dot{s}_2 &= \kappa \left(\frac{\theta_1}{\theta_2} - 1 \right)\end{aligned}\tag{3.1}$$

mit dem Wärmeleitkoeffizienten $\kappa = 300 \frac{\text{W}}{\text{K}}$. Nach Gl. (2.17)₁ steht die Entropie s_k mit der Temperatur θ_k durch die freie Energie ψ_k in Verbindung. Hier muss nun das verwendete Energiemodell explizit eingesetzt werden. Mit dem Kopplungsparameter $\beta_k = 0$, folgt unter Verwendung des Neo-Hooke Modells für die Entropien s_k nach Gl. (B.5):

$$s_k = -\frac{\partial \psi_k}{\partial \theta_k} = k_k \ln \frac{\theta_k}{\theta_\infty}\tag{3.2}$$

Die Zeitableitung der Entropie \dot{s}_k kann weiterhin durch das konstitutive Gesetz dargestellt werden als:

$$\begin{aligned}\dot{s}_k &= -\frac{\partial^2 \psi_k}{\partial \theta_k^2} \dot{\theta}_k \\ &= \frac{k_k}{\theta_k} \dot{\theta}_k\end{aligned}\tag{3.3}$$

Wird Gl. (3.3) in Gl. (3.1) eingesetzt, lassen sich die thermischen Evolutionsgleichungen durch die Temperatur ausdrücken als:

$$\begin{aligned}\dot{\theta}_1 &= \frac{\kappa}{k_1} (\theta_2 - \theta_1) \\ \dot{\theta}_2 &= \frac{\kappa}{k_2} (\theta_1 - \theta_2)\end{aligned}\tag{3.4}$$

Die Differenz der Temperaturen wird durch die Variable $z = \theta_1 - \theta_2$ und die Addition durch die Variable $w = \theta_1 + \theta_2$ wiedergegeben. Die zugehörigen Anfangswerte werden durch $z^0 = \theta_1^0 - \theta_2^0$ und $w^0 = \theta_1^0 + \theta_2^0$ definiert. Zum einen wird nun die Differenz und zum anderen die Summe der Gl. (3.4)₁ und Gl. (3.4)₂ gebildet. Anschließend wird die Trennung der Variablen und eine Integration durchgeführt. Es folgt:

$$\begin{aligned}z(t) &= z^0 \exp\left(-2 \frac{\kappa}{k} t\right) \\ w(t) &= w^0\end{aligned}\tag{3.5}$$

Bei der Wahl gleicher Wärmekapazitäten $k = k_1 = k_2$ ergibt sich der Temperaturverlauf:

$$\theta_k(t) = \frac{\theta_k^0 + \theta_j^0}{2} + \frac{\theta_k^0 - \theta_j^0}{2} \exp\left(-2 \frac{\kappa}{k} t\right) \quad \forall j \neq k \in [1, 2]\tag{3.6}$$

Für eine Zeit $t \rightarrow \infty$ nehmen die Temperaturen einen konstanten Wert $\theta_k(t \rightarrow \infty) = \frac{1}{2} (\theta_k^0 + \theta_j^0)$ an.

Folgende Anfangswerte werden für die Positionsvektoren \mathbf{q}_k^0 , die Impulse \mathbf{p}_k^0 , die Temperaturen θ_k^0 und die internen Variablen $c_{i_k}^0$ festgelegt:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_1^0 &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ m} & \mathbf{p}_1^0 &= \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \\ 1,5 \end{bmatrix} \frac{\text{kg m}}{\text{s}} & \theta_1^0 &= 380 \text{ K} & c_{i_1}^0 &= 1 \\ \mathbf{q}_2^0 &= \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ m} & \mathbf{p}_2^0 &= \begin{bmatrix} -6 \\ 12 \\ 12 \end{bmatrix} \frac{\text{kg m}}{\text{s}} & \theta_2^0 &= 310 \text{ K} & c_{i_2}^0 &= 1 \end{aligned}$$

Tabelle 3.2.: Anfangswerte - Reine Wärmeleitung

Die Massen der Massenpunkte werden wie folgt gewählt, $m_1 = 1 \text{ kg}$ und $m_2 = 2 \text{ kg}$. Die Entropien für das Anfangswertproblem s_k^0 lassen sich durch die Gl. (2.17)₁ aus den vorgegebenen Temperaturen θ_k^0 und Positionsvektoren \mathbf{q}_k^0 bestimmen. Für die gegebenen Anfangswerte nähern sich die Temperaturen θ_k bei $\theta_k(t \rightarrow \infty) = 345 \text{ K}$ an (s. Abbildung 3.1).

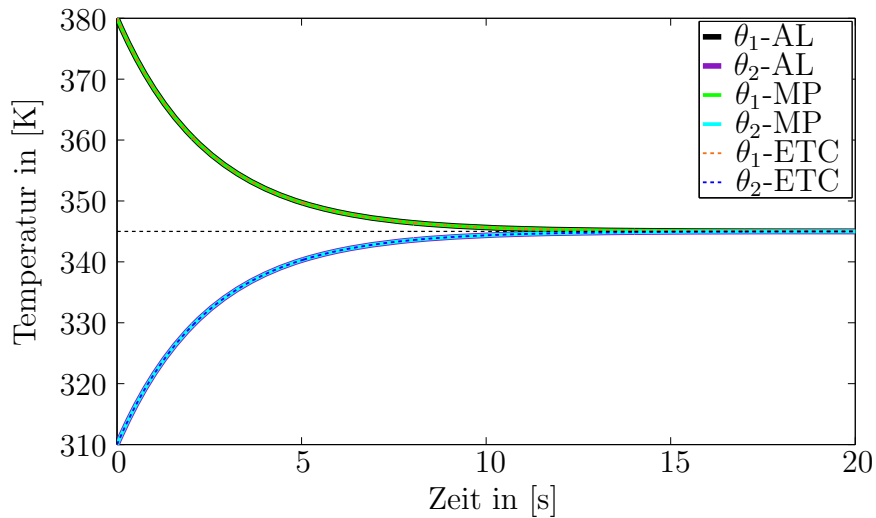


Abbildung 3.1.: Temperaturverlauf der reinen Wärmeleitung

Die Temperatur θ_1 nimmt bei einer reinen Wärmeleitung kontinuierlich ab und die Temperatur θ_2 steigt stetig an. Die analytische Lösung (AL) der Temperaturen θ_k kann sowohl von der Mittelpunktsregel (MP) als auch von dem erweiterten TC Integrator (ETC) wiedergegeben werden. Die hierbei verwendete äquidistante Zeitschrittweite ist $h_n = 10 \text{ ms}$ und als lokales und globales Abbruchkriterium wird eine Toleranz von $\varepsilon^{loc} = \varepsilon^{glo} = 10^{-8} \text{ J}$ verwendet.

3.2. Kriechversuch

Nach Holzapfel [37] stellen die generalisierten Maxwell-Elemente ein einfaches Modell zur Abbildung realer viskoelastischer Werkstoffe dar. Die generalisierten Maxwell-Elemente können typische Merkmale wie Relaxation und Kriechen dieses Werkstoffes nachbilden (s. Abbildung 3.2). Der Begriff Relaxation beschreibt dabei einen Prozess, bei dem ein System eine abnehmende Spannung besitzt, wenn es ruckartig deformiert wird und diese Deformation aufrecht erhalten bleibt (s. Abbildung 3.2). Wird ein System einer konstanten Spannung oder Belastung ausgesetzt, steigt die Deformation stetig an. Dieser Prozess nennt sich Kriechen.

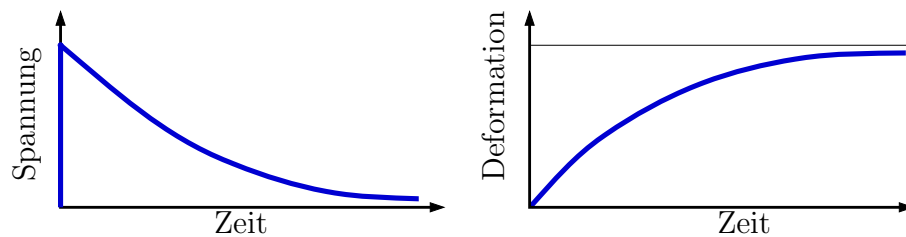


Abbildung 3.2.: Qualitativer Verlauf eines Relaxations- (links) und Kriechprozesses (rechts)

Für das thermoviskoelastische Doppelpendel wird im Folgenden ein Kriechversuch durchgeführt. Die Parameter und Anfangsbedingungen des Anfangswertproblems für das Doppelpendel sind die gleichen wie im vorangehenden Kapitel 3.1. Um den Kriechversuch durchzuführen, werden Änderungen für die folgenden Parameter vorgenommen:

$$\begin{array}{lll} \lambda_k = 300 \text{ J} & \lambda_{e_k} = 3 \text{ kJ} & \beta_1 = 0,0001 \text{ K}^{-1} \\ \mu_k = 75 \text{ J} & \mu_{e_k} = 750 \text{ J} & \beta_2 = 0,0001 \text{ K}^{-1} \end{array}$$

Tabelle 3.3.: Parameter - Kriechversuch

Am Massenpunkt m_2 greift eine Kraft \mathbf{F}_2^{ext} an und die Anfangsbedingungen für die Positionsvektoren \mathbf{q}_k^0 und die Impulse \mathbf{p}_k^0 lauten:

$$\begin{array}{lll} \mathbf{q}_1^0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} \text{ m} & \mathbf{p}_1^0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \frac{\text{kg m}}{\text{s}} & \mathbf{F}_1^{ext} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ N} \\ \mathbf{q}_2^0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -2,5 \end{bmatrix} \text{ m} & \mathbf{p}_2^0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \frac{\text{kg m}}{\text{s}} & \mathbf{F}_2^{ext} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -F_2^{ext} \end{bmatrix} \text{ N} \end{array}$$

Tabelle 3.4.: Anfangswerte - Kriechversuch

Die externen Kräfte \mathbf{F}_k^{ext} lassen sich sehr leicht in die Berechnungen integrieren. Dies geschieht sowohl für die Mittelpunktsregel als auch für den erweiterten TC Integrator, indem die externen Kräfte $\mathbf{F}_{k\frac{1}{2}}^{ext}$ am Mittelpunkt der Zeit $t_{n+\frac{1}{2}}$ ausgewertet werden und zum dritten und vierten Eintrag der Gl. (2.108) hinzu addiert werden. Da die externen Kräfte $\mathbf{F}_{k\frac{1}{2}}^{ext}$ nicht vom Zustandsvektor \mathbf{z}_{n+1} abhängig sind, liefern sie keinen Beitrag zur Tangentenmatrix.

Das Doppelpendel hängt in negativer z -Richtung, wie in Abbildung 3.3 dargestellt. Eine Kraft $F_2^{ext}(t)$ wird in negativer z -Richtung des Doppelpendels aufgebracht. Die Steigerung dieser Kraft erfolgt inkrementell bis zu einem konstanten Wert F_{2max}^{ext} , wie in Abbildung 3.3 dargestellt. Die Funktion der externen Kraft $F_2^{ext}(t)$ lautet

$$F_2^{ext}(t) = \begin{cases} \frac{F_{2max}^{ext}}{t_{max}} t & \forall t < t_{max} \\ F_{2max}^{ext} & \forall t \geq t_{max} \end{cases} \quad (3.7)$$

mit den maximalen Werten der Funktion für die Kraft $F_{2max}^{ext} = 100$ N und die Zeit $t_{max} = 0,2$ s. Nachdem die maximale Kraft erreicht ist, startet der Kriechprozess. Die inkrementelle Kraftaufbringung im Sinne eines inkrementell-iterativen Newton-Raphson Verfahrens verhindert ein Divergieren des Newton-Raphson-Verfahrens.

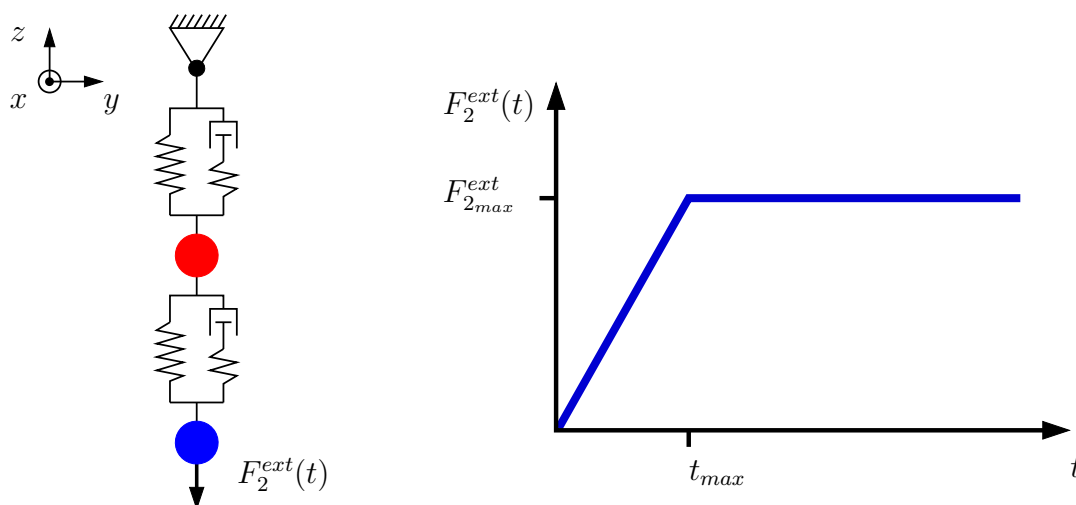


Abbildung 3.3.: Anfangsposition des Doppelpendels für den Kriechversuch (links) und den Kraftverlauf (rechts)

Die Mittelpunktsregel (MP) und der erweiterte TC (ETC) Integrator geben für den Kriechversuch den typischen Deformationverlauf wieder (s. Abbildung 3.4). Ab $t = 0,2$ s (s. Abbildung 3.4) beginnt der Kriechprozess. Durch die Anfangsbedingungen der Zustandsvektoren \mathbf{q}_k^0 aus Tabelle 3.4 sind die Anfangslängen der Vektoren \mathbf{q}_1^0 und \mathbf{r}^0 mit $L_1 = 1$ m und $L_2 = 1,5$ m gegeben. Die Längen l_k der generalisierten Maxwell-Elemente

3. Numerische Beispiele des Modellproblems

steigen unter den konstanten Belastung von $F_{2_{max}}^{ext}$ während des Kriechprozesses zu einem konstanten Wert an ($l_1(t \rightarrow \infty) \approx 1,150$ m, $l_2(t \rightarrow \infty) \approx 1,848$ m).

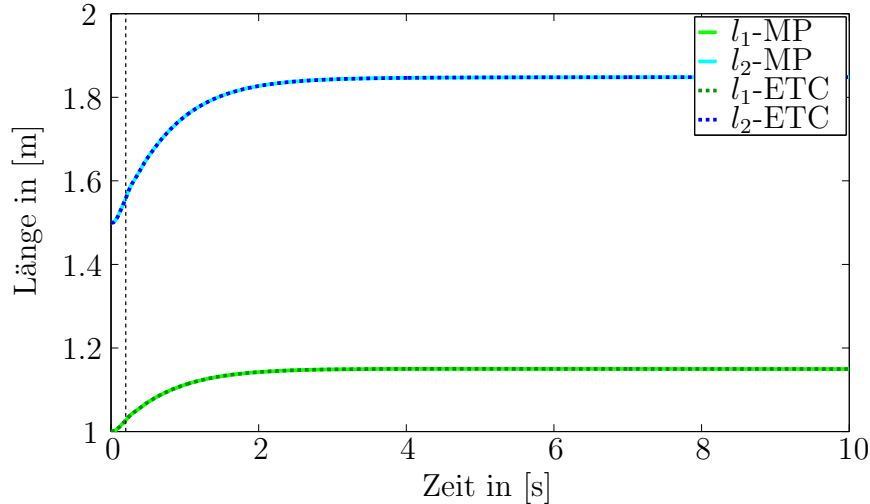


Abbildung 3.4.: Längen l_1 und l_2 des Doppelpendels über die Zeit t für den Kriechversuch

3.3. Thermische Zwangsbedingung für das Pendel 1

In diesem Kapitel soll eine thermische Zwangsbedingung die Temperatur des Pendels 1 so beeinflussen, dass diese konstant bleibt. Es werden zwei verschiedene Zwangsbedingungen gegenüber gestellt (s. Gl. (2.135) und Gl. (2.136)).

Die Massen des Doppelpendels sind gegeben durch $m_1 = 1$ kg und $m_2 = 2$ kg. Die Referenztemperatur beträgt $\theta_\infty = 300$ K. Der Wärmeleitkoeffizient nimmt den Wert $\kappa = 300 \frac{\text{W}}{\text{K}}$ an. Für $k = [1, 2]$ werden gleiche Lamé-Parameter λ_k und μ_k sowie viskose Lamé-Parameter λ_{e_k} und μ_{e_k} , Wärmekapazitäten k_k , Kopplungsparameter β_k und Viskositätsparameter V_k^{vol} angenommen (s. Tabelle 3.5).

$$\begin{array}{llll} \lambda_k = 30 \text{ kJ} & \lambda_{e_k} = 3 \text{ kJ} & k_k = 1,5 \frac{\text{kJ}}{\text{K}} & V_k^{vol} = 50 \text{ Js} \\ \mu_k = 7,5 \text{ kJ} & \mu_{e_k} = 750 \text{ J} & \beta_k = 0,0001 \text{ K}^{-1} & \end{array}$$

Tabelle 3.5.: Parameter - Thermische Zwangsbedingung für das Pendel 1

Die Anfangswerte für das Anfangswertproblem werden aus Tabelle 3.2 übernommen. Lediglich der Startwert für θ_1^0 entspricht der Referenztemperatur θ_∞ .

Die Zeitschrittweite für die zeitliche Diskretisierung wird auf $h_n = 50$ ms festgelegt. Die Toleranzen für das lokale und globale Residuum lauten $\varepsilon^{glo} = 10^{-6}$ J und $\varepsilon^{loc} = 10^{-8}$ J.

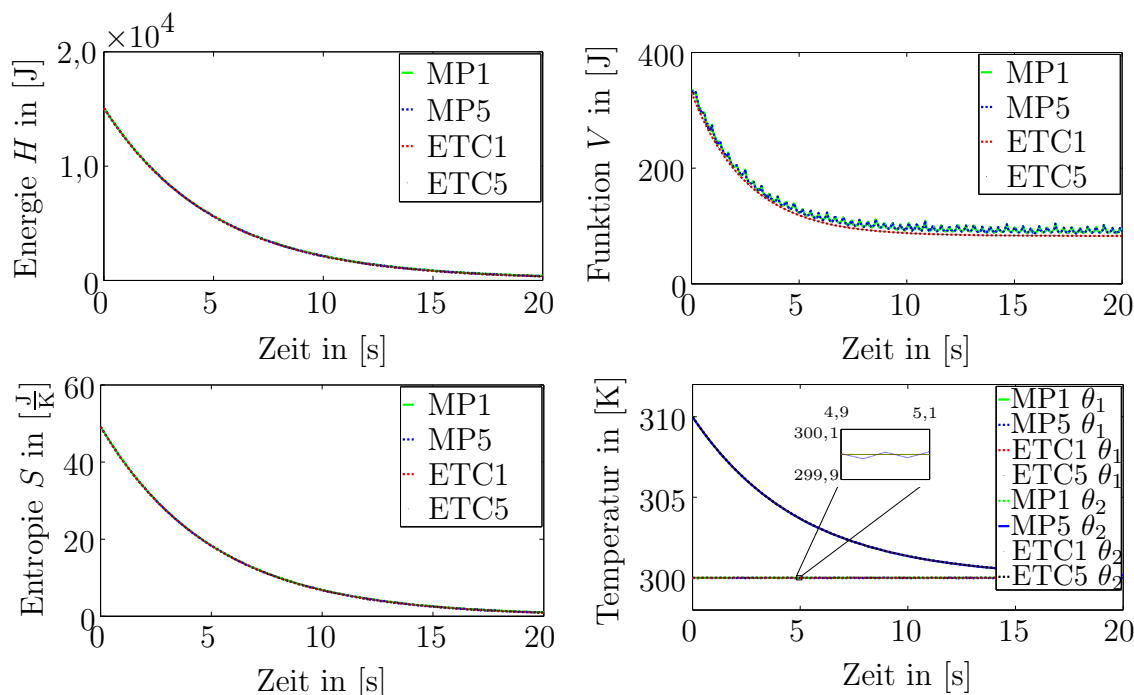


Abbildung 3.5.: Gesamtenergie H , Lyapunov-Funktion V , Gesamtentropie S und der Temperaturverlauf von θ_1 und θ_2 für die Mittelpunktsregel mit der Zwangsbedingung zum Zeitpunkt $n + 1$ (MP1) und zum Zeitpunkt $\frac{1}{2}$ (MP5) sowie für den erweiterten TC Integrator mit der Zwangsbedingung zum Zeitpunkt $n + 1$ (ETC1) und zum Zeitpunkt $\frac{1}{2}$ (ETC5)

In Abbildung 3.5 sind die Gesamtenergie H , die Lyapunov-Funktion V , die Gesamtentropie S und der Temperaturverlauf von θ_1 und θ_2 des Modellproblems dargestellt. Dabei bezeichnet MP1 die Mittelpunktsregel mit der Zwangsbedingung zum Zeitpunkt $n + 1$ aus Gl. (2.135) und MP5 die Mittelpunktsregel mit der Zwangsbedingung zum Zeitpunkt $\frac{1}{2}$ aus Gl. (2.136). Analog zur Mittelpunktsregel erhält der erweiterte TC Integrator die Abkürzungen ETC1 und ETC5.

Die Gesamtenergie H , die Lyapunov-Funktion V und die Gesamtentropie S fallen aufgrund der Zwangsbedingung, die einen Wärmefluss über den Rand zulässt, ab. Weiterhin ist zu erkennen, dass die Gesamtenergie H und die Gesamtentropie S keine nennenswerten Unterschiede für die unterschiedlichen Zwangsbedingungen liefern. Dies ist auch in der Lyapunov-Funktion wiederzuerkennen, die sich lediglich durch den verwendeten Integrator unterscheidet. Die Mittelpunktsregel zeigt bereits in Ansätzen das für sie typische, oszillierende Verhalten, welches durch Vergrößerung der Zeitschrittweite zu einem *blow-up* der Gesamtenergie H führt (s. auch Kapitel 3.4).

Der Temperaturverlauf zeigt, dass sowohl θ_1 als auch θ_2 durch beide Zwangsbedingungen gut wiedergegeben werden können. Der Nachteil der Zwangsbedingung aus Gl. (2.136) ist jedoch im Ausschnitt der Abbildung 3.5 zu erkennen. Durch die Einforderung der

3. Numerische Beispiele des Modellproblems

Zwangsbedingung am Zeitpunkt $\frac{1}{2}$ oszilliert die Temperatur am momentanen Zeitknoten $n + 1$ um die geforderte Referenztemperatur θ_∞ . Dieses Phänomen ist sowohl bei der Mittelpunktsregel als auch bei dem erweiterten TC Integrator der Fall, wobei die Oszillationen des ETC5 verschwindend gering sind. Die Temperaturabweichungen sind jedoch nur gering und liefern keinen großen Beitrag. Ein weiterer Nachteil ist, dass die Energie am momentanen Zeitpunkt H_{n+1} verändert wird, da $\phi_{n+1} \neq 0$ (s. Bemerkung 2.1.2).

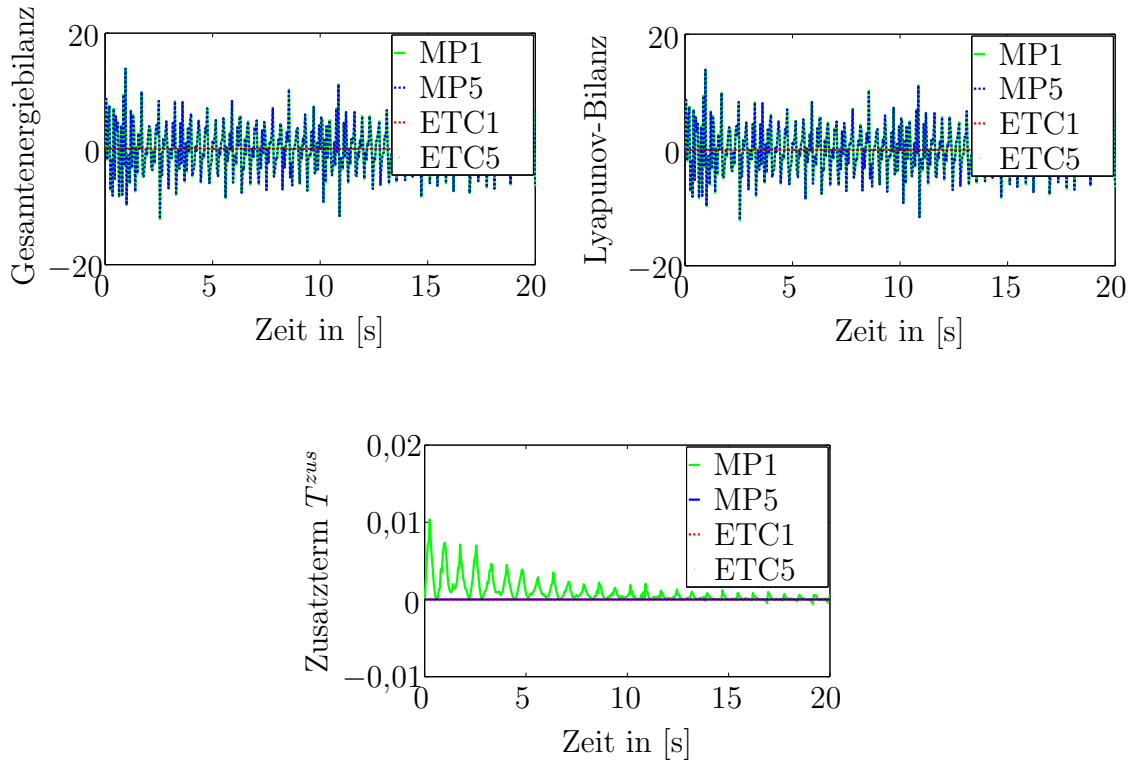


Abbildung 3.6.: Gesamtenergiebilanz, Lyapunov-Bilanz und Zusatzterm T^{zus} für die Mittelpunktsregel mit der Zwangsbedingung zum Zeitpunkt $n + 1$ (MP1) und zum Zeitpunkt $\frac{1}{2}$ (MP5) sowie für den erweiterten TC Integrator mit der Zwangsbedingung zum Zeitpunkt $n + 1$ (ETC1) und zum Zeitpunkt $\frac{1}{2}$ (ETC5)

In Abbildung 3.6 sind die Energiebilanz aus Gl. (2.127), die Lyapunov-Bilanz aus Gl. (2.134) und der Zusatzterm

$$T^{zus} = h_n \lambda_{1,n+1} \left(\theta_{1,\frac{1}{2}} - \theta_\infty \right) \quad (3.8)$$

dargestellt. Wie bereits erwartet, kann die Mittelpunktsregel sowohl die Gesamtenergiebilanz als auch die Lyapunov-Bilanz nicht erfüllen. Der erweiterte TC Integrator liefert die Gesamtenergiebilanz innerhalb der Newton-Toleranz ε^{glo} und die Lyapunov-Bilanz innerhalb der Grenzen $[-1 \quad 1] \cdot 10^{-5}$ J. Der Zusatzterm T^{zus} wird durch die Wahl

der Zwangsbedingung am Mittelpunkt für den Integrator MP5 und ETC5 zu null (s. Abbildung 3.6). Die Mittelpunktsregel MP1 liefert einen sehr großen Zusatzterm zur Lyapunov-Bilanz, der Integrator ETC1 hingegen keinen nennenswerten Zusatzterm.

Die Verwendung der Zwangsbedingungen aus Gl. (2.135) und Gl. (2.136) für die Mittelpunktsregel und den erweiterten TC Integrator verfolgen unterschiedliche Ziele.

Ein Vorteil der Zwangsbedingung zum Zeitpunkt $n+1$ ist die exakte Wiedergabe der Gesamtenergie H_{n+1} , da die Zwangsbedingung am momentanen Zeitknoten keinen Einfluss auf die Gesamtenergie nimmt. Ein Nachteil ist, dass die Lyapunov-Bilanz nicht exakt erhalten werden kann (s. Zusatzterm T^{zus} von MP1 in Abbildung 3.6), da die Temperatur am Knotenpunkt $\theta_{1_{n+1}}$ nicht mit der Temperatur $\theta_{1_{\frac{1}{2}}}$ übereinstimmen muss.

Der Vorteil der Zwangsbedingung $\phi_{1_{\frac{1}{2}}}$ ist die exakte Erfüllung der Lyapunov-Bilanz, da der Zusatzterm T^{zus} zu null wird. Der Nachteil dieser Zwangsbedingung ist eine Veränderung der Gesamtenergie H_{n+1} . Es kann nicht sicher gestellt werden, dass die Abweichungen der Temperatur $\theta_{1_{n+1}}$ und der Temperatur $\theta_{1_{\frac{1}{2}}}$ vernachlässigbar sind. Es ist jedoch sichtbar, dass die Unterschiede gering sind.

Für eine Energie-Entropie-konsistente Diskretisierung wird daher die Zwangsbedingung ϕ_{n+1} gewählt.

3.4. Numerischer Vergleich der Integratoren

Die in Kapitel 2.3 vorgestellten Integratoren sollen in diesem Kapitel verglichen werden. Dazu wird zunächst eine Referenzlösung mit sehr kleiner Zeitschrittweite h_n betrachtet, die durch den erweiterten TC Integrator gebildet wird. Die Ergebnisse der Referenzlösung können dann mit den Ergebnissen der Mittelpunktsregel und des erweiterten TC Integrators für weitaus größere Zeitschrittweiten h_n verglichen werden.

Die Massen des Doppelpendels werden für den Vergleich mit $m_1 = 1$ kg und $m_2 = 2$ kg gewählt. Der Wärmeleitkoeffizient und die Referenztemperatur sollen den Wert $\kappa = 10 \frac{\text{W}}{\text{K}}$ und $\theta_\infty = 300$ K für das adiabat abgeschlossene System betragen. Die Lamé-Parameter λ_{e_k} und μ_{e_k} , die Wärmekapazitäten k_k , den Kopplungsparameter β_k und den Viskositätsparameter V_k^{vol} werden für $k = [1, 2]$ identisch gewählt:

$$\begin{aligned} \lambda_{e_k} &= 3 \text{ kJ} & k_k &= 1,5 \frac{\text{kJ}}{\text{K}} & V_k^{vol} &= 50 \text{ Js} \\ \mu_{e_k} &= 750 \text{ J} & \beta_k &= 0,0001 \text{ K}^{-1} \end{aligned}$$

Tabelle 3.6.: Parameter - Numerischer Vergleich der Integratoren

3. Numerische Beispiele des Modellproblems

Es werden zwei Fälle des Doppelpendels verglichen. Ein weiches Materialmodell kann für das thermoviskoelastische Doppelpendel mit niedrigen Lamé-Parametern und ein steifes Material mit hohen Lamé-Parametern simuliert werden (s. Tabelle 3.7).

weiches Material:	$\lambda_k = 3 \text{ kJ}$	$\mu_k = 750 \text{ J}$
steifes Material:	$\lambda_k = 30 \text{ kJ}$	$\mu_k = 7,5 \text{ kJ}$

Tabelle 3.7.: Lamé-Parameter des weichen und steifen Materials

Die Anfangswerte für das Anfangswertproblem werden aus Tabelle 3.2 übernommen.

3.4.1. Referenzlösung

Die Referenzlösung wird, wie schon erwähnt, mit dem erweiterten TC Integrator ermittelt. Dazu wird für das weiche Material eine äquidistante Zeitschrittweite von $h_n = 1 \text{ ms}$ im Intervall $I = [0, 500] \text{ s}$ und für das steife Material eine äquidistante Zeitschrittweite von $h_n = 0,1 \text{ ms}$ im Intervall $I = [0, 50] \text{ s}$ gewählt. Die Toleranzen für das lokale und globale Newton-Raphson-Verfahren werden für den weichen Fall identisch gewählt mit $\varepsilon^{loc} = \varepsilon^{glo} = 10^{-8} \text{ J}$. Für den steifen Fall wird die globale Toleranz auf $\varepsilon^{glo} = 10^{-6} \text{ J}$ geändert, da der Wert des Anfangsresiduums größer ist.

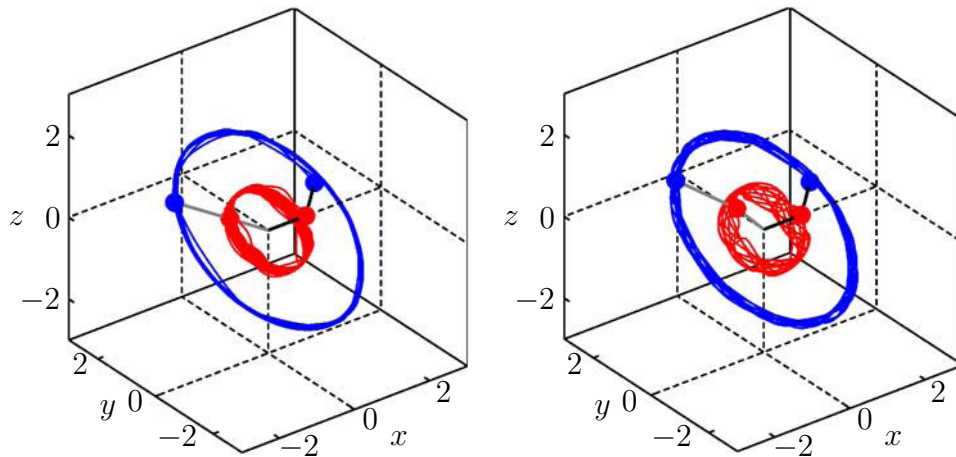


Abbildung 3.7.: Orbits der Massenpunkte m_k für die Referenzlösung - weiches Material (links) und steifes Material (rechts)

In Abbildung 3.7 sind die Umlaufbahnen der Massenpunkte m_k des thermoviskoelastischen Doppelpendels dargestellt. Die generalisierten Maxwell-Elemente werden hier durch schwarze bzw. graue Verbindungslinien visualisiert. Dabei stellen die schwarzen Linien vom Ursprung bis zum Massenpunkt m_1 (rot) und von dem Massenpunkt m_1 zum Massenpunkt m_2 (blau) die generalisierten Maxwell-Elemente zum Beginn $t = 0 \text{ s}$ der Bewegung dar. Die grauen Linien geben die generalisierten Maxwell-Elemente zum Zeitpunkt von $t = 120 \text{ s}$ (weich) bzw. $t = 19,25 \text{ s}$ (steif) wieder.

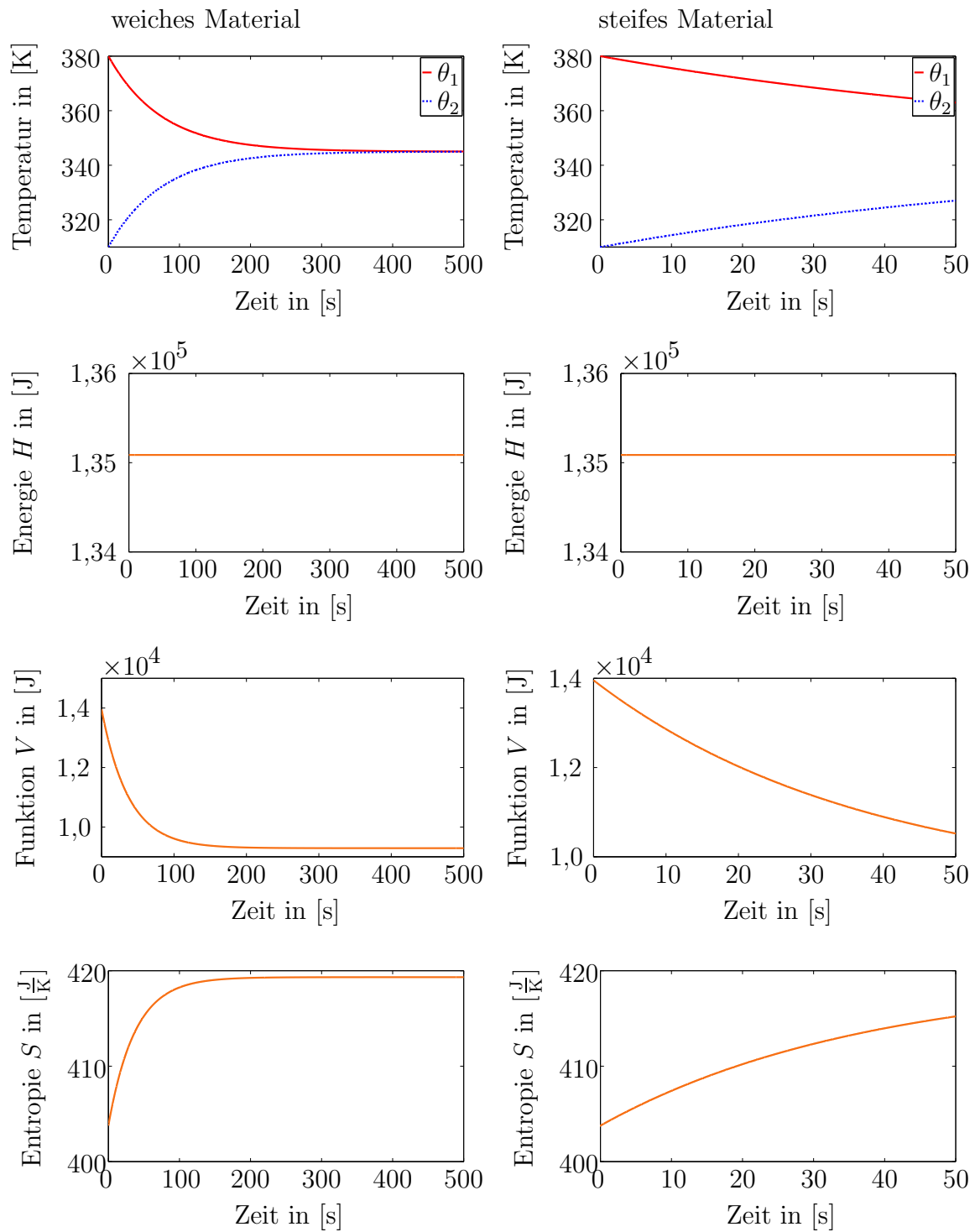


Abbildung 3.8.: Temperaturverlauf, Gesamtenergie H , Lyapunov-Funktion V und Gesamtentropie S der Referenzlösung - Ergebnisse des weichen Materials (links) und Ergebnisse des steifen Materials (rechts)

Der Temperaturverlauf θ_k , die Gesamtenergie H , die Lyapunov-Funktion V und die Gesamtentropie S werden in Abbildung 3.8 (linke Seite) für das weiche Material dargestellt. Die Temperatur θ_1 nimmt ab, während die Temperatur θ_2 ansteigt. Da das System adiabatisch abgeschlossen ist, können sich die Temperaturen des Doppelpendels lediglich ausgleichen. Es wird keine Wärme abgeführt oder Wärme eingeleitet. Die Temperaturkurven steigen bzw. fallen sehr langsam. Dies liegt an dem geringen Wärmeleitkoeffizienten $\kappa = 10 \frac{\text{W}}{\text{K}}$ (vgl. Kapitel 3.1, Abbildung 3.1, $\kappa = 300 \frac{\text{W}}{\text{K}}$). Die Gesamtenergie H des Doppelpendels bleibt während der Bewegung erhalten, da keine äußeren Kräfte angreifen. Der Wert der Gesamtenergie liegt bei $H \approx 135086,63 \text{ J}$. Die Lyapunov-Funktion V fällt stetig, bis sie einen konstanten Wert erreicht. Die Gesamtentropie S steigt stetig an.

In Abbildung 3.8 (rechte Seite) wird die Referenzlösung der Temperaturen θ_k , der Gesamtenergie H , der Lyapunov-Funktion V und der Gesamtentropie S für das steife Material dargestellt. Hier sind ähnliche Merkmale wie bei der Referenzlösung des weichen Materials zu erkennen. Die Temperatur θ_1 nimmt ab, die Temperatur θ_2 nimmt zu und beide Temperaturen nähern sich an. Die Gesamtenergie H ist konstant und liefert denselben konstanten Wert wie das weiche Material. Die Lyapunov-Funktion V fällt stetig und die Gesamtentropie S steigt stetig an.

3.4.2. Weiches Material

In diesem Kapitel erfolgt der Vergleich zwischen der Mittelpunktsregel und dem erweiterten TC Integrator für ein weiches Material. Dazu werden Simulationen mit unterschiedlichen äquidistanten Zeitschrittweiten $h_n = [0,03 \ 0,06 \ 0,09 \ 0,12] \text{ s}$ durchgeführt, um die Robustheit der Zeitintegratoren zu testen. Es gelten die gleichen Abbruchkriterien wie bei der Referenzlösung für das weiche Material ($\varepsilon^{loc} = \varepsilon^{glo} = 10^{-8} \text{ J}$).

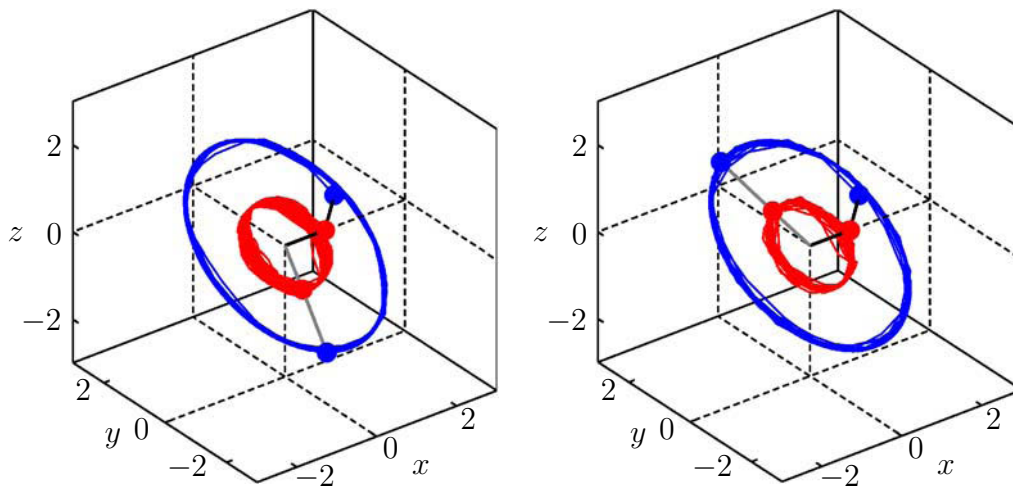


Abbildung 3.9.: Orbits der Massenpunkte m_k für ein weiches Material nach $t = 120 \text{ s}$ - Mittelpunktsregel bei $h_n(2) = 0,06 \text{ s}$ (links) und erweiterter TC Integrator $h_n(4) = 0,12 \text{ s}$ (rechts)

Die Umlaufbahnen der Massenpunkte m_k werden für die Mittelpunktsregel bei einer Zeitschrittweite $h_n(2) = 0,06$ s wiedergegeben, da größere Zeitschrittweiten sehr früh zum Abbruch der Simulation führen. Die Umlaufbahn des erweiterten TC Integrator ist für die Zeitschrittweite $h_n(4) = 0,12$ s dargestellt (s. Abbildung 3.9). Die Simulation der Orbits zeigt sowohl für die Verwendung der Mittelpunktsregel als auch des erweiterten TC Integrators bei diesen hohen Zeitschrittweiten vergleichbare Bahnen. Die Zwischenposition des Doppelpendels beider Integratoren bei $t = 120$ s wird in grau dargestellt und gibt im Vergleich mit der Referenzlösung für den erweiterten TC Integrator ein *genauer* Ergebnis als die Mittelpunktsregel wieder (vgl. Abbildung 3.7, links).

In Abbildung 3.10 werden die Temperaturverläufe, die Gesamtenergie H und die Lyapunov-Funktion der Mittelpunktsregel und des erweiterten TC Integrators gegenüber gestellt.

Die Temperaturverläufe des Doppelpendels stellen sowohl für die Mittelpunktsregel bei einer Zeitschrittweite $h_n(2) = 0,06$ s als auch für den erweiterten TC Integrator bei einer Zeitschrittweite von $h_n(4) = 0,12$ s denselben Verlauf wie die Referenzlösung für das weiche Material (s. Abbildung 3.8, links) dar. Die nächst größeren Zeitschrittweiten $h_n(3) = 0,09$ s und $h_n(4) = 0,12$ s sind für die Mittelpunktsregel nicht mehr zu simulieren.

Die Gesamtenergie H des Systems kann bei den Zeitschrittweiten $h_n(3) = 0,09$ s und $h_n(4) = 0,12$ s für die Mittelpunktsregel nicht erhalten werden. Sie steigt auf den 1,5-fachen bzw. den doppelten Wert an. Dieses Verhalten wird auch als *blow-up* (explodieren) bezeichnet. Daher kann die Rechnung nach einigen Schritten nicht weitergeführt werden. Je größer die Zeitschrittweite gewählt wird, desto früher wird dieses blow-up Verhalten sichtbar. Die Gesamtenergie H des erweiterten TC Integrators wird für alle Zeitschrittweiten erhalten.

Das blow-up Verhalten der Mittelpunktsregel für die Gesamtenergie H ist auch für die Lyapunov-Funktion V und die Gesamtentropie S sichtbar. Die Kurven für die Zeitschrittweiten $h_n(3) = 0,09$ s und $h_n(4) = 0,12$ s liefern somit falsche Ergebnisse im Vergleich zur Referenzlösung (s. Abbildung 3.8, links).

Die Ergebnisse des erweiterten TC Integrators für die Lyapunov-Funktion V und die Gesamtentropie S stimmen für sämtliche Zeitschrittweiten mit der Referenzlösung (s. Abbildung 3.8, links) überein. Die Lyapunov-Funktion V fällt stetig ab und die Gesamtentropie S steigt stetig an.

In Abbildung 3.11 werden die Energie- und Lyapunov-Bilanz für die Mittelpunktsregel und den erweiterten TC Integrator dargestellt. Die Energiebilanz $H_{n+1} - H_n$ und die Lyapunov-Bilanz aus Gl. (2.133) sollen durch den gewählten Integrator konsistent wiedergegeben werden. Die Mittelpunktsregel kann diese Bilanzen nicht erfüllen. Dies wird bei großen Zeitschrittweiten $h_n(3) = 0,09$ s und $h_n(4) = 0,12$ s sichtbar.

3. Numerische Beispiele des Modellproblems

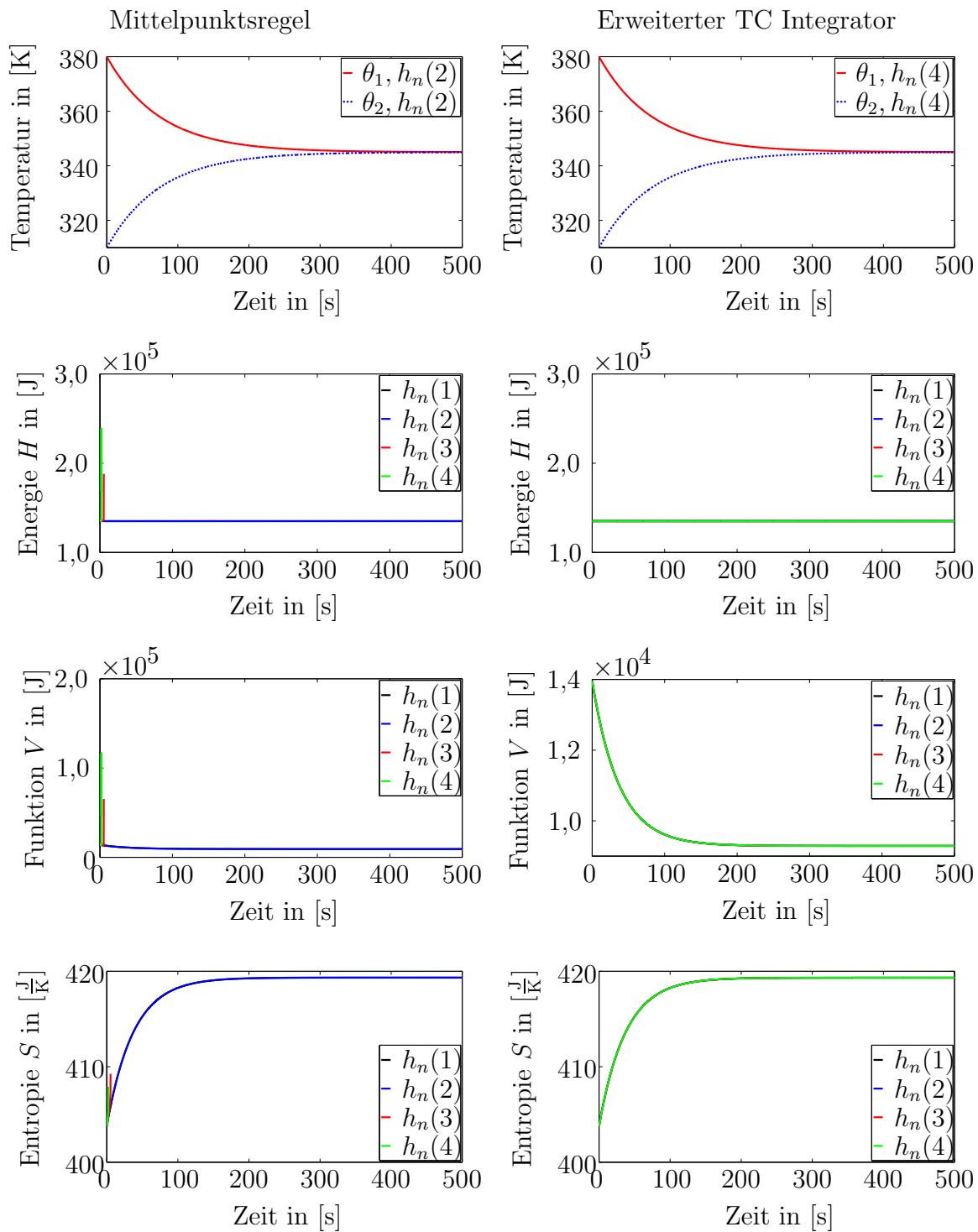


Abbildung 3.10.: Temperaturverlauf, Gesamtenergie H , Lyapunov-Funktion V und Gesamtentropie S für das weiche Material - Ergebnisse der Mittelpunktsregel (links) und Ergebnisse des erweiterten TC Integrators (rechts)

Der erweiterte TC Integrator kann die Energiebilanz in der vorgegebenen Newton-Raphson-Toleranz erfüllen. Die Lyapunov-Bilanz erfüllt diese Toleranz bis auf einige Ausnahmen. Der erweiterte TC Integrator ist durch die Erhaltung der Struktureigenschaften ein sehr robuster Integrator. Die Mittelpunktsregel kann nicht alle strukturerhaltenden Eigenschaften erfüllen und ist daher nicht so robust wie der erweiterte TC Integrator. Dies wird bei größeren Zeitschrittweiten sichtbar. Die Mittelpunktsregel liefert hier falsche Ergebnisse.

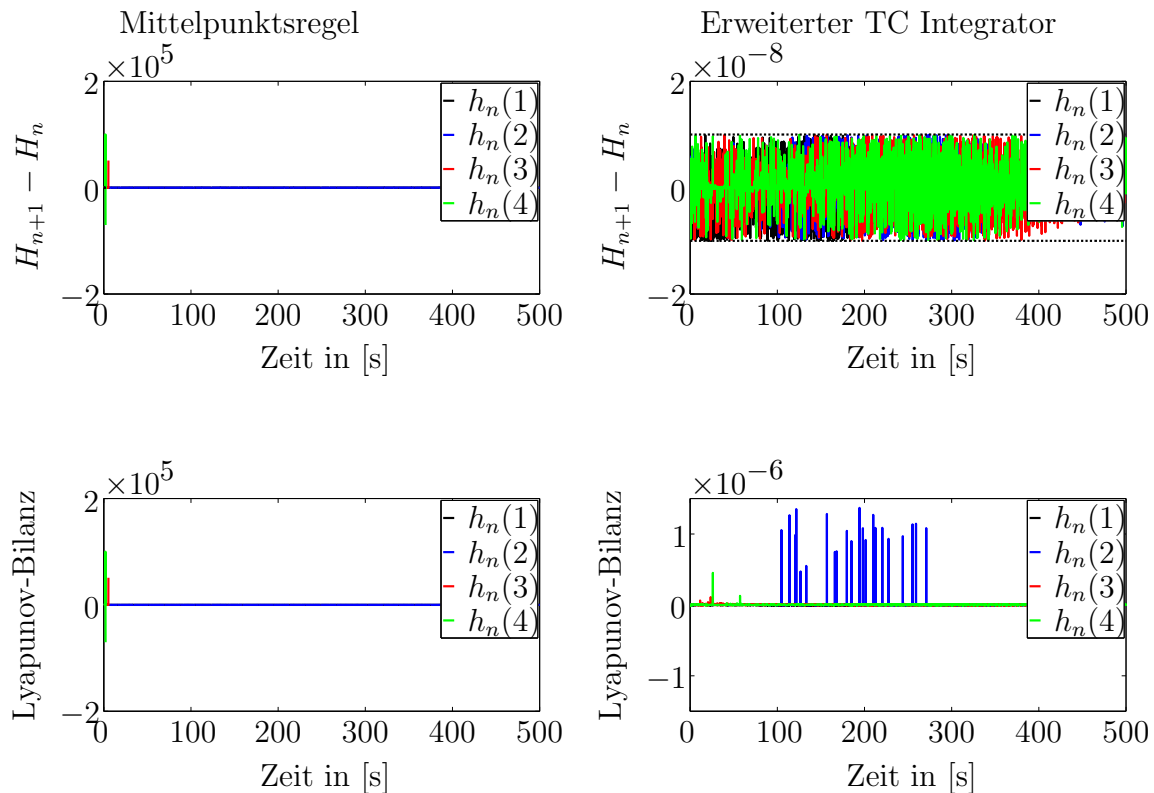


Abbildung 3.11.: Energiebilanz und Lyapunov-Bilanz für das weiche Material - Ergebnisse der Mittelpunktsregel (links), Ergebnisse des erweiterten TC Integrators (rechts)

Bemerkung 3.4.1 Im Weiteren soll auf die Lyapunov-Bilanz des erweiterten TC Integrators eingegangen werden. Abbildung 3.11 zeigt, dass die Lyapunov-Bilanz nicht in der vorgegebenen Toleranz von $\varepsilon^{gl0} = 10^{-8} \text{ J}$ liegt, sondern lediglich in einer Toleranz von 10^{-6} J . Dies kann auch für die Drehimpulserhaltung $\mathbf{J}_{n+1} - \mathbf{J}_n$ gezeigt werden (s. Abbildung 3.12). Das Abbruchkriterium ist auf die Erhaltung der Energiebilanz ausgelegt, aber nicht für die Erhaltung der Lyapunov-Bilanz und der Drehimpulsbilanz bestimmt.

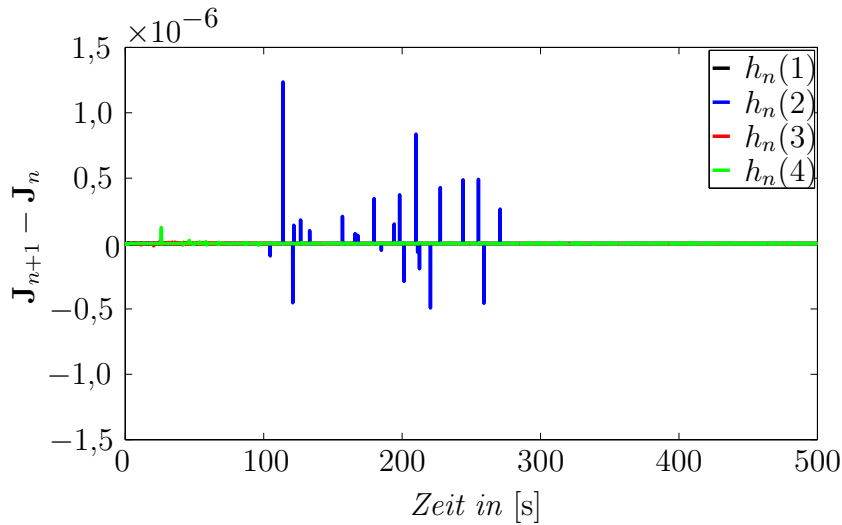


Abbildung 3.12.: Drehimpulsbilanz $\mathbf{J}_{n+1} - \mathbf{J}_n$ für das weiche Material unter Verwendung des erweiterten TC Integrators

3.4.3. Steifes Material

Bei der Verwendung der steifen Lamé-Parameter werden die äquidistanten Zeitschrittweiten $h_n = [25 \ 35 \ 45 \ 55]$ ms für die Mittelpunktsregel und den erweiterten TC Integrator gewählt. Die Toleranzen werden analog zur steifen Referenzlösung für das lokale Newton-Raphson-Verfahren zu $\varepsilon^{loc} = 10^{-8}$ J und für das globale Newton-Raphson-Verfahren zu $\varepsilon^{glo} = 10^{-6}$ J gewählt.

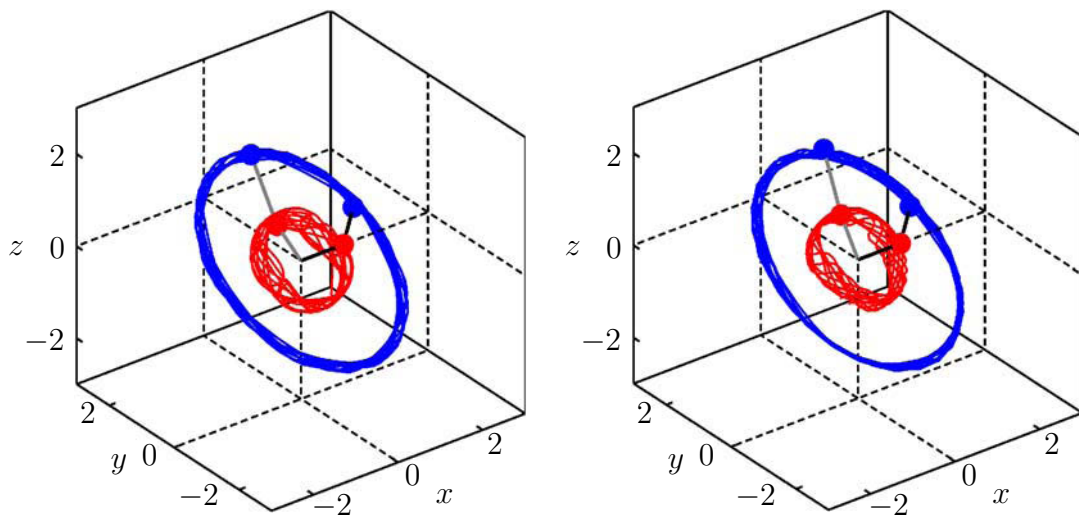


Abbildung 3.13.: Orbits der Massenpunkte m_k für ein steifes Material nach $t = 19,25$ s - Mittelpunktsregel bei $h_n(2) = 35$ ms (links) und erweiterter TC Integrator $h_n(4) = 55$ ms (rechts)

Die in Abbildung 3.13 dargestellten Umlaufbahnen nach einer Zeit von $t = 19,25$ s lassen sich mit der Referenzlösung aus Abbildung 3.7 (rechts) vergleichen. Die Bahnen des steifen Materials für die Mittelpunktsregel und den erweiterten TC Integrator sind für die Zeitschrittweiten $h_n(2) = 35$ ms bzw. $h_n(4) = 55$ ms fast identisch. Die Zwischenposition des Doppelpendels (graue generalisierte Maxwell-Elemente) ist für beide Integratoren nahezu gleich. Im Vergleich zur Referenzlösung verfehlen aber beide Integratoren die vorgegebene Zwischenposition.

Abbildung 3.14 stellt die Temperaturverläufe θ_k , die Gesamtenergie H , die Lyapunov-Funktion V und die Gesamtentropie S der beiden Integratoren für das steife Material dar.

Die Temperaturen der Mittelpunktsregel mit der Zeitschrittweite $h_n(2) = 35$ ms und die des erweiterten TC Integrators mit der Zeitschrittweite $h_n(4) = 55$ ms haben denselben Verlauf. Die Temperaturen θ_k laufen zusammen, wobei die Temperatur θ_1 vom Startwert $\theta_1^0 = 380$ K abnimmt und die Temperatur θ_2 vom Startwert $\theta_1^0 = 310$ K ansteigt.

Die Gesamtenergie H , die Lyapunov-Funktion V und die Gesamtentropie S zeigen hinsichtlich großer Zeitschrittweiten für die Mittelpunktsregel ein blow-up Verhalten. Sowohl die Gesamtenergie H als auch die Lyapunov-Funktion V steigen um das Vierfache. Dies führt zum Abbruch der Berechnung. Auch in diesem Fall gilt: Je größer die gewählte Zeitschrittweite ist, desto früher erfolgt der blow-up.

Beim erweiterten TC Integrator wird die Gesamtenergie H erhalten, die Lyapunov-Funktion V ist stetig fallend und die Gesamtentropie S stetig ansteigend. Die Ergebnisse des erweiterten TC Integrators entsprechen den Ergebnissen der Referenzlösung.

Die Energiedifferenz $H_{n+1} - H_n$ und die Lyapunov-Bilanz aus Abbildung 3.15 zeigen, dass die Erhaltungseigenschaften für die Mittelpunktsregel nicht erfüllt werden können. Dies wird durch das blow-up Verhalten bei den Zeitschrittweiten $h_n(3) = 45$ ms und $h_n(4) = 55$ ms sichtbar.

Der erweiterte TC Integrator erhält die Energiedifferenz $H_{n+1} - H_n$ im Rahmen der globalen Toleranz ε^{glo} des Newton-Raphson-Verfahrens. Dies kann mit einigen Ausnahmen auch für die Lyapunov-Bilanz gezeigt werden. Durch diese Ergebnisse lässt sich feststellen, dass der erweiterte TC Integrator durch seine strukturerhaltenden Eigenschaften wesentlich robuster ist als die Mittelpunktsregel.

3. Numerische Beispiele des Modellproblems

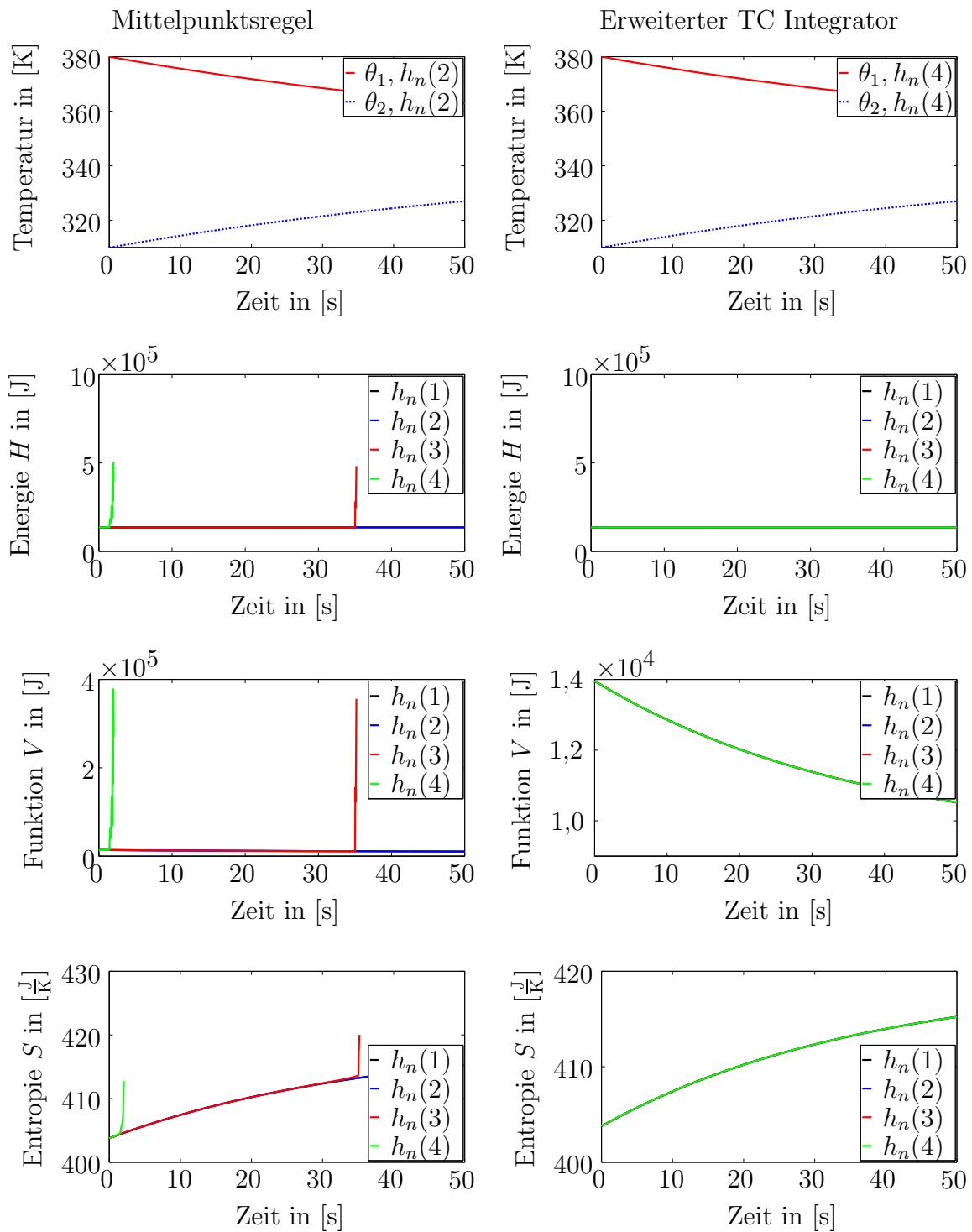


Abbildung 3.14.: Temperaturverlauf, Gesamtenergie H , Lyapunov-Funktion V und Gesamtentropie S für das steife Material - Ergebnisse der Mittelpunktsregel (links) und Ergebnisse des erweiterten TC Integrators (rechts)

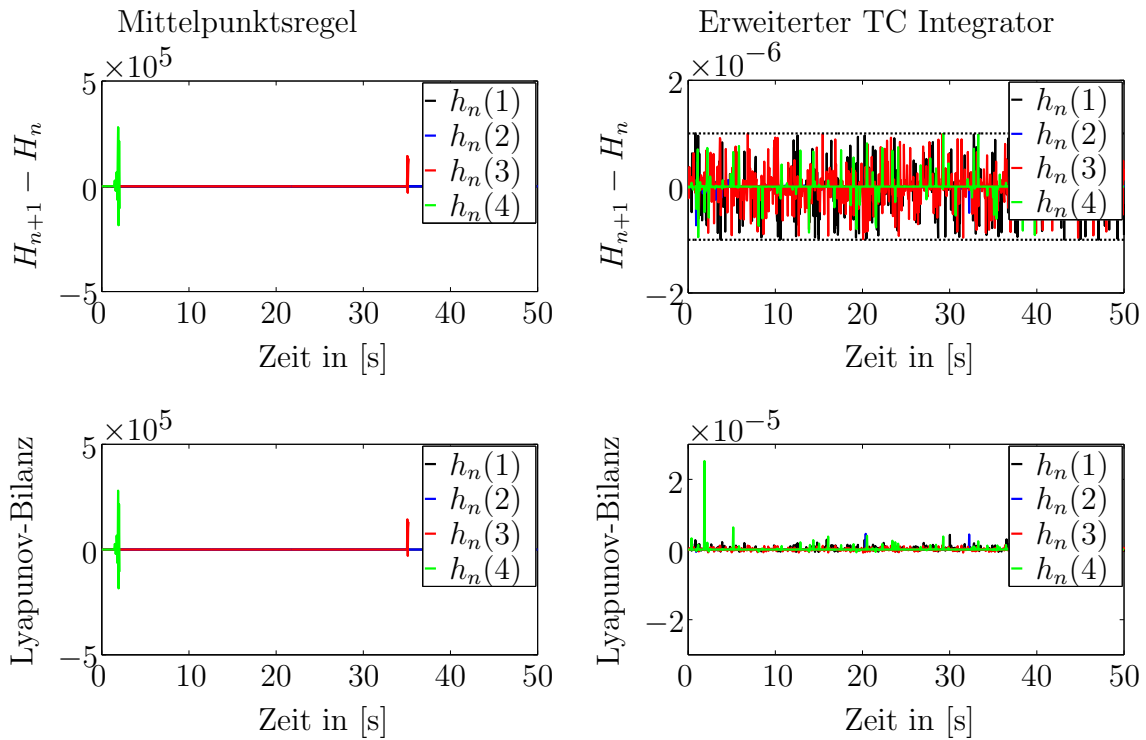


Abbildung 3.15.: Energiebilanz und Lyapunov-Bilanz für das steife Material - Ergebnisse der Mittelpunktsregel (links) und Ergebnisse des erweiterten TC Integrators (rechts)

Bemerkung 3.4.2 In *Abbildung 3.15* wird ein weiteres Mal gezeigt, dass die Lyapunov-Bilanz des erweiterten TC Integrators nicht in der vorgegebenen Toleranz von $\varepsilon^{gl_0} = 10^{-6}$ J erhalten wird, sondern lediglich in einer Toleranz von 10^{-5} J. Dies kann auch für die Drehimpulsdifferenz $\mathbf{J}_{n+1} - \mathbf{J}_n$ gezeigt werden (s. *Abbildung 3.16*).

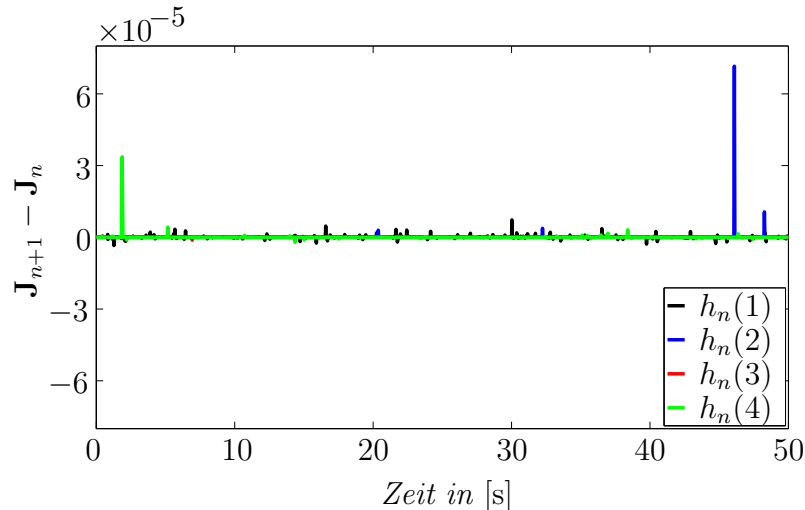


Abbildung 3.16.: Drehimpulsbilanz $\mathbf{J}_{n+1} - \mathbf{J}_n$ für das steife Material unter Verwendung des erweiterten TC Integrators

4. Thermoviskoelastisches Kontinuum

In diesem Kapitel wird auf die Theorie des thermoviskoelastischen Kontinuums eingegangen. Das Konzept des Kontinuums ist sehr gut geeignet, um makroskopische Systeme abzubilden.

Die Variablen für das thermoviskoelastische Kontinuum entsprechen den Variablen des Modellproblems. Es werden Poissonschen Variablen verwendet. Zunächst wird die Kinematik und die Kinetik des Kontinuums beschrieben (s. Marsden und Hughes [63]). Diese liefern die starken (differentielle Schreibweise) und schwachen (integrale Schreibweise) Formen zur Beschreibung des thermoviskoelastischen Kontinuums. Um die Bewegung des thermoviskoelastischen Kontinuums zu beschreiben, werden die mechanischen Evolutionsgleichungen (Bewegungsgleichungen) aufgestellt. Weiterhin werden zwei Evolutionsgleichungen benötigt, die das thermische und viskose Verhalten wiedergeben. Die thermische Evolutionsgleichung greift das Fouriersche Gesetz der Wärmeleitung auf, das von einem thermisch isotropen Wärmefluss ausgeht. Für die viskose Evolutionsgleichung werden deformationswertige interne Variablen und ein vierstufiger viskoser Nachgiebigkeitstensor verwendet.

Die starken Evolutionsgleichungen können durch das erweiterte GENERIC Format formuliert werden, solange von einem mechanisch und thermisch isolierten Kontinuum ausgegangen wird. Die Divergenzterme der starken Formen liefern durch Umwandlung in die schwachen Formen die externen mechanischen und thermischen Lasten. Durch die Wahl der Poissonschen Variablen können lediglich Randbedingungen auf die Konfiguration und die Entropie aufgebracht werden. Da am Rand des Kontinuum Einfluss auf die Temperaturen des Systems genommen werden soll, werden in dieser Arbeit Lagrange Multiplikatoren eingeführt, die die zusätzlichen Zwangsbedingungen einfordern.

Die Diskretisierung des thermoviskoelastischen Kontinuums erfolgt in Zeit und Raum. Das erweiterte GENERIC Format bleibt bei beiden Diskretisierungen von großer Bedeutung. Für die zeitliche Integration wird sowohl die Mittelpunktsregel als auch der erweiterte TC Integrator verwendet. Die räumliche Approximation erfolgt mittels gewöhnlicher Formfunktionen der Finite-Elemente-Methode. Zur Energie-konsistenten Approximation im Raum wird eine Projektion der Temperatur auf die Knoten durchgeführt.

4.1. Kinematik

Zunächst wird die Kinematik in Anlehnung an Holzapfel [37] erläutert. Im Gegensatz zur molekularen und atomistischen Theorie (s. Ortiz und Phillips [78]), die mikroskopische Systeme betrachten, verfolgt die Theorie des Kontinuums die makroskopische Sichtweise. Hierbei besteht ein Körper \mathcal{B} aus vielen kleinen Teilen eines Kontinuums, den sogenannten Kontinuumpartikeln P (s. Abbildung 4.1). Der Rand des Kontinuums wird durch $\partial\mathcal{B}$ beschrieben. Der Körper besitzt ein Volumen und eine Masse bzw. Dichte.

4.1.1. Konfigurationen und Bewegungen

Bewegt sich das Kontinuum im dreidimensionalen euklidischen Raum \mathbb{R}^3 über eine Zeit t werden zwei Konfigurationen definiert. Die Konfiguration zum Zeitpunkt $t = 0$ wird Referenzkonfiguration \mathcal{B}_0 mit dem Rand $\partial\mathcal{B}_0$ genannt, die Konfiguration nach einer Zeit t Momentankonfiguration \mathcal{B}_t mit dem Rand $\partial\mathcal{B}_t$. Die Basisvektoren \mathbf{e}_i ($i = 1, 2, 3$) bezeichnen ein raumfestes rechtshändiges Koordinatensystem.

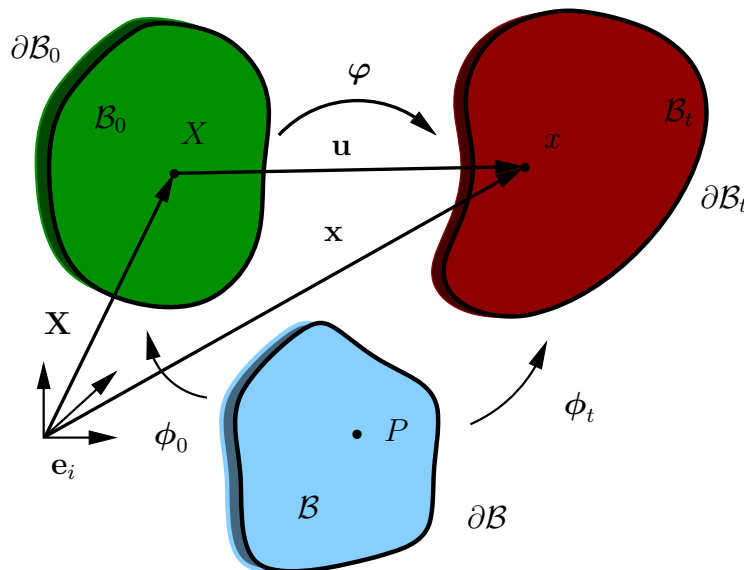


Abbildung 4.1.: Konfigurationen des Kontinuums

Der Kontinuumpartikel P kann über die Abbildungen ϕ_0 und ϕ_t sowohl in die Referenzkonfiguration \mathcal{B}_0 als auch in die Momentankonfiguration \mathcal{B}_t überführt werden:

$$\mathbf{X} = \phi_0(P) \quad \mathbf{x} = \phi_t(P, t) \quad (4.1)$$

Die Positionsvektoren \mathbf{X} und \mathbf{x} geben die Positionen der Punkte X und x wieder. Mit der Abbildung φ kann direkt vom Positionsvektor \mathbf{X} der Referenzkonfiguration \mathcal{B}_0 auf den Positionsvektor \mathbf{x} der Momentankonfiguration \mathcal{B}_t geschlossen werden und mit der inversen Abbildung φ^{-1} von \mathbf{x} auf \mathbf{X} :

$$\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X}, t) \quad \mathbf{X} = \varphi^{-1}(\mathbf{x}, t) \quad (4.2)$$

Diese Abbildungen ermöglichen es, die benötigten Größen in einer materiellen Beschreibung in Abhängigkeit vom Positionsvektor \mathbf{X} und der Zeit t oder einer räumlichen Beschreibung in Abhängigkeit vom Positionsvektor \mathbf{x} und der Zeit t darzustellen. Im Folgenden wird die materielle Beschreibung verwendet. Das Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ ist dabei die Differenz der Positionsvektoren:

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X} \quad (4.3)$$

Die Geschwindigkeit $\mathbf{v}(\mathbf{X}, t)$ und die Beschleunigung $\mathbf{a}(\mathbf{X}, t)$ werden durch die Zeitableitung der Abbildung φ bei festgehaltenem Positionsvektor \mathbf{X} berechnet:

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \varphi(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \quad \mathbf{a}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{X}, t)}{\partial t^2} \quad (4.4)$$

Weiterhin kann die Geschwindigkeit \mathbf{v} und die Beschleunigung \mathbf{a} mit Gl. (4.2)₁ beschrieben werden als:

$$\mathbf{v} = \dot{\varphi} = \dot{\mathbf{x}} \quad \mathbf{a} = \ddot{\varphi} = \ddot{\mathbf{x}} \quad (4.5)$$

Die Notation mit dem Punkt über den Vektoren stellt eine Zeitableitung bei festgehaltenem Positionsvektor \mathbf{X} dar.

4.1.2. Deformationen und Streckungen

Die Deformation eines Kontinuums kann durch die Tangenten $d\mathbf{x}$ und $d\mathbf{X}$ an den Positionsvektoren \mathbf{x} und \mathbf{X} der Kurve $\mathbf{c}(s)$ bzw. $\mathbf{C}(s)$ bestimmt werden (*s.* Abbildung 4.2). Der Parameter der Kurve wird durch s beschrieben.

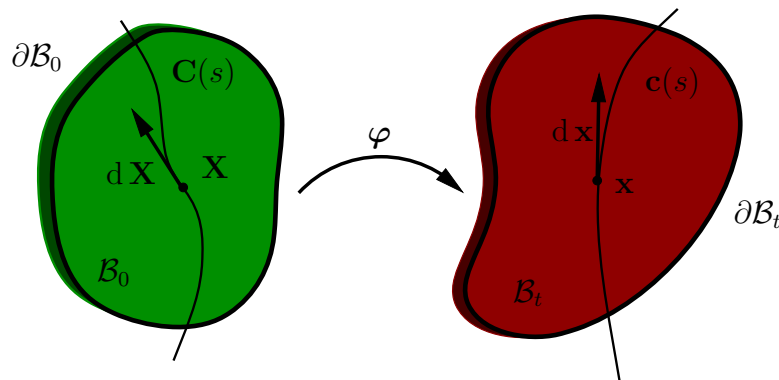


Abbildung 4.2.: Tangentenvektoren des Kontinuums

Die Tangente der Momentanform $d\mathbf{x}$ an dem Punkt $\mathbf{x} = \mathbf{c}(s)$ lautet (berechnet mit Hilfe der Kettenregel):

$$d\mathbf{x} = \frac{\partial \mathbf{c}(s)}{\partial s} ds \quad (4.6)$$

Analog folgt für die Tangente der Referenzkonfiguration $d\mathbf{X}$:

$$d\mathbf{X} = \frac{\partial \mathbf{C}(s)}{\partial s} ds \quad (4.7)$$

Der Parameter s wird durch die Abbildung \mathbf{C} auf die Referenzkonfiguration \mathcal{B}_0 projiziert und durch die Abbildung \mathbf{c} auf die Momentankonfiguration \mathcal{B}_t abgebildet. Durch diesen Zusammenhang kann $\mathbf{c}(s)$ durch die Abbildung $\varphi(\mathbf{C}(s), t)$ ausgedrückt werden und es folgt:

$$\frac{\partial \mathbf{c}(s)}{\partial s} = \frac{\partial \varphi(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} \frac{\partial \mathbf{C}(s)}{\partial s} \quad (4.8)$$

Durch Einsetzen der Gleichungen (4.6) und (4.7) erhält man:

$$d\mathbf{x} = \frac{\partial \varphi(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} d\mathbf{X} \quad (4.9)$$

Zur Beschreibung der Deformation wird der sogenannte Deformationsgradient \mathcal{F} eingeführt:

$$\mathcal{F} = \frac{\partial \varphi(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} = \text{Grad } \varphi(\mathbf{X}, t) \quad (4.10)$$

Die Volumina dv und dV der Momentan- bzw. Referenzkonfiguration können über das Spatprodukt der Tangentenvektoren $d\mathbf{x}_i$ und $d\mathbf{X}_i$ mit $i = [1, 2, 3]$ berechnet werden. Setzt man Gl. (4.9) in das Spatprodukt von $dv = (d\mathbf{x}_1, d\mathbf{x}_2, d\mathbf{x}_3)$ ein, liefert dies die Beziehung

$$dv = J dV \quad (4.11)$$

mit der Jacobideterminante $J = \det \mathcal{F} > 0$, die das Volumenverhältnis angibt. Da die Jacobideterminante größer null ist, ist das Volumen frei von Selbstdurchdringung. Zudem ist der Deformationsgradient \mathcal{F} invertierbar.

Die Deformationen des Kontinuums können durch die verschiedensten Deformationstensoren beschrieben werden. Einer dieser Deformationstensoren ist der rechte Cauchy-Green-Tensor \mathcal{C} .

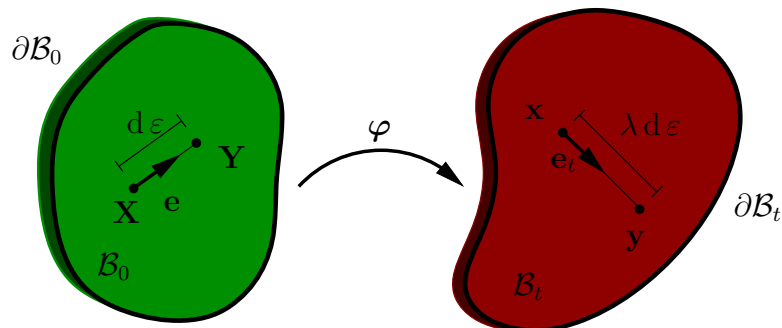


Abbildung 4.3.: Deformationen des Kontinuums

Für die Bestimmung des rechten Cauchy-Green-Tensors \mathbf{C} wird die Veränderung der Länge $d\varepsilon = |\mathbf{Y} - \mathbf{X}|$ zwischen zwei benachbarten Punkten \mathbf{X} und \mathbf{Y} der Referenzkonfiguration betrachtet (s. Abbildung 4.3). Der Einheitsvektor \mathbf{e} an \mathbf{X} in Richtung \mathbf{Y} lautet somit:

$$\mathbf{e} = \frac{\mathbf{Y} - \mathbf{X}}{|\mathbf{Y} - \mathbf{X}|} \quad (4.12)$$

Der Vektor zwischen beiden Punkten wird beschrieben durch:

$$\mathbf{Y} - \mathbf{X} = d\varepsilon \mathbf{e} \quad (4.13)$$

Für die Differenz der Vektoren \mathbf{y} und \mathbf{x} lässt sich eine lineare Approximation

$$\begin{aligned} \mathbf{y} - \mathbf{x} &= d\varepsilon \mathcal{F} \mathbf{e} \\ &= d\varepsilon \mathbf{e}_t \end{aligned} \quad (4.14)$$

finden, wobei der Streckungsvektor $\mathbf{e}_t = \mathcal{F} \mathbf{e}$ ist. Die Länge dieses Vektors beschreibt die Streckung $\lambda = |\mathbf{e}_t|$, um den der Einheitsvektor \mathbf{e} gestreckt oder komprimiert wird. Für das Quadrat der Streckung folgt:

$$\begin{aligned} \lambda^2 &= \mathbf{e} \cdot \mathcal{F}^T \mathcal{F} \mathbf{e} \\ &= \mathbf{e} \cdot \mathbf{C} \mathbf{e} \end{aligned} \quad (4.15)$$

Dadurch ist der symmetrische, positiv definite rechte Cauchy-Greensche Deformationstensor \mathbf{C} definiert als:

$$\mathbf{C} = \mathcal{F}^T \mathcal{F} \quad (4.16)$$

Die Jacobideterminante J kann auch durch den rechten Cauchy-Green-Tensor \mathbf{C} dargestellt werden:

$$J = \sqrt{\det \mathbf{C}} \quad (4.17)$$

4.1.3. Entropie und interne Variable

Um den thermischen Vorgang zu beschreiben, wird die Entropie s als Zustandsvariable verwendet:

$$s = s(\mathbf{X}, t) \quad (4.18)$$

Bereits in den Arbeiten von Romero [91, 92] wurde die Entropie als Zustandsvariable gewählt. Diese Zustandsvariable lässt sich im Gegensatz zur Temperatur als Zustandsgröße sehr gut ins GENERIC Format einfügen (s. Romero [90]). Die Entropie s ist lediglich eine quantitative Größe, um die mikroskopische Unordnung und Zufälligkeit zu erfassen. Aus der Entropie $s(\mathbf{X}, t)$ lässt sich durch das zugrundeliegende konstitutive Gesetz die Temperatur $\theta(\mathbf{X}, t)$ berechnen.

4. Thermoviskoelastisches Kontinuum

Das viskose, geschichtsabhängige Verhalten wird durch eine deformationsewertige interne Variable C_i beschrieben (Coleman und Gurtin [15], Reese und Govindjee [84] und Groß und Betsch [26]):

$$C_i = C_i(\mathbf{X}, t) \quad (4.19)$$

Die interne Variable C_i ist symmetrisch und beschreibt die innere Struktur des Kontinuums mit ihren irreversiblen (dissipativen) Effekten. Dabei ist die interne Variable eine nicht sichtbare oder kontrollierbare Größe im Gegensatz zur Deformation, die durch den Deformationsgradient \mathcal{F} beschrieben wird. Der inelastische Deformationsgradient \mathcal{F}_i stellt eine Variable dar, die auf einer Zwischenkonfiguration \mathcal{B}_z berechnet wird und eine Transformation zwischen zwei inelastischen Zuständen darstellt (s. Abbildung 4.4).

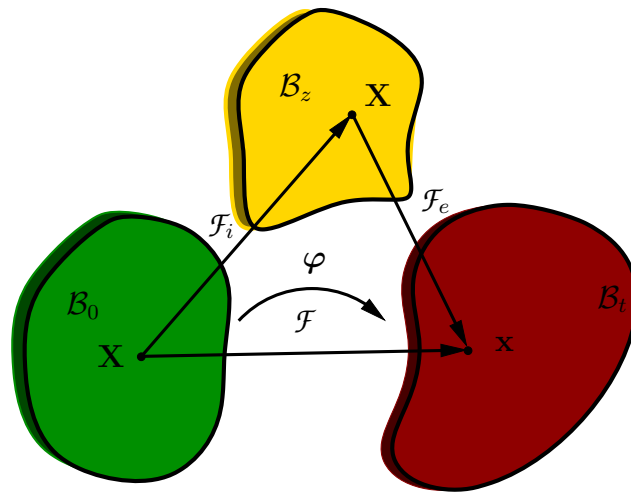


Abbildung 4.4.: Zwischenkonfiguration des Kontinuums

Nach Noll [74, 75] wird auf zwei unterschiedlichen Konfigurationen gleiches elastisches Materialverhalten wiedergegeben, wenn dazwischen ein sogenannter materieller Isomorphismus existiert. Bezogen auf die Referenzkonfiguration \mathcal{B}_0 und die Zwischenkonfiguration \mathcal{B}_z bedeutet dies, dass eine Funktion f_0 auf \mathcal{B}_0 und eine Funktion f_z auf \mathcal{B}_z existiert. Hierbei wird mit C_e die Metrik des Körpers in der Zwischenkonfiguration \mathcal{B}_z bezeichnet, die mit der Metrik C in \mathcal{B}_0 über den inelastischen Deformationsgradienten \mathcal{F}_i in Verbindung steht:

$$C_e = \mathcal{F}_i^{-T} C \mathcal{F}_i^{-1} \quad (4.20)$$

Bei isotropen elastischen Materialverhalten kann der elastische Deformationszustand in \mathcal{B}_z auch über die inelastische Metrik $C_i = \mathcal{F}_i^T C \mathcal{F}_i$ dargestellt werden. Somit sind die Invarianten der Tensoren C_e und des folgenden Tensors Λ gleich:

$$\Lambda = C C_i^{-1} \quad (4.21)$$

Bereits in Miehe [66] wurde diese vereinfachte Form eines materiellen Isomorphismuses für die Elasto-Plastizität verwendet (s. auch Besdo [3]).

4.1.4. Randbedingungen

Die Randbedingungen des Systems werden über den Rand $\partial\mathcal{B}$ in das System eingebracht. Dabei kann der Rand $\partial\mathcal{B}$ in einen mechanischen Rand $\partial_m\mathcal{B} = \partial\mathcal{B}$ und einen thermischen Rand $\partial_t\mathcal{B} = \partial\mathcal{B}$ aufgeteilt (s. Abbildung 4.5) werden. Die beiden Ränder dürfen sich überlappen.

Der mechanische Rand $\partial_m\mathcal{B} = \partial_\varphi\mathcal{B} \cup \partial_T\mathcal{B}$ kann wiederum in mechanische Dirichlet-Ränder $\partial_\varphi\mathcal{B}$ und Neumann-Ränder $\partial_T\mathcal{B}$ aufgeteilt werden. Hierbei ist jedoch keine Überlappung der Ränder erlaubt $\partial_\varphi\mathcal{B} \cap \partial_T\mathcal{B} = \emptyset$. Analog lässt sich der thermische Rand $\partial_t\mathcal{B} = \partial\mathcal{B}$ in einen thermischen Dirichlet-Rand $\partial_s\mathcal{B}$ und Neumann-Rand $\partial_Q\mathcal{B}$ mit den Bedingungen $\partial_t\mathcal{B} = \partial_s\mathcal{B} \cup \partial_Q\mathcal{B}$ und $\partial_s\mathcal{B} \cap \partial_Q\mathcal{B} = \emptyset$ aufteilen.

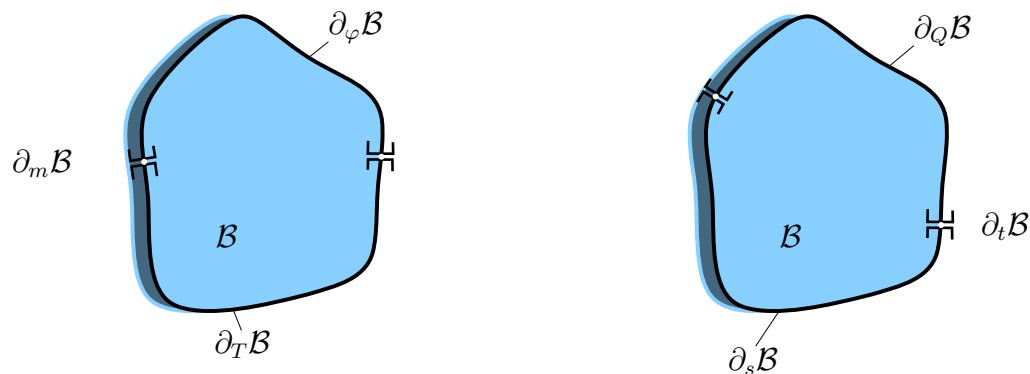


Abbildung 4.5.: Aufteilung des mechanischen Randes $\partial_m\mathcal{B}$ und des thermischen Randes $\partial_t\mathcal{B}$

Da als primäre Zustandsvariable die Entropie gewählt wurde, kann durch den thermischen Dirichlet-Rand $\partial_s\mathcal{B}$ lediglich Einfluss auf die Entropie genommen werden. In den meisten Anwendungsfällen soll jedoch die Temperatur am Rand beeinflusst werden. Hierzu wird die Zwangsbedingung ϕ der Temperatur über den Lagrangeschen Multiplikator λ in das System eingeführt. Der zugehörige Rand ist kein Dirichlet-Rand, wird hier aber mit $\partial_\lambda\mathcal{B}$ bezeichnet.

4.2. Kinetik

In diesem Kapitel sollen die Gesamtenergie, die Entropie und die verschiedenen Spannungen eines Kontinuums beschrieben werden. Die zugehörigen Bilanzgleichungen werden in einem gesonderten Kapitel behandelt.

4.2.1. Gesamtenergie

Die Gesamtenergie H des Kontinuums setzt sich aus der kinetischen Gesamtenergie T und der inneren Gesamtenergie E zusammen:

$$H = T(\mathbf{p}) + E(C, s, C_i) \quad (4.22)$$

Bemerkung 4.2.1 Wird eine Zwangsbedingung ϕ auf den Rand $\partial_\lambda \mathcal{B}$ in das System eingeführt, kann die Gesamtenergie \tilde{H} des Systems mit dem Lagrangeschen Multiplikator λ wie folgt beschrieben werden:

$$\tilde{H} = H + \int_{\partial_\lambda \mathcal{B}} \lambda \phi \quad (4.23)$$

Der letzte Term liefert hier keinen Beitrag zur Gesamtenergie, da für die zusätzliche Zwangsbedingung

$$\phi = 0 \quad (4.24)$$

gilt.

Die kinetische Gesamtenergie T ist gegeben als das Volumenintegral über die kinetische Energie \mathcal{T} :

$$\begin{aligned} T(\mathbf{p}) &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{T}(\mathbf{p}) \\ &= \int_{\mathcal{B}_0} \frac{1}{2\rho_0} \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} \end{aligned} \quad (4.25)$$

Sie ist abhängig von der Dichte $\rho_0(\mathbf{X}, t)$ und dem Impulsvektor $\mathbf{p} = \rho_0 \mathbf{v}$ bezogen auf die Referenzkonfiguration. Im Folgenden werden die differentiellen Elemente, über die die Funktion integriert werden soll, zur einfacheren Darstellung weggelassen (wie in diesem Fall dV). Die Integration bleibt aber eindeutig durch die Angabe des Integrationsgebietes (hier \mathcal{B}_0) beschrieben. Die innere Gesamtenergie E wird aus dem Volumenintegral über die innere Energie e ermittelt:

$$E(C, s, C_i) = \int_{\mathcal{B}_0} e(C, s, C_i) \quad (4.26)$$

Die innere Energie e kann durch die freie Energie ψ , die Temperatur θ und die Entropie s ausgedrückt werden als:

$$e = \psi + \theta s \quad (4.27)$$

4.2.2. Gesamtentropie

Die Gesamtentropie S des Kontinuums wird durch die Entropie s beschrieben. Auch hier wird die Gesamtentropie S über das Volumenintegral der Entropie s (als Dichtefunktion) bestimmt:

$$S = \int_{\mathcal{B}_0} s \quad (4.28)$$

Die Temperatur θ folgt aus dem Zusammenhang:

$$\theta = \frac{\partial e}{\partial s} \quad (4.29)$$

4.2.3. Spannungen

Die Spannungen lassen sich aus der inneren Energie e des Kontinuums herleiten. Wird das Kontinuum in der Referenzkonfiguration \mathcal{B}_0 durchgeschnitten, wird der Spannungsvektor \mathbf{T} im Gebiet sichtbar. Der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungsvektor $\mathbf{T} = \mathcal{P} \mathbf{N}$ ist durch die Multiplikation des ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors \mathcal{P}

$$\mathcal{P} = \mathcal{F} \mathcal{S} \quad (4.30)$$

und dem Normalenvektor \mathbf{N} der Referenzkonfiguration auf der freigeschnittenen Fläche gegeben. Der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor \mathcal{P} ist weiterhin vom Deformationsgradienten \mathcal{F} und dem zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor \mathcal{S} abhängig:

$$\mathcal{S} = 2 \frac{\partial e}{\partial \mathcal{C}} \quad (4.31)$$

Der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor \mathcal{S} liefert den Zusammenhang mit der inneren Energie e , besitzt aber keine physikalische Interpretation wie der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor \mathcal{P} . Dieser ist, im Gegensatz zum zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor, ein Zweifeld-Tensor. Dies bedeutet, dass er auf beiden Konfigurationen $(\mathcal{B}_0, \mathcal{B}_t)$ basiert.

Bemerkung 4.2.2 *In der Momentankonfiguration \mathcal{B}_t wird der Cauchysche Spannungsvektor $\mathbf{t} = \sigma \mathbf{n}$ beim Freischneiden sichtbar. Dieser Spannungsvektor setzt sich aus dem Cauchyschen Spannungstensor σ*

$$\sigma = \frac{1}{J} \mathcal{F} \mathcal{S} \mathcal{F}^T \quad (4.32)$$

und dem Normalenvektor \mathbf{n} auf der freigeschnittenen Fläche der Momentankonfiguration \mathcal{B}_t zusammen. Ein weiterer Spannungstensor der Momentankonfiguration \mathcal{B}_t ist der Kirchhoffsche Spannungstensor τ :

$$\tau = J \sigma \quad (4.33)$$

Für die negative Ableitung der inneren Energie e nach den internen Variablen \mathcal{C}_i wird ein inelastischer Spannungstensor

$$\Gamma = - \frac{\partial e}{\partial \mathcal{C}_i} \quad (4.34)$$

sowie ein viskoser Mandelscher Spannungstensor

$$\begin{aligned} \Sigma^{vis} &= 2 \mathcal{C} \frac{\partial \psi^{vis}}{\partial \mathcal{C}} \\ &= 2 \mathcal{C}_i \Gamma \end{aligned} \quad (4.35)$$

definiert.

4.3. Evolutionsgleichungen

Die Evolutionsgleichungen für das Kontinuum werden aus der Bilanz der mechanischen Energie, sowie dem ersten und zweiten Hauptsatz der Thermodynamik bestimmt.

4.3.1. Starke Formen

Bewegungsgleichungen

Die Bilanz der mechanischen Energie liefert die Bewegungsgleichungen des Kontinuums und besteht aus der Zeitableitung der kinetischen Gesamtenergie \dot{T} , der addiert mit den internen mechanischen Leistungen P^{int} , den externen mechanischen Leistungen P^{ext} entspricht:

$$\dot{T} + P^{int} = P^{ext} \quad (4.36)$$

Die internen und externen Leistungen P^{int} und P^{ext} sind dabei wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} P^{int} &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{P} : \dot{\mathcal{F}} = \int_{\mathcal{B}_0} \frac{1}{2} \mathcal{S} : \dot{\mathcal{C}} \\ P^{ext} &= \int_{\partial_T \mathcal{B}} \mathbf{T} \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} + \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{B} \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} \end{aligned} \quad (4.37)$$

Die Volumenkräfte \mathbf{B} werden im Weiteren vernachlässigt. Zudem wird der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungsvektor \mathbf{T} durch $\mathcal{P}\mathbf{N}$ ersetzt und die Zeitableitung der kinetischen Gesamtenergie T aus Gl. (4.25)₂ durchgeführt. Dadurch folgt:

$$\int_{\mathcal{B}_0} \frac{1}{\rho_0} \dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{p} + \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{P} : \dot{\mathcal{F}} = \int_{\partial_T \mathcal{B}} \mathcal{P}\mathbf{N} \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} \quad (4.38)$$

Das Randintegral wird mit dem Gaußschen Divergenztheorem in ein Volumenintegral überführt, so dass Gl. (4.38) zu

$$\int_{\mathcal{B}_0} (\dot{\mathbf{p}} - \text{Div } \mathcal{P}) \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} = 0 \quad (4.39)$$

äquivalent ist. Die starken Formen der Bewegungsgleichungen lauten somit:

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\varphi}} &= \frac{1}{\rho_0} \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} &= \text{Div } \mathcal{P} \end{aligned} \quad (4.40)$$

Thermische Evolutionsgleichung

Die thermische Evolutionsgleichung folgt aus dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik, welcher die Entropieproduktion des Kontinuums beschreibt. Die Gesamtentropieproduktion Ξ eines thermodynamischen Prozesses ist immer größer oder gleich null und setzt sich aus der Veränderungsrate der Gesamtentropie \dot{S} und der Rate des Entropieeingangs \tilde{Q} zusammen:

$$\Xi = \dot{S} - \tilde{Q} \geq 0 \quad (4.41)$$

Die Gesamtentropieproduktion Ξ ist nach Simo [96]:

$$\Xi = \int_{\mathcal{B}_0} \frac{D^{tot}}{\theta} \quad (4.42)$$

Die totale Dissipation D^{tot} des Systems ist durch die Dissipation der Wärmeleitung D^{cdu} und die innere Dissipation D^{int} gegeben:

$$D^{tot} = D^{cdu} + D^{int} \quad (4.43)$$

Die Rate des Entropieeingangs \tilde{Q} wird durch die Entropiequellen \tilde{R} und dem Piola-Kirchhoffschen Entropiefluss \mathbf{H} gekennzeichnet:

$$\tilde{Q} = - \int_{\partial_Q \mathcal{B}} \mathbf{H} \cdot \mathbf{N} + \int_{\mathcal{B}_0} \tilde{R} \quad (4.44)$$

Dabei steht der Piola-Kirchhoffsche Entropieflussvektor \mathbf{H} in der rationalen Thermodynamik (s. z.B. Hutter [41]) in Beziehung zu dem Piola-Kirchhoffschen Wärmeflussvektor \mathbf{Q} :

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\theta} \mathbf{Q} \quad (4.45)$$

Werden die Entropiequellen \tilde{R} vernachlässigt, folgt für Gl. (4.41):

$$\int_{\mathcal{B}_0} \frac{D^{tot}}{\theta} = \int_{\mathcal{B}_0} \dot{s} + \int_{\partial_Q \mathcal{B}} \frac{1}{\theta} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} \quad (4.46)$$

Das Randintegral wird durch das Gaußsche Divergenztheorem in ein Volumenintegral umgewandelt. Mit der Definition der Dissipation der Wärmeleitung

$$D^{cdu} = -\frac{1}{\theta} \mathbf{Q} \cdot \text{Grad } \theta \quad (4.47)$$

lautet die integrale Form der thermischen Evolutionsgleichung:

$$\int_{\mathcal{B}_0} \dot{s} = - \int_{\mathcal{B}_0} \frac{1}{\theta} [\text{Div } \mathbf{Q} - D^{int}] \quad (4.48)$$

Die starke Form der thermischen Evolutionsgleichung lautet folglich:

$$\dot{s} = -\frac{1}{\theta} [\text{Div } \mathbf{Q} - D^{int}] \quad (4.49)$$

Für die thermische Evolutionsgleichung wird ein konstitutives Gesetz für den Piola-Kirchhoffschen Wärmeflussvektor \mathbf{Q} benötigt. Unter der Annahme der thermischen Isotropie folgt das Fouriersche Gesetz der Wärmeleitung (s. Holzapfel [37])

$$\mathbf{Q} = -\mathcal{K} \text{Grad } \theta \quad (4.50)$$

mit dem isotropen Wärmeleitfähigkeitstensor:

$$\mathcal{K} = \kappa J C^{-1} \quad (4.51)$$

Dabei wird der Parameter $\kappa > 0$ als Wärmeleitkoeffizient bezeichnet.

Bemerkung 4.3.1 *Durch das gewählte konstitutive Gesetz kann gezeigt werden, dass die Dissipation der Wärmeleitung $D^{cd_u} > 0$ ist. Wird das konstitutive Gesetz aus Gl. (4.50) in Gl. (4.47) eingesetzt, folgt:*

$$\begin{aligned} D^{cd_u} &= \theta^3 \text{Grad } \frac{1}{\theta} \cdot \mathcal{K} \text{Grad } \frac{1}{\theta} \\ &= \kappa J \theta^3 \text{Grad } \frac{1}{\theta} \cdot C^{-1} \text{Grad } \frac{1}{\theta} > 0 \end{aligned} \quad (4.52)$$

Die Jacobideterminante J , die Temperatur θ und der Wärmeleitkoeffizient κ sind jeweils größer null und liefern somit einen positiven Vorfaktor. Durch die symmetrischen und positiv definiten Eigenschaften des rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensors C und dessen Inversen C^{-1} folgt eine positive Dissipation D^{cd_u} .

Viskose Evolutionsgleichung

Die viskose Evolutionsgleichung wird aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik mit Hilfe des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik hergeleitet. Hierbei entspricht die Summe der internen mechanischen Leistungen P^{int} und die Rate der thermischen Arbeit Q der Rate der inneren Gesamtenergie E :

$$P^{int} + Q = \dot{E} \quad (4.53)$$

Die internen Leistungen P^{int} sind bereits aus Gl. (4.37)₁ bekannt. Die thermische Leistung Q und die Rate der inneren Gesamtenergie E führen zu:

$$\begin{aligned} Q &= - \int_{\partial_Q \mathcal{B}} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} + \int_{\mathcal{B}_0} R \\ \dot{E} &= \int_{\mathcal{B}_0} \left[\frac{1}{2} \mathcal{S} : \dot{C} + \theta \dot{s} - \Gamma : \dot{C}_i \right] \end{aligned} \quad (4.54)$$

Die thermische Leistung Q wird in zwei Anteile aufgeteilt. Zum einen werden die thermischen Leistungen durch den Wärmeflussvektor \mathbf{Q} über den Rand aufgebracht und zum anderen über Wärmequellen R , die im Weiteren vernachlässigt werden sollen.

Wird weiterhin die Bilanz der mechanischen Energie aus Gl. (4.36) mit der internen Leistung P^{int} in Gl. (4.53) einbezogen, folgt:

$$\begin{aligned}\dot{H} &= P^{ext} + Q \\ &= \int_{B_0} [\text{Div } \mathcal{P} \cdot \dot{\varphi} + \mathcal{P} : \dot{\mathcal{F}} - \text{Div } \mathbf{Q}] \end{aligned} \quad (4.55)$$

Die externen Leistungen werden durch den ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor \mathcal{P} ausgedrückt und die Randintegrale werden in Volumenintegrale überführt. Die bereits bekannten lokalen Evolutionsgleichungen aus Gl. (4.40) und Gl. (4.49) werden in Gl. (4.55)₂ eingesetzt. Der Term $\int_{B_0} \text{Div } \mathcal{P} \cdot \dot{\varphi}$ gibt die Rate der kinetischen Gesamtenergie \dot{T} wieder. Es folgt:

$$\dot{E} = \int_{B_0} [\mathcal{P} : \dot{\mathcal{F}} + \theta \dot{s} - D^{int}] \quad (4.56)$$

Nach dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik darf die Dissipation D^{int} nicht negativ sein. Dies führt zu einer lokalen Gleichung, die den Namen Clausius-Planck Ungleichung trägt:

$$D^{int} = \mathcal{P} : \dot{\mathcal{F}} + \theta \dot{s} - \dot{e} \geq 0 \quad (4.57)$$

Wird Gl. (4.54)₂ mit eingebunden, folgt die innere Dissipation zu:

$$D^{int} = \Gamma : \dot{C}_i \geq 0 \quad (4.58)$$

Diese Gleichung ist der Ausgangspunkt zur Bestimmung der viskosen Evolutionsgleichung. Nach Miehe [66] kann die Rate des rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensors C durch den Geschwindigkeitstensor \mathcal{L} und den Tensor C selbst ausgedrückt werden als:

$$\dot{C} = \mathcal{L}^T C + C \mathcal{L} \quad (4.59)$$

Im viskosen Fall erhält man durch den viskosen Geschwindigkeitstensor \mathcal{L}_i eine analoge Beziehung:

$$\dot{C}_i = \mathcal{L}_i^T C_i + C_i \mathcal{L}_i \quad (4.60)$$

Wird die Rate der internen Variable C_i in Gl. (4.58) eingebunden und die Symmetrieeigenschaften von Γ ausgenutzt, dann folgt:

$$\begin{aligned} D^{int} &= 2 C_i \Gamma : \mathcal{L}_i \\ &= \Sigma^{vis} : \mathcal{L}_i \geq 0 \end{aligned} \quad (4.61)$$

mit dem viskosen Geschwindigkeitstensor \mathcal{L}_i :

$$\mathcal{L}_i = \frac{1}{2} \mathbf{C}_i^{-1} \dot{\mathbf{C}}_i \quad (4.62)$$

Um eine viskose Evolutionsgleichung zu erhalten, wird nun ein Ansatz für den viskosen Geschwindigkeitstensor \mathcal{L}_i gewählt, der eine nicht negative Dissipation $D^{int} \geq 0$ gewährleisten kann und eine symmetrische Rate der internen Variable \mathbf{C}_i ermöglicht:

$$\mathcal{L}_i = \mathbb{V}^{-1} : \Sigma^{vis} \quad (4.63)$$

Der verwendete vierstufige viskose Nachgiebigkeitstensor \mathbb{V}^{-1} wird im Anhangkapitel C.2.2 näher erläutert. Durch das Einsetzen der Gl. (4.62) folgt die viskose Evolutionsgleichung:

$$\dot{\mathbf{C}}_i = 2 \mathbf{C}_i \mathbb{V}^{-1} : \Sigma^{vis} \quad (4.64)$$

Die Dissipation D^{int} lautet:

$$D^{int} = \Sigma^{vis} : \mathbb{V}^{-1} : \Sigma^{vis} \geq 0 \quad (4.65)$$

4.3.2. Schwache Formen

Die schwachen Formen der Evolutionsgleichungen lassen sich aus den Energiebilanzen des Systems bestimmen. Hierbei werden die schwachen Bewegungsgleichungen aus der Bilanz der kinetischen Energie bestimmt. Die schwachen thermischen und viskosen Evolutionsgleichungen folgen aus der Betrachtung der Gesamtenergiebilanz.

Bewegungsgleichungen

Die Bilanz der kinetischen Energie T liefert den Ausgangspunkt zur Ermittlung der schwachen Form:

$$\dot{T} = \int_{\mathcal{B}_0} \frac{1}{\rho_0} \dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{p} \quad (4.66)$$

Wird $\frac{1}{\rho_0} \mathbf{p}$ mit Gl. (4.40)₁ und $\dot{\mathbf{p}}$ mit Gl. (4.40)₂ ersetzt, so führen die beiden schwachen Formen der Bewegungsgleichungen zu:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_\varphi \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_\varphi \cdot \frac{1}{\rho_0} \mathbf{p} \\ \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_p \cdot \dot{\mathbf{p}} &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_p \cdot \text{Div } \mathcal{P} \end{aligned} \quad (4.67)$$

Die zugehörige Testfunktion $\mathbf{w}_\varphi = \dot{\mathbf{p}}$ stellt die Rate des Impulses \mathbf{p} für die erste schwache Bewegungsgleichung (4.67)₁ dar. Analog ist die Geschwindigkeit $\dot{\boldsymbol{\varphi}}$ die konsistente Testfunktion $\mathbf{w}_p = \dot{\boldsymbol{\varphi}}$ für die zweite schwache Bewegungsgleichung (4.67)₂.

Thermische Evolutionsgleichung

Die Rate der inneren Energie E aus Gl. (4.54) liefert die schwache Form der thermischen Evolutionsgleichung:

$$\dot{E} = P^{int} + \int_{\mathcal{B}_0} [\theta \dot{s} - \Gamma : \dot{C}_i] \quad (4.68)$$

Der Term $\theta \dot{s}$ wird nun in Zusammenhang mit der starken Form der thermischen Evolutionsgleichung Gl. (4.49) gebracht:

$$\int_{\mathcal{B}_0} w_s \dot{s} = - \int_{\mathcal{B}_0} w_s \left(\frac{1}{\theta} [\text{Div } \mathbf{Q} - D^{int}] \right) \quad (4.69)$$

Die Temperatur θ ist die zugehörige Testfunktion $w_s = \theta$ der schwachen thermischen Evolutionsgleichung.

Viskose Evolutionsgleichung

Die schwache viskose Evolutionsgleichung wird aus dem letzten Term der Gl. (4.68) bestimmt. Diese schwache Form wird zur Vollständigkeit mit aufgeführt, benötigt aber keine räumliche Diskretisierung. Wird die starke viskose Evolutionsgleichung aus Gl. (4.64) eingesetzt, folgt:

$$\int_{\mathcal{B}_0} w_{C_i} : \dot{C}_i = \int_{\mathcal{B}_0} w_{C_i} : 2 C_i \mathbb{V}^{-1} : \Sigma^{vis} \quad (4.70)$$

Eine geeignete Testfunktion $w_{C_i} = -\Gamma$ für die schwache viskose Evolutionsgleichung ist somit der negative inelastische Spannungstensor Γ .

4.3.3. Thermische Zwangsbedingung

Analog zur Bemerkung 2.1.3 kann durch das Prinzip der virtuellen Temperatur nun eine thermische Zwangsbedingung für die Temperatur vorgegeben werden (s. Willner [110] und Hesch und Betsch [35]):

$$\phi = \theta - \bar{\theta} = 0 \quad (4.71)$$

Die Ableitung der thermischen Zwangsbedingung nach der Temperatur lautet:

$$\nabla_{\theta} \phi = 1 \quad (4.72)$$

Die Ableitung der Zwangsbedingung richtet sich hierbei nach der Testfunktion $w_s = \theta$. Dadurch entsteht eine thermische Zwangslast Z :

$$\begin{aligned} Z &= \lambda \nabla_{\theta} \phi \\ &= \lambda \end{aligned} \quad (4.73)$$

Diese thermische Zwangslast wird von der bereits bekannten thermischen Gleichung abgezogen. Somit folgt für die starke thermische Gleichung mit thermischen Zwangsbedingungen

$$\dot{s} = -\frac{1}{\theta} [\text{Div } \mathbf{Q} - D^{int}] - Z \quad (4.74)$$

und für die schwache thermische Gleichung mit der thermischen Zwangsbedingung über den Rand $\partial_\lambda \mathcal{B}$:

$$\int_{\mathcal{B}_0} w_s \dot{s} = - \int_{\mathcal{B}_0} \frac{w_s}{\theta} [\text{Div } \mathbf{Q} - D^{int}] - \int_{\partial_\lambda \mathcal{B}} w_s Z \quad (4.75)$$

Wird die thermische Zwangslast mit der Testfunktion $w_s = \theta$ multipliziert, entspricht dies der Dissipation über den Rand des Systems.

4.4. Bilanzen

Die Bilanzen zur Beschreibung des Kontinuums sind: die Massenbilanz, die Impulsbilanz, die Drehimpulsbilanz und die Energiebilanz. Diese Bilanzen sind die Grundpfeiler der betrachteten Kontinuums-Theorie und sollen im Weiteren kurz vorgestellt werden.

4.4.1. Massenbilanz

Das betrachtete System ist ein materiell abgeschlossenes System. Dies bedeutet, dass die Masse m des Kontinuums konstant ist. Somit kann die Masse m die Grenzen des Kontinuums nicht überschreiten. Es wird lediglich Energie mit der Umgebung ausgetauscht (Arbeit und Wärme). Die Masse m kann durch das Volumenintegral, über die konstante Dichte $\rho_0 \in \mathcal{B}_0$ oder die veränderliche Dichte $\rho \in \mathcal{B}_t$ beschrieben werden:

$$m = \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 = \int_{\mathcal{B}_t} \rho = konst. \quad (4.76)$$

Dadurch liefert die Deformation eines Kontinuums unterschiedliche Dichten ρ und Volumina v , die Masse m bleibt immer gleich.

4.4.2. Impulsbilanz

Die Impulsbilanz besteht aus der Zeitableitung des Gesamtimpulses \mathbf{L} und den externen Kräften \mathbf{F}^{ext} :

$$\dot{\mathbf{L}} = \mathbf{F}^{ext} \quad (4.77)$$

Der Gesamtimpuls \mathbf{L} wird aus der Impulsdichte \mathbf{p} gebildet:

$$\mathbf{L} = \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{p} \quad (4.78)$$

Die externen Kräfte \mathbf{F}^{ext} setzen sich aus den Volumenkräften \mathbf{B} (wie z.B. Gravitationskräften) und den Oberflächenkräften \mathbf{T} zusammen:

$$\mathbf{F}^{ext} = \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{B} + \int_{\partial_T \mathcal{B}} \mathbf{T} \quad (4.79)$$

Greifen keine äußeren Kräfte am Kontinuum an, gilt für die Impulsbilanz

$$\dot{\mathbf{L}} = \mathbf{0} \quad (4.80)$$

sodass der Impuls \mathbf{L} konstant ist.

4.4.3. Drehimpulsbilanz

Analog zur Impulsbilanz entspricht die Zeitableitung des Gesamtdrehimpulses \mathbf{J} gerade den externen Momenten \mathbf{M}^{ext} , die am Kontinuum angreifen:

$$\dot{\mathbf{J}} = \mathbf{M}^{ext} \quad (4.81)$$

Der Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} kann durch den Impuls \mathbf{p} und den Positionsvektor \mathbf{R} ausgedrückt werden als:

$$\mathbf{J} = \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{R} \times \mathbf{p} \quad (4.82)$$

Die externen Momente \mathbf{M}^{ext} sind durch die Volumenkräfte \mathbf{B} und Oberflächenkräfte \mathbf{T} gegeben:

$$\mathbf{M}^{ext} = \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{R} \times \mathbf{B} + \int_{\partial_T \mathcal{B}} \mathbf{R} \times \mathbf{T} \quad (4.83)$$

Wirken keine äußeren Kräfte auf das Kontinuum ein, folgt die Drehimpulserhaltung

$$\dot{\mathbf{J}} = \mathbf{0} \quad (4.84)$$

und somit auch die Konstanz des Drehimpulses.

4.4.4. Energiebilanz

Die Zeitableitung der Gesamtenergie H ist nach Gl. (4.22) die Summe der Zeitableitungen der kinetischen Gesamtenergie T und der inneren Gesamtenergie E :

$$\dot{H} = \dot{T} + \dot{E} \quad (4.85)$$

Durch Einsetzen der mechanischen Energiebilanz aus Gl. (4.36), der Bilanz der inneren Energie aus Gl. (4.68) sowie dem Einsetzen der schwachen thermischen Evolutionsgleichung aus Gl. (4.69) ergibt sich:

$$\dot{H} = \int_{\partial_T \mathcal{B}} \mathbf{T} \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} - \int_{\partial_Q \mathcal{B}} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} \quad (4.86)$$

Greifen keine äußeren Kräfte am Körper an und wird auch keine Wärme zugeführt, dann bleibt die Gesamtenergie H erhalten:

$$\dot{H} = 0 \quad (4.87)$$

Bemerkung 4.4.1 *Wird die thermische Zwangsbedingung verwendet, dann muss die thermische schwache Evolutionsgleichung aus Gl. (4.75) in die Bilanz der inneren Energie eingesetzt werden. Daraus folgt die Bilanz der Gesamtenergie:*

$$\dot{H} = \int_{\partial_T \mathcal{B}} \mathbf{T} \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} - \int_{\partial_Q \mathcal{B}} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} - \int_{\partial_\lambda \mathcal{B}} \theta Z \quad (4.88)$$

4.4.5. Entropiebilanz

Die Entropiebilanz kann durch die zeitliche Ableitung der Gl. (4.28) berechnet werden:

$$\dot{S} = \int_{\mathcal{B}_0} \dot{s} \quad (4.89)$$

Wird die starke Form der thermischen Evolutionsgleichung (4.49) eingesetzt, folgt:

$$\begin{aligned} \dot{S} &= - \int_{\mathcal{B}_0} \frac{1}{\theta} [\text{Div } \mathbf{Q} - D^{int}] \\ &= \int_{\mathcal{B}_0} \frac{D^{tot}}{\theta} - \int_{\partial_Q \mathcal{B}} \frac{1}{\theta} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} \end{aligned} \quad (4.90)$$

Ist das System adiabatisch abgeschlossen, wird keine thermische Energie mit der Umgebung ausgetauscht ($\tilde{Q} = 0$). Für die Rate der Entropie gilt dadurch:

$$\dot{S} = \int_{\mathcal{B}_0} \frac{D^{tot}}{\theta} \geq 0 \quad (4.91)$$

Dabei sind die totale Dissipation D^{tot} und die Temperatur θ positiv. Daraus folgt eine stetig ansteigende Gesamtentropie S über der Zeit t .

Bemerkung 4.4.2 *Unter Verwendung der thermischen Zwangsbedingung am Rand $\partial_\lambda \mathcal{B}$ muss die starke thermische Evolutionsgleichung aus Gl. (4.74) in Gl. (4.89) eingesetzt werden, um die Entropiebilanz zu bestimmen:*

$$\dot{S} = \int_{\mathcal{B}_0} \frac{D^{tot}}{\theta} - \int_{\partial_Q \mathcal{B}} \frac{1}{\theta} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} - \int_{\partial_\lambda \mathcal{B}} Z \quad (4.92)$$

4.4.6. Bilanz der Lyapunov-Funktion

Die Bilanz der Lyapunov-Funktion setzt sich aus der Energiebilanz und der Entropiebilanz zusammen:

$$\dot{V} = \dot{H} - \theta_\infty \dot{S} \quad (4.93)$$

Die Temperatur der Umgebung wird mit θ_∞ bezeichnet. Ist das betrachtete System mechanisch und thermisch unbelastet, folgt mit Gl. (4.87) und Gl. (4.91) eine stetig abfallende Lyapunov-Funktion V :

$$\dot{V} = -\theta_\infty \int_{\mathcal{B}_0} \frac{D^{tot}}{\theta} \leq 0 \quad (4.94)$$

Bemerkung 4.4.3 *Die Gl. (4.94) gilt auch bei der Verwendung von thermischen Zwangsbedingungen, wenn die Temperatur $\bar{\theta}$ am Rand $\partial_\lambda \mathcal{B}$ der Umgebungstemperatur θ_∞ entspricht und keine Lasten auf die Neumann-Ränder aufgegeben werden:*

$$\dot{V} = \underbrace{\int_{\partial_T \mathcal{B}} \mathbf{T} \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} + \int_{\partial_Q \mathcal{B}} \left(\frac{\theta_\infty}{\theta} - 1 \right) \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N}}_{=0} - \int_{\partial_\lambda \mathcal{B}} \underbrace{(\theta - \theta_\infty)}_{=\phi} Z - \theta_\infty \int_{\mathcal{B}_0} \frac{D^{tot}}{\theta} \quad (4.95)$$

4.5. Erweitertes GENERIC Format

Das erweiterte GENERIC Format wird auf die starken Evolutionsgleichungen des thermoviskoelastischen Kontinuums angewendet. Die starken Evolutionsgleichungen werden dabei in eine Matrix-Vektor Struktur umgeformt. Ein Kontinuum, dessen starke Evolutionsgleichungen in das erweiterte GENERIC Format gebracht werden können, gibt automatisch die strukturellen Erhaltungseigenschaften wieder. Hierbei ist zu beachten, dass das erweiterte GENERIC Format nur auf mechanisch und thermisch isolierte Systeme anwendbar ist. Bereits in Romero [91, 92] ist das GENERIC Format für solch ein System verwendet worden. Die starken Formen der Evolutionsgleichungen aus Gl. (4.40), (4.49) und (4.64) lauten im erweiterten GENERIC Format:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{z}} &= [\mathbf{L}(\mathbf{z}) + \mathbf{L}^{vis}(\mathbf{z})] \delta H(\mathbf{z}) + [\mathbf{M}(\mathbf{z}) + \mathbf{M}^{vis}(\mathbf{z})] \delta S(\mathbf{z}) \\ \mathbf{z}(t=0) &= \mathbf{z}^0 \end{aligned} \quad (4.96)$$

4. Thermoviskoelastisches Kontinuum

Das δ -Symbol bezeichnet die Funktionalableitung eines allgemeinen Funktionals F und wird mit dem Tangentenvektor \mathbf{v} wie folgt gebildet:

$$\int_{\mathcal{B}_0} \delta F(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{v} = \left. \frac{d}{d\varepsilon} F(\mathbf{z} + \varepsilon \mathbf{v}) \right|_{\varepsilon=0} \quad (4.97)$$

Der Zustandsvektor $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{13}$ besteht aus der Abbildung $\boldsymbol{\varphi} \in \mathbb{R}^3$, dem Impulsvektor $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3$, der Entropie $s \in \mathbb{R}$ und dem Vektor der symmetrischen internen Variable $[C_i]_{vn1} \in \mathbb{R}^6$ (auch Voigt-Notation der internen Variable genannt, s. Voigt-Notation C.3):

$$\mathbf{z} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varphi} \\ \mathbf{p} \\ s \\ [C_i]_{vn1} \end{bmatrix} \quad (4.98)$$

Die Summe einer schiefsymmetrischen Matrix $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{13 \times 13}$ und einer symmetrischen Matrix $\mathbf{L}^{vis} \in \mathbb{R}^{13 \times 13}$ wird mit der Funktionalableitung der Gesamtenergie $\delta H \in \mathbb{R}^{13}$ multipliziert, wobei sich die Matrix \mathbf{L}^{vis} auf die interne Variable C_i bezieht. Die Summation der beiden symmetrisch positiv semidefiniten Matrizen $\mathbf{M}, \mathbf{M}^{vis} \in \mathbb{R}^{13 \times 13}$ steht vor der Funktionalableitung der Entropie $\delta S \in \mathbb{R}^{13}$. Die zugehörigen Degenerationsbedingungen für das erweiterte GENERIC Format des Kontinuums lauten:

$$\int_{\mathcal{B}_0} \delta H \cdot \mathbf{M} \delta S = 0 \quad \int_{\mathcal{B}_0} \delta S \cdot [\mathbf{L} + \mathbf{L}^{vis}] \delta H = 0 \quad (4.99)$$

Zusätzlich muss folgende Bedingung für das thermoviskoelastische Kontinuum erfüllt sein:

$$\int_{\mathcal{B}_0} \delta H \cdot \mathbf{M}^{vis} \delta S = - \int_{\mathcal{B}_0} \delta H \cdot \mathbf{L}^{vis} \delta H \quad (4.100)$$

Die Funktionalableitungen der Gesamtenergie δH und der Entropie δS nach dem Zustandsvektor \mathbf{z} lauten:

$$\delta H = \begin{bmatrix} -\text{Div } \mathcal{P} \\ \frac{1}{\rho_0} \mathbf{p} \\ \theta \\ -[T]_{vn3} \end{bmatrix} \quad \delta S = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{3 \times 1} \\ \mathbf{0}^{3 \times 1} \\ 1 \\ \mathbf{0}^{6 \times 1} \end{bmatrix} = \text{const.} \quad (4.101)$$

Der inelastische Spannungstensor $[T]_{vn3}$ wird durch die Voigt-Notation dargestellt. Die vorgegebenen Funktionalableitungen liefern die Matrizen \mathbf{L} und \mathbf{L}^{vis}

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{3 \times 3} & \mathbf{I}^{3 \times 3} & \mathbf{0}^{3 \times 7} \\ -\mathbf{I}^{3 \times 3} & \mathbf{0}^{3 \times 3} & \mathbf{0}^{3 \times 7} \\ \mathbf{0}^{7 \times 3} & \mathbf{0}^{7 \times 3} & \mathbf{0}^{7 \times 7} \end{bmatrix} \quad \mathbf{L}^{vis} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{7 \times 7} & \mathbf{0}^{7 \times 6} \\ \mathbf{0}^{6 \times 7} & -[C_i]_{vn} \end{bmatrix} \quad (4.102)$$

mit dem vierstufigen Tensor $[\mathbb{C}_i]_{vn}$ der Evolutionsgleichung in Voigt-Notation (s. Kapitel C.3.2). Weiterhin werden die Matrizen \mathbf{M} und \mathbf{M}^{vis} aufgestellt:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 1} & \mathbf{0}^{6 \times 6} \\ \mathbf{0}^{1 \times 6} & -\frac{1}{\theta} \text{Div } \mathbf{Q} & \mathbf{0}^{1 \times 6} \\ \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 1} & \mathbf{0}^{6 \times 6} \end{bmatrix} \quad \mathbf{M}^{vis} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 1} & \mathbf{0}^{6 \times 6} \\ \mathbf{0}^{1 \times 6} & \frac{1}{\theta} D^{int} & \mathbf{0}^{1 \times 6} \\ \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 1} & \mathbf{0}^{6 \times 6} \end{bmatrix} \quad (4.103)$$

Beweis 4.5.1 Die Erhaltungseigenschaften der Gesamtenergie H , der stetige Anstieg der Entropie S und der stetige Abfall der Lyapunov-Funktion V sollen im Folgenden für das erweiterte GENERIC Format erläutert werden. Die Rate der Gesamtenergie liefert:

$$\begin{aligned} \dot{H} &= \int_{\mathcal{B}_0} \delta H \cdot \dot{\mathbf{z}} \\ &= \int_{\mathcal{B}_0} \delta H \cdot \mathbf{L}^{vis} \delta H + \delta H \cdot \mathbf{M}^{vis} \delta S \end{aligned} \quad (4.104)$$

Hierbei wurde bereits die Schiefsymmetrie der Matrix \mathbf{L} mit einbezogen. Die Degenerationsbedingung aus Gl. (4.99)₁ liefert die thermische Leistung, die über den Rand aufgebracht wird. Da äußere Kräfte vernachlässigt werden, wird der folgende Term zu null:

$$\int_{\mathcal{B}_0} \delta H \cdot \mathbf{M} \delta S = - \int_{\mathcal{B}_0} \text{Div } \mathbf{Q} = - \int_{\partial_Q \mathcal{B}} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} = 0 \quad (4.105)$$

In Gl. (4.104)₂ bleiben lediglich die Terme der zusätzlichen Bedingung aus Gl. (4.100) stehen:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{B}_0} \delta H \cdot \mathbf{L}^{vis} \delta H &= - \int_{\mathcal{B}_0} \Gamma : \dot{\mathbf{c}} \\ \int_{\mathcal{B}_0} \delta H \cdot \mathbf{M}^{vis} \delta S &= \int_{\mathcal{B}_0} D^{int} \end{aligned} \quad (4.106)$$

Mit der Definition der inneren Dissipation aus Gl. (4.58) folgt, dass die Energie über die Zeit erhalten bleibt:

$$\dot{H} = 0 \quad (4.107)$$

Weiterhin lässt sich der stetige Anstieg der Entropie S zeigen. Die Zeitableitung der Entropie \dot{S} wird in das Raumintegral über die Funktionalableitung δS und in die Rate des Zustandsvektors $\dot{\mathbf{z}}$ aufgeteilt:

$$\begin{aligned} \dot{S} &= \int_{\mathcal{B}_0} \delta S \cdot \dot{\mathbf{z}} \\ &= \int_{\mathcal{B}_0} \delta S \cdot [\mathbf{M} + \mathbf{M}^{vis}] \delta S \end{aligned} \quad (4.108)$$

4. Thermoviskoelastisches Kontinuum

Die zweite Degenerationsbedingung aus Gl. (4.99)₂ wird trivial erfüllt. Die Matrizen \mathbf{M} und \mathbf{M}^{vis} liefern den folgenden Ausdruck:

$$\dot{S} = - \int_{\mathcal{B}_0} \frac{1}{\theta} (\text{Div } \mathbf{Q} - D^{int}) \quad (4.109)$$

Nach partieller Integration, Anwendung des Gaußtheorems und Elimination der externen Kräfte folgt die bereits bekannte Gleichung:

$$\dot{S} = \int_{\mathcal{B}_0} \frac{D^{tot}}{\theta} \geq 0 \quad (4.110)$$

Die Gl. (4.107) und Gl. (4.110) liefern weiterhin eine stetig fallende Lyapunov-Funktion:

$$\dot{V} = -\theta_\infty \int_{\mathcal{B}_0} \frac{D^{tot}}{\theta} \leq 0 \quad (4.111)$$

Die schwachen Evolutionsgleichungen des erweiterten GENERIC Formats lassen sich aus der Gesamtenergiebilanz der Gl. (4.104)₂ herleiten. Die Testfunktionen für die schwachen Evolutionsgleichungen stimmen mit der Funktionalableitung der Gesamtenergie δH aus Gl. (4.101)₁ überein. Werden für die ersten beiden Einträge des Vektors die starken Bewegungsgleichungen eingesetzt, ergibt sich der Testfunktionsvektor zu:

$$\mathbf{w}_z = \begin{bmatrix} -\dot{\mathbf{p}} \\ \dot{\varphi} \\ \theta \\ -[\Gamma]_{vn3} \end{bmatrix} \quad (4.112)$$

Im Vergleich zu den Testfunktionen aus Kapitel 4.3.2 unterscheidet sich die erste Testfunktion durch ein negatives Vorzeichen. Das negative Vorzeichen ist hier notwendig, um die Energiebilanz im erweiterten GENERIC Format zu erhalten. Somit lauten die schwachen Evolutionsgleichungen des erweiterten GENERIC Formats:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_z \cdot \dot{\mathbf{z}} &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_z \cdot ([\mathbf{L} + \mathbf{L}^{vis}] \delta H + [\mathbf{M} + \mathbf{M}^{vis}] \delta S) \\ &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_\varphi \cdot \frac{1}{\rho_0} \mathbf{p} + \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_p \cdot \text{Div } \mathcal{P} - \int_{\mathcal{B}_0} \frac{w_s}{\theta} [\text{Div } \mathbf{Q} - D^{int}] \\ &\quad + \int_{\mathcal{B}_0} w_{C_i} : 2 C_i \mathbb{V}^{-1} : \Sigma^{vis} \end{aligned} \quad (4.113)$$

4.5.1. Thermische Zwangsbedingung

Die thermische Zwangsbedingung kann durch einen additiven Term in das erweiterte GENERIC Format aufgenommen werden. Dies liefert das differential-algebraische System des erweiterten GENERIC Formats

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{z}} &= [\mathbf{L}(\mathbf{z}) + \mathbf{L}^{vis}(\mathbf{z})] \delta H(\mathbf{z}) + [\mathbf{M}(\mathbf{z}) + \mathbf{M}^{vis}(\mathbf{z})] \delta S(\mathbf{z}) + \mathbf{L}^\lambda(\lambda) \delta \phi \\ 0 &= \phi \end{aligned} \quad (4.114)$$

mit den Anfangsbedingungen:

$$\mathbf{z}(t = 0) = \mathbf{z}^0 \quad \lambda(t = 0) = \lambda^0 \quad (4.115)$$

Die zugehörige Matrix $\mathbf{L}^\lambda(\lambda)$ und der Vektor $\nabla \phi$ lauten:

$$\mathbf{L}^\lambda(\lambda) = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 1} & \mathbf{0}^{6 \times 6} \\ \mathbf{0}^{1 \times 6} & -\lambda & \mathbf{0}^{1 \times 6} \\ \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 1} & \mathbf{0}^{6 \times 6} \end{bmatrix} \quad \delta \phi = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{(6 \times 1)} \\ \nabla_\theta \phi \\ \mathbf{0}^{(6 \times 1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{(6 \times 1)} \\ 1 \\ \mathbf{0}^{(6 \times 1)} \end{bmatrix} \quad (4.116)$$

Die Zwangsbedingung ϕ ist von den primären Variablen abhängig. Die Ableitung der Zwangsbedingung ist jedoch von der Testfunktion $w_s = \theta$ abhängig und wird im thermischen Fall nach dieser Variablen abgeleitet. Die zugehörige Testfunktion zur Zwangsbedingung ϕ lautet $w_\lambda = \lambda$.

Die schwachen Evolutionsgleichungen des erweiterten GENERIC Formats mit thermischen Zwangsbedingungen über den Rand $\partial_\lambda \mathcal{B}$ folgen:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_z \cdot \dot{\mathbf{z}} &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_z \cdot ([\mathbf{L} + \mathbf{L}^{vis}] \delta H + [\mathbf{M} + \mathbf{M}^{vis}] \delta S + \mathbf{L}^\lambda \delta \phi) \\ &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_\varphi \cdot \frac{1}{\rho_0} \mathbf{p} + \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_p \cdot \text{Div } \mathcal{P} - \int_{\mathcal{B}_0} \frac{w_s}{\theta} [\text{Div } \mathbf{Q} - D^{int}] \\ &\quad - \int_{\partial_\lambda \mathcal{B}} w_s \lambda + \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_{C_i} : 2 C_i \mathbb{V}^{-1} : \Sigma^{vis} \end{aligned} \quad (4.117)$$

4.6. Diskretisierung

Die schwachen Evolutionsgleichungen aus dem vorangegangenen Kapitel werden in Zeit und Raum diskretisiert. Für die zeitliche Diskretisierung werden die Mittelpunktsregel und der erweiterte TC Integrator verwendet. Die räumliche Diskretisierung wird mittels der Finite-Elemente-Methode durchgeführt.

Der Unterschied der beiden Integratoren soll anhand des Kontinuums verdeutlicht werden. Die Mittelpunktsregel erfüllt für ein thermisch und mechanisch isoliertes System lediglich die Impuls- und Drehimpulserhaltung, während der erweiterte TC Integrator sämtliche Bilanzen (s. Kapitel 4.4) erfüllen kann.

4.6.1. Zeitliche Diskretisierung

Um eine zeitliche Diskretisierung durchführen zu können, wird das Zeitintervall $\mathcal{I} = [0, T]$ in Zeitschritte $\mathcal{I}_n = [t_n, t_{n+1}]$ der Anzahl $n = [1, \dots, n_{tp}]$ unterteilt (s. Abbildung 4.6).

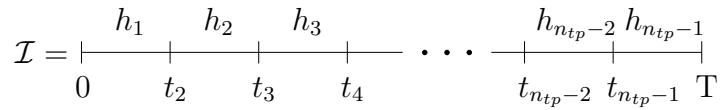


Abbildung 4.6.: Unterteilung des Zeitintervalls in Zeitschritte

Die Zeitschrittweite h_n ist somit durch die Grenzen des zugehörigen Zeitschrittes gegeben:

$$h_n = t_{n+1} - t_n \quad (4.118)$$

Mittelpunktsregel

Wird zur zeitlichen Diskretisierung die Mittelpunktsregel verwendet, folgt für die diskreten schwachen Evolutionsgleichungen des erweiterten GENERIC Formats:

$$\begin{aligned} \frac{H_{n+1} - H_n}{h_n} &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_z \cdot \frac{\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n}{h_n} \\ &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_z \cdot ([\mathbf{L} + \mathbf{L}^{vis}] \Delta H + [\mathbf{M} + \mathbf{M}^{vis}] \Delta S) \end{aligned} \quad (4.119)$$

Die Matrix \mathbf{L} besitzt konstante Einträge und entspricht somit der kontinuierlichen Matrix \mathbf{L} :

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{3 \times 3} & \mathbf{I}^{3 \times 3} & \mathbf{0}^{3 \times 7} \\ -\mathbf{I}^{3 \times 3} & \mathbf{0}^{3 \times 3} & \mathbf{0}^{3 \times 7} \\ \mathbf{0}^{7 \times 3} & \mathbf{0}^{7 \times 3} & \mathbf{0}^{7 \times 7} \end{bmatrix} \quad \mathbf{L}^{vis} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{7 \times 7} & \mathbf{0}^{7 \times 6} \\ \mathbf{0}^{6 \times 7} & -[\mathbb{C}_i(\mathbb{C}_{i_{n+\frac{1}{2}}})]_{vn} \end{bmatrix} \quad (4.120)$$

Die Matrix \mathbf{L}^{vis} sowie die Matrizen \mathbf{M} und \mathbf{M}^{vis} werden am Mittelpunkt des Zustandsvek-

tors $\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}$ ausgewertet:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 1} & \mathbf{0}^{6 \times 6} \\ \mathbf{0}^{1 \times 6} & -\frac{1}{\theta_{\frac{1}{2}}} \text{Div } \mathbf{Q}_{\frac{1}{2}} & \mathbf{0}^{1 \times 6} \\ \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 1} & \mathbf{0}^{6 \times 6} \end{bmatrix} \quad \mathbf{M}^{vis} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 1} & \mathbf{0}^{6 \times 6} \\ \mathbf{0}^{1 \times 6} & \frac{1}{\theta_{\frac{1}{2}}} D_{\frac{1}{2}}^{int} & \mathbf{0}^{1 \times 6} \\ \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 1} & \mathbf{0}^{6 \times 6} \end{bmatrix} \quad (4.121)$$

Der Index $(\cdot)_{\frac{1}{2}}$ weist auf eine zeitlich diskrete Größe hin, die weiter definiert werden muss. Die Temperaturen $\theta_{\frac{1}{2}}$ und der Wärmeflussvektor $\mathbf{Q}_{\frac{1}{2}}$ lauten

$$\begin{aligned} \theta_{\frac{1}{2}} &= \frac{\partial e}{\partial s} \left(c_{\frac{1}{2}}, s_{n+\frac{1}{2}}, c_{i_{n+\frac{1}{2}}} \right) \\ \mathbf{Q}_{\frac{1}{2}} &= -\mathcal{K}_{\frac{1}{2}} \text{Grad } \theta_{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (4.122)$$

mit dem isotropen Wärmeleitfähigkeitstensor:

$$\mathcal{K}_{\frac{1}{2}} = \kappa \sqrt{\det c_{\frac{1}{2}}} c_{\frac{1}{2}}^{-1} \quad (4.123)$$

Die Auswertung des rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensors am Mittelpunkt des Positionsvektors $\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}$ bzw. am Mittelpunkt des Deformationsgradienten $\mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}}$ ergibt:

$$c_{\frac{1}{2}} = \mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}}^T \mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}} \quad (4.124)$$

Die innere Dissipation besteht hier aus einem unveränderlichen viskosen Nachgiebigkeitstensor \mathbb{V}^{-1} . Die interne Variable C_i und der inelastische Spannungstensor Γ sind aber in der Zeit veränderlich:

$$D_{\frac{1}{2}}^{int} = 2 c_{i_{n+\frac{1}{2}}} \Gamma_{\frac{1}{2}} : \mathbb{V}^{-1} : 2 c_{i_{n+\frac{1}{2}}} \Gamma_{\frac{1}{2}} \quad (4.125)$$

Die zeitlich diskreten Funktionalableitungen der Gesamtenergie H und der Gesamtentropie S lauten:

$$\Delta H = \begin{bmatrix} -\text{Div} \left(\mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}} \mathcal{S}_{\frac{1}{2}} \right) \\ \frac{1}{\rho_0} \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} \\ \theta_{\frac{1}{2}} \\ - \left[\Gamma_{\frac{1}{2}} \right]_{vn3} \end{bmatrix} \quad \Delta S = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{(3 \times 1)} \\ \mathbf{0}^{(3 \times 1)} \\ 1 \\ \mathbf{0}^{(6 \times 1)} \end{bmatrix} = \text{const.} \quad (4.126)$$

Die Auswertung des zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors $\mathcal{S}_{\frac{1}{2}}$ und des inelastischen Spannungstensors $\Gamma_{\frac{1}{2}}$ ergeben:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\frac{1}{2}} &= 2 \frac{\partial e}{\partial \mathcal{C}} \left(c_{\frac{1}{2}}, s_{n+\frac{1}{2}}, c_{i_{n+\frac{1}{2}}} \right) \\ \Gamma_{\frac{1}{2}} &= -\frac{\partial e}{\partial C_i} \left(c_{\frac{1}{2}}, s_{n+\frac{1}{2}}, c_{i_{n+\frac{1}{2}}} \right) \end{aligned} \quad (4.127)$$

Die zeitlich diskreten Testfunktionen \mathbf{w}_z sind wie folgt gegeben:

$$\mathbf{w}_z = \begin{bmatrix} -\frac{\mathbf{P}_{n+1} - \mathbf{P}_n}{h_n} \\ \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{h_n} \\ \theta_{\frac{1}{2}} \\ -\left[\Gamma_{\frac{1}{2}}\right]_{vn3} \end{bmatrix} \quad (4.128)$$

Erweiterter TC Integrator

Der erweiterte TC Integrator ist ein strukturerhaltender Integrator. Er basiert auf der G-äquivalenten Funktionalableitung von Gonzalez [19] und dem bereits bekannten TC Integrator von Romero [91, 92]. Die diskreten schwachen Evolutionsgleichungen des erweiterten GENERIC Formates lauten für den erweiterten TC Integrator:

$$\begin{aligned} \frac{H_{n+1} - H_n}{h_n} &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_z \cdot \frac{\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n}{h_n} \\ &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_z \cdot \left([\mathbf{L} + \mathbf{L}^{vis}] \Delta^G H + [\mathbf{M} + \mathbf{M}^{vis}] \Delta^G S \right) \end{aligned} \quad (4.129)$$

Die Testfunktionen \mathbf{w}_z , die Matrizen \mathbf{L} und \mathbf{L}^{vis} sowie die Matrizen \mathbf{M} und \mathbf{M}^{vis} sind bereits durch die Gl. (4.128), Gl. (4.120) und Gl. (4.121) bekannt.

Die G-äquivalente diskrete Funktionalableitung stellt die folgende Beziehung für ein Funktional F her:

$$\begin{aligned} F_{n+1} - F_n &= \int_{\mathcal{B}_0} \Delta^G F \left(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}} \right) \cdot (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) \\ &= \mathbf{D}^G F (\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \cdot (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) \\ &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{D}\mathcal{F} (\boldsymbol{\pi}_n, \boldsymbol{\pi}_{n+1}) \cdot (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n) \end{aligned} \quad (4.130)$$

$\mathbf{D}\mathcal{F}$ stellt den diskreten partitionierten Gradienten von \mathcal{F} dar. Der Vektor $\boldsymbol{\pi}$ beinhaltet die Invarianten des Systems. Diese Invarianten sind unveränderlich gegenüber der Rotation des Kontinuums und ermöglichen die Energieerhaltung ohne die Impuls- und Drehimpulserhaltung zu beeinflussen. Das thermoviskoelastische Kontinuum benötigt die vier Invarianten:

$$\pi_1 = C \quad \pi_2 = \|\mathbf{p}\|^2 \quad \pi_3 = s \quad \pi_4 = C_i \quad (4.131)$$

Diese Invarianten sind durch den rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensor \mathcal{C} , das Skalarprodukt der Impulsvektoren \mathbf{p} , die Entropie s und die interne Variable C_i gegeben. Mit Hilfe der Voigt-Notation lässt sich der Vektor der Invarianten $\boldsymbol{\pi} \in \mathbb{R}^{14}$ aufstellen:

$$\boldsymbol{\pi} = \begin{bmatrix} [\mathcal{C}]_{vn1} \\ \|\mathbf{p}\|^2 \\ s \\ [C_i]_{vn1} \end{bmatrix} \quad (4.132)$$

Die Ableitungen der inneren Energie e , der kinetischen Energie \mathcal{T} und der Entropie s nach den Invarianten π_k mit $k = [1, 2, 3, 4]$ werden durch partitionierte diskrete Gradienten ersetzt. Die Ableitung der Invarianten $\boldsymbol{\pi}$ nach dem Zustandsvektor \mathbf{z} wird am Mittelpunkt ausgewertet. Somit lassen sich die G-äquivalenten Funktionalableitungen der Gesamtenergie H und der Gesamtentropie S folgendermaßen beschreiben:

$$\Delta^G H = \begin{bmatrix} -\text{Div} \left(\mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}} \mathcal{S}_{\frac{1}{2}} \right) \\ \text{D}_{\|\mathbf{p}\|^2} \mathcal{T} \cdot 2 \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} \\ \theta_{\frac{1}{2}} \\ - \left[\Gamma_{\frac{1}{2}} \right]_{vn3} \end{bmatrix} \quad \Delta^G S = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{(3 \times 1)} \\ \mathbf{0}^{(3 \times 1)} \\ \text{D}_s s \\ \mathbf{0}^{(6 \times 1)} \end{bmatrix} \quad (4.133)$$

Der Spannungstensor $\mathcal{S}_{\frac{1}{2}}$, die Temperatur $\theta_{\frac{1}{2}}$ und der inelastische Spannungstensor $\Gamma_{\frac{1}{2}}$ werden definiert als:

$$\mathcal{S}_{\frac{1}{2}} = 2 \text{D}_c e \quad \theta_{\frac{1}{2}} = \text{D}_s e \quad \Gamma_{\frac{1}{2}} = -\text{D}_{C_i} e \quad (4.134)$$

Die Matrix \mathbf{M}^{vis} wird mit der inneren Dissipation $D_{\frac{1}{2}}^{int}$ nach Gl. (4.125) ausgewertet. Der Wärmeflussvektor $\mathbf{Q}_{\frac{1}{2}}$ aus der Matrix \mathbf{M} muss für den erweiterten TC Integrator abgeändert werden. Diese Änderung erfolgt durch den isotropen Wärmeflussvektor:

$$\boldsymbol{\kappa}_{\frac{1}{2}} = \kappa \sqrt{\det \mathbf{C}_{n+\frac{1}{2}}} \mathbf{C}_{n+\frac{1}{2}}^{-1} \quad (4.135)$$

Beweis 4.6.1 *An dieser Stelle wird die Überführung von Gl. (4.130)₁ zu Gl. (4.130)₃ für das Funktional der Gesamtenergie H durchgeführt:*

$$\begin{bmatrix} -\text{Div} \left(\mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}} \mathcal{S}_{\frac{1}{2}} \right) \\ \text{D}_{\|\mathbf{p}\|^2} \mathcal{T} \cdot 2 \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} \\ \theta_{\frac{1}{2}} \\ - \left[\Gamma_{\frac{1}{2}} \right]_{vn3} \end{bmatrix} \cdot [\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n] = \begin{bmatrix} [\text{D}_c e]_{vn3} \\ \text{D}_{\|\mathbf{p}\|^2} \mathcal{T} \\ \theta_{\frac{1}{2}} \\ [\text{D}_{C_i} e]_{vn3} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \left[2 \mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}}^T \text{Grad} (\boldsymbol{\varphi}_{n+1} - \boldsymbol{\varphi}_n) \right]_{vn1} \\ 2 \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} \cdot (\mathbf{p}_{n+1} - \mathbf{p}_n) \\ s_{n+1} - s_n \\ [C_{i_{n+1}} - C_{i_n}]_{vn1} \end{bmatrix} \quad (4.136)$$

Es zeigt sich, dass der letzte Vektor der rechten Seite aus Gl. (4.136) die Differenz der Invarianten beinhaltet:

$$\begin{aligned}
 \left[2 \mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}}^T \text{Grad} (\boldsymbol{\varphi}_{n+1} - \boldsymbol{\varphi}_n) \right]^{sym} &= \left[2 \mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}}^T (\mathcal{F}_{n+1} - \mathcal{F}_n) \right]^{sym} \\
 &= \mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}}^T (\mathcal{F}_{n+1} - \mathcal{F}_n) + (\mathcal{F}_{n+1}^T - \mathcal{F}_n^T) \mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}} \\
 &= \mathcal{F}_{n+1}^T \mathcal{F}_{n+1} - \mathcal{F}_n^T \mathcal{F}_n
 \end{aligned} \tag{4.137}$$

Weiterhin gilt:

$$\begin{aligned}
 2 \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} \cdot (\mathbf{p}_{n+1} - \mathbf{p}_n) &= (\mathbf{p}_{n+1} - \mathbf{p}_n) \cdot (\mathbf{p}_{n+1} - \mathbf{p}_n) \\
 &= \mathbf{p}_{n+1} \cdot \mathbf{p}_{n+1} - \mathbf{p}_n \cdot \mathbf{p}_n
 \end{aligned} \tag{4.138}$$

Partitionierte diskrete Gradienten

Die partitionierten diskreten Gradienten der kinetischen Energie $D_{\|\mathbf{p}\|^2} \mathcal{T}$ und der Entropie $D_s s$ sind lediglich von einer Invarianten (π_2 bzw. π_3) abhängig. Für diesen Fall wird die Rechenvorschrift aus dem Anhangkapitel B.3.1 verwendet. Die Invarianten sind außerdem skalare Größen und liefern die folgenden partitionierten diskreten Gradienten:

$$D_{\pi_2} \mathcal{T} = \frac{\mathcal{T}(\pi_{2n+1}) - \mathcal{T}(\pi_{2n})}{\pi_{2n+1} - \pi_{2n}} \quad D_{\pi_3} s = \frac{s_{n+1} - s_n}{\pi_{3n+1} - \pi_{3n}} \tag{4.139}$$

Durch die Definition der kinetischen Energie aus Gl. (4.25) und der Invarianten $\pi_3 = s$ folgen zeitlich konstante Werte für die partitionierten diskreten Gradienten:

$$D_{\|\mathbf{p}\|^2} \mathcal{T} = \frac{1}{2 \rho_0} \quad D_s s = 1 \tag{4.140}$$

Die innere Ennergie e ist von den drei Invarianten π_1 , π_3 und π_4 abhängig. Dadurch lassen sich die partitionierten diskreten Gradienten $D_C e$, $D_s e$ und $D_{C_i} e$ durch die Rechenvorschrift aus Anhangkapitel B.3.2 herleiten. Da $\pi_3 = s$ eine skalare Größe darstellt, vereinfacht sich der partitionierte diskrete Gradient $D_s e$. Die partitionierten diskreten Gradienten lauten

$$\begin{aligned}
 D_C e &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial e}{\partial C} (C_{n+\frac{1}{2}}, s_{n+1}, C_{i_{n+1}}) + H_{s_{n+1}, C_{i_{n+1}}} (C_{n+1} - C_n) \right] \\
 &\quad + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial e}{\partial C} (C_{n+\frac{1}{2}}, s_n, C_{i_n}) + H_{s_n, C_{i_n}} (C_{n+1} - C_n) \right]
 \end{aligned} \tag{4.141}$$

$$\begin{aligned}
 D_s e &= \frac{e(C_n, s_{n+1}, C_{i_{n+1}}) - e(C_n, s_n, C_{i_{n+1}})}{2 (s_{n+1} - s_n)} \\
 &\quad + \frac{e(C_{n+1}, s_{n+1}, C_{i_n}) - e(C_{n+1}, s_n, C_{i_n})}{2 (s_{n+1} - s_n)}
 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} D_{C_i} e = & \frac{1}{2} \left[\frac{\partial e}{\partial C_i} \left(C_n, s_n, C_{i_{n+\frac{1}{2}}} \right) + J_{C_n, s_n} \left(C_{i_{n+1}} - C_{i_n} \right) \right] \\ & + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial e}{\partial C_i} \left(C_{n+1}, s_{n+1}, C_{i_{n+\frac{1}{2}}} \right) + J_{C_{n+1}, s_{n+1}} \left(C_{i_{n+1}} - C_{i_n} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.142)$$

mit den verwendeten Abkürzungen:

$$\begin{aligned} H_{(\cdot)} = & \frac{e(C_{n+1}, \cdot) - e(C_n, \cdot) - \frac{\partial e}{\partial C} \left(C_{n+\frac{1}{2}}, \cdot \right) : (C_{n+1} - C_n)}{\|C_{n+1} - C_n\|^2} \\ J_{(\cdot)} = & \frac{e(C_{i_{n+1}}, \cdot) - e(C_{i_n}, \cdot) - \frac{\partial e}{\partial C_i} \left(C_{i_{n+\frac{1}{2}}}, \cdot \right) : (C_{i_{n+1}} - C_{i_n})}{\|C_{i_{n+1}} - C_{i_n}\|^2} \end{aligned} \quad (4.143)$$

Tritt der Spezialfall ein, dass $C_{n+1} = C_n$, $s_{n+1} = s_n$ bzw. $C_{i_{n+1}} = C_{i_n}$ gilt, folgt für die partitionierten diskreten Gradienten der inneren Energie:

$$\begin{aligned} D_C e = & \frac{1}{2} \left[\frac{\partial e}{\partial C} \left(C_{n+\frac{1}{2}}, s_{n+1}, C_{i_{n+1}} \right) + \frac{\partial e}{\partial C} \left(C_{n+\frac{1}{2}}, s_n, C_{i_n} \right) \right] \\ D_s e = & \frac{1}{2} \left[\frac{\partial e}{\partial s} \left(C_n, s_{n+\frac{1}{2}}, C_{i_{n+1}} \right) + \frac{\partial e}{\partial s} \left(C_{n+1}, s_{n+\frac{1}{2}}, C_{i_n} \right) \right] \\ D_{C_i} e = & \frac{1}{2} \left[\frac{\partial e}{\partial C_i} \left(C_n, s_n, C_{i_{n+\frac{1}{2}}} \right) + \frac{\partial e}{\partial C_i} \left(C_{n+1}, s_{n+1}, C_{i_{n+\frac{1}{2}}} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.144)$$

Zusammenfassung der zeitlichen Diskretisierung

Die beiden zuvor verwendeten Integratoren, die Mittelpunktsregel und der erweiterte TC Integrator, liefern die folgenden zeitlich diskreten schwachen Evolutiongleichungen. Die schwachen Bewegungsgleichungen lauten:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_\varphi \cdot \frac{\boldsymbol{\varphi}_{n+1} - \boldsymbol{\varphi}_n}{h_n} = & \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_\varphi \cdot \frac{1}{\rho_0} \mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}} \\ \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_p \cdot \frac{\mathbf{P}_{n+1} - \mathbf{P}_n}{h_n} = & - \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}}^\top \text{Grad } \mathbf{w}_p : \mathcal{S}_{\frac{1}{2}} + \int_{\partial_T \mathcal{B}} \mathbf{w}_p \cdot \mathbf{T}_{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (4.145)$$

Der letzte Term aus Gl. (4.145)₂ bezieht externe Kräfte über den ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungsvektor $\mathbf{T}_{\frac{1}{2}}$ mit ein. Diese externen Kräfte stören die Erhaltungseigenschaften des erweiterten GENERIC Formates. Die zeitlich diskrete schwache thermische Evolutiongleichung führt zu:

$$\int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_s \frac{s_{n+1} - s_n}{h_n} = \int_{\mathcal{B}_0} \left[\text{Grad} \left(\frac{\mathbf{w}_s}{\theta_{\frac{1}{2}}} \right) \cdot \mathcal{K}_{\frac{1}{2}} \theta_{\frac{1}{2}}^2 \text{Grad} \left(\frac{1}{\theta_{\frac{1}{2}}} \right) + \frac{\mathbf{w}_s}{\theta_{\frac{1}{2}}} D_{\frac{1}{2}}^{int} \right] + \int_{\partial_Q \mathcal{B}} \frac{\mathbf{w}_s}{\theta_{\frac{1}{2}}} Q_{\frac{1}{2}} \quad (4.146)$$

4. Thermoviskoelastisches Kontinuum

Der letzte Term der Gl. (4.146) bezieht einen externen Wärmefluss $Q_{\frac{1}{2}}$ mit ein. Dieser externe Fluss stört ebenfalls die bereits bekannten Erhaltungseigenschaften des erweiterten GENERIC Formates. Die letzte Gleichung ist die zeitlich diskrete viskose Evolutionsgleichung:

$$\int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_{C_i} : \frac{C_{i_{n+1}} - C_{i_n}}{h_n} = \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_{C_i} : 2 C_{i_{n+\frac{1}{2}}} \mathbb{V}^{-1} : 2 C_{i_{n+\frac{1}{2}}} \Gamma_{\frac{1}{2}} \quad (4.147)$$

Die Mittelpunktsregel wird durch den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor $S_{\frac{1}{2}}$, den inelastischen Spannungstensor $\Gamma_{\frac{1}{2}}$ aus Gl. (4.127), der Temperatur $\theta_{\frac{1}{2}}$ aus Gl. (4.122)₂ und der inneren Dissipation $D_{\frac{1}{2}}^{int}$ aus Gl. (4.125) gebildet. Der rechte Cauchy-Green-Tensor $C_{\frac{1}{2}}$ wird nach Gl. (4.124) ausgewertet. Der isotrope Wärmeleitfähigkeitstensor $\mathcal{K}_{\frac{1}{2}}$ ist durch Gl. (4.123) gegeben.

Der erweiterte TC Integrator liefert diese Einträge durch die Gl. (4.134), Gl. (4.135) und Gl. (4.125).

Thermische Zwangsbedingung

Die thermische Zwangsbedingung wird am Knotenpunkt $n + 1$ der zeitlichen Diskretisierung ausgewertet:

$$\phi_{n+1} = \theta_{n+1} - \bar{\theta} \quad (4.148)$$

Die Matrix und der Vektor aus Gl. (4.116) lauten im zeitlich Diskreten:

$$\mathbf{L}^\lambda = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 1} & \mathbf{0}^{6 \times 6} \\ \mathbf{0}^{1 \times 6} & -\lambda_{n,n+1} & \mathbf{0}^{1 \times 6} \\ \mathbf{0}^{6 \times 6} & \mathbf{0}^{6 \times 1} & \mathbf{0}^{6 \times 6} \end{bmatrix} \quad \Delta \phi = \Delta^G \phi = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{6 \times 1} \\ 1 \\ \mathbf{0}^{6 \times 1} \end{bmatrix} \quad (4.149)$$

Die Ableitungen der Zwangsbedingung für die Mittelpunktsregel $\Delta \phi$ und den erweiterten TC Integrator $\Delta^G \phi$ sind indentisch. Die Ableitungen stellen einen konstanten Vektor dar, der von der Zeit unabhängig ist. Die Lagrangeschen Multiplikatoren $\lambda_{n,n+1}$ sind über den Zeitschritt konstant.

Die diskrete schwache Evolutionsgleichung für die Mittelpunktsregel aus Gl. (4.119)₂ wird mit dem Term

$$\int_{\partial_\lambda \mathcal{B}} \mathbf{w}_z \cdot \mathbf{L}^\lambda \Delta \phi = - \int_{\partial_\lambda \mathcal{B}} \mathbf{w}_s \lambda_{n,n+1} \quad (4.150)$$

erweitert und die Gl. (4.129)₂ wird für eine thermische Zwangsbedingung mit folgendem Term addiert:

$$\int_{\partial_\lambda \mathcal{B}} \mathbf{w}_z \cdot \mathbf{L}^\lambda \Delta^G \phi = - \int_{\partial_\lambda \mathcal{B}} \mathbf{w}_s \lambda_{n,n+1} \quad (4.151)$$

Für die semidiskrete schwache thermische Evolutionsgleichung folgt unter Verwendung der thermischen Zwangsbedingungen:

$$\int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_s \frac{s_{n+1} - s_n}{h_n} = \int_{\mathcal{B}_0} \left[\text{Grad} \left(\frac{\mathbf{w}_s}{\theta_{\frac{1}{2}}} \right) \cdot \mathcal{K}_{\frac{1}{2}} \theta_{\frac{1}{2}}^2 \text{Grad} \left(\frac{1}{\theta_{\frac{1}{2}}} \right) + \frac{\mathbf{w}_s}{\theta_{\frac{1}{2}}} D_{\frac{1}{2}}^{int} \right] + \int_{\partial_Q \mathcal{B}} \frac{\mathbf{w}_s}{\theta_{\frac{1}{2}}} Q_{\frac{1}{2}} - \int_{\partial_\lambda \mathcal{B}} \mathbf{w}_s \lambda_{n,n+1} \quad (4.152)$$

4.6.2. Räumliche Diskretisierung

Die räumliche Diskretisierung der Evolutionsgleichungen erfolgt durch die Methode der finiten Elemente (s. Wriggers [112]) und wird nach der zeitlichen Diskretisierung durchgeführt. Dazu wird das Gebiet \mathcal{B} durch ein Gebiet $\Omega_e \subset \mathcal{B}^h \approx \mathcal{B}$ approximiert und dieses in n_e Elemente $\Omega_e \subset \mathcal{B}^h$ aufgeteilt:

$$\mathcal{B}^h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \Omega_e \quad (4.153)$$

Der Rand des Gebietes \mathcal{B}^h wird mit $\partial \mathcal{B}^h$ bezeichnet und setzt sich aus den Randelementen $\partial \Omega_e$ zusammen:

$$\partial \mathcal{B}^h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \partial \Omega_e \quad (4.154)$$

Im dreidimensionalen Fall bilden die Randelemente $\partial \Omega_e$ die Oberflächen des Kontinuums \mathcal{B}^h ab. Die Elemente Ω_e dürfen sich dabei nicht durchdringen (s. Abbildung 4.7).

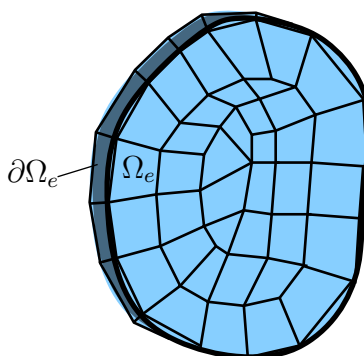


Abbildung 4.7.: Räumlich diskretisiertes Kontinuum mit Hilfe der FEM

Bei der Finite-Elemente-Methode werden Ansätze für die Feldgrößen und die Geometrie des Kontinuums verwendet. Wird das isoparametrische Konzept gewählt, werden sowohl die Feldgrößen als auch die Geometrie mit den gleichen Ansatzfunktionen approximiert. Diese Ansatzfunktionen sind auf dem Referenzelement Ω_\square definiert. Abbildung 4.8 stellt

den Zusammenhang des Referenzelementes Ω_{\square} mit einem Element aus der Referenzkonfiguration $\Omega_e^0 \subset \mathcal{B}_0^h$, und einem Element aus der Momentankonfiguration $\Omega_e^t \subset \mathcal{B}_t^h$ dar.

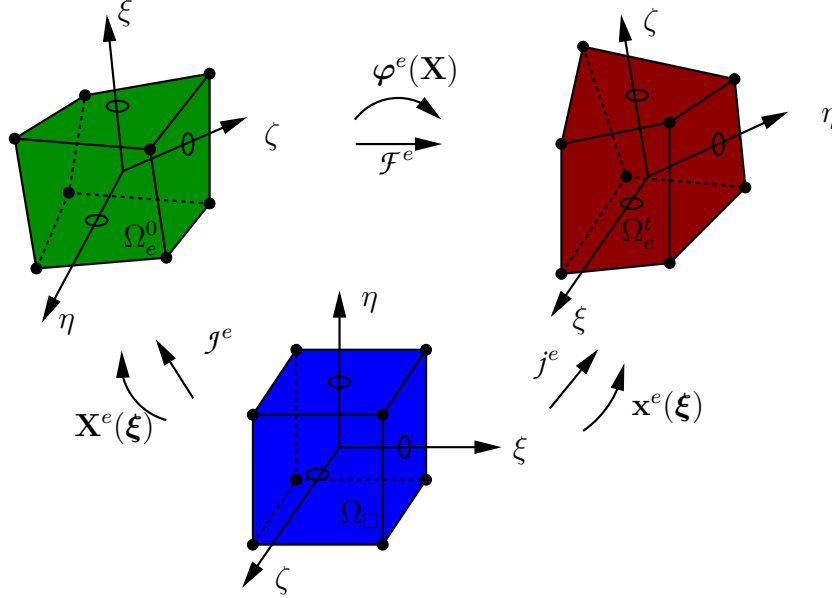


Abbildung 4.8.: Abbildung des Referenzelementes in ein Element der Referenzkonfiguration und der Momentankonfiguration

Durch die Einführung des Referenzelementes kann die Geometrie des Kontinuums sowohl in der Referenzkonfiguration \mathbf{X} als auch in der Momentankonfiguration φ durch die approximierten Größen \mathbf{X}^e und \mathbf{x}^e beschrieben werden:

$$\mathbf{X}^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A \mathbf{X}^{eA} \quad \mathbf{x}^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A \mathbf{x}^{eA} \quad (4.155)$$

Die approximierten Größen \mathbf{X}^e und \mathbf{x}^e werden durch die Summe der Ansatzfunktionen $N^A(\boldsymbol{\xi})$ und der zugehörigen Knotenvektoren \mathbf{X}^{eA} und \mathbf{x}^{eA} bestimmt. n_{af} gibt die Anzahl der Ansatzfunktionen wieder. Das Koordinatensystem des Referenzelementes ist durch $\boldsymbol{\xi} = [\xi, \eta, \zeta]$ gegeben. Feldgrößen, wie der Impulsvektor \mathbf{p} und die Entropie s , werden analog durch die Ansatzfunktionen N^A und ihre Knotenvektoren \mathbf{p}^{eA} und s^{eA} angenähert:

$$\mathbf{p}^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A \mathbf{p}^{eA} \quad s^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A s^{eA} \quad (4.156)$$

Weiterhin werden die Testfunktionen \mathbf{w}_φ , \mathbf{w}_p und w_s approximiert mit:

$$\mathbf{w}_\varphi^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A \mathbf{w}_\varphi^{eA} \quad \mathbf{w}_p^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A \mathbf{w}_p^{eA} \quad w_s^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A w_s^{eA} \quad (4.157)$$

Zur einfacheren Darstellung wird nicht zwischen freien und durch Randbedingungen festgehaltenen Raumknoten unterschieden.

Die viskose Testfunktion w_{c_i} und die interne Variable C_i werden auf der Elementebene berechnet. Daher ist hier keine räumliche Approximation notwendig. Da diese Variablen jedoch durch approximierte Größen elementweise berechnet werden, wird die Testfunktion im Weiteren durch $w_{C_i}^e$ und die interne Variable durch C_i^e beschrieben.

Der Deformationgradient \mathcal{F}^e kann durch die Gradienten des Referenzelementes räumlich diskretisiert werden:

$$\mathcal{F}^e = j^e \mathcal{J}^{e^{-1}} \quad (4.158)$$

Die Gradienten sind folgendermaßen definiert:

$$\mathcal{J}^e = \frac{\partial \mathbf{X}^e}{\partial \boldsymbol{\xi}} \quad j^e = \frac{\partial \mathbf{x}^e}{\partial \boldsymbol{\xi}} \quad (4.159)$$

Alle weiteren Größen können durch die bereits bekannten Größen berechnet werden und werden mit einem $[\cdot]^e$ gekennzeichnet. Zur vollständigen räumlichen Diskretisierung fehlt nur die Überführung des Integrals im Referenzgebiet \mathcal{B}_0 in das Integral im Referenzelement Ω_\square :

$$\int_{\mathcal{B}_0} g(\mathbf{X}) \approx \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_e} g^e(\mathbf{X}^e) = \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_\square} g^e(\boldsymbol{\xi}) \det \mathcal{J}^e \quad (4.160)$$

Das erweiterte GENERIC Format kann für die räumliche Diskretisierung gezeigt werden. Der Zustandsvektor besteht hierbei aus den Knotenvektoren des Positionsvektor \mathbf{x}^{eA} , dem Impulsvektor \mathbf{p}^{eA} , der Entropie s^{eA} und der internen Variable $[C_i^e]_{vn1}$:

$$\mathbf{z}^{eA} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{eA} \\ \mathbf{p}^{eA} \\ s^{eA} \\ [C_i^e]_{vn1} \end{bmatrix} \quad (4.161)$$

Die schwachen räumlich diskreten Evolutionsgleichungen lassen sich aus der Energiebilanz bestimmen:

$$\begin{aligned} \dot{H} &= \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_\square} \mathbf{w}_z^{eA} \cdot \dot{\mathbf{z}}^{eA} \det \mathcal{J}^e \\ &= \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_\square} \mathbf{w}_z^{eA} \cdot ([\mathbf{L}^e + \mathbf{L}^{vis^e}] \delta_{z^{eA}} H + [\mathbf{M}^e + \mathbf{M}^{vis^e}] \delta_{z^{eA}} S) \det \mathcal{J}^e \end{aligned} \quad (4.162)$$

Die Matrizen \mathbf{L}^e und \mathbf{L}^{vis^e} sowie \mathbf{M}^e und \mathbf{M}^{vis^e} werden nicht aufgeführt, da hier lediglich die zuvor dargestellten Approximationen in die bereits bekannten Matrizen aus Gl.

4. Thermoviskoelastisches Kontinuum

(4.102) und Gl. (4.103) eingesetzt werden. Die Funktionalableitungen der Gesamtenergie H und der Gesamtentropie S nach dem Knotenvektor \mathbf{z}^{eA} lauten:

$$\delta_{z^{eA}} H = \begin{bmatrix} \mathcal{S}^e : \mathbb{B}^{eA} \\ \frac{1}{\rho_0} \mathbf{p}^e N^A \\ \theta^{eA} \\ - [\Gamma^e]_{vn3} \end{bmatrix} \quad \delta_{z^{eA}} S = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^{3 \times 1} \\ \mathbf{0}^{3 \times 1} \\ N^A \\ \mathbf{0}^{6 \times 1} \end{bmatrix} \quad (4.163)$$

Die dreistufigen Tensoren \mathbb{B}^{eA} und \mathbb{B}^{eAT} werden durch die Ableitungen der Formfunktionen N^A und den Deformationstensor \mathcal{F}^e definiert:

$$\mathbb{B}^{eA} = \text{Grad } N^A \otimes \mathcal{F}^{eT} \quad \mathbb{B}^{eAT} = \mathcal{F}^e \otimes \text{Grad } N^A \quad (4.164)$$

Die Testfunktionen $\mathbf{w}_{z^{eA}}$ bestehen aus den folgenden Knotenvektoren:

$$\mathbf{w}_z^{eA} = \begin{bmatrix} -\dot{\mathbf{p}}^{eA} \\ \dot{\mathbf{x}}^{eA} \\ \theta^{eA} \\ - [\Gamma^e]_{vn3} \end{bmatrix} \quad (4.165)$$

Bemerkung 4.6.1 Die Approximation der Testfunktion w_s stellt ein Problem dar. Nach Gl. (4.112)) entspricht die Testfunktion w_s der Temperatur θ . Die Temperatur θ stellt eine Größe dar, die nicht räumlich approximiert wird und am Gausspunkt berechnet wird. Das bedeutet, dass diese Testfunktion in den Testraum projiziert werden muss, damit Gl. (4.157)₃ zutrifft. Diese projizierte Größe wird in Anlehnung an die Temperatur θ^p genannt und wird wie folgt definiert:

$$\theta^p = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A \theta^{p^{eA}} \quad (4.166)$$

Die projizierte Temperatur θ^p entsteht aus einer zusätzlichen Gleichung, der Projektion, die hier zunächst nur zeitlich diskret beschrieben wird:

$$\int_{B_0} \mathbf{w}_{\theta^p} \theta_{\frac{1}{2}}^p = \int_{B_0} \mathbf{w}_{\theta^p} \theta_{\frac{1}{2}} \quad (4.167)$$

Die Projektion wurde bereits in den Arbeiten von Romero [91] und Denzer [17] verwendet. Die Testfunktion \mathbf{w}_{θ^p} der Projektion muss der Entropierate

$$\mathbf{w}_{\theta^p} = -\frac{s_{n+1} - s_n}{h_n} \quad (4.168)$$

entsprechen und kann somit analog zur projizierten Temperatur θ^{pe} approximiert werden als:

$$w_{\theta^p}^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A w_{\theta^p}^{eA} \quad (4.169)$$

Neumann-Randbedingungen

Die mechanischen Neumann-Ränder $\partial\mathcal{B}_T$ und die thermischen Neumann-Ränder $\partial\mathcal{B}_Q$ werden durch sogenannte Randintegrale aufgebracht. Dabei werden die mechanischen Neumann-Ränder über die externen Kräfte $\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{exteA}$ in die Bewegungsgleichungen mit eingebunden. Die externen Kräfte $\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{exteA}$ sind durch den ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungsvektor $\mathbf{T}_{\frac{1}{2}}^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A \mathbf{T}_{\frac{1}{2}}^{eA}$ gegeben, der mit den Ansatzfunktionen N^A approximiert wird:

$$\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{exteA} = \sum_{B=1}^{n_{af}} H_r^{AB} \mathbf{T}_{\frac{1}{2}}^{eB} \quad (4.170)$$

Die thermischen Neumann-Ränder werden, analog zu den externen Kräften, durch den externen Wärmefluss $Q_{\frac{1}{2}}^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A Q_{\frac{1}{2}}^{eA}$ in die thermische Evolutionsgleichung eingebunden:

$$T_{\frac{1}{2}}^{exteA} = \sum_{B=1}^{n_{af}} \int_{\partial\Omega_{\square}} \frac{1}{\theta_{\frac{1}{2}}^{pe}} N^A N^B \det \mathcal{J}_r^e Q_{\frac{1}{2}}^{eB} \quad (4.171)$$

Das Randintegral über die Ansatzfunktionen N^A wird definiert als:

$$H_r^{AB} = \int_{\partial\Omega_{\square}} N^A N^B \det \mathcal{J}_r^e \quad (4.172)$$

Dabei ist die Jacobideterminante des Randintegrals $\det \mathcal{J}_r^e$ nach Wriggers [112] mit folgender Rechenvorschrift gegeben:

$$\det \mathcal{J}_r^e = \|\mathbf{X}_{,\xi}^e \times \mathbf{X}_{,\eta}^e\| \quad (4.173)$$

Dirichlet-Randbedingungen

Werden mechanische Dirichlet-Ränder $\partial\mathcal{B}_{\varphi}$ mit $\mathbf{x}^{eA} = \bar{\mathbf{x}}^{eA}$ betrachtet, lässt sich die Lösung des Systems durch ein reduziertes System berechnen. Das reduzierte System löst lediglich die freien (unbelasteten) Knoten. Wird als Vorgabe für die Dirichlet-Ränder die Verschiebung $\mathbf{u}^{eA} = \mathbf{0}$ gewählt, so werden sowohl die Verschiebung $\mathbf{x}_{n+1}^{eB} - \mathbf{x}_n^{eB}$ als auch die Impulsdifferenz $\mathbf{p}_{n+1}^{eB} - \mathbf{p}_n^{eB}$ an diesen Knoten zu null. Dem thermoviskoelastischen System wird durch diese mechanischen Dirichlet-Ränder keine Energie zu- oder abgeführt.

4. Thermoviskoelastisches Kontinuum

Zur Einführung von thermischen Rändern $\partial\mathcal{B}_\lambda$ werden Lagrangesche Multiplikatoren $\lambda_{n,n+1}^{eA}$ verwendet, um die projizierten momentanen Temperaturen

$$\theta_{n+1}^{peA} = (H^{AB})^{-1} \int_{\Omega_\square} N^B \theta^e(\varphi_{n+1}^e, s_{n+1}^e) \det \mathcal{J}^e \quad (4.174)$$

zu bedingen. Da diese Temperaturen am Knotenpunkt und nicht über den gesamten Rand des Kontinuums beeinflusst werden, reduziert sich die integrale Schreibweise aus Gl. (4.150) und Gl. (4.151) auf die Summe über die Knoten. Die zugehörigen Lagrange-schen Multiplikatoren werden als zusätzliche Variablen in das System eingeführt.

Die Zwangsbedingungen zur Vorgabe der projizierten Temperaturen lauten:

$$\phi_{n+1}^{eA} = \theta_{n+1}^{peA} - \bar{\theta}^{eA} = 0 \quad (4.175)$$

Die thermischen Zwangslasten Z^{eA} bestehen somit lediglich aus den Lagrangeschen Multiplikatoren:

$$\begin{aligned} Z_{\frac{1}{2}}^{eA} &= \lambda_{n,n+1}^{eC} \delta^{CA} \\ &= \lambda_{n,n+1}^{eA} \end{aligned} \quad (4.176)$$

Diese thermischen Zwangslasten werden von der bereits bekannten thermischen Gleichung subtrahiert.

Zeitlich und räumlich diskretisierte schwache Evolutionsgleichungen

Nach der zeitlichen und räumlichen Diskretisierung werden hier die vollständig diskretisierten schwachen Evolutionsgleichungen aufgeführt. Es folgen zunächst die diskretisierten schwachen Bewegungsgleichungen:

$$\begin{aligned} \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_\varphi^{eA} \cdot H^{AB} \frac{\mathbf{x}_{n+1}^{eB} - \mathbf{x}_n^{eB}}{h_n} &= \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_\varphi^{eA} \cdot M_{\rho_0^{-1}}^{AB} \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{eB} \\ \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_p^{eA} \cdot H^{AB} \frac{\mathbf{p}_{n+1}^{eB} - \mathbf{p}_n^{eB}}{h_n} &= \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_p^{eA} \cdot \left(\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}} - \mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} \right) \end{aligned} \quad (4.177)$$

Die internen Kräfte $\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}}$ entsprechen der doppelten Kontraktion zwischen dem dreistufigen Tensor $\mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eAT}$ und dem zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor $\mathcal{S}_{\frac{1}{2}}^e$ integriert über das Referenzelement Ω_\square :

$$\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} = \int_{\Omega_\square} \mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eAT} : \mathcal{S}_{\frac{1}{2}}^e \det \mathcal{J}^e \quad (4.178)$$

Die Raumintegrale des Referenzelementes über die Ansatzfunktionen N^A werden definiert als:

$$H^{AB} = \int_{\Omega_{\square}} N^A N^B \det \mathcal{J}^e \quad M_{\rho_0}^{AB} = \frac{1}{\rho_0} H^{AB} \quad (4.179)$$

Geeignete diskrete Testfunktionen für die Bewegungsgleichungen sind:

$$\mathbf{w}_{\varphi}^{eA} = -\frac{\mathbf{P}_{n+1}^{eA} - \mathbf{P}_n^{eA}}{h_n} \quad \mathbf{w}_p^{eA} = \frac{\mathbf{x}_{n+1}^{eA} - \mathbf{x}_n^{eA}}{h_n} \quad (4.180)$$

Analog zu den diskreten schwachen Bewegungsgleichungen lässt sich die diskrete schwache thermische Evolutionsgleichung in einen internen und einen externen Anteil aufteilen:

$$\bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_s^{eA} H^{AB} \frac{s_{n+1}^{eB} - s_n^{eB}}{h_n} = \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_s^{eA} \left(T_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}} - T_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} \right) \quad (4.181)$$

Der interne Anteil $T_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}}$ wird durch die projizierte Temperatur $\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}$ beschrieben:

$$T_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} = \int_{\Omega_{\square}} \left[\left[\frac{\text{Grad } N^A}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} - \frac{N^A}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^{e2}}} \text{Grad } \theta_{\frac{1}{2}}^{p^e} \right] \cdot \mathcal{K}_{\frac{1}{2}}^e \text{Grad } \theta_{\frac{1}{2}}^{p^e} - \frac{N^A}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} D_{\frac{1}{2}}^{int^e} \right] \det \mathcal{J}^e \quad (4.182)$$

Sie wird durch die später folgende Projektionsgleichung berechnet. Die diskrete Testfunktion für die diskrete thermische Evolutionsgleichung \mathbf{w}_s^{eA} wird durch die projizierte Temperatur $\theta_{\frac{1}{2}}^{p^{eA}}$ gebildet:

$$\mathbf{w}_s^{eA} = \theta_{\frac{1}{2}}^{p^{eA}} \quad (4.183)$$

Durch die vierte diskrete schwache Gleichung, die diskrete Projektion, besteht ein Zusammenhang zwischen der projizierten Temperatur am Raumknoten $\theta_{\frac{1}{2}}^{p^{eA}}$ und den Temperaturen $\theta_{\frac{1}{2}}^e$ am Gaußpunkt:

$$\bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_{\theta^p}^{eA} H^{AB} \theta_{\frac{1}{2}}^{p^{eB}} = \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_{\theta^p}^{eA} \int_{\Omega_{\square}} N^A \theta_{\frac{1}{2}}^e \det \mathcal{J}^e \quad (4.184)$$

Wie in Gl. (4.168) bereits erläutert, besteht die Testfunktion $\mathbf{w}_{\theta^p}^{eA}$ aus der Differenz der Entropien:

$$\mathbf{w}_{\theta^p}^{eA} = -\frac{s_{n+1}^{eA} - s_n^{eA}}{h_n} \quad (4.185)$$

Somit unterscheidet sich der linke Term der Projektion (4.184) von dem linken Term der diskreten thermischen Evolutionsgleichung (4.181) durch das negative Vorzeichen.

4. Thermoviskoelastisches Kontinuum

Die diskrete viskose Evolutionsgleichung wird lediglich ins Referenzelement überführt

$$\bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_\square} \mathbf{w}_{C_i}^e : \frac{C_{i_{n+1}}^e - C_{i_n}^e}{h_n} = \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_\square} \mathbf{w}_{C_i}^e : 2 C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e \mathbb{V}^{-1^e} : 2 C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e \Gamma_{\frac{1}{2}}^e \quad (4.186)$$

mit den diskreten Testfunktionen $\mathbf{w}_{C_i}^e = -\Gamma_{\frac{1}{2}}^e$.

Bemerkung 4.6.2 Die thermischen Zwangsbedingungen auf die Knotenpunkte θ_{n+1}^{eA} werden durch die Zwangslasten $Z_{\frac{1}{2}}^{eA}$ in die diskrete thermische Evolutionsgleichung (4.181) integriert:

$$\bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_s^{eA} H^{AB} \frac{s_{n+1}^{eB} - s_n^{eB}}{h_n} = \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_s^{eA} \left(T_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}} - T_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} - Z_{\frac{1}{2}}^{eA} \right) \quad (4.187)$$

Die Langrangeschen Multiplikatoren $\lambda_{n,n+1}^{eA}$ liefern eine weitere zu lösende algebraische Gleichungen:

$$\bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_\lambda^{eA} \phi_{n+1}^{eA} = 0 \quad (4.188)$$

Hierbei ist $\mathbf{w}_\lambda^{eA} = \lambda_{n,n+1}^{eA}$ die Testfunktion.

Bemerkung 4.6.3 Die Integrale über das Referenzelement werden numerisch durch die Anwendung der Gaußschen Quadraturregel gelöst. Das Integral über das Referenzelement bzw. den Rand des Referenzelementes werden in eine Summe überführt:

$$\begin{aligned} \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_\square} g^e(\boldsymbol{\xi}) \det \mathcal{J}^e &\approx \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{P=1}^{n_p} g^e(\boldsymbol{\xi}^P) \det \mathcal{J}^e(\boldsymbol{\xi}^P) w^P \\ \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\partial\Omega_\square} f^e(\boldsymbol{\xi}) \det \mathcal{J}_r^e &\approx \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{P=1}^{n_p} f^e(\boldsymbol{\xi}^P) \det \mathcal{J}_r^e(\boldsymbol{\xi}^P) w^P \end{aligned} \quad (4.189)$$

Dabei beschreibt n_p die Anzahl der Gaußpunkte, $\boldsymbol{\xi}^P = [\xi^P, \eta^P, \zeta^P]$ sind die vorgegebenen Stützstellen und w^P sind die zugehörigen Wichtungen.

Werden isoparametrische 8-Knotenelemente für das räumliche Element und 4-Knotenelemente über den Rand verwendet, dann können Polynome des Grades $m = 3$ exakt integriert werden. Diese lassen sich aus den Stützstellen pro Dimension $n_d = n + 1$ berechnen. In diesem Fall ist $n_d = 2 \rightarrow n = 1$. Der exakt zu integrierende Polynomgrad folgt aus $m \leq 2n + 1$.

Bemerkung 4.6.4 Zur Lösung der impliziten nichtlinearen diskreten schwachen Evolutionsgleichungen sowie der diskreten schwachen Projektion wird das in Kapitel 2.3.3 erläuterte Newton-Raphson-Verfahren verwendet. Die aus diesen Gleichungen resultierenden Residuen und deren Tangentenmatrizen sowie die Abbruchkriterien werden im Anhangkapitel C.4 sowohl für die Mittelpunktsregel als auch den erweiterten TC Integrator erläutert.

4.6.3. Algorithmische strukturelle Eigenschaften

Die strukturellen Eigenschaften wie die Impulsbilanz, die Drehimpulsbilanz, die Energiebilanz, die stetig ansteigende Entropie und die stetig abfallende Lyapunov-Funktion werden nach der Diskretisierung in Zeit und Raum noch einmal untersucht. Hierbei wird veranschaulicht, welcher Integrator (Mittelpunktsregel oder TC Integrator) die strukturellen Eigenschaften besser wiedergeben kann.

Impulsbilanz

Für die Impulsbilanz lässt sich folgende diskrete Version zeigen:

$$\mathbf{L}_{n+1} - \mathbf{L}_n = \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_\square} (\mathbf{p}_{n+1}^e - \mathbf{p}_n^e) \det \mathcal{J}^e \quad (4.190)$$

Werden zusätzliche Ansatzfunktionen $\sum_{A=1}^{n_{af}} N^A = 1$ eingefügt, liefert dies die Multiplikation von H^{AB} und den Knotenvektoren des Impulses \mathbf{p}^{eB} :

$$\mathbf{L}_{n+1} - \mathbf{L}_n = \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A,B=1}^{n_{af}} H^{AB} (\mathbf{p}_{n+1}^{eB} - \mathbf{p}_n^{eB}) \quad (4.191)$$

Die zweite diskrete schwache Bewegungsgleichung (4.177)₂ wird eingesetzt und es resultiert:

$$\mathbf{L}_{n+1} - \mathbf{L}_n = \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} h_n \left(\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{exteA} - \mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{inteA} \right) \quad (4.192)$$

Durch die Summe der internen Kräfte folgt:

$$\sum_{A=1}^{n_{af}} \mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{inteA} = \int_{\Omega_\square} \mathcal{F}^e \otimes \left(\sum_{A=1}^{n_{af}} N^A, \mathbf{X} \right) : \mathcal{S}_{\frac{1}{2}}^e \det \mathcal{J}^e = \mathbf{0} \quad (4.193)$$

An dieser Stelle wird nochmals die Beziehung $\sum_{A=1}^{n_{af}} N^A = 1$ ausgenutzt. Die diskrete Impulsbilanz liefert dadurch:

$$\mathbf{L}_{n+1} - \mathbf{L}_n = \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} h_n \mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{exteA} \quad (4.194)$$

Greifen keine äußeren Kräfte $\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}}$ am Kontinuum an, so ist der diskrete Impuls erhaltend $\mathbf{L}_{n+1} - \mathbf{L}_n = \mathbf{0}$.

Drehimpulsbilanz

Für den Beweis der Drehimpulserhaltung wird zunächst der Drehimpuls für den Zeitschritt $n + 1$ aufgestellt:

$$\mathbf{J}_{n+1} = \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_{\square}} \mathbf{x}_{n+1}^e \times \mathbf{p}_{n+1}^e \det \mathcal{J}^e \quad (4.195)$$

Werden die Approximationen für den Positionsvektor \mathbf{x}_{n+1}^e und den Impulsvektor \mathbf{p}_{n+1}^e eingesetzt, liefert dies:

$$\mathbf{J}_{n+1} = \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A,B=1}^{n_{af}} H^{AB} \mathbf{x}_{n+1}^{eA} \times \mathbf{p}_{n+1}^{eB} \quad (4.196)$$

Werden nacheinander die diskreten schwachen Bewegungsgleichungen aus Gl. (4.177)₁ und Gl. (4.177)₂ eingesetzt, dann folgt:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{n+1} &= \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \frac{h_n}{2} M_{\rho_0}^{AB} \mathbf{p}_n^{eA} \times \mathbf{p}_{n+1}^{eB} + H^{AB} \mathbf{x}_n^{eA} \times \mathbf{p}_{n+1}^{eB} \\ \mathbf{J}_{n+1} - \mathbf{J}_n &= \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} \left(\mathbf{x}_n^{eA} + \frac{h_n}{2\rho_0} \mathbf{p}_n^{eA} \right) \times h_n \left(\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}} - \mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} \right) \end{aligned} \quad (4.197)$$

Durch die Beziehung

$$\frac{h_n}{2\rho_0} \mathbf{p}_n^{eA} \times \left(\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}} - \mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} \right) = \frac{1}{2} \left(\mathbf{x}_{n+1}^{eA} - \mathbf{x}_n^{eA} \right) \times \left(\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}} - \mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} \right) \quad (4.198)$$

kann der Drehimpuls mittels des Positionsvektors am Mittelpunkt $\mathbf{x}_{n+\frac{1}{2}}^{eA}$ beschrieben werden als:

$$\mathbf{J}_{n+1} - \mathbf{J}_n = h_n \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} \mathbf{x}_{n+\frac{1}{2}}^{eA} \times \left(\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}} - \mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} \right) \quad (4.199)$$

Da sich die internen Kräfte $\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}}$ sowohl für die Mittelpunktsregel als auch für den erweiterten TC Integrator wie folgt schreiben lassen

$$\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} = \int_{\Omega_{\square}} N_{,\mathbf{X}}^A \cdot S_{\frac{1}{2}}^e N_{,\mathbf{X}}^B \det \mathcal{J}^e \mathbf{x}_{n+\frac{1}{2}}^{eB} \quad (4.200)$$

gilt für beide Integratoren die Drehimpulserhaltung $\mathbf{J}_{n+1} - \mathbf{J}_n$, wenn keine externen Kräfte $\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}}$ wirken. Das Vektorprodukt des Positionsvektors $\mathbf{x}_{n+\frac{1}{2}}^{eA}$ und $\mathbf{x}_{n+\frac{1}{2}}^{eB}$ wird in Gl. (4.199) zu null.

Energiebilanz

Die algorithmische Energiebilanz lässt sich, wenn das System mechanisch und thermisch isoliert ist, aus der folgenden Gleichung herleiten:

$$H_{n+1} - H_n = \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_\square^e} \mathbf{w}_z^e \cdot (\mathbf{z}_{n+1}^e - \mathbf{z}_n^e) \det \mathcal{J}^e \quad (4.201)$$

Die Testfunktionen \mathbf{w}_z^e entsprechen für die Mittelpunktsregel gerade den im Element ausgewerteten Funktionalableitungen ΔH^e aus Gl. (4.126)₁. Bei dem erweiterten TC Integrator ersetzen die G-äquivarianten Funktionalableitung $\Delta^G H^e$ aus Gl. (4.133)₁ die Testfunktionen. Beide Integratoren geben die im Weiteren gezeigte Struktur der Energiebilanz wieder:

$$\begin{aligned} H_{n+1} - H_n = & \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_\square^e} \left(-\text{Div} \left(\mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}}^e \mathcal{S}_{\frac{1}{2}}^e \right) \cdot (\mathbf{x}_{n+1}^e - \mathbf{x}_n^e) + \frac{1}{\rho_0} \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^e \cdot (\mathbf{p}_{n+1}^e - \mathbf{p}_n^e) \right. \\ & \left. + \theta_{\frac{1}{2}}^{p^e} (s_{n+1}^e - s_n^e) - \Gamma_{\frac{1}{2}}^e : (\mathbf{C}_{i_{n+1}}^e - \mathbf{C}_{i_n}^e) \right) \det \mathcal{J}^e \end{aligned} \quad (4.202)$$

Hierbei ist der zweite Term der rechten Seite gerade die Differenz der kinetischen Energie $\mathcal{T}_{n+1}^e - \mathcal{T}_n^e$. Der dritte Term wird durch die projizierte Temperatur $\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}$ ausgedrückt. Wird die diskrete Projektion aus Gl. (4.184) mit einbezogen, geben die restlichen Terme die Bilanz der inneren Gesamtenergie wieder mit:

$$E_{n+1} - E_n = \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_\square^e} \begin{bmatrix} \left[\frac{1}{2} \mathcal{S}_{\frac{1}{2}}^e \right]_{vn3} \\ \theta_{\frac{1}{2}}^e \\ - \left[\Gamma_{\frac{1}{2}}^e \right]_{vn3} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \left[\mathbf{C}_{n+1}^e - \mathbf{C}_n^e \right]_{vn1} \\ s_{n+1}^e - s_n^e \\ \left[\mathbf{C}_{i_{2n+1}}^e - \mathbf{C}_{i_{2n}}^e \right]_{vn1} \end{bmatrix} \det \mathcal{J}^e \quad (4.203)$$

Die gewählte Energie für das thermoviskoelastische Kontinuum (s. Anhangkapitel C.1) ist in hohem Maße nichtlinear. Die Mittelpunktsregel kann die Bedingung aus Gl. (4.203) nicht erfüllen. Der erweiterte TC Integrator ist für die Gültigkeit dieser Gleichung konstruiert worden (s. Gl. (4.130)). Treten externe Kräfte, wie der ersten Piola-Kirchhoffsche Spannungsvektor $\mathbf{T}_{\frac{1}{2}}^e$, externe thermische Lasten, wie der Wärmefluss $Q_{\frac{1}{2}}^e$ auf, oder werden thermische Zwangsbedingungen in das System eingeführt, dann wird die Energiebilanz gestört und $E_{n+1} \neq E_n$. Für die Gesamtenergiebilanz folgt somit

$$H_{n+1} - H_n = h_n \left(P_{\frac{1}{2}}^{ext} + Q_{\frac{1}{2}} - \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} \theta_{\frac{1}{2}}^{p^{eA}} Z_{\frac{1}{2}}^{eA} \right) \quad (4.204)$$

mit:

$$P_{\frac{1}{2}}^{ext} = \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_p^{eA} \cdot \mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}} \quad Q_{\frac{1}{2}} = \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\partial\Omega_\square^e} \frac{\mathbf{w}_s^e}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} Q_{\frac{1}{2}}^e \det \mathcal{J}_r^e \quad (4.205)$$

Entropiebilanz

Die algorithmische Entropiebilanz kann analog zur Energiebilanz mit den Testfunktionen $\mathbf{w}_{s_z}^e$ aufgestellt werden. Externe Lasten und thermische Zwangsbedingungen werden vernachlässigt und es folgt:

$$S_{n+1} - S_n = \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_{\square}} \mathbf{w}_{s_z}^e \cdot (\mathbf{z}_{n+1}^e - \mathbf{z}_n^e) \det \mathcal{J}^e \quad (4.206)$$

Diese Testfunktionen $\mathbf{w}_{s_z}^e$ entsprechen bei der Mittelpunktsregel gerade den Funktionalableitungen ΔS^e aus Gl. (4.126)₂) und beim erweiterten TC Integrator den G-äquivalenten Funktionalableitungen $\Delta^G S^e$ aus Gl. (4.133)₂). Da beide Integratoren die gleichen Testfunktionen $\mathbf{w}_{s_z}^e$ besitzen, folgt:

$$\begin{aligned} S_{n+1} - S_n &= -h_n \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_{s_z}^{eA} T_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} \\ &= h_n \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_{\square}} \left[\frac{1}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^{e2}}} \text{Grad } \theta_{\frac{1}{2}}^{p^e} \cdot \mathfrak{K}_{\frac{1}{2}}^e \text{Grad } \theta_{\frac{1}{2}}^{p^e} + \frac{1}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} D_{\frac{1}{2}}^{int^e} \right] \det \mathcal{J}^e \quad (4.207) \\ &= h_n \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_{\square}} \frac{1}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} \left(D_{\frac{1}{2}}^{cdu^e} + D_{\frac{1}{2}}^{int^e} \right) \det \mathcal{J}^e \geq 0 \end{aligned}$$

Die algorithmische Entropiebilanz wird durch die projizierte Temperatur $\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}$ berechnet. Beide Integratoren können diese Entropiebilanz erfüllen, dadurch steigt die Entropie stetig an. Treten externe Lasten auf, wird diese Bilanz gestört:

$$\begin{aligned} S_{n+1} - S_n &= -h_n \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} Z_{\frac{1}{2}}^{eA} + h_n \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\partial\Omega_{\square}} \frac{1}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} Q_{\frac{1}{2}}^e \det \mathcal{J}^e \\ &\quad + h_n \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_{\square}} \frac{1}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} \left(D_{\frac{1}{2}}^{cdu^e} + D_{\frac{1}{2}}^{int^e} \right) \det \mathcal{J}^e \quad (4.208) \end{aligned}$$

Lyapunov-Funktion

Die Lyapunov-Funktion wird aus der Bilanz der Energie und Entropie gebildet:

$$V_{n+1} - V_n = H_{n+1} - H_n - \theta_{\infty} (S_{n+1} - S_n) \leq 0 \quad (4.209)$$

Da die Energiebilanz für die Mittelpunktsregel nicht erfüllt werden kann, gilt dies auch für die Lyapunov-Funktion. Der TC Integrator kann somit alle Erhaltungseigenschaften

wiedergeben. Die Lyapunov-Funktion liefert weiterhin:

$$V_{n+1} - V_n = -h_n \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_\square} \frac{\theta_\infty}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} \left(D_{\frac{1}{2}}^{cdu^e} + D_{\frac{1}{2}}^{int^e} \right) \det \mathcal{J}^e \leq 0 \quad (4.210)$$

Treten externe Lasten auf, folgt:

$$\begin{aligned} V_{n+1} - V_n &= h_n P_{\frac{1}{2}}^{ext} + h_n \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\partial\Omega_\square} \left(1 - \frac{\theta_\infty}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} \right) Q_{\frac{1}{2}}^e \det \mathcal{J}^e \\ &\quad - h_n \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} \underbrace{\left(\theta_{\frac{1}{2}}^{p_{\frac{1}{2}}^{eA}} - \theta_\infty \right)}_{\neq \phi_{n+1}^{eA}} Z_{\frac{1}{2}}^{eA} \\ &\quad - h_n \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_\square} \frac{\theta_\infty}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} \left(D_{\frac{1}{2}}^{cdu^e} + D_{\frac{1}{2}}^{int^e} \right) \det \mathcal{J}^e \end{aligned} \quad (4.211)$$

Hierbei wird deutlich, dass der dritte Term der rechten Seite nicht mit der Zwangsbedingung ϕ_{n+1}^{eA} übereinstimmt. Die Testfunktion der thermischen Evolutionsgleichung liefert hier die Temperatur $\theta_{\frac{1}{2}}^{p_{\frac{1}{2}}^{eA}}$, die dem Knotenwert der Temperatur am Mittelpunkt entspricht. Somit kann die Lyapunov-Funktion bei thermischen Zwangsbedingungen nicht erfüllt werden.

5. Numerische Beispiele des Kontinuums

In diesem Kapitel wird die Theorie der vorherigen Kapitel durch numerische Beispiele belegt. Dazu werden vier Beispiele betrachtet: eine thermisch und mechanisch isolierte Scheibe; eine Scheibe mit mechanischen Dirichlet-Rändern und thermischen Zwangsbedingungen; eine Scheibe mit der Belastung von thermischen Neumann-Rändern und einen Anschlagpuffer, der mechanischen Dirichlet- und Neumann-Rändern unterliegt. Hierbei wird das Neo-Hooke Materialmodell (s. Anhangkapitel C.1) verwendet.

5.1. Mechanisch und thermisch isolierte Scheibe

Als erstes Beispiel wird eine thermisch und mechanisch isolierte Scheibe betrachtet, die durch eine Anfangswinkelgeschwindigkeit $\omega_z^0 = 0,33 \frac{1}{s}$ (Drehzahl $n \approx 3,18 \frac{1}{\text{min}}$) in Rotation versetzt wird.

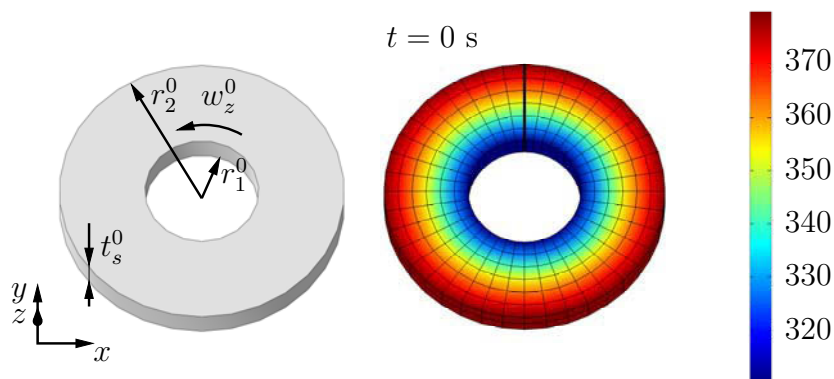


Abbildung 5.1.: Kontinuierliche Scheibe (links) und diskretisierte Scheibe mit Temperaturfeld bei $t = 0$ s (rechts)

Diese Scheibe besitzt in der Referenzkonfiguration \mathcal{B}_0 einen Innenradius von $r_1^0 = 0,8$ m und einen Außenradius von $r_2^0 = 2$ m. Die konstante Dicke der Scheibe zu Beginn

5. Numerische Beispiele des Kontinuums

beträgt $t_s^0 = 0,4$ m. Das Kontinuum besitzt einen logarithmischen Temperaturverlauf (s. Abbildung 5.1). Um die Bewegung der Scheibe besser beobachten zu können, sind die oberen vertikalen Elementlinien mit einer fettgedruckten schwarzen Linie markiert.

Der logarithmische Temperaturverlauf zu Beginn wird nach Carslaw und Jaeger [14] für einen Wärmefluss in einem unendlichen Zylinder (stetige Temperatur, Radialströmung) wie folgt beschrieben:

$$\theta^e = \left(\theta_1^0 \ln \frac{r_2^0}{r} + \theta_2^0 \ln \frac{r}{r_1^0} \right) \left(\ln \frac{r_2^0}{r_1^0} \right)^{-1} \quad (5.1)$$

Die Temperatur am inneren Rand der Scheibe beträgt zu Beginn $\theta_1^0 = 310$ K. Am äußeren Rand ist die Temperatur $\theta_2^0 = 380$ K. Der Radius r beschreibt den Abstand von der z -Achse zum jeweiligen Punkt $\mathbf{x}^e = [x^e, y^e, z^e]$:

$$r = \sqrt{x^{e2} + y^{e2}} \quad (5.2)$$

Dadurch kann jede beliebige Temperatur am Gaußpunkt θ^e berechnet werden. Die Projektion dieser Gaußpunkte θ^e liefern die Knotenwerte θ^{eA} , analog zu Gl. (4.184), für die Referenzkonfiguration \mathcal{B}_0 . Die Entropien am Gaußpunkt s^e werden durch das vorliegende Stoffgesetz mit den Temperaturen θ^e in Verbindung gebracht:

$$s^e = k \ln \frac{\theta^e}{\theta_\infty} + \beta n_{dim} \frac{\partial \psi^{vol}(J)}{\partial J} \quad (5.3)$$

Durch eine Projektion, analog zur Projektion der Temperatur, werden die Entropien am Gaußpunkt s^e in Knotenwerte der Entropien s^{eA} überführt. Die Scheibe wird mit 480 acht-knotigen Lagrange-Elementen im Raum diskretisiert. Das daraus folgende Netz liefert die Knotenwerte \mathbf{x}^{eA} . Da die Scheibe thermisch und mechanisch isoliert ist und frei im Raum schwebt, gilt für die thermischen und mechanischen Ränder $\partial_m \mathcal{B} = \emptyset$ und $\partial_t \mathcal{B} = \emptyset$. Die Impulse in der Referenzkonfiguration \mathbf{p}^{eA} werden aus den vorgegebenen Anfangswinkelgeschwindigkeiten berechnet. Für die internen Variablen gilt im Ausgangszustand $C_i^e = I$.

Die Lamé-Parameter λ und μ , die viskosen Lamé-Parameter λ_e und μ_e sowie die Parameter V^{dev} und V^{vol} werden wie folgt gewählt:

$$\begin{array}{lll} \lambda = 30 \frac{\text{kJ}}{\text{m}^3} & \lambda_e = 3 \frac{\text{kJ}}{\text{m}^3} & V^{dev} = 100 \frac{\text{J s}}{\text{m}^3} \\ \mu = 7,5 \frac{\text{kJ}}{\text{m}^3} & \mu_e = 750 \frac{\text{J}}{\text{m}^3} & V^{vol} = 500 \frac{\text{J s}}{\text{m}^3} \end{array}$$

Tabelle 5.1.: Lamé- und viskose Parameter - Mechanisch und thermisch isolierte Scheibe

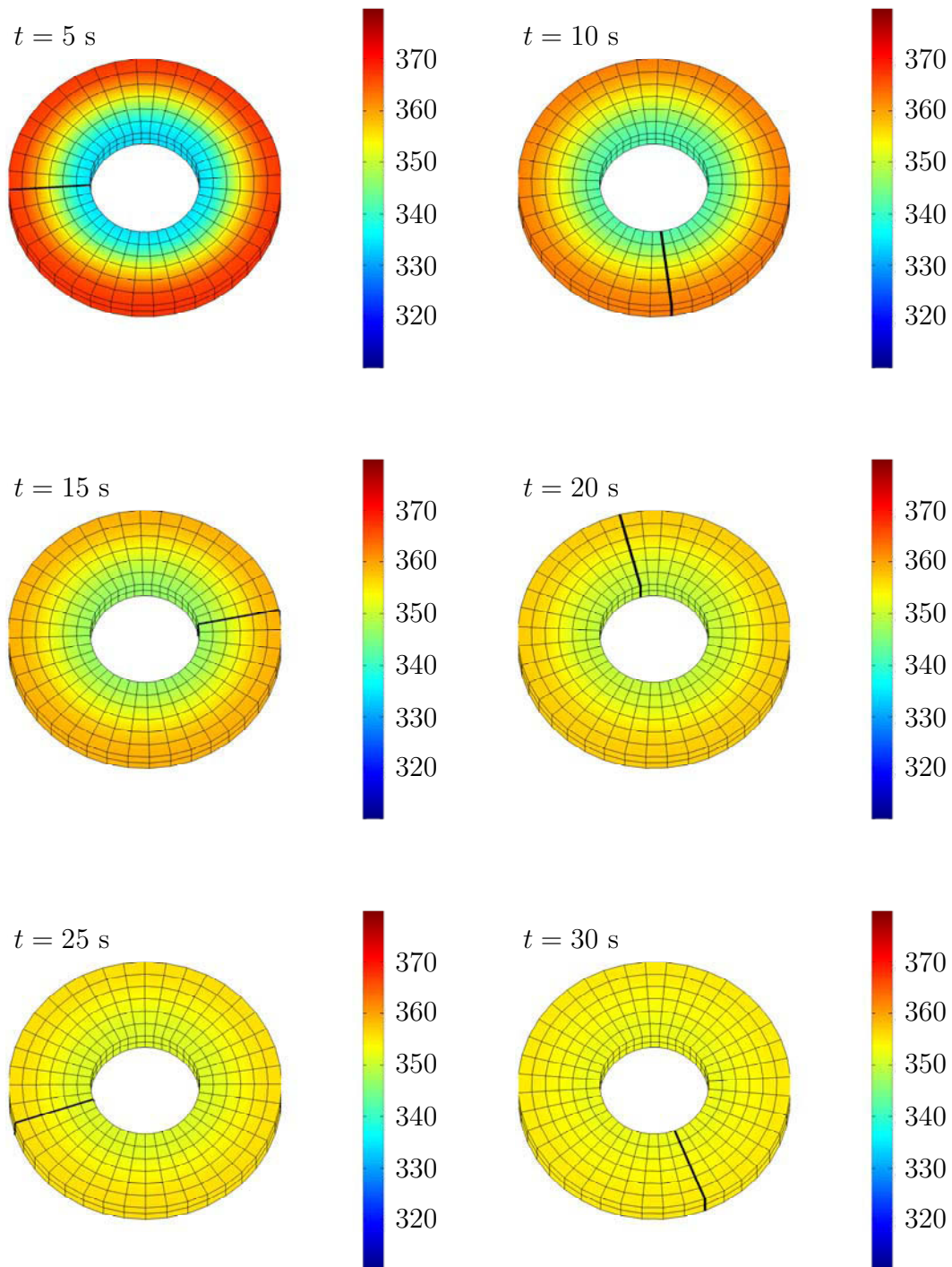


Abbildung 5.2.: Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes nach $t = [5, 10, 15, 20, 25, 30]$ s - Berechnung durch die Mittelpunktsregel bei einer Zeitschrittweite von $h_n(1) = 0,02$ s

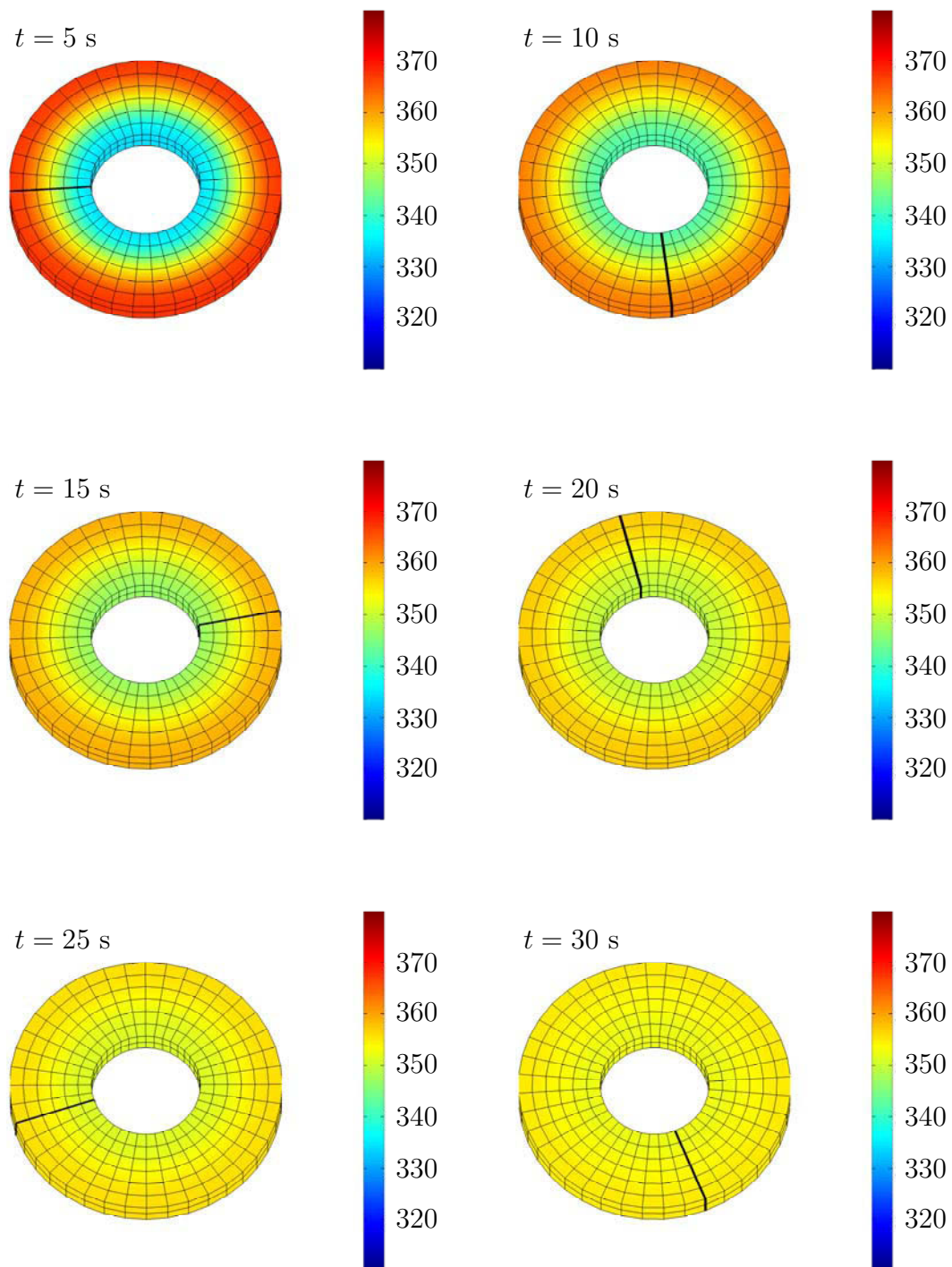


Abbildung 5.3.: Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes nach $t = [5, 10, 15, 20, 25, 30]$ s - Berechnung durch den erweiterten TC Integrator bei einer Zeitschrittweite von $h_n(1) = 0,02$ s

Die Dichte ρ_0 , der Kopplungsparameter β , die Wärmekapazität k und die Wärmeleitfähigkeit κ werden zudem auf folgende Werte gesetzt:

$$\rho_0 = 8.93 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \quad \kappa = 2 \frac{\text{W}}{\text{K m}} \quad k = 150 \frac{\text{J}}{\text{K m}^3} \quad \beta = 0,0001 \text{ K}^{-1}$$

Tabelle 5.2.: Dichte und thermische Parameter - Mechanisch und thermisch isolierte Scheibe

Für die Referenztemperatur gilt $\theta_\infty = 300 \text{ K}$. Die betrachtete Dimension ist $n_{dim} = 3$.

Die zeitliche Diskretisierung wird mit drei verschiedenen Zeitschrittweiten $h_n(1) = 0,02 \text{ s}$, $h_n(2) = 0,08 \text{ s}$ und $h_n(3) = 0,1 \text{ s}$ durchgeführt. Das globale Newton-Raphson-Verfahren unterliegt einer Toleranz von $\varepsilon^{glo} = 10^{-8} \text{ J}$. Die Toleranz für das lokale Newton-Raphson-Verfahren beträgt $\varepsilon^{loc} = 10^{-12} \text{ J}$. Die Berechnung der mechanisch und thermisch isolierten Scheibe mit logarithmischem Temperaturverlauf erfolgt mit der Mittelpunktsregel und dem erweiterten TC Integrator.

Die Abbildung 5.2 zeigt die Bewegung und das Temperaturfeld der Scheibe für die Zeitpunkte $t = [5, 10, 15, 20, 25, 30] \text{ s}$. Die zeitliche Diskretisierung wurde mit der Mittelpunktsregel mit einer Zeitschrittweite von $h_n(1) = 0,02 \text{ s}$ durchgeführt. Die Bewegung und das Temperaturfeld der Scheibe mit der zeitlichen Diskretisierung des erweiterten TC Integrators ($h_n(1) = 0,02 \text{ s}$) wird in Abbildung 5.3 dargestellt. Die Abbildungen liefern keine nennenswerten Unterschiede. Im Laufe der Zeit gleicht sich die Temperatur an. Da der Temperaturverlauf nichtlinear ist, liegt die Temperatur θ^{p^e} nach einer Zeit $t = \infty$ im Bereich von $\theta^{p^e}(t = \infty) \approx 355 \text{ K}$.

Die Gesamtenergie H , die Gesamtentropie S und die Lyapunov-Funktion V sind für die mechanisch und thermisch isolierte Scheibe und die unterschiedlichen Zeitschrittweiten in Abbildung 5.4 ersichtlich. Die Mittelpunktsregel und der erweiterte TC Integrator liefern vergleichbare Ergebnisse für die Zeitschrittweiten $h_n(1) = 0,02 \text{ s}$ und $h_n(1) = 0,08 \text{ s}$. Die Gesamtenergie H scheint für beide Integratoren erhaltend zu sein. Außerdem ist die Gesamtentropie S stetig ansteigend, die Lyapunov-Funktion fällt stetig ab.

Bei einer Zeitschrittweite von $h_n(3) = 0,1 \text{ s}$ werden die Vorteile des erweiterten TC Integrators sichtbar (s. Abbildung 5.4). Die Gesamtenergie H , berechnet durch die Mittelpunktsregel, erfährt einen blow-up und die Berechnung bricht ab. Dieser blow-up ist auch in der Gesamtentropie S und der Lyapunov-Funktion ersichtlich. Da die Lyapunov-Funktion ansteigt, führt dies zu einem instabilen Verhalten für die Mittelpunktsregel. Der erweiterte TC Integrator liefert ähnliche Ergebnisse wie zuvor - die Gesamtenergie H bleibt konstant, die Gesamtentropie S steigt an und die Lyapunov-Funktion V fällt stetig ab.

5. Numerische Beispiele des Kontinuums

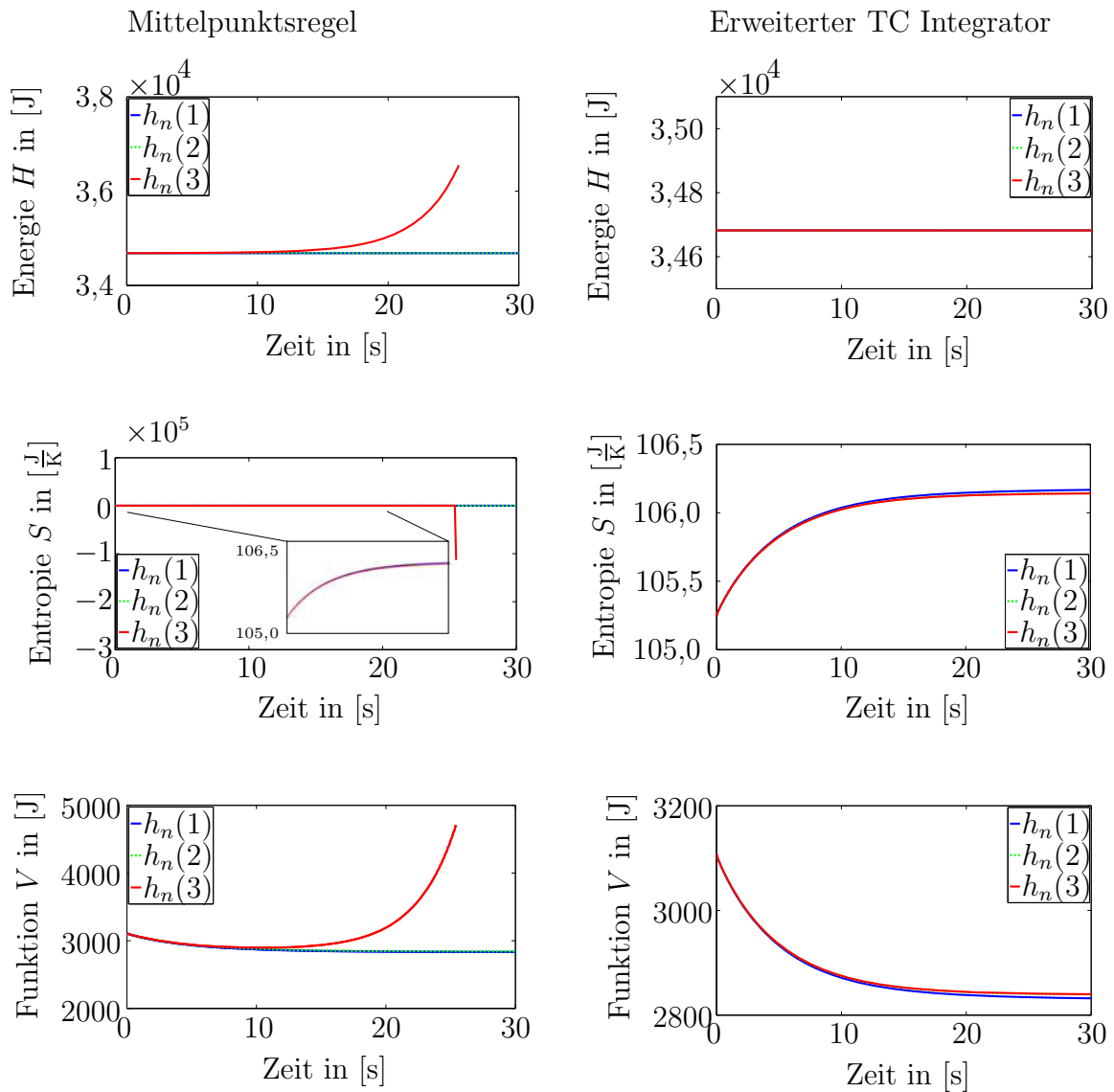


Abbildung 5.4.: Gesamtenergie H , Gesamtentropie S und Lyapunov-Funktion V - mit Mittelpunktsregel (links) und erweitertem TC Integrator (rechts) für die Zeitschrittweiten $h_n(1) = 0,02$ s, $h_n(2) = 0,08$ s und $h_n(3) = 0,1$ s

In Abbildung 5.5 ist zu erkennen, dass das blow-up Verhalten der Mittelpunktsregel falsche Ergebnisse für das Temperaturfeld und die Konfiguration bei einer Zeitschrittweite $h_n(3) = 0,1$ s liefert. Dazu wird das Standbild bei einer Zeit von $t = 25$ s betrachtet. Im Vergleich zur Bewegung mit einer Zeitschrittweite $h_n(1) = 0,02$ s lässt der erweiterte TC Integrator bei dieser Zeitschrittweite und gleicher Zeit des Standbildes keinen Unterschied erkennen (vgl. Abbildung 5.3).

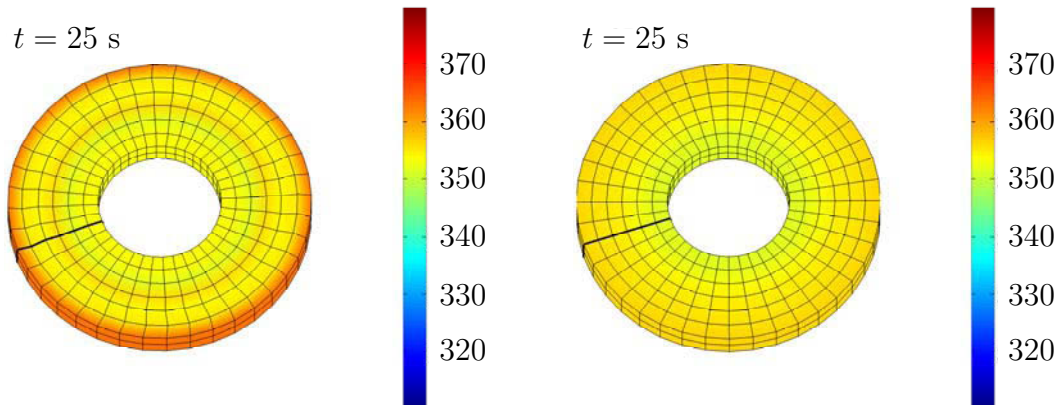


Abbildung 5.5.: Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes nach $t = 25$ s - Berechnung durch die Mittelpunktsregel (links) und den erweiterten TC Integrator (rechts) bei einer Zeitschrittweite von $h_n(3) = 0,1$ s

Wird die Funktion $H_{n+1} - H_n$ betrachtet (s. Abbildung 5.6), dann wird deutlich, dass die Mittelpunktsregel die Energie nicht in der vorgegebenen Toleranz von $\varepsilon^{glo} = 10^{-8}$ J erhalten kann.

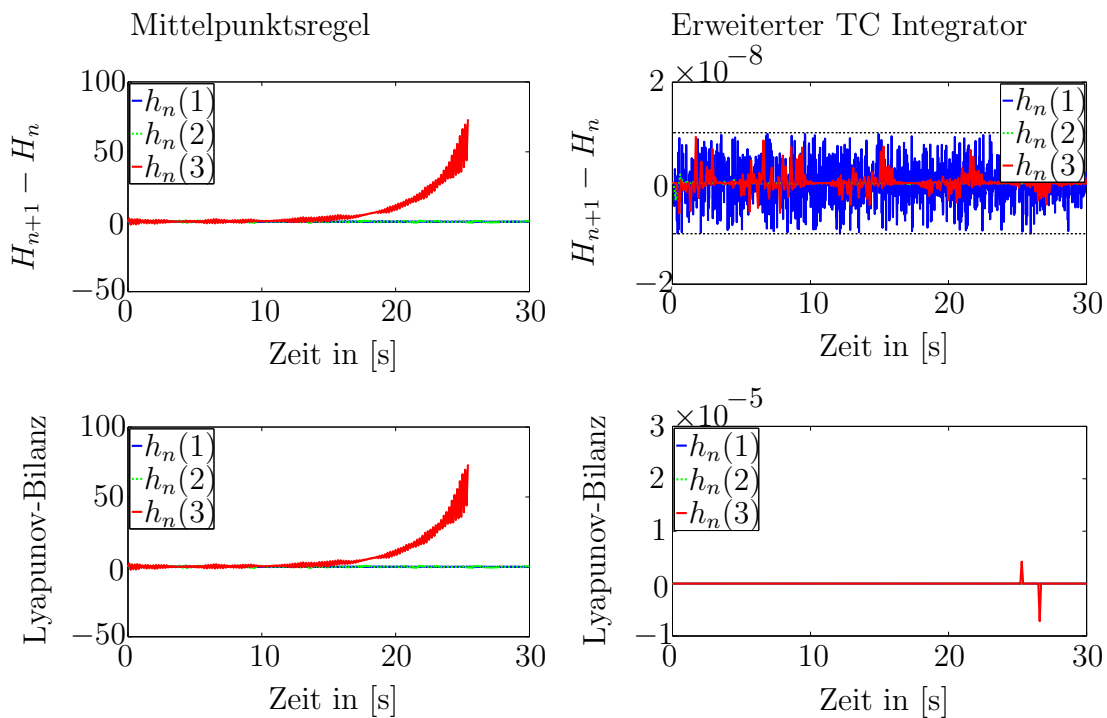


Abbildung 5.6.: Energiebilanz und Lyapunov-Bilanz - Mittelpunktsregel (links) und erweiterter TC Integrator (rechts) für die Zeitschrittweiten $h_n(1) = 0,02$ s, $h_n(2) = 0,08$ s und $h_n(3) = 0,1$ s

Bei einer Vergrößerung der Zeitschrittweite h_n wird die Abweichung der Mittelpunktsregel zur vorgegebenen Toleranz immer größer. Dies führt schließlich zum blow-up der Mittelpunktsregel bei einer Zeitschrittweite von $h_n(3) = 0,1$ s und damit zum Abbruch der Berechnung.

Der erweiterte TC Integrator kann die Energie in der vorgegebenen Toleranz von $\varepsilon^{glo} = 10^{-8}$ J erhalten. Die Eigenschaften der Mittelpunktsregel und des erweiterten TC Integrators lassen sich auf die Lyapunov-Bilanz übertragen. Dabei sind lediglich zwei Peaks der Lyapunov-Bilanz des TC Integrators zu erkennen, die über die vorgegebene Toleranz herausragen.

5.2. Mechanische Dirichlet-Ränder und thermische Zwangsbedingungen

In diesem Kapitel wird eine thermoelastische frei fliegende Scheibe mit mechanischen Dirichlet-Rändern und thermischen Zwangsbedingungen betrachtet. Diese ist die dreidimensionale Erweiterung, $n_{dim} = 3$, der in Groß und Betsch [27] verwendeten ringförmigen Platte mit Wärmeverlust. Die Scheibe besitzt zu Beginn einen Innenradius von $r_1^0 = 0,5$ m einen Außenradius von $r_2^0 = 1,5$ m und eine Dicke von $t_s^0 = 1$ m.

Die Scheibe wird auf den planaren Flächen in z -Richtung mit mechanischen Dirichlet-Rändern $\partial_\varphi\mathcal{B}$ (s. Abbildung 5.7, gelb dargestellt) belastet, um einen ebenen Verzerungszustand zu simulieren. Die Temperaturen $\theta^{p^{eA}} = \theta_\infty$ werden am Rand $\partial_\lambda\mathcal{B}$ durch Lagrangesche Multiplikatoren erzwungen (s. Abbildung 5.7, grün dargestellt). Die Umgebungstemperatur beträgt $\theta_\infty = 298,15$ K.

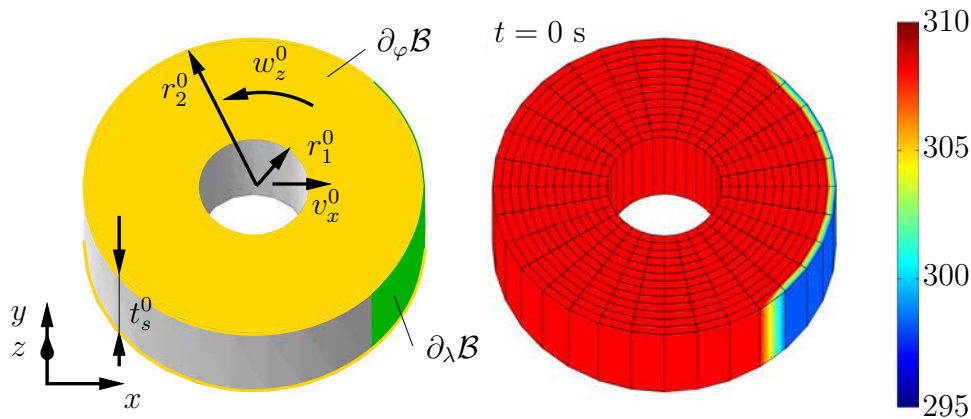


Abbildung 5.7.: Kontinuierliche Scheibe (links) und diskretisierte Scheibe mit unisoliertem Rand bei $t = 0$ s (rechts)

Die Bewegung der Scheibe wird durch eine translatorische Bewegung in x -Richtung mit $\mathbf{v}_{tra}^0 = [20, 0, 0] \frac{m}{s}$ und eine rotatorische Bewegung um die z -Achse mit $\boldsymbol{\omega}^0 = [0, 0, -7] \frac{1}{s}$

(Drehzahl $n \approx 66,66 \frac{1}{\text{min}}$) initialisiert. Aus der Anfangsgeschwindigkeit $\mathbf{v}^0 = \mathbf{v}_{tra}^0 + \boldsymbol{\omega}^0 \times \mathbf{X}^{eA}$ resultiert der Anfangsimpuls \mathbf{p}^{eA} .

Die ungezwungenen Temperaturen $\theta^{p^{eA}} \in \mathcal{B} \setminus \partial_\lambda \mathcal{B}$ der Scheibe sind durch eine einheitliche Temperatur von $\theta^{p^{eA}} = 308,15$ K in der Referenzkonfiguration \mathcal{B}_0 vorgegeben. Der Temperaturunterschied zwischen den erzwungenen und ungezwungenen Knotentemperaturen beträgt 10 K. Die unterschiedlichen Knotentemperaturen $\theta^{p^{eA}} \in \mathcal{B}$ liefern die Entropien s^{eA} durch die iterative Lösung der diskreten Projektion aus Gl. (4.184). Die interne Variable wird zu Beginn auf $C_i^e = I$ gesetzt.

Damit die Ergebnisse der Scheibe mit der ringförmigen Platte aus Groß und Betsch [27] verglichen werden können, werden nun folgende Werte für die Lamé-Parameter λ und μ , die viskosen Lamé-Parameter λ_e und μ_e sowie die Parameter V^{dev} und V^{vol} gewählt:

$$\begin{array}{lll} \lambda = 30 \frac{\text{kJ}}{\text{m}^3} & \lambda_e = 0 \frac{\text{J}}{\text{m}^3} & V^{dev} = 100 \frac{\text{J s}}{\text{m}^3} \\ \mu = 7,5 \frac{\text{kJ}}{\text{m}^3} & \mu_e = 0 \frac{\text{J}}{\text{m}^3} & V^{vol} = 500 \frac{\text{J s}}{\text{m}^3} \end{array}$$

Tabelle 5.3.: Lamé- und viskose Parameter - Mechanische Dirichlet-Ränder und thermische Zwangsbedingungen

Die viskosen Lamé-Parameter werden zu null. Dies hat zur Folge, dass sowohl die viskose Energie ψ^{vis} als auch deren Ableitungen zu null werden. Die Parameter V^{dev} und V^{vol} müssen laut Gl. (C.43) einen Wert größer null besitzen. Da die viskose Evolutionsgleichung von der Ableitung der viskosen Energie ψ^{vis} abhängig ist, wird die viskose interne Variable nicht durch die Wahl dieser Parameter verändert.

Die Dichte ρ_0 , der Kopplungsparameter β , die Wärmekapazität k und die Wärmeleitfähigkeit κ sind gegeben durch:

$$\rho_0 = 10 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \quad \kappa = 300 \frac{\text{W}}{\text{K m}} \quad k = 300 \frac{\text{J}}{\text{K m}^3} \quad \beta = 0,0001 \text{ K}^{-1}$$

Tabelle 5.4.: Dichte und thermische Parameter - Mechanische Dirichlet-Ränder und thermische Zwangsbedingungen

Für die zeitliche Diskretisierung wird die Mittelpunktsregel und der erweiterte TC Integrator verwendet. Im Anhang C.5 wird zudem ein Vergleich zwischen der Mittelpunktsregel und dem erweiterten TC Integrator in Poissonschen Variablen (\mathbf{x}^e , \mathbf{p}^e , s^e , C_i^e) und der Mittelpunktsregel in Lagrangeschen Variablen (\mathbf{x}^e , \mathbf{v}^e , θ^e) für das in diesem Kapitel beschriebene Beispiel durchgeführt. Die Zeitschrittweiten für die Mittelpunktsregel

5. Numerische Beispiele des Kontinuums

und den erweiterten TC Integrator sind die folgenden äquidistanten Zeitschrittweiten: $h_n(1) = 10$ ms, $h_n(2) = 12$ ms und $h_n(3) = 14$ ms.

Das globale Newton-Raphson-Verfahren wird bei der Unterschreitung der Toleranz $\varepsilon^{glo} = 10^{-6}$ J abgebrochen. Für das lokale Newton-Raphson-Verfahren wird eine Toleranz von $\varepsilon^{loc} = 10^{-12}$ J festgelegt.

Die räumliche Approximation wird mit 416 acht-knotigen Lagrange-Elementen im Raum diskretisiert. Dabei werden 13 Elemente in radialer Richtung, 1 Element in z -Richtung und 32 Elemente über den Umfang der Scheibe verteilt (s. Abbildung 5.7).

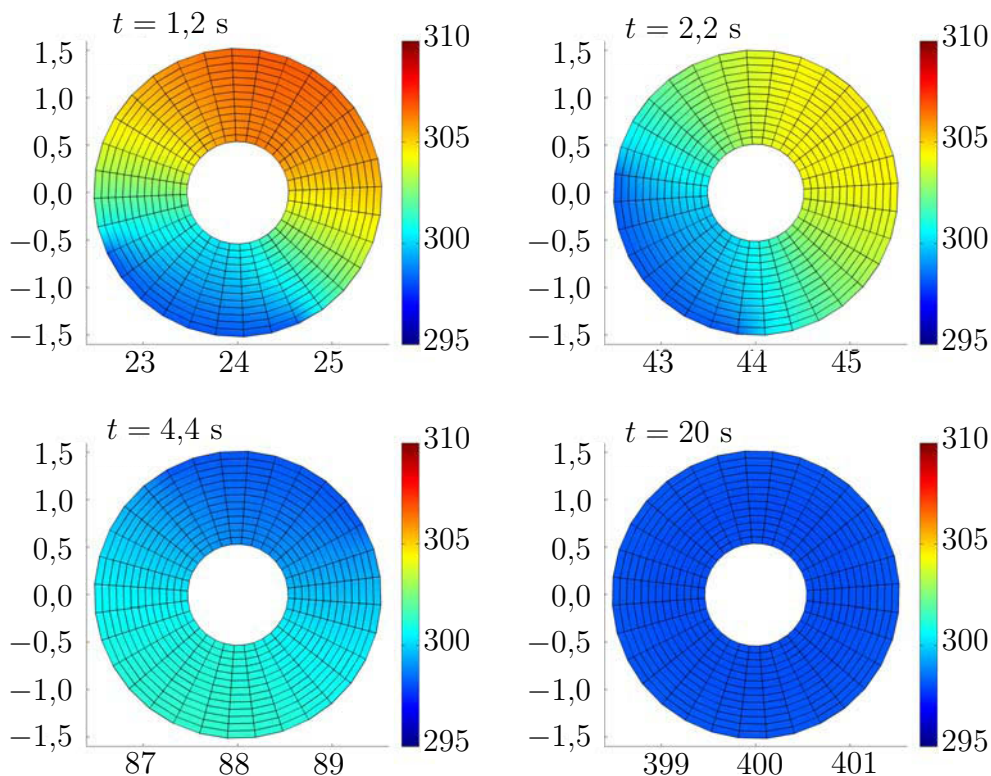


Abbildung 5.8.: Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes nach $t = [1,2; 2,2; 4,4; 20]$ s - Berechnung durch die Mittelpunktsregel bei einer Zeitschrittweite von $h_n(1) = 10$ ms

Abbildung 5.8 zeigt die Bewegung und das Temperaturfeld der Scheibe unter Verwendung der Mittelpunktsregel für eine Zeitschrittweite von $h_n(1) = 10$ ms. Das Temperaturfeld und die Bewegung sind an den Zeitpunkten $t = [1,2; 2,2; 4,4; 20]$ s dargestellt. Die Bewegung und das Temperaturfeld der Scheibe werden mit dem erweiterten TC Integrator für die Zeitdiskretisierung in Abbildung 5.9 wiedergegeben. Die x - und y -Achse sind dabei in Blattebene dargestellt, die z -Achse zeigt aus der Blattebene heraus. Die x -Achse ist für die Abbildungen 5.8 und 5.9 veränderlich gewählt worden.

Das Temperaturfeld der Mittelpunktsregel und des erweiterten TC Integrators aus den Abbildungen 5.8 und 5.9 liefern keine nennenswerten Unterschiede. Der Körper kühlt am Rand $\partial_\lambda \mathcal{B}$ durch die Zwangsbedingungen nach und nach aus und die Temperaturen nehmen am Knoten ab. Der Wert der Temperaturen liegt bei $\theta^{p^{eA}}(t \rightarrow \infty) \approx \theta_\infty$. Lediglich in der Bewegung der Scheibe lassen sich kleine Unterschiede im Vergleich der Mittelpunktsregel und des erweiterten TC Integrators erkennen. Diese Unterschiede werden vor allem bei den Standbildern für die Zeitpunkte $t = 4,4$ s und $t = 20$ s sichtbar.

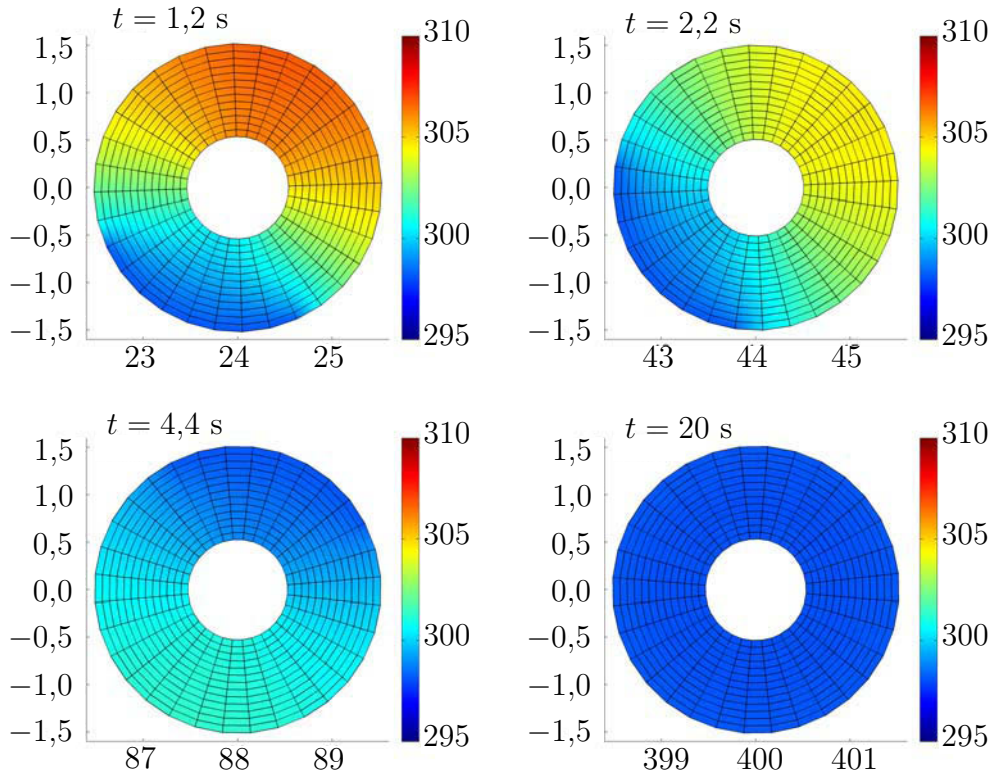


Abbildung 5.9.: Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes nach $t = [1,2; 2,2; 4,4; 20]$ s - Berechnung durch den erweiterten TC Integrator bei einer Zeitschrittweite von $h_n(1) = 10$ ms

In Abbildung 5.10 werden die Gesamtenergie H , die Gesamtentropie S und die Lyapunov-Funktion V für die am Rand $\partial_\lambda \mathcal{B}$ unisolierte Scheibe wiedergegeben. Dabei werden die Ergebnisse der Mittelpunktsregel links dargestellt und die Ergebnisse des erweiterten TC Integrators werden rechts abgebildet. Die Zeitschrittweiten sind: $h_n(1) = 10$ ms, $h_n(2) = 12$ ms und $h_n(3) = 14$ ms.

Durch den unisolierten Rand wird Energie aus dem System abgeführt, die Gesamtenergie H des Systems sinkt ab. Zudem nimmt die Gesamtentropie S des Systems ab. Die Lyapunov-Funktion V sinkt stetig ab. Dies ist für alle drei Zeitschrittweiten für den erweiterten TC Integrator zu erkennen. Die Mittelpunktsregel liefert für die Zeitschrittweiten $h_n(1) = 10$ ms und $h_n(2) = 12$ ms ähnliche Ergebnisse. Bei einer Zeitschrittweite

5. Numerische Beispiele des Kontinuums

von $h_n(2) = 14$ ms ist das typische blow-up Verhalten der Mittelpunktsregel in der Gesamtenergie H und der Lyapunov-Funktion V zu erkennen. Die Simulation bricht bei einem Zeitpunkt $t \approx 2$ s ab.

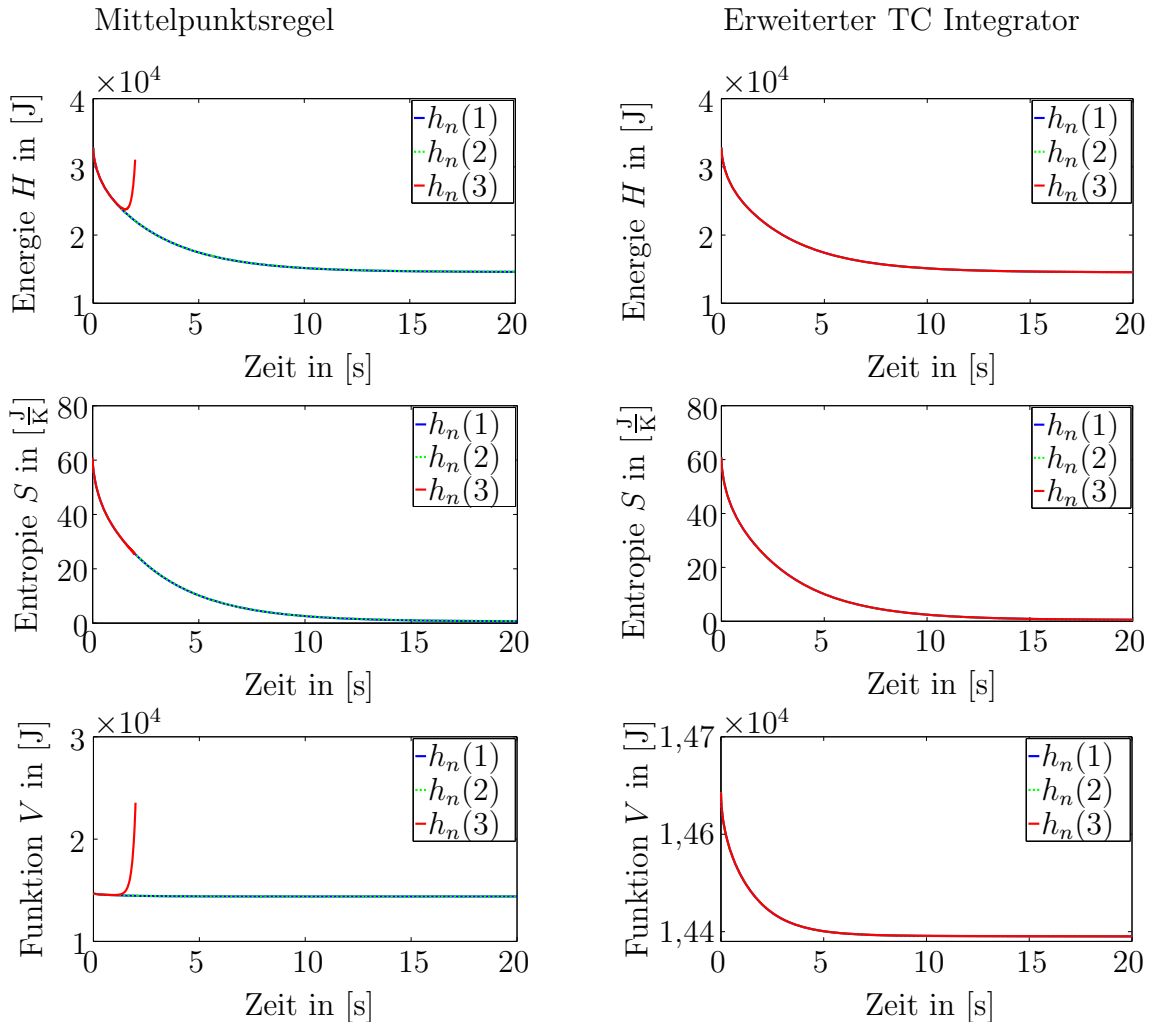


Abbildung 5.10.: Gesamtenergie H , Gesamtentropie S und Lyapunov-Funktion V - Mittelpunktsregel (links) und erweiterter TC Integrator (rechts) für die Zeitschrittweiten $h_n(1) = 10$ ms, $h_n(2) = 12$ ms und $h_n(3) = 14$ ms

Das blow-up Verhalten der Mittelpunktsregel bei der Zeitschrittweite $h_n(3) = 14$ ms liefert falsche Ergebnisse. Dies kann für die Konfiguration φ^{eA} und die Temperaturen $\theta^{p^{eA}}$ gezeigt werden. In Abbildung 5.11 ist zu erkennen, dass sich die Temperatur $\theta^{p^{eA}}$ unnatürlich und wellenartig ausbreitet, wenn sie durch die Mittelpunktsregel berechnet wird. Weiterhin sind unnatürliche Verzerrungen der Elemente sichtbar. Der erweiterte TC Integrator liefert bei dieser Zeitschrittweite und zu diesem Zeitpunkt die erwarteten Ergebnisse.

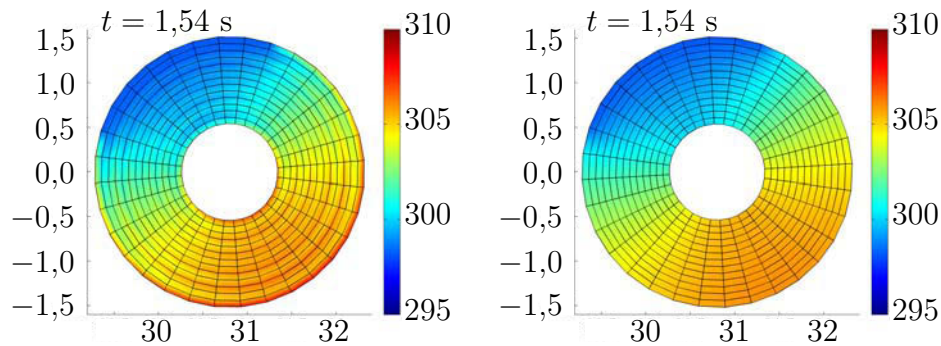


Abbildung 5.11.: Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes nach $t = 1,54$ s - Berechnung durch die Mittelpunktsregel (links) und den erweiterten TC Integrator (rechts) bei einer Zeitschrittweite von $h_n(3) = 14$ ms

Zur näheren Betrachtung der Konsistenzigenschaften wird die Gesamtenergiebilanz und die Lyapunov-Bilanz in Abbildung 5.12 herangezogen. Die Gesamtenergiebilanz kann bei Verwendung der Mittelpunktsregel nicht innerhalb der Toleranz erfüllt werden.

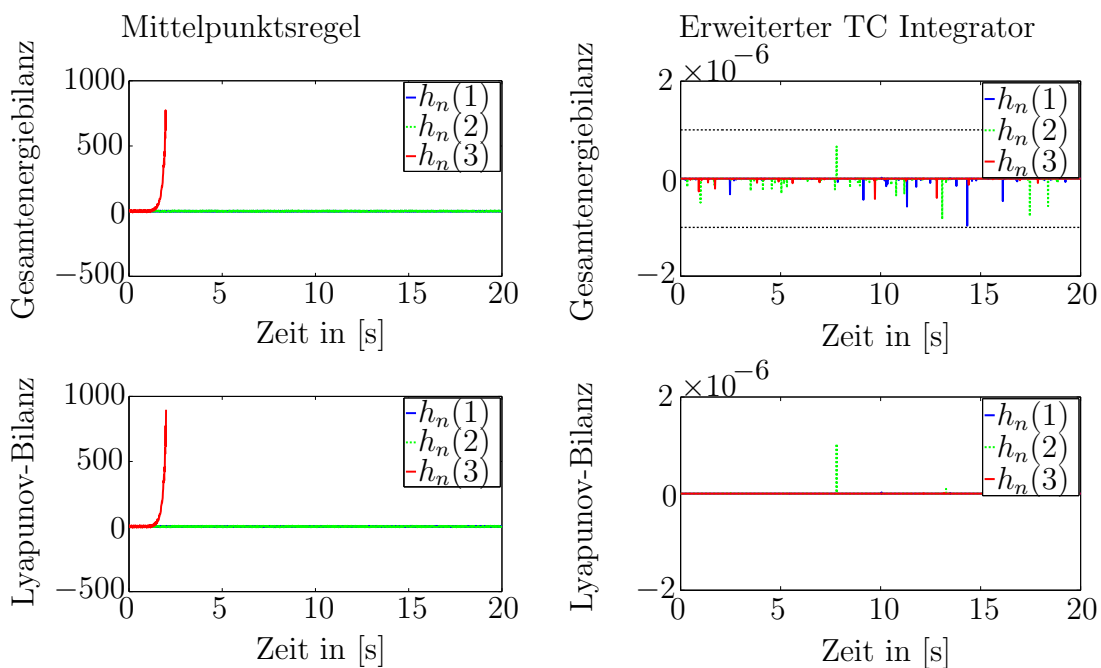


Abbildung 5.12.: Energiebilanz und Lyapunov-Bilanz - Mittelpunktsregel und erweiterter TC Integrator für die Zeitschrittweiten $h_n(1) = 10$ ms, $h_n(2) = 12$ ms und $h_n(3) = 14$ ms

Dies führt bei größeren Zeitschrittweiten ($h_n(3) = 14$ ms) zum blow-up. Der blow-up wird weiterhin in der Lyapunov-Bilanz sichtbar. Der erweiterte TC Integrator liefert eine Gesamtenergiebilanz innerhalb der vorgegebenen Toleranz von $\varepsilon^{glo} = 10^{-6}$ J. Die Lyapunov-Funktion wird innerhalb der Grenzen $[-1,1 \cdot 10^{-6}, 1,1 \cdot 10^{-6}]$ J eingehalten.

5. Numerische Beispiele des Kontinuums

Die Lyapunov-Bilanz spiegelt die Gl. (4.211) wieder, wobei der Zusatzterm

$$T^{zus} = h_n \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} (\theta^{p^{eA}} - \theta_\infty) Z_{\frac{1}{2}}^{eA} \quad (5.4)$$

durch die zeitliche Diskretisierung nicht verschwindet. Eine genauere Betrachtung des Verlaufes dieses Zusatzterms T^{zus} über der Zeit t liefert die Abbildung 5.13.

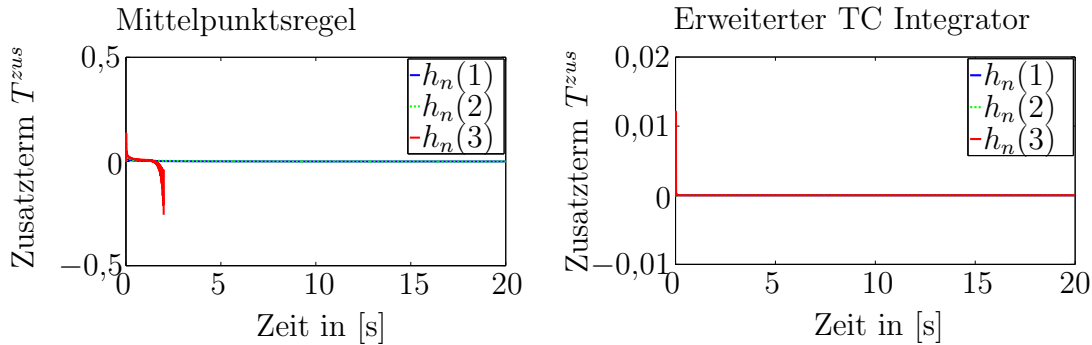


Abbildung 5.13.: Zusatzterm T^{zus} - Mittelpunktsregel und erweiterter TC Integrator für die Zeitschrittweiten $h_n(1) = 10$ ms, $h_n(2) = 12$ ms und $h_n(3) = 14$ ms

Die in diesem Kapitel vorgestellten Ergebnisse sind vergleichbar mit den Ergebnissen aus Groß und Betsch [27]. Eine Mittelpunktsregel in Lagrangeschen Variablen liefert ähnliche Ergebnisse zu der in Poissonschen Variablen (s. Kapitel C.5). In Groß und Betsch [27] wird, als weiterer Integrator, die Trapezregel dem energiekonsistenten ehG (*enhanced hybrid Galerkin*) Schema gegenüber gestellt. Hierbei werden einmal mehr die Vorteile einer energiekonsistenten Methode gegenüber eines Standardintegrators deutlich.

5.3. Scheibe mit thermischen Neumann-Rändern

Im folgenden Beispiel wird die Scheibe am unteren Rand mit thermischen Neumann-Rändern belastet (s. Abbildung 5.14, gelb). Die Anfangswinkelgeschwindigkeit wird mit $\omega^0 = [1, 1, 1] \frac{1}{s}$ gewählt. Die Abmaße der Scheibe sind aus Kapitel 5.1 bekannt.

Die räumliche Diskretisierung erfolgt mit 480 acht-knotigen Lagrange-Elementen. Die thermischen Neumann-Randbedingungen werden dabei auf die unteren 16 Randelemente aufgebracht. Weiterhin wird die Scheibe zu Beginn der Bewegung mit einer konstanten Temperatur von $\theta^{p^{eA}} = 300$ K beaufschlagt (s. Abbildung 5.14). Diese Temperatur entspricht der Umgebungstemperatur θ_∞ . Auch hier werden die vertikalen Elementlinien im oberen Teil der Scheibe mit dickeren Linien wiedergegeben, um die Bewegung der Scheibe besser nachvollziehen zu können. Die Anfangstemperatur liefert die zugehörige Entropie bei $t = 0$ mit $s^{eA} = 0$ für das gesamte Kontinuum. Die interne Variable zu Beginn ist $C_i^e = I$. Die Anfangsimpulse \mathbf{p}^{eA} berechnen sich aus der Anfangswinkelgeschwindigkeit ω^0 .

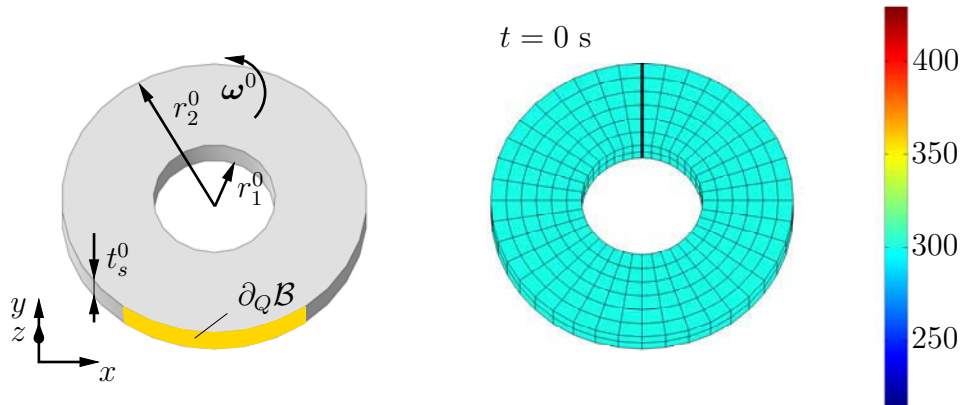


Abbildung 5.14.: Kontinuierliche Scheibe mit thermischen Neumann-Rändern (links) und diskretisierte Scheibe mit der Temperatur $\theta^{eA} = 300 \text{ K}$ zum Zeitpunkt $t = 0 \text{ s}$ (rechts)

Im Intervall $\mathcal{I} = [0, 4] \text{ s}$ ist der Wärmefluss $Q_{\frac{1}{2}}^{eA}$ mit der Einheit $\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$ durch eine sinusförmige Belastungskurve gegeben. Nach 4 s werden die externen Lasten zu null, wie in Abbildung 5.15 dargestellt.

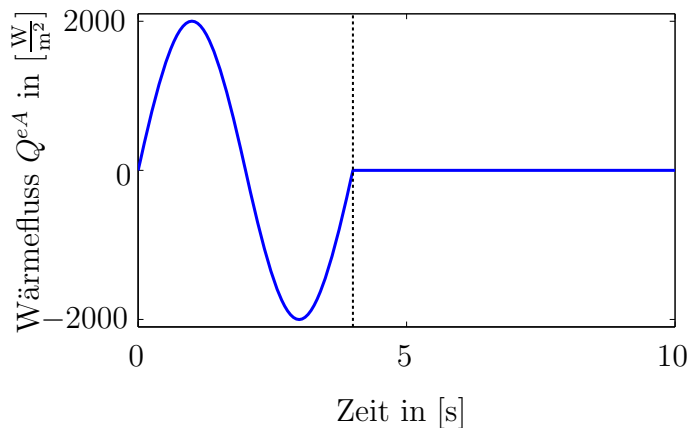


Abbildung 5.15.: Qualitativer Verlauf des externen Wärmeflusses $Q^{eA}(t)$

Die zugehörige Gleichung wird am Mittelpunkt ausgewertet:

$$Q_{\frac{1}{2}}^{eA} = \begin{cases} 2000 \sin\left(\frac{2\pi}{4} \frac{t_{n+1} + t_n}{2}\right) & \forall t_{n+1} < 4 \text{ s} \\ 0 & \forall t_{n+1} \geq 4 \text{ s} \end{cases} \quad (5.5)$$

Die Lamé-Parameter λ und μ werden für dieses Beispiel um den Faktor 10 geringer gewählt als zuvor mit $\lambda = 3 \frac{\text{kJ}}{\text{m}^3}$ und $\mu = 750 \frac{\text{J}}{\text{m}^3}$, um ein weiches Material zu simulieren. Alle anderen Parameter werden aus Tabelle 5.1 und Tabelle 5.2 entnommen.

5. Numerische Beispiele des Kontinuums

Die zeitliche Diskretisierung erfolgt für die Mittelpunktsregel und den erweiterten TC Integrator für drei unterschiedliche Zeitschrittweiten: $h_n(1) = 20$ ms, $h_n(2) = 60$ ms und $h_n(3) = 80$ ms. Die Toleranz des globalen Newton-Verfahrens ist durch $\varepsilon^{glo} = 10^{-6}$ J und die Toleranz des lokalen Newton-Verfahrens durch $\varepsilon^{loc} = 10^{-9}$ J gegeben.

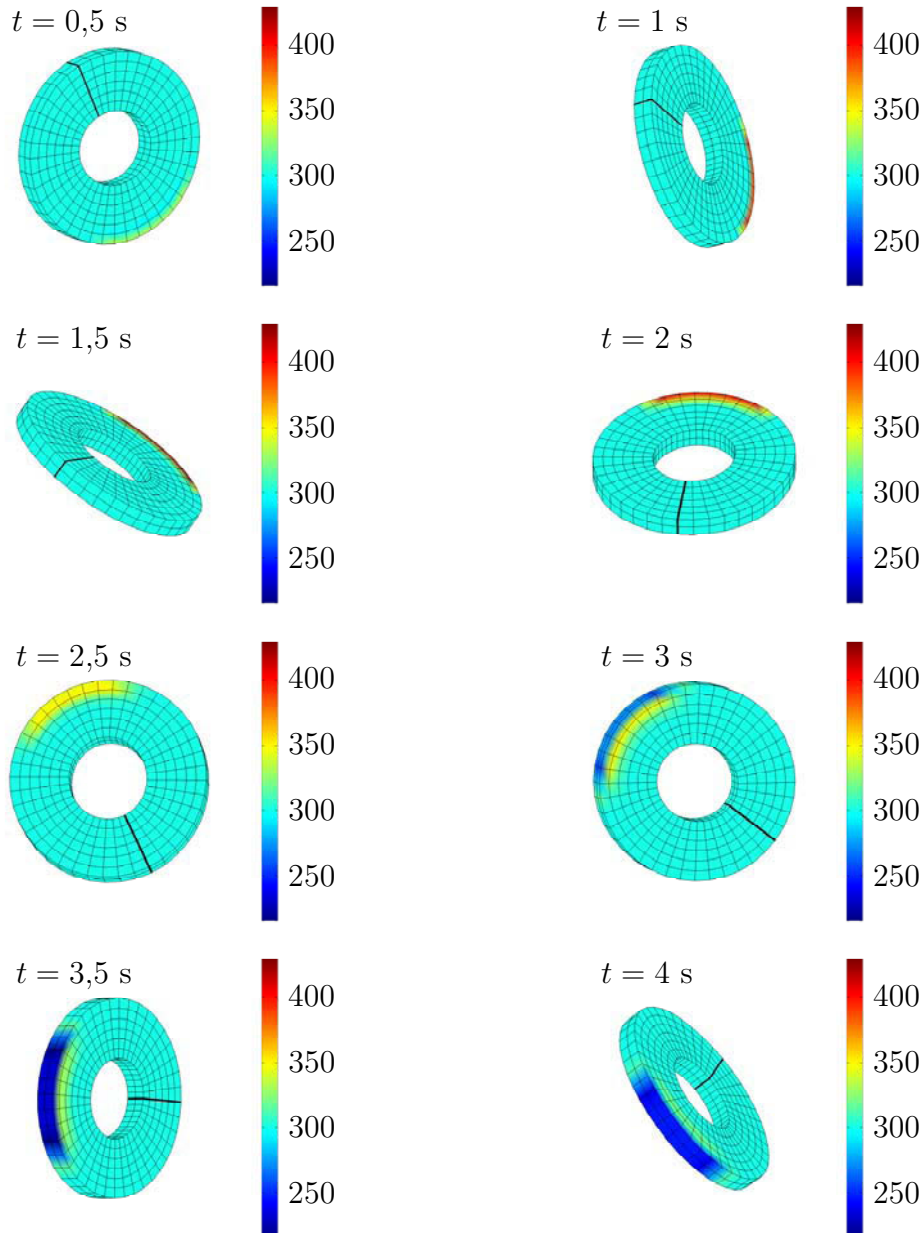


Abbildung 5.16.: Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes nach $t = [0,5; 1; 1,5; 2; 2,5; 3; 3,5; 4]$ s - Berechnung durch die Mittelpunktsregel bei einer Zeitschrittweite von $h_n(1) = 20$ ms

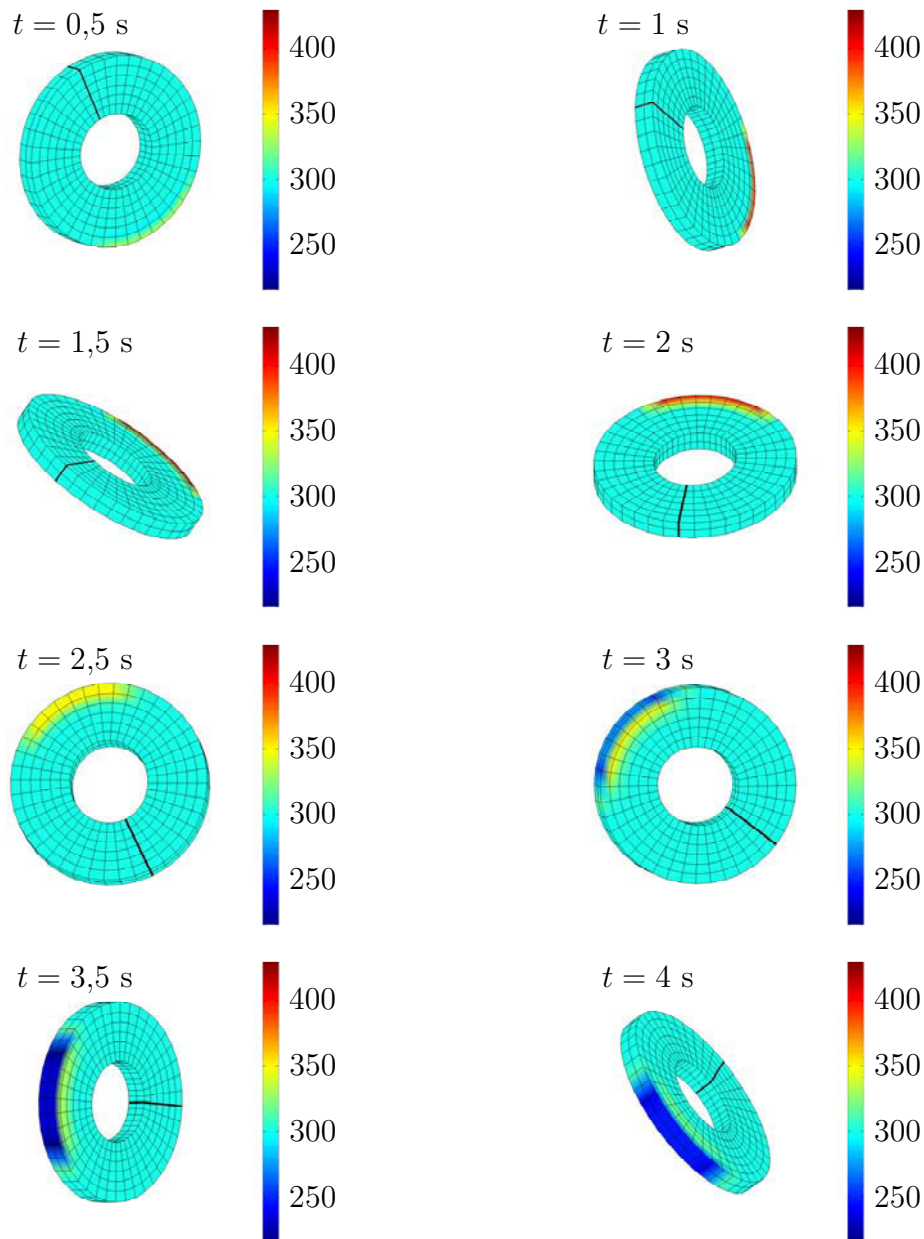


Abbildung 5.17.: Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturfeldes nach $t = [0,5; 1; 1,5; 2; 2,5; 3; 3,5; 4]$ s - Berechnung durch den erweiterten TC Integrator bei einer Zeitschrittweite von $h_n(1) = 20$ ms

In Abbildung 5.16 und 5.17 sind die Bewegung und das Temperaturfeld der Scheibe für die Mittelpunktsregel und den erweiterten TC Integrator mit thermischen Neumann-Randbedingungen dargestellt. Dabei sind die x - und y -Achse in Blattebene und die z -Achse aus der Blattebene heraus. Die verwendete Zeitschrittweite ist $h_n(1) = 20$ ms.

5. Numerische Beispiele des Kontinuums

Die Scheibe wird durch acht ausgewählte Zeitpunkte in dem Zeitraum der Belastung $\mathcal{I} = [0, 4]$ s dargestellt.

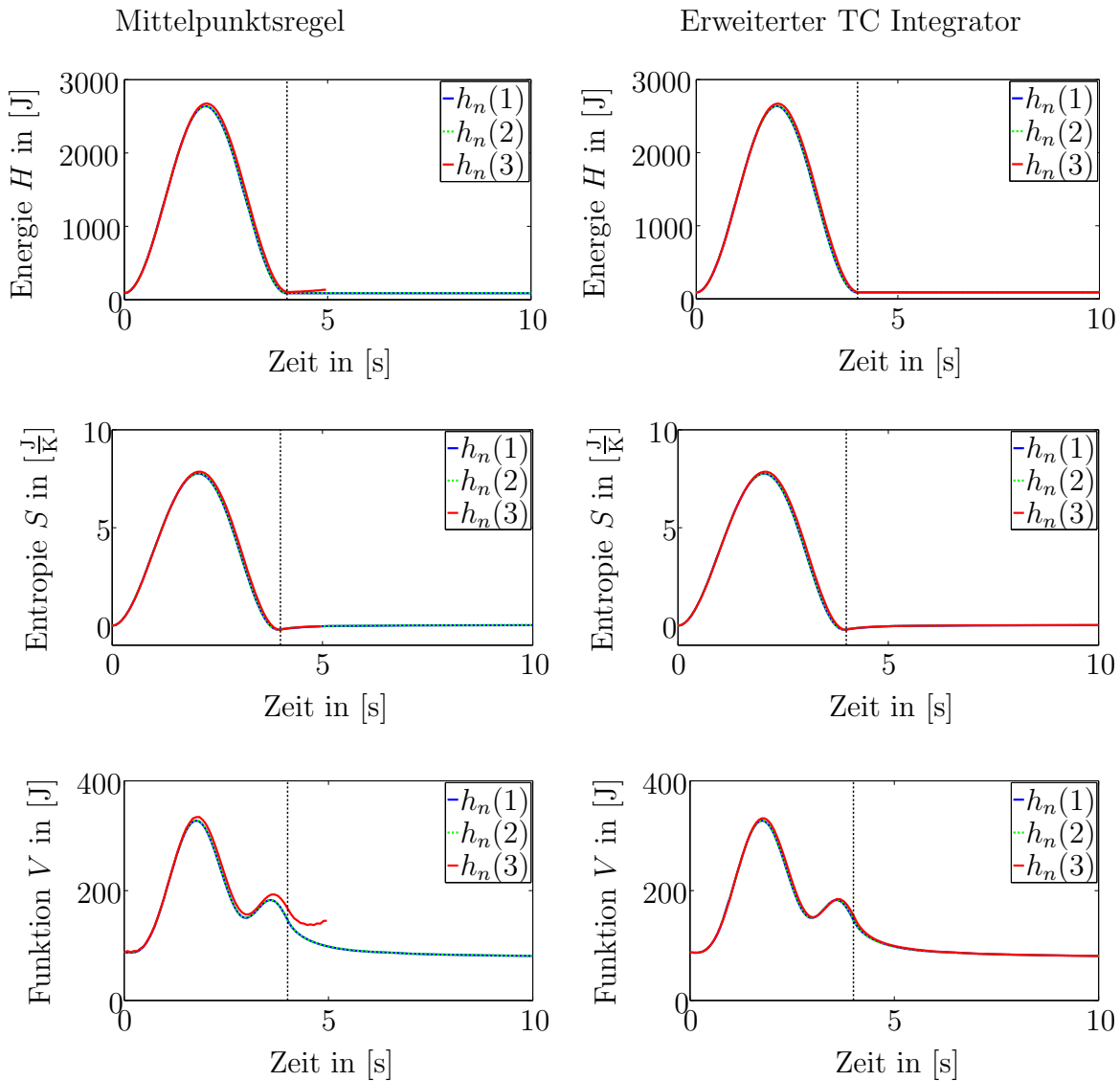


Abbildung 5.18.: Gesamtenergie H , Gesamtentropie S und Lyapunov-Funktion V - Mittelpunktsregel (links) und erweiterter TC Integrator (rechts) für die Zeitschrittweiten $h_n(1) = 20$ ms, $h_n(2) = 60$ ms und $h_n(3) = 80$ ms

Ein Vergleich der Abbildungen 5.16 und 5.17 liefert keine nennenswerten Unterschiede. Weiterhin sind die Temperaturänderungen durch den externen Wärmefluss $\mathbf{Q}_{\frac{1}{2}}^{eA}$ in beiden Abbildungen zu erkennen. Die Scheibe erwärmt sich durch den externen Wärmefluss $\mathbf{Q}_{\frac{1}{2}}^{eA}$ bis zu einer Zeit von $t = 2$ s und kühlt sich anschließend ab. Nachdem die externen Lasten zu null werden, ist die Scheibe thermisch und mechanisch isoliert.

Abbildung 5.18 stellt die Gesamtenergie H , die Gesamtentropie S und die Lyapunov-Funktion V für die Mittelpunktsregel und den erweiterten TC Integrator dar. Die Zeitschrittweiten $h_n(1) = 0,02$ s und $h_n(2) = 0,06$ s liefern ähnliche Ergebnisse für beide Integratoren. Durch die externen Lasten werden die Gesamtenergie H , die Entropie S und die Lyapunov-Funktion V gestört.

Nach der Belastungsphase sind die strukturellen Eigenschaften für ein isoliertes System wiederzuerkennen. Die Gesamtenergie H ist erhaltend, die Entropie S steigt an und die Lyapunov-Funktion V fällt stetig ab. Wird die Zeitschrittweite auf $h_n(3) = 0,08$ s erhöht, erfolgt unter Verwendung der Mittelpunktsregel ein blow-up in der Gesamtenergie H und somit auch in der Lyapunov-Funktion V . Der erweiterte TC Integrator liefert mit einer Zeitschrittweite von $h_n(3) = 0,08$ s ähnliche Ergebnisse wie die kleineren Zeitschrittweiten.

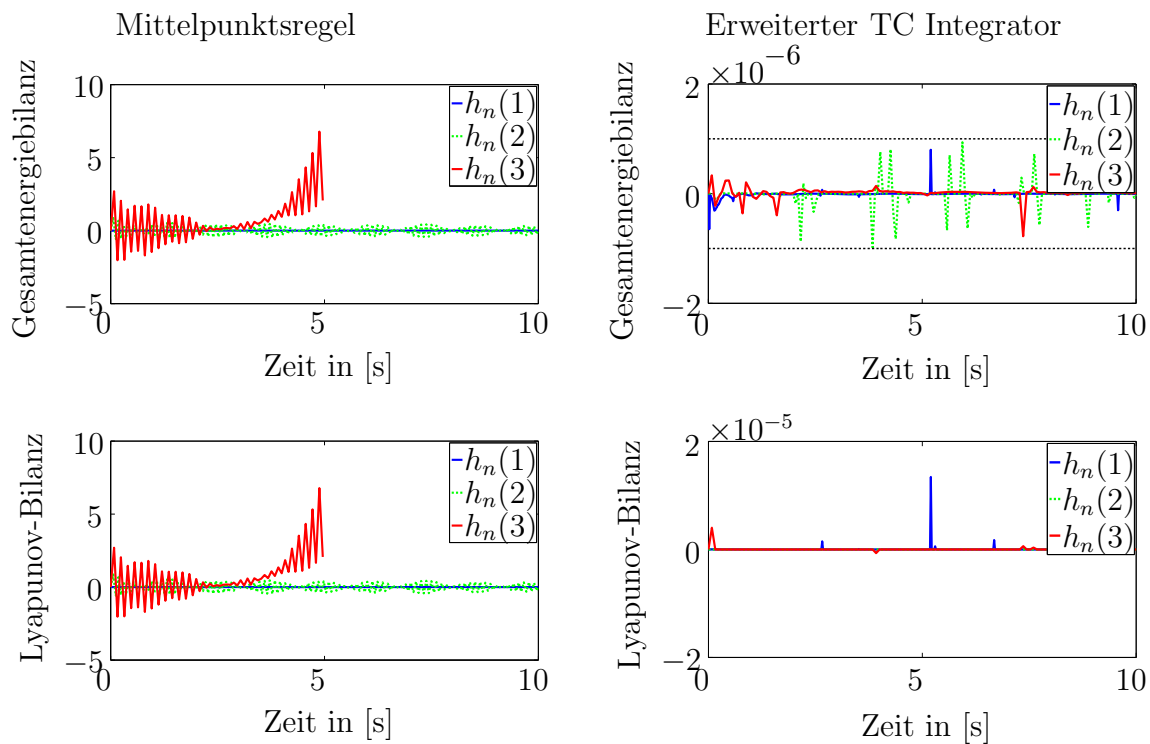


Abbildung 5.19.: Energiebilanz und Lyapunov-Bilanz - Mittelpunktsregel (links) und erweiterter TC Integrator (rechts) für die Zeitschrittweiten $h_n(1) = 20$ ms, $h_n(2) = 60$ ms und $h_n(3) = 80$ ms

Die Betrachtung der Gesamtenergiebilanz und der Lyapunov-Bilanz (s. Abbildung 5.19) zeigt ein weiteres Mal, dass der erweiterte TC Integrator die Energiekonsistenz im Bereich der vorgegebenen Toleranz erhält und die Lyapunov-Bilanz in der Toleranz von 10^{-5} J liegt. Die Mittelpunktsregel kann diese Konsistenzigenschaften nicht erfüllen. Dies führt bei einer Vergrößerung der Zeitschrittweite zu einem Abbruch.

5.4. Anwendungsbeispiel: Anschlagpuffer mit mechanischen Dirichlet- & Neumann-Rändern

Als Anwendungsbeispiel wird ein Anschlagpuffer eines VW Golfs aus mikrozelligem Polyurethan (s. Abbildung 5.20) betrachtet. Der Anschlagpuffer sitzt auf der Kolbenstange des vorderen Stoßdämpfers und kann sich dort frei bewegen. Nach Reimpell [86] und Reimpell und Stoll [87] dient der Stoßdämpfer der Sicherheit und dem Komfort beim Fahren. Der Stoßdämpfer ist zwischen der Achsmasse und der Aufbaumasse des Fahrzeuges befestigt und mindert die Schwingungen des Fahrzeuges, weshalb er auch als Schwingungsdämpfer bezeichnet wird. Der Anschlagpuffer nimmt über eine große Strecke, zusätzlich zum Feder-Dämpfersystem des Stoßdämpfers, die Federungsarbeit mit auf. Aufgrund dieser Eigenschaft wird der Anschlagpuffer auch Zusatzfeder genannt.

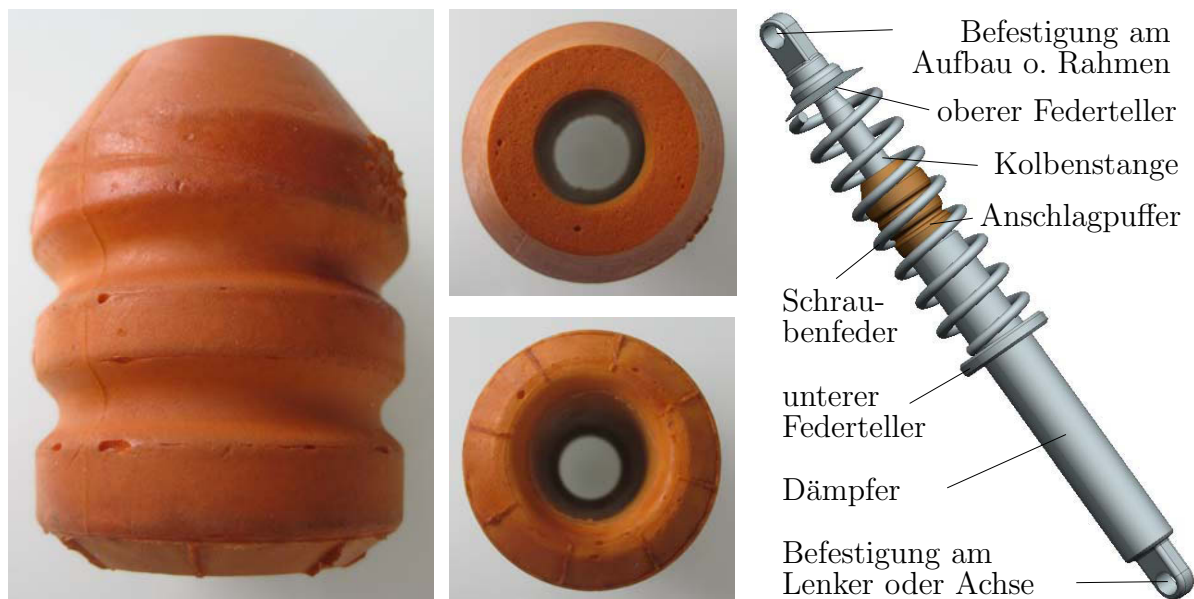


Abbildung 5.20.: Anschlagpuffer eines VW Golfs für den vorderen Stoßdämpfer - links: Seitenansicht des Anschlagpuffers, mittig: Draufsichten des Anschlagpuffers, rechts: Position des Anschlagpuffers im Stoßdämpfer

Die wichtigsten Abmessungen des Anschlagpuffer sind in Abbildung 5.21 dargestellt (Höhe: 6,3 cm, Außendurchmesser: 5 cm). Für die Simulation werden die Angaben um das 100-fache vergrößert und lediglich ein Viertel des Anschlagpuffers aus Symmetriegründen verwendet.

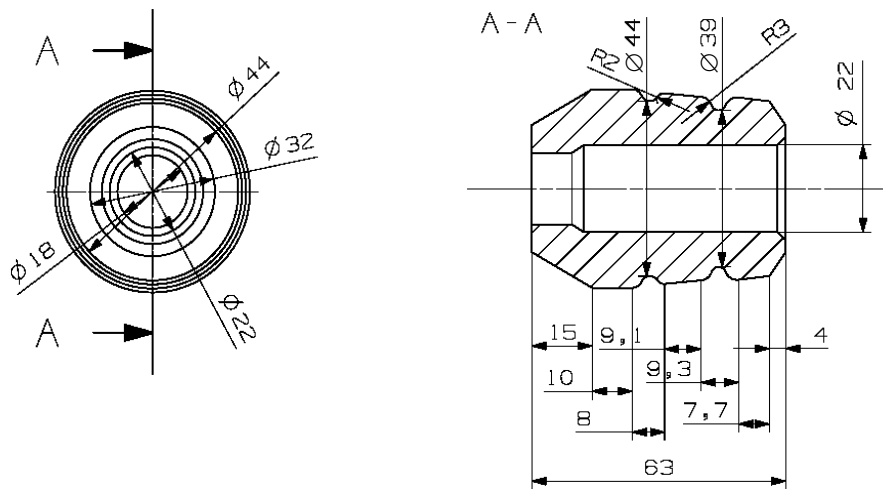


Abbildung 5.21.: Einzelteilzeichnung des Anschlagpuffers mit den wichtigsten Abmessungen, links: Draufsicht, rechts: Schnittansicht A-A

Wie in Abbildung 5.22 dargestellt, besitzt der Anschlagpuffer drei unterschiedliche, mechanische Dirichlet-Ränder $\partial_\varphi\mathcal{B}$. Die Schnittfläche in x - z -Richtung (grün) wird in y -Richtung fest gelagert und die Schnittfläche in y - z -Richtung (blau) wird in x -Richtung fest gehalten. Somit wird eine Verschiebung in Normalenrichtung zur Schnittfläche verhindert. Weiterhin wird der untere Rand des Anschlagpuffers (rot) in alle Richtungen unverschieblich angenommen.

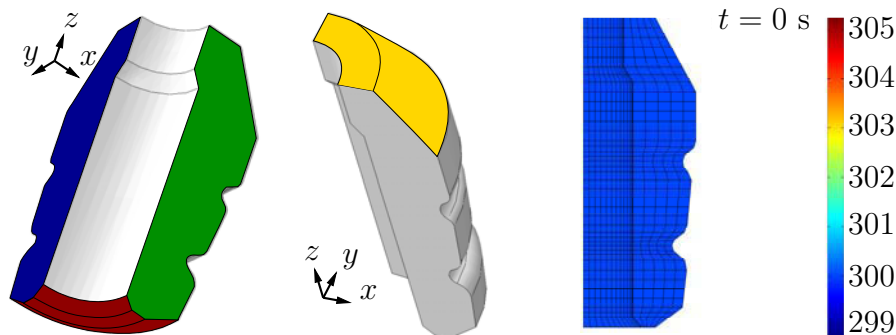


Abbildung 5.22.: links: mechanische Dirichlet-Ränder des Anschlagpuffers, mittig: mechanische Neumann-Ränder des Anschlagpuffers, rechts: diskretisierter Anschlagpuffer

Die mechanischen Neumann-Ränder $\partial_T\mathcal{B}$ werden nach Abbildung 5.22 auf den oberen Rand des Anschlagpuffers aufgegeben (gelb). Hierbei wird der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungsvektor $\mathbf{T}_{\frac{1}{2}}^{eA}$ durch eine sinusförmige Funktion in z -Richtung des Anschlagpuffers vorgegeben:

$$\mathbf{T}_{\frac{1}{2}}^{eA} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 4000 \end{bmatrix} \sin\left(\frac{2\pi}{4} \frac{t_{n+1} + t_n}{2}\right) \quad (5.6)$$

5. Numerische Beispiele des Kontinuums

Der Verlauf der externen Lasten ist in Abbildung 5.23 dargestellt.

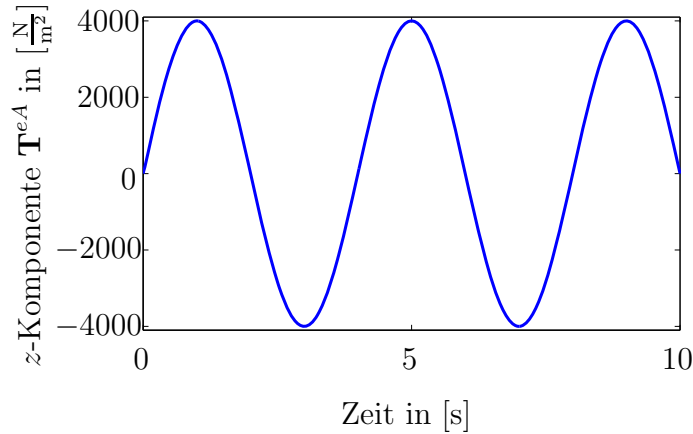


Abbildung 5.23.: Verlauf der z -Komponente der externen Lasten $\mathbf{T}^{eA}(t)$

Die räumliche Diskretisierung wird mit 2600 acht-knotigen Lagrange-Elementen durchgeführt, die die Knotenwerte \mathbf{x}^{eA} festlegen (s. Abbildung 5.22). Der Impuls des Anschlagpuffers zu Beginn der Bewegung ist $\mathbf{p}^{eA} = \mathbf{0}$. Zudem besitzt der Anschlagpuffer in der Referenzkonfiguration eine Temperatur von $\theta^{p^{eA}} = \theta_\infty$ und somit eine anfängliche Entropie von $s^{eA} = 0$. Die internen Variablen C_i^e entsprechen bei einer Zeit von $t = 0$ dem Einheitstensor I . Für die Referenztemperatur gilt $\theta_\infty = 300$ K und die betrachtete Dimension ist $n_{dim} = 3$.

Die Lamé-Parameter λ und μ , die viskosen Lamé-Parameter λ_e und μ_e sowie die Parameter V^{dev} und V^{vol} werden wie folgt gewählt:

$$\begin{array}{lll} \lambda = 30 \frac{\text{kJ}}{\text{m}^3} & \lambda_e = 3 \frac{\text{kJ}}{\text{m}^3} & V^{dev} = 100 \frac{\text{J s}}{\text{m}^3} \\ \mu = 7,5 \frac{\text{kJ}}{\text{m}^3} & \mu_e = 750 \frac{\text{J}}{\text{m}^3} & V^{vol} = 500 \frac{\text{J s}}{\text{m}^3} \end{array}$$

Tabelle 5.5.: Lamé- und viskose Parameter - Anschlagpuffer

Die Dichte ρ_0 , der Kopplungsparameter β , die Wärmekapazität k und die Wärmeleitfähigkeit κ lauten:

$$\rho_0 = 30 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \quad \kappa = 0,02 \frac{\text{W}}{\text{K m}} \quad k = 1,5 \frac{\text{kJ}}{\text{K m}^3} \quad \beta = 0,0001 \text{ K}^{-1}$$

Tabelle 5.6.: Dichte und thermische Parameter - Anschlagpuffer

Die zeitliche Diskretisierung wird mit dem erweiterten TC Integrator und einer äquidistanten Zeitschrittweite von $h_n = 10$ ms durchgeführt. Es wird eine globale Newton-Toleranz von $\varepsilon^{glo} = 10^{-6}$ J und eine lokale Newton-Toleranz von $\varepsilon^{loc} = 10^{-9}$ J gewählt.

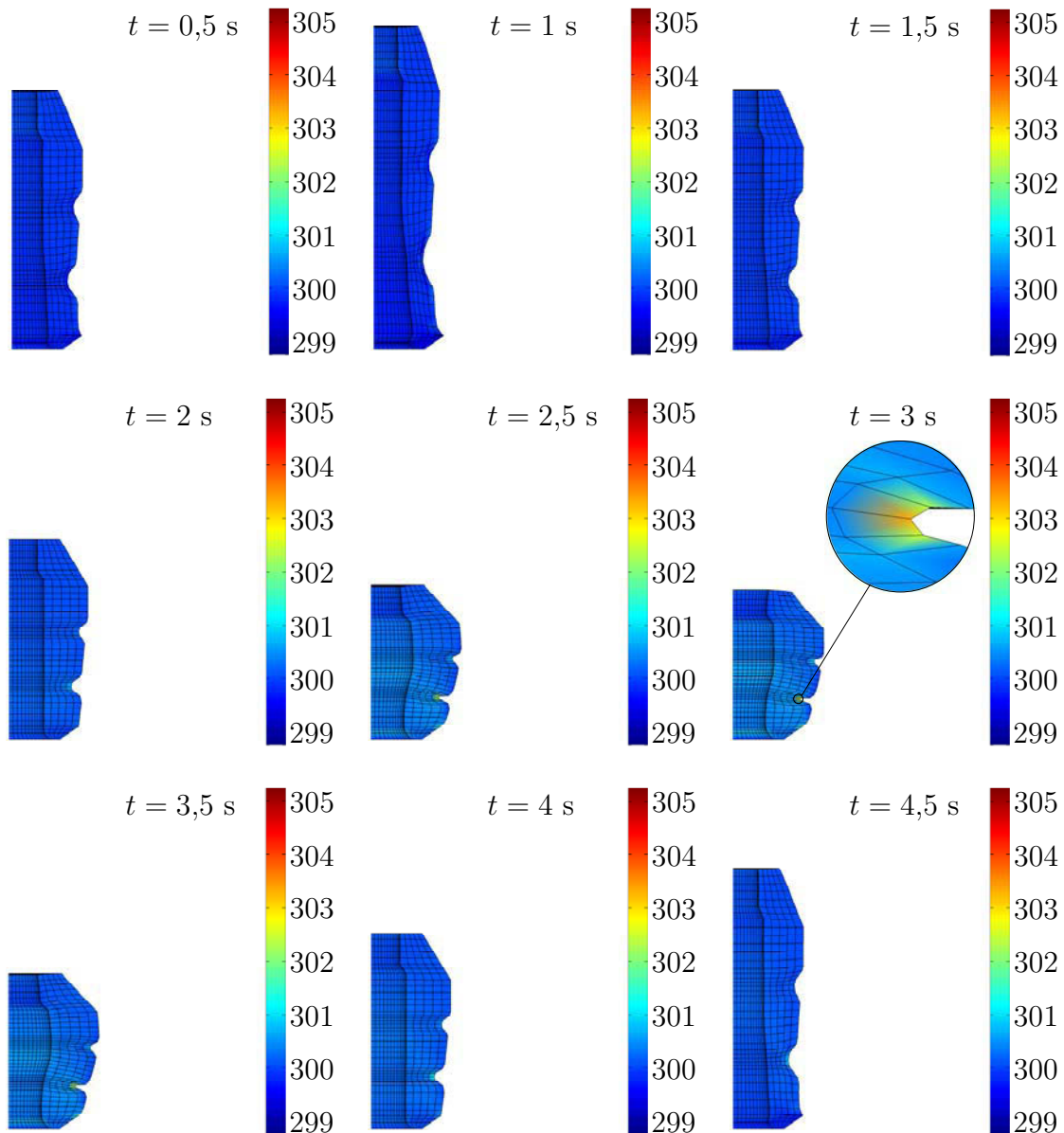


Abbildung 5.24.: Bewegung und Temperaturfeld des Anschlagpuffers für die Zeitpunkte $t = [0,5; 1; 1,5; 2; 2,5; 3; 3,5; 4; 4,5]$ s

Die Bewegung und das Temperaturfeld des Anschlagpuffers werden in Abbildung 5.24 für verschiedene Zeitschritte dargestellt. Dabei ist zu erkennen, dass der Anschlagpuffer

5. Numerische Beispiele des Kontinuums

zunächst ein dunkleres Blau annimmt als in der Referenzkonfiguration aus Abbildung 5.22. Anschließend wird er heller. Dies bedeutet, dass die Temperaturen in der Zugphase $t = [0, 2]$ s zunächst kleiner und anschließend größer werden (vgl. Holzapfel [37], Gough-Joule Effekt). Die größte Erwärmung tritt bei einem Durchmesser von $\varnothing 39$ mm auf.

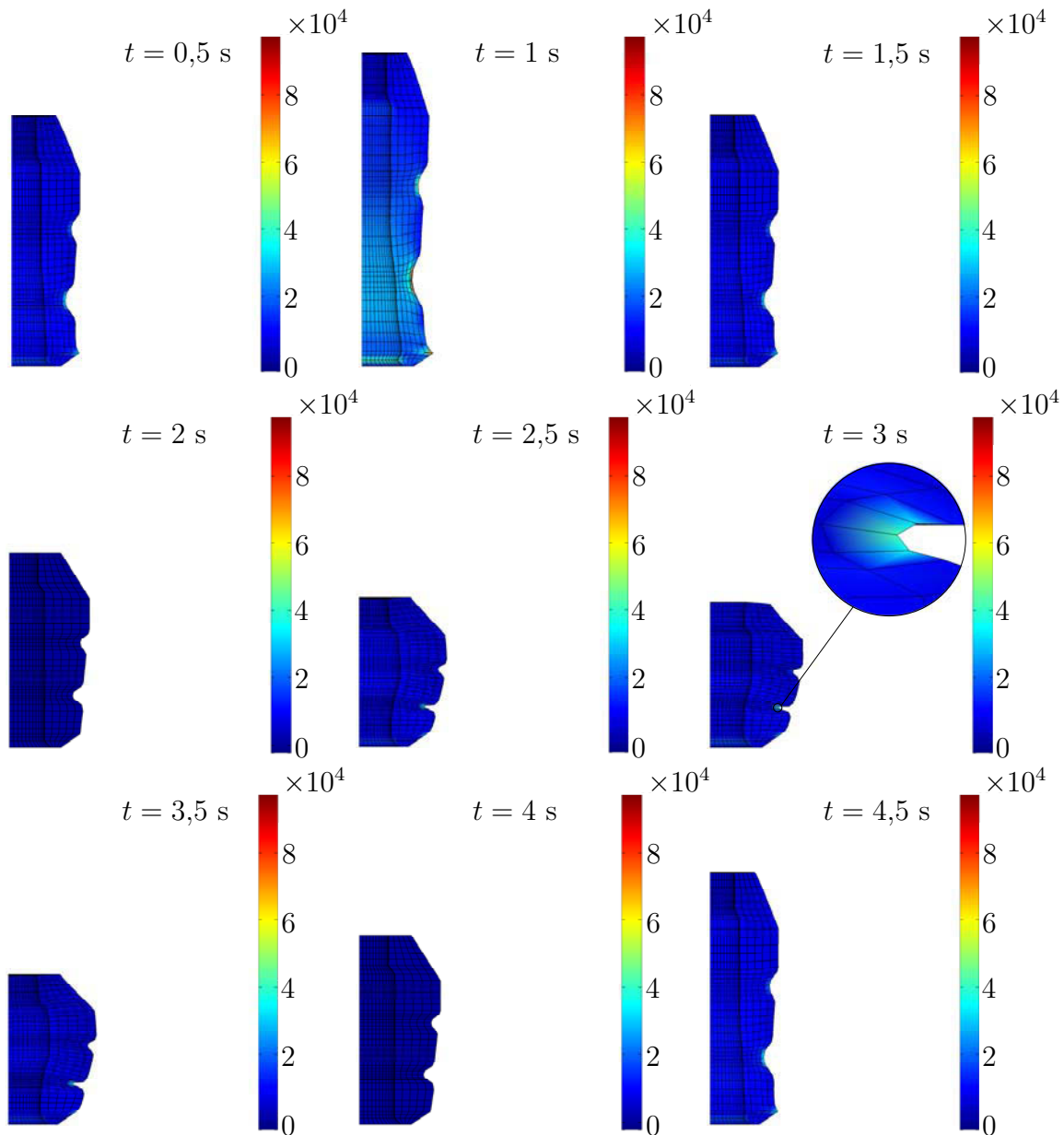


Abbildung 5.25.: Bewegung und Kirchhoffsches Spannungsfeld $||\tau||$ des Anschlagpuffers für die Zeitpunkte $t = [0,5; 1; 1,5; 2; 2,5; 3; 3,5; 4; 4,5]$ s

In Abbildung 5.25 ist das Spannungsfeld durch die Norm des Kirchhoffschen Spannungstensors $||\tau||$ dargestellt. Bei der Zugphase im Zeitraum $\mathcal{I} = [0, 2]$ s treten sehr hohe

Spannungen auf. Im Gegensatz dazu sind in der Druckphase $\mathcal{I} = [2, 4]$ s sehr geringe Druckspannungen zu erkennen. Die größte Druckspannung tritt bei einem Durchmesser von $\varnothing 39$ mm auf.

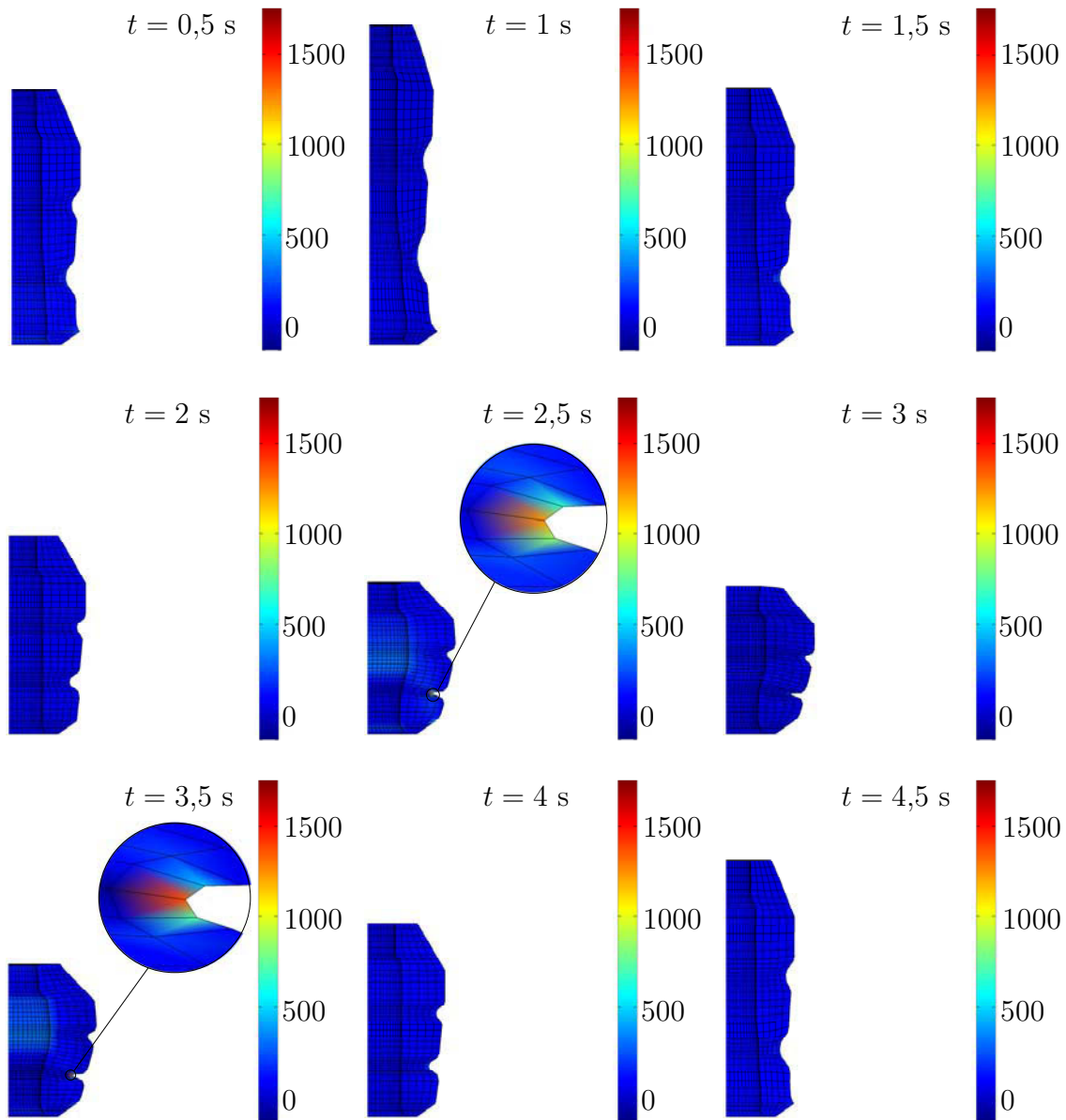


Abbildung 5.26.: Bewegung und inelastisches Spannungsfeld $\|\Gamma\|$ des Anschlagpuffers für die Zeitpunkte $t = [0,5; 1; 1,5; 2; 2,5; 3; 3,5; 4; 4,5]$ s

Das viskose Verhalten kann durch die Norm der inelastischen Spannungen $\|\Gamma\|$ verdeutlicht werden. In der Zugphase $\mathcal{I} = [0, 2]$ s sind sehr gleichmäßige Verteilungen zu

5. Numerische Beispiele des Kontinuums

erkennen. Erst in der Druckphase $\mathcal{I} = [2, 4]$ s wird das viskose Verhalten bei einem Durchmesser von $\varnothing 39$ mm sichtbar.

Die Gesamtenergie H , die Entropie S und die Lyapunov-Funktion V sind in Abbildung 5.27 dargestellt. Durch die externen mechanischen Neumann-Randbedingungen $\partial_T \mathcal{B}$ wird die Erhaltung der Gesamtenergie H sowie das stetige Abnehmen der Lyapunov-Funktion V gestört. Die Entropie S bleibt von den mechanischen Lasten unbeeinflusst und steigt stetig an.

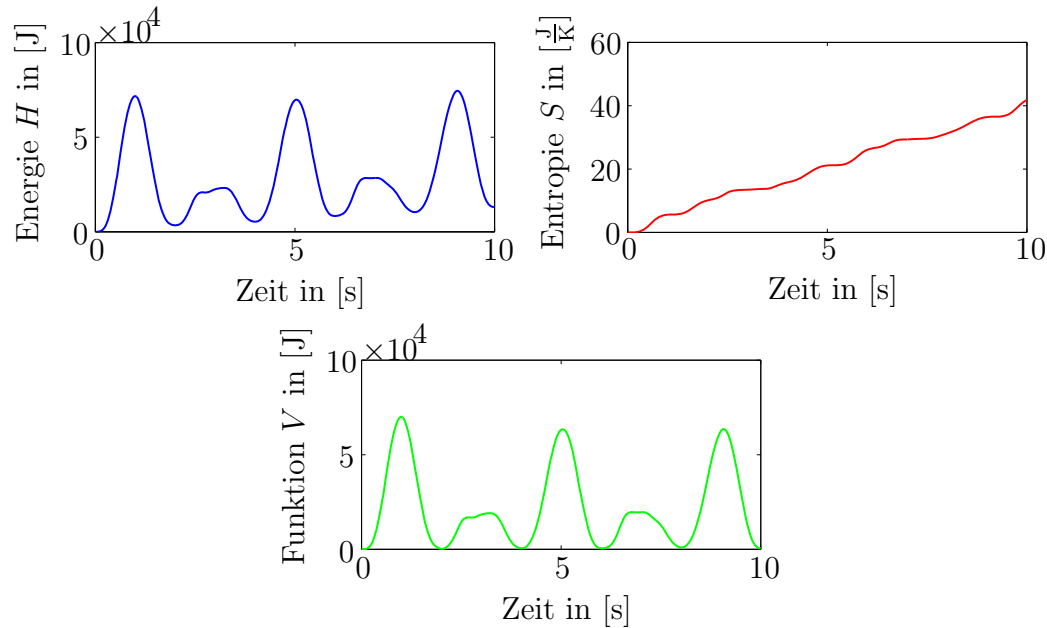


Abbildung 5.27.: Gesamtenergie H , Gesamtentropie S und Lyapunov-Funktion V des Anschlagpuffers für den erweiterter TC Integrator

Abbildung 5.28 stellt die Energiebilanz und die Lyapunov-Bilanz dar. Hier wird ein weiteres Mal die Konsistenz beider Funktionen gezeigt, wobei die Energiebilanz innerhalb der globalen Newton-Toleranz von 10^{-6} J und die Bilanz der Lyapunov-Funktion in den Grenzen von $[-2, 2] \cdot 10^{-6}$ J erhalten wird.

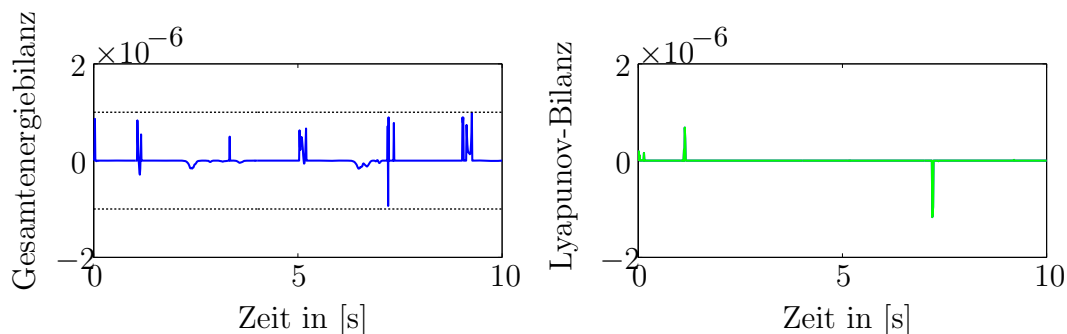


Abbildung 5.28.: Energiebilanz und Lyapunov-Bilanz des Anschlagpuffers für den erweiterter TC Integrator

6. Auswertung und Ausblick

6.1. Auswertung

Das Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines Energie-Entropie-konsistenten Zeitintegrators für die Thermoviskoelastodynamik. Die Vorteile dieses Zeitintegrators werden durch numerische Beispiele belegt.

Sowohl für das Modellproblem als auch die Kontinuumsmechanik wird das erweiterte GENERIC Format zugrunde gelegt, um die strukturellen Eigenschaften eines thermo-viskoelastischen Systems wiederzugeben. Diese strukturellen Eigenschaften sind: Impuls- und Drehimpulserhaltung sowie die Energieerhaltung für ein isoliertes System. Weiterhin kann eine stetig ansteigende Entropie und eine stetig abfallende Lyapunov-Funktion gezeigt werden.

Das System wird durch die Poissonschen Variablen beschrieben, die durch die Konfiguration, den Impuls, die Entropie und die interne Variable gegeben sind. Diese liefern jeweils vier Evolutionsgleichungen: zwei Bewegungsgleichungen, eine thermische Evolutionsgleichung und eine viskose Evolutionsgleichung.

Die thermische Evolutionsgleichung ist durch das isotrope Fouriersche Gesetz gegeben und die Beschreibung der viskosen Evolutionsgleichung erfolgt durch die viskose Nachgiebigkeit. Die viskose Nachgiebigkeit wird bei dem Modellproblem in Form eines inversen volumetrischen Viskositätsparameters und beim Kontinuum durch einen inversen vierstufigen Nachgiebigkeitstensor dargestellt.

Die Durchführung der Zeitintegration erfolgt mit der Mittelpunktsregel und mit dem erweiterten TC Integrator. Hierbei basiert der erweiterte TC Integrator auf partitionierten diskreten Gradienten.

Bereits in der Theorie lässt sich zeigen, dass die Mittelpunktsregel die Energieerhaltung und dadurch auch die Lyapunov-Bilanz für isolierte Systeme nicht erhalten kann. Der erweiterte TC Integrator ist für die Energieerhaltung konzipiert worden. Dies liefert

gleichzeitig eine konsistente Lyapunov-Bilanz. Die ansteigende Entropie kann von beiden Integratoren erfüllt werden. Weiterhin kann gezeigt werden, dass externe Lasten die Erhaltungseigenschaft der Energie stören. Diese externen Lasten werden in die Bilanzen integriert und werden Konsistenzeigenschaften genannt. Es wird somit nicht mehr die Erhaltung der Gesamtenergie, sondern die Bilanz der Gesamtenergie überprüft.

Die externen Lasten werden im Modellproblem nach der zeitlichen Diskretisierung zu den Evolutionsgleichungen aus dem erweiterten GENERIC Format hinzuaddiert. Beim Kontinuum ist dies anders. Da das erweiterte GENERIC Format auf die starken Formen angewandt wird, werden in den schwachen Formen die externen Lasten sichtbar und automatisch in das System integriert.

Als externe Lasten des Kontinuums werden mechanische und thermische Neumann-Ränder sowie mechanische Dirichlet-Ränder aufgebracht. Da die Poissonschen Variablen lediglich einen thermischen Dirichlet-Rand auf die Entropien zulassen, wird ein Weg gesucht, um Temperaturen anzusteuern. Temperaturen können durch Zwangsbedingungen beeinflusst werden, die durch Lagrangesche Multiplikatoren in das System aufgenommen werden. Diese Zwangsbedingung kann auch für das Modellproblem angewendet werden. Das erweiterte GENERIC Format wird dadurch um eine Matrix mit Lagrangeschen Multiplikatoren ergänzt.

Die Auswertung der Zwangsbedingung am momentanen Zeitknoten zeigt, dass die Lyapunov-Bilanz nicht erfüllt werden kann. Wird die Zwangsbedingung für die Temperaturen am Mittelpunkt der Konfiguration und der Entropie erzwungen, kann gezeigt werden, dass die Lyapunov-Bilanz erfüllt wird. Ein Nachteil ist jedoch die Veränderung der momentanen Gesamtenergie. Hier wird sich für die Auswertung am momentanen Zeitknoten entschieden, um ein energiekonsistentes Verfahren zu erhalten.

Für die Approximation des Kontinuums im Raum wird die Finite-Elemente-Methode (FEM) verwendet. Die Approximation der primären Variablen - Konfiguration, Impuls und Entropie - erfolgt durch die FEM. Die Testfunktionen werden auch mit Hilfe der FEM diskretisiert. Ein Problem stellt die Temperatur dar, die der Testfunktion der thermischen Evolutionsgleichung entspricht. Die Temperatur ist durch die Abhängigkeit von der Entropie und der Konfiguration keine primäre Variable. Um die Temperaturen am Knotenpunkt zu erhalten, muss eine Projektion der Temperatur am Gaußpunkt durchgeführt werden. Dadurch kann die Energieerhaltung für isolierte System auch nach der räumlichen Diskretisierung gewährleistet werden. Aus der Projektion folgt eine zusätzliche Gleichung, die gelöst werden muss.

Die numerischen Beispiele belegen, die in der Theorie beschriebenen Unterschiede der Mittelpunktsregel und des erweiterten TC Integrators. Die Mittelpunktsregel liefert für große Zeitschrittweiten unrealistische Ergebnisse. Weiterhin wird das bekannte blow-up Verhalten deutlich sichtbar, das zu Instabilitäten führt. Durch diese Instabilitäten bricht

die Berechnung frühzeitig ab. Die Zeitintegration durch den erweiterten TC Integrator und die Projektion der Temperaturen liefern einen Integrator, der die strukturellen Eigenschaften des Systems wiedergeben kann und dadurch auch für große Zeitschrittweiten stabil läuft. Die Ergebnisse des erweiterten TC Integrators mit großen Zeitschrittweiten sind mit den Ergebnissen für kleinere Zeitschrittweiten vergleichbar.

6.2. Ausblick

Quasi-inkompressible Polymere wie Gummi besitzen eine Querkontraktionszahl von $\nu = 0,5$. Bei biegedominierten Deformationsvorgängen kann es unter Verwendung von Standardverschiebungselementen zu einem numerischen Versteifungseffekt kommen, dem sogenannten *locking*. Eine Unterintegration schafft Abhilfe, kann aber zu unnatürlichen Deformationen (*hourglassing*) führen. Die *enhanced strain* Elemente für die lineare Theorie von Simo und Rifai [100] sowie die auf dem Variationsprinzip von Hu-Washizu basierenden Arbeiten von Simo und Armero [97] und Simo et al. [98] können hier weiterhelfen. In Wriggers und Reese [113] wird jedoch auch der Nachteil dieser Elemente für Drucklasten beschrieben. Die Unterintegration und ein Stabilisierungskonzept zur Vermeidung von unnatürlichen Deformationen werden in Reese [82] beschrieben. Weiterhin erfolgt darin die Darstellung der gemischten und der Enhanced-strain-Methode.

In der vorliegenden Arbeit wird die Wärmeleitung durch das Fouriersche Gesetz beschrieben. Dadurch steigt der Wärmefluss proportional zum Gradienten der Temperatur und die Wärmeleitung erfolgt durch die Diffusion (unendliche Ausbreitungsgeschwindigkeit). Nach Bargmann [2] ist das Fouriersche Gesetz sehr gut, um die meisten ingenieurtechnischen Anwendungen abzudecken. Bei einigen Phänomenen, wie z.B. tiefen Temperaturen, versagt jedoch dieses Gesetz, da hier Ausbreitungsgeschwindigkeiten des Zweiten Schalls auftreten (wellenförmig, endliche Ausbreitungsgeschwindigkeit). In Bargmann [2] wird auf die Theorie von Green und Naghdi [21] übergegangen, um diese Phänomene beschreiben zu können. Dabei wird ein thermisches Verschiebungsfeld zusätzlich zum mechanischen Verschiebungsfeld eingeführt. Maugin und Kalpakides [64] entwerfen eine Hamiltonsche Struktur für die Theorie von Green und Naghdi. Diese Struktur beinhaltet sowohl konservative (Hamiltonsche Systeme) als auch dissipative Systeme (Poissonsche Systeme). Die Formulierung der Thermoelastizität nach Maugin und Kalpakides [64] in der Hamiltonsche bzw. Poissonsche Struktur kann von großem Interesse für das erweiterte GENERIC Format sein und bedarf weiterer Untersuchungen.

Ein weiterer zu betrachtender Aspekt ist das Materialmodell. Wie bereits in der Einleitung erwähnt, gibt es, um Polymere zu beschreiben, weitaus komplexere nichtlineare Materialmodelle als das hier verwendete Neo-Hooke Modell. Zu nennen ist hier das Ogden-Modell (s. Ogden [76, 77]), das durch die hohe Anzahl von Parametern eine sehr hohe Anpassungsfähigkeit besitzt.

In dieser Arbeit wurden Integratoren zweiter Ordnung verwendet. Ein weiteres Ziel könnte die Einbindung von Zeitintegratoren höherer Ordnung sein (s. Groß [25]), um die Genauigkeit des Integrators zu steigern.

Um weitere ingenieurtechnische Anwendungen zu betrachten, müssen zusätzlich Randbedingungen wie Drucklasten (s. Simo et al. [105]) oder Kopplungen mit Starrkörpern (s. Sanger [93]) konsistent mit eingebunden werden. Weiterhin spielt die Kontaktmechanik (s. Hesch [33]) eine groe Rolle, um das Zusammenspiel mehrerer Komponenten realistisch wiederzugeben.

A. Anhang - Neo-Hooke Modell

Kunststoffe und speziell Gummi haben eine sehr große Bedeutung in der Klasse technischer Werkstoffe. Seit einigen Jahrzehnten werden diese immer mehr durch Polyurethan-Elastomere ersetzt. Die Polyurethane reichen von sehr harten und zähen Konstruktionswerkstoffen bis hin zu sehr weichen, gummielastischen Materialien (s. Bütche et al. [12]). Dabei werden makrozellige und mikrozellige Polyurethane unterschieden. Makrozellige Polyurethane sind sogenannte Schaumstoffe, die isotrop und sehr stark deformierbar sind. Diese können durch spezielle, dafür entwickelte Schaumstoffelemente simuliert werden (s. Markert [62]). Im Gegensatz dazu sind mikrozellige Polyurethane sehr kompressibel. Sie können durch die bereits sehr gut bekannten Kontinuums-elemente abgebildet werden. Bei den Polymeren wird im Gegensatz zu Metallen ein interessanter Effekt beobachtet - der sogenannte Gough-Joule Effekt (s. Reese [83]). Ein belastetes Polymer kühlt sich bei größer werdender Verzerrung zunächst ab und erhitzt sich anschließend. Weiterhin zeigt sich, dass sich ein Polymer zusammenzieht, wenn es unter Spannung steht und gleichzeitig erhitzt wird (s. Holzapfel [37]).

Als Materialmodell für Polymere wird ein Neo-Hooke Material (s. Groß [25] und darin enthaltene Referenzen) verwendet. Die freie Energie $\hat{\psi}$ dieses isotropen thermoviskoelastischen Materials kann in drei Anteile aufgeteilt werden:

$$\hat{\psi}(\mathbf{C}, \hat{\theta}, \mathbf{C}_i) = \psi^{com}(\mathbf{C}) + \hat{\psi}^{the}(\mathbf{C}, \hat{\theta}) + \psi^{vis}(\mathbf{C}, \mathbf{C}_i) \quad (\text{A.1})$$

Dabei beschreibt ψ^{com} die kompressible freie Energie des elastischen Materials, $\hat{\psi}^{the}$ gibt die thermische freie Energie wieder und ψ^{vis} liefert die viskose freie Energie.

A.1. Kompressible freie Energie

Polymere bestehen aus einem dreidimensionalen Netzwerk von langkettigen Makromolekülen. In Reese [83] werden drei mikromechanische Zugänge unter Verwendung der statistischen Mechanik vorgestellt, die die Verbindung zwischen den mikromechanischen Vorgängen und der makromechanischen Theorie darstellen. Die mikromechanischen Zugänge sind die Kettenstatistik und die statische Netzwerktheorie, die elastisches

Verhalten abbilden sowie die transiente Netzwerktheorie, die viskoelastisches Verhalten wiedergibt. Besteht ein Netzwerk aus langkettigen Makromolekülen, die ihre Vernetzung beibehalten, so beschreibt dies elastisches Verhalten. Zur Beschreibung elastischen Verhaltens wird im Weiteren die Gaußsche Netzwerktheorie verwendet, die zur statischen Netzwerktheorie gehört. Nach Treloar [107] werden folgende Annahmen getroffen:

- die Anzahl N der Moleküle haben die gleiche Länge
- die Abstände der Endpunkte werden mit einer Gaußverteilung bestimmt
- jedes einzelne Moleküle erfährt die gleiche Änderung wie das gesamte Material
- es findet keine Volumenänderung statt

Die freie Energie-Funktion eines inkompressiblen Materialverhaltens ψ^{inc} kann somit nach Treloar [107] wie folgt beschrieben werden:

$$\psi^{inc} = \frac{N k_B \theta_\infty}{2} \left(\sum_{k=1}^{n_{dim}} \lambda_k^2 - n_{dim} \right) \quad (\text{A.2})$$

Hierbei ist k_B die Boltzmann-Konstante und θ_∞ die Referenztemperatur. λ_k entspricht den Hauptstreckungen und n_{dim} der Dimension des betrachteten Materials. Das Produkt $N k_B \theta_\infty$ kann mit dem Lamé-Parameter $\mu > 0$ zusammengefasst werden, der die Steifigkeit des Materials wiedergibt. Die inkompressible freie Energie führt zu:

$$\psi^{inc} = \frac{\mu}{2} \left(\sum_{k=1}^{n_{dim}} \lambda_k^2 - n_{dim} \right) \quad (\text{A.3})$$

Die Summe der Hauptstreckungen $\sum_{k=1}^{n_{dim}} \lambda_k^2$ kann durch die Spur des rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensor $\text{tr } \mathbf{C}$ dargestellt werden:

$$\psi^{inc} = \frac{\mu}{2} (\text{tr } \mathbf{C} - n_{dim}) \quad (\text{A.4})$$

Diese Darstellung des inkompressiblen Materialverhaltens aus Gl. (A.4) bringt einige Probleme mit sich. Für große Deformationen sollte die Konfiguration im Ausgangszustand für $\lambda_k = 1$ spannungsfrei sein. Zusätzlich sollte gelten, dass für $\lambda_k \rightarrow 0$ die freie Energie unendlich groß ist und die Spannung gegen $-\infty$ läuft. Die inkompressible freie Energie aus Gl. (A.4) und deren erste Piola-Kirchhoffsche Hauptspannung $P_k = \frac{\partial \psi^{inc}}{\partial \lambda_k}$ liefern:

$$\lim_{\lambda_k \rightarrow 0} \psi^{inc} = -\frac{3}{2} \mu \quad P_k(\lambda_k = 1) = \mu \quad \lim_{\lambda_k \rightarrow 0} P_k = 0 \quad (\text{A.5})$$

Die Bedingungen können nur erhalten werden, wenn man einen zusätzlichen Term mit dem Parameter a und der Funktion H zur freien inkompressiblen Energie hinzufügt:

$$\bar{\psi}^{inc} = \frac{\mu}{2} (\text{tr } \mathbf{C} - n_{dim}) + a H^{inc} \quad (\text{A.6})$$

Bildet man nun die erste Piola-Kirchhoffsche Hauptspannung P_k , sollte diese die Bedingungen $P_k(\lambda_k = 1) = 0$ und $\lim_{\lambda_k \rightarrow 0} P_k = -\infty$ erfüllen. Der Parameter a muss somit dem negative Lamé-Parameter μ entsprechen und die Funktion H^{inc} dem Logarithmus der Jacobideterminante J :

$$a = -\mu \quad H^{inc} = \ln J \quad (\text{A.7})$$

Dies liefert für die erweiterte inkompressible freie Energie $\bar{\psi}^{inc}$:

$$\bar{\psi}^{inc} = \frac{\mu}{2} (\text{tr } C - n_{dim} - 2 \ln J) \quad (\text{A.8})$$

Um eine kompressible freie Energie ψ^{com} zu erhalten, wird nach Simo und Taylor [103] eine *Penalty*-Funktion (Bestrafung) G eingeführt, die als Spezialfall für $J = 1$ zu null wird und den inkompressiblen Fall wiedergibt. Zudem darf diese Funktion die bereits bekannten Bedingungen nicht aufheben:

$$\psi^{com} = \bar{\psi}^{inc} + \lambda G \quad (\text{A.9})$$

Der Penalty-Parameter $\lambda > 0$ entspricht dem zweiten Lamé-Parameter. Eine geeignete Funktion, die die bekannten Bedingungen nicht verändert, ist:

$$G = \frac{1}{2} [\ln^2 J + (J - 1)^2] \quad (\text{A.10})$$

Somit folgt für die kompressible freie Energie

$$\psi^{com} = \frac{\mu}{2} (\text{tr } C - n_{dim} - 2 \ln J) + \psi^{vol}(J) \quad (\text{A.11})$$

mit der volumetrischen freien Energie:

$$\psi^{vol}(J) = \lambda G = \frac{\lambda}{2} [\ln^2 J + (J - 1)^2] \quad (\text{A.12})$$

A.2. Thermische freie Energie

Die thermische freie Energie $\hat{\psi}^{the}$ wird zum einen durch die Funktion T dargestellt, die lediglich von der Temperatur abhängig ist. Sie kann durch die Wärmekapazität $k_{\mathcal{F}}$ berechnet werden. Zum anderen wird die thermische freie Energie durch einen Kopplungsterm M charakterisiert, der den Zusammenhang der Deformation und der Temperatur wiedergibt:

$$\hat{\psi}^{the} = T + M \quad (\text{A.13})$$

Der Term T kann, wie schon erwähnt, durch die Wärmekapazität $k_{\mathcal{F}}$ berechnet werden. Der Index $[\cdot]_{\mathcal{F}}$ bedeutet, dass die Wärmekapazität bei festgehaltener Deformation berechnet wird:

$$k = k_{\mathcal{F}} = -\hat{\theta} \frac{\partial^2 \hat{\psi}}{\partial \hat{\theta}^2} \quad (\text{A.14})$$

Werden, wie in Simo und Miehe [99] oder Simo [96], eine konstante Wärmekapazität $k = k_F > 0$ und die Legendre-Transformation $\hat{\psi} = \hat{e} - \hat{\theta} \hat{s}$ verwendet, dann kann die Wärmekapazität auch durch die Ableitung der Entropie s und der inneren Energie e ausgedrückt werden (s. Holzapfel [37]):

$$k = \hat{\theta} \frac{\partial \hat{s}}{\partial \hat{\theta}} \quad k = \frac{\partial \hat{e}}{\partial \hat{\theta}} \quad (\text{A.15})$$

Dadurch lässt sich der Term T durch die Integration der beiden letzten Terme analog zur Legendre-Transformation beschreiben:

$$\begin{aligned} T &= \int_{\theta_\infty}^{\hat{\theta}} k - \hat{\theta} \int_{\theta_\infty}^{\hat{\theta}} \frac{k}{\hat{\theta}} \\ &= k \left(\hat{\theta} - \theta_\infty - \hat{\theta} \ln \frac{\hat{\theta}}{\theta_\infty} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Der Kopplungsterm M basiert auf der linearen Theorie von Carlson [13]

$$M = \left(\hat{\theta} - \theta_\infty \right) \hat{M} \quad (\text{A.17})$$

wobei \hat{M} eine beliebige Funktion ist, die die thermische Ausdehnung beschreibt. Nach Simo und Miehe [99] besitzt diese Funktion folgende Struktur:

$$\hat{M} = -n_{dim} \beta \frac{\partial \psi^{vol}(J)}{\partial J} \quad (\text{A.18})$$

Die thermische freie Energie $\hat{\psi}^{the}$ kann mit dem konstanten Kopplungsparameter $\beta > 0$ beschrieben werden:

$$\hat{\psi}^{the} = k \left(\hat{\theta} - \theta_\infty - \hat{\theta} \ln \frac{\hat{\theta}}{\theta_\infty} \right) - n_{dim} \beta \left(\hat{\theta} - \theta_\infty \right) \frac{\partial \psi^{vol}(J)}{\partial J} \quad (\text{A.19})$$

A.3. Viskose freie Energie

Die viskose freie Energie ψ^{vis} lässt sich aus der kompressiblen freien Energie ψ^{com} herleiten. Hier wird lediglich das Argument der kompressiblen freien Energie ψ^{com} , dass dem rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensor C entspricht, durch den elastischen Deformationstensor C_e ausgetauscht:

$$\psi^{vis} = \frac{\mu_e}{2} (\text{tr} A - n_{dim} - 2 \ln J_e) + \psi^{vol}(J_e) \quad (\text{A.20})$$

Die viskose volumetrische freie Energie lautet:

$$\psi^{vol}(J_e) = \frac{\lambda_e}{2} [\ln^2 J_e + (J_e - 1)^2] \quad (\text{A.21})$$

B. Anhang - Modellproblem

B.1. Innere Energie für das Modellproblem

Das verwendete thermoviskoelastische Materialmodell für das Modellproblem wurde bereits im Anhangkapitel A beschrieben. Die tensorwertigen Skalarfunktionen aus Gl. (A.1) werden dabei in skalarwertige Skalarfunktionen umgewandelt. Das im Anhangkapitel A beschriebene Neo-Hooke Material wird in Lagrangeschen Variablen geschrieben und wird durch eine Legendre Transformation in Poissonsche Variablen überführt.

B.1.1. Lagrangesche Variablen

Die innere Energie \hat{e}_k des Modellproblems setzt sich aus einem kompressiblen Anteil der freien Energie ψ_k^{com} , einem thermischen Anteil der inneren Energie \hat{e}_k^{the} und einem viskosen Anteil der freien Energie ψ_k^{vis} zusammen, wobei:

$$\hat{e}_k^{the}(c_k, \hat{\theta}_k) = \hat{\psi}_k^{the}(c_k, \hat{\theta}_k) + \hat{\theta}_k \hat{s}_k(c_k, \hat{\theta}_k) \quad (\text{B.1})$$

Für das thermoviskoelastische Modellproblem wird die tensorwertige Skalarfunktion in eine skalarwertige Skalarfunktion umgewandelt, somit lautet die innere Energie:

$$\hat{e}_k(c_k, \hat{\theta}_k, c_{i_k}) = \psi_k^{com}(c_k) + \hat{\psi}_k^{the}(c_k, \hat{\theta}_k) + \hat{\theta}_k \hat{s}_k(c_k, \hat{\theta}_k) + \psi_k^{vis}(c_k, c_{i_k}) \quad (\text{B.2})$$

Der kompressible, der thermische und der viskose Anteil der freien Energiefunktion lauten:

$$\begin{aligned} \psi_k^{com} &= \frac{\mu_k}{2} (c_k - 1 - 2 \ln \sqrt{c_k}) + \psi_k^{vol}(J_k) \\ \psi_k^{vis} &= \frac{\mu_{e_k}}{2} (c_{e_k} - 1 - 2 \ln \sqrt{c_{e_k}}) + \psi_k^{vol}(J_{e_k}) \\ \hat{\psi}_k^{the} &= k_k \left(\vartheta_k - \hat{\theta}_k \ln \frac{\hat{\theta}_k}{\theta_\infty} \right) - \beta_k \hat{\vartheta}_k \frac{\partial \psi_k^{vol}(J_k)}{\partial J_k} \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Der volumetrische Anteil und dessen Ableitung nach der Jacobideterminante $J_{(\cdot)}$ sind

$$\begin{aligned}\psi_k^{vol}(J_{(\cdot)}) &= \frac{\lambda_{(\cdot)}}{2} [\ln^2 J_{(\cdot)} + (J_{(\cdot)} - 1)^2] \\ \frac{\partial \psi_k^{vol}(J_{(\cdot)})}{\partial J_{(\cdot)}} &= \lambda_{(\cdot)} \left(\frac{1}{J_{(\cdot)}} \ln J_{(\cdot)} + J_{(\cdot)} - 1 \right)\end{aligned}\quad (\text{B.4})$$

mit der elastischen Jacobideterminante $J_k = \sqrt{c_k}$ und der viskosen Jacobideterminante $J_{e_k} = \sqrt{c_{e_k}}$. Die Parameter μ_k bzw. μ_{e_k} und λ_k bzw. λ_{e_k} sind die Lamé-Parameter für den kompressiblen bzw. viskosen Anteil. Für die Entropie folgt nun nach Gl. (2.17):

$$\hat{s}_k = k_k \ln \frac{\hat{\theta}_k}{\theta_\infty} + \beta_k \frac{\partial \psi_k^{vol}(J_k)}{\partial J_k} \quad (\text{B.5})$$

B.1.2. Poissonsche Variablen

Um die innere Energie in Poissonschen Variablen darzustellen, wird die Umkehrfunktion der Gl. (B.5) gebildet, somit folgt θ_k zu:

$$\theta_k(c_k, s_k) = \theta_\infty \exp \left(\frac{s_k}{k_k} - \frac{\beta_k}{k_k} \frac{\partial \psi_k^{vol}(J_k)}{\partial J_k} \right) \quad (\text{B.6})$$

Die Legendre Transformation der freien Energie $\hat{\psi}_k^{the}$ führt zu der thermischen inneren Energie e_k^{the} :

$$\hat{\psi}_k^{the}(c_k, \hat{\theta}_k) \rightarrow e_k^{the}(c_k, s_k) \quad (\text{B.7})$$

Die innere Energie lautet

$$e_k(c_k, s_k, c_{i_k}) = \psi_k^{com}(c_k) + e_k^{the}(c_k, s_k) + \psi_k^{vis}(c_k, c_{i_k}) \quad (\text{B.8})$$

mit:

$$e_k^{the}(c_k, s_k) = k_k \vartheta_k + \beta_k \theta_\infty \frac{\partial \psi_k^{vol}(J_k)}{\partial J_k} \quad (\text{B.9})$$

Bemerkung B.1.1 *Es lässt sich sehr einfach zeigen, dass Gl. (2.10) gilt. Da lediglich der erste Term der thermischen inneren Energie $e_k^{the}(c_k, s_k)$ von der Entropie abhängig ist, folgt:*

$$\theta_k(c_k, s_k) = \frac{\partial e_k^{the}}{\partial s_k} = k_k \frac{\partial \vartheta_k}{\partial s_k} = k_k \frac{\partial \theta_k}{\partial s_k} \quad (\text{B.10})$$

Durch die Beziehung

$$\frac{\partial \theta_k}{\partial s_k} = \frac{\theta_\infty}{k_k} \exp \left(\frac{s_k}{k_k} - \frac{\beta_k}{k_k} \frac{\partial \psi_k^{vol}(J_k)}{\partial J_k} \right) \quad (\text{B.11})$$

folgt wieder Gl. (B.6).

B.1.3. Ableitungen für das Anfangswertproblem

Für das Anfangswertproblem werden die Ableitungen der inneren Energie e_k nach den Variablen c_k , s_k und c_{i_k} benötigt. Die Ableitung der inneren Energie e_k nach der Entropie s_k ist nach Gl. (2.10) die Temperatur θ_k , die durch Gl. (B.6) wiedergegeben wird. Die Ableitung der inneren Energie e_k nach der Deformation c_k besteht aus drei Termen

$$\frac{\partial e_k}{\partial c_k} = \frac{\partial \psi_k^{com}}{\partial c_k} + \frac{\partial \psi_k^{vis}}{\partial c_{e_k}} \frac{\partial c_{e_k}}{\partial c_k} + \frac{\partial e_k^{the}}{\partial c_k} \quad (\text{B.12})$$

mit

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_k^{com}}{\partial c_k} &= \frac{\mu_k}{2} \left(1 - \frac{1}{c_k}\right) + \frac{\partial \psi_k^{vol}(J_k)}{\partial J_k} \frac{1}{2 J_k} \\ \frac{\partial \psi_k^{vis}}{\partial c_{e_k}} &= \frac{\mu_{e_k}}{2} \left(1 - \frac{1}{c_{e_k}}\right) + \frac{\partial \psi_k^{vol}(J_{e_k})}{\partial J_{e_k}} \frac{1}{2 J_{e_k}} \\ \frac{\partial e_k^{the}}{\partial c_k} &= -\beta_k \frac{\partial^2 \psi_k^{vol}(J_k)}{\partial J_k^2} \frac{1}{2 J_k} (\theta_k - \theta_\infty) \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

und:

$$\frac{\partial^2 \psi_k^{vol}(J_{(\cdot)})}{\partial J_{(\cdot)}^2} = -\frac{\lambda_{(\cdot)}}{J_{(\cdot)}^2} (\ln J_{(\cdot)} - J_{(\cdot)}^2 - 1) \quad (\text{B.14})$$

Die Ableitung der elastischen Deformation c_{e_k} nach c_k entspricht:

$$\frac{\partial c_{e_k}}{\partial c_k} = c_{i_k}^{-1} \quad (\text{B.15})$$

Die Ableitung der inneren Energie e_k nach der internen Variablen c_{i_k} lautet:

$$\frac{\partial e_k}{\partial c_{i_k}} = \frac{\partial \psi_k^{vis}}{\partial c_{e_k}} \frac{\partial c_{e_k}}{\partial c_{i_k}} \quad (\text{B.16})$$

Mit der Ableitung der elastischen Deformation c_{e_k} nach c_{i_k} ergibt sich:

$$\frac{\partial c_{e_k}}{\partial c_{i_k}} = -c_k c_{i_k}^{-2} \quad (\text{B.17})$$

B.1.4. Ableitungen für die Tangentenmatrix

Die Tangentenmatrizen des Newton-Raphson-Verfahrens aus Kapitel B.4.3 benötigen die doppelten Ableitungen der Energie e_k nach den Deformationen c_k , den Entropien s_k und den internen Variablen c_{i_k} sowie sämtliche gemischte doppelte Ableitungen. Die doppelte Ableitung der Energie e_k nach den Deformationen setzt sich wie folgt zusammen:

$$\frac{\partial^2 e_k}{\partial c_k^2} = \frac{\partial^2 \psi_k^{com}}{\partial c_k^2} + \frac{\partial^2 \psi_k^{vis}}{\partial c_{e_k}^2} \left(\frac{\partial c_{e_k}}{\partial c_k}\right)^2 + \frac{\partial^2 e_k^{the}}{\partial c_k^2} \quad (\text{B.18})$$

Die Terme entsprechen dabei:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 \psi_k^{com}}{\partial c_k^2} &= \frac{\mu_k}{2 c_k^2} + \frac{1}{4 J_k^2} \left(\frac{\partial^2 \psi_k^{vol}(J_k)}{\partial J_k^2} - \frac{1}{J_k} \frac{\partial \psi_k^{vol}(J_k)}{\partial J_k} \right) \\
 \frac{\partial^2 \psi_k^{vis}}{\partial c_{e_k}^2} &= \frac{\mu_{e_k}}{2 c_{e_k}^2} + \frac{1}{4 J_{e_k}^2} \left(\frac{\partial^2 \psi_k^{vol}(J_{e_k})}{\partial J_{e_k}^2} - \frac{1}{J_{e_k}} \frac{\partial \psi_k^{vol}(J_{e_k})}{\partial J_{e_k}} \right) \\
 \frac{\partial^2 e_k^{the}}{\partial c_k^2} &= \left(\frac{1}{J_k} \frac{\partial^2 \psi_k^{vol}(J_k)}{\partial J_k^2} - \frac{\partial^3 \psi_k^{vol}(J_k)}{\partial J_k^3} \right) \frac{\beta_k}{4 J_k^2} (\theta - \theta_\infty) \\
 &\quad + \left(\frac{\partial^2 \psi_k^{vol}(J_k)}{\partial J_k^2} \right)^2 \frac{\beta_k^2 \theta_k}{4 k_k J_k^2}
 \end{aligned} \tag{B.19}$$

Die dreifache Ableitung der volumetrischen Energie $\psi_k^{vol}(J_{(\cdot)})$ nach der Jacobideterminante $J_{(\cdot)}$ lautet:

$$\frac{\partial^3 \psi_k^{vol}(J_{(\cdot)})}{\partial J_{(\cdot)}^3} = \frac{\lambda_{(\cdot)}}{J_{(\cdot)}^3} (2 \ln J_{(\cdot)} - 3) \tag{B.20}$$

Die doppelte Ableitung der inneren Energie e_k nach der Entropie s_k entspricht der Ableitung der Temperatur θ_k nach der Entropie s_k , die durch Gl. (B.11) gegeben ist.

Die doppelte Ableitung der inneren Energie e_k nach den interne Variablen c_{i_k} ist gegeben durch

$$\frac{\partial^2 e_k}{\partial c_{i_k}^2} = \frac{\partial^2 \psi_k^{vis}}{\partial c_{e_k}^2} \left(\frac{\partial c_{e_k}}{\partial c_{i_k}} \right)^2 + \frac{\partial \psi_k^{vis}}{\partial c_{e_k}} \frac{\partial^2 c_{e_k}}{\partial c_{i_k}^2} \tag{B.21}$$

mit:

$$\frac{\partial^2 c_{e_k}}{\partial c_{i_k}^2} = 2 c_k c_{i_k}^{-3} \tag{B.22}$$

Bei den gemischten skalaren Ableitungen gilt der Satz von Schwarz, der besagt, dass die Reihenfolge der Ableitungen von mehrfach differenzierbaren Funktionen keinen Einfluss auf das Ergebnis hat. Somit gilt:

$$\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y \partial x} \tag{B.23}$$

Die zwei möglichen, gemischten Ableitungen der inneren Energie lauten

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 e_k}{\partial c_k \partial s_k} &= -\frac{\beta_k}{2 k_k J_k} \frac{\partial^2 \psi_k^{vol}(J_k)}{\partial J_k^2} \theta_k \\
 \frac{\partial^2 e_k}{\partial c_k \partial c_{i_k}} &= \frac{\partial^2 \psi_k^{vis}}{\partial c_{e_k}^2} \frac{\partial c_{e_k}}{\partial c_k} \frac{\partial c_{e_k}}{\partial c_{i_k}} + \frac{\partial \psi_k^{vis}}{\partial c_{e_k}} \frac{\partial^2 c_{e_k}}{\partial c_k \partial c_{i_k}}
 \end{aligned} \tag{B.24}$$

mit der Ableitung der elastischen Deformationen c_{e_k} :

$$\frac{\partial^2 c_{e_k}}{\partial c_k \partial c_{i_k}} = -c_{i_k}^{-2} \tag{B.25}$$

B.2. Runge-Kutta-Verfahren

Für die Anwendung des Runge-Kutta-Verfahrens liegt folgendes Anfangswertproblem zugrunde:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{y}} &= \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) \\ \mathbf{y}(t_0) &= \mathbf{y}_0\end{aligned}\tag{B.26}$$

Das Butcher-Schema wird durch die Koeffizienten a_{ij} , b_j und c_j charakterisiert:

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_s \end{array}\tag{B.27}$$

Ein s -stufiges Runge-Kutta-Verfahren wird durch die folgende allgemeine vektorielle Form beschrieben

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h_n \mathbf{F}(t_n, \mathbf{y}_n, h_n, \mathbf{f})\tag{B.28}$$

mit:

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{K}_i \\ \mathbf{K}_i &= \mathbf{f}\left(t_n + c_i h_n, \mathbf{y}_n + h_n \sum_{j=1}^s a_{ij} \mathbf{K}_j\right)\end{aligned}\tag{B.29}$$

B.2.1. Mittelpunktsregel

Mit dem Butcher-Schema aus Gl. (2.78) für die einstufige Mittelpunktsregel ergeben sich die Vektoren \mathbf{F} und \mathbf{K}_1 :

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= \mathbf{K}_1 \\ \mathbf{K}_1 &= \mathbf{f}\left(t_n + \frac{1}{2} h_n, \mathbf{y}_n + h_n \frac{1}{2} \mathbf{K}_1\right)\end{aligned}\tag{B.30}$$

Mit der Zeitschrittweite h_n (s. Gl. (2.77)) und dem Vektor \mathbf{K}_1 aus Gl. (B.28) folgt die zeitliche Diskretisierung des Anfangswertproblems mittels Mittelpunktsregel

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h_n \mathbf{f}\left(t_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{y}_{n+\frac{1}{2}}\right)\tag{B.31}$$

mit der Auswertung am Mittelpunkt:

$$[\cdot]_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} ([\cdot]_n + [\cdot]_{n+1})\tag{B.32}$$

B.3. Berechnung der partitionierten diskreten Gradienten

In Gonzalez [19] wird der diskrete Gradiente $Df(x, y)$ einer Funktion $f(x, y)$ sowohl für den Fall mit einer Unbekannten als auch für den allgemeineren partitionierten Fall beschrieben. Der Fall des diskreten Gradienten mit einer Unbekannten lautet

$$Df(x, y) = Df(z) + \frac{f(y) - f(x) - Df(z) \cdot v}{\|v\|^2} v \quad (\text{B.33})$$

mit $z = \frac{1}{2}(x + y)$ und $v = y - x$. Für den Fall, dass $x = y$, gilt für den diskreten Gradienten $Df(x, y) = Df(z)$. Die diskreten Gradienten des partitionierten Falls Df_i setzen sich dabei aus den zwei Anteilen Df_{xy}^i und Df_{yx}^i zusammen:

$$\begin{aligned} Df(x, y) \cdot v &= \sum_{i=1}^r \frac{1}{2} [Df_{xy}^i(x_i, y_i) + Df_{yx}^i(x_i, y_i)] \cdot v_i \\ &= \sum_{i=1}^r Df_i \cdot v_i \end{aligned} \quad (\text{B.34})$$

Die beiden Anteile der partitionierten diskreten Gradienten Df_{xy}^i und Df_{yx}^i lassen sich allgemein nach Gl. (B.33) berechnen:

$$\begin{aligned} Df_{xy}^i(x_i, y_i) &= Df_{xy}^i(z_i) + \frac{f_{xy}^i(y_i) - f_{xy}^i(x_i) - Df_{xy}^i(z_i) \cdot (y_i - x_i)}{(y_i - x_i)^2} (y_i - x_i) \\ Df_{yx}^i(x_i, y_i) &= Df_{yx}^i(z_i) + \frac{f_{yx}^i(y_i) - f_{yx}^i(x_i) - Df_{yx}^i(z_i) \cdot (y_i - x_i)}{(y_i - x_i)^2} (y_i - x_i) \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

Sind die Variablen $v_i \in \mathbb{R}$, lassen sich die partitionierten diskreten Gradienten und die Variablen in einem Vektor $D\mathbf{f}^P$ und \mathbf{v} zusammenfassen

$$\sum_{i=1}^r \frac{1}{2} [Df_{xy}^i(x_i, y_i) + Df_{yx}^i(x_i, y_i)] v_i = D\mathbf{f}^P \cdot \mathbf{v} \quad (\text{B.36})$$

mit den zugehörigen Vektoren:

$$D\mathbf{f}^P = \begin{bmatrix} Df_1 \\ Df_2 \\ \vdots \\ Df_k \end{bmatrix} \quad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_k \end{bmatrix} \quad (\text{B.37})$$

Sind die Variablen x_i und y_i Skalare, vereinfacht sich die Berechnung der beiden Anteile zu

$$\begin{aligned} Df_{xy}^i(x_i, y_i) &= \frac{f_{xy}^i(y_i) - f_{xy}^i(x_i)}{y_i - x_i} \\ Df_{yx}^i(x_i, y_i) &= \frac{f_{yx}^i(y_i) - f_{yx}^i(x_i)}{y_i - x_i} \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

mit der Definition zur Berechnung der Funktionen f_{xy}^i und f_{yx}^i für:

$$\begin{aligned} f_{xy}^i(w) &= f(x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, w, y_{i+1}, \dots, y_k) \\ f_{yx}^i(w) &= f(y_1, y_2, \dots, y_{i-1}, w, x_{i+1}, \dots, x_k) \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

B.3.1. Partitionierte diskrete Gradienten - $r = 1$

Der einfachste Fall der partitionierten diskreten Gradienten entsteht, wenn $r = 1$ gewählt wird. Bei dieser Wahl gibt es lediglich einen partitionierten diskreten Gradienten Df_1 mit der Variablen $v_1 = y_1 - x_1$

$$Df_1 = \frac{1}{2} [Df_{xy}^1(x_1, y_1) + Df_{yx}^1(x_1, y_1)] \quad (\text{B.40})$$

mit den beiden Anteilen:

$$\begin{aligned} Df_{xy}^1(x_1, y_1) &= Df_{xy}^1(z_1) + \frac{f_{xy}^1(y_1) - f_{xy}^1(x_1) - Df_{xy}^1(z_1) \cdot (y_1 - x_1)}{(y_1 - x_1)^2} (y_1 - x_1) \\ Df_{yx}^1(x_1, y_1) &= Df_{yx}^1(z_1) + \frac{f_{yx}^1(y_1) - f_{yx}^1(x_1) - Df_{yx}^1(z_1) \cdot (y_1 - x_1)}{(y_1 - x_1)^2} (y_1 - x_1) \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

Die Auswertung der Funktionen f_{xy}^1 und f_{yx}^1 erfolgt mit Hilfe der Gl. (B.39). Da nur die Variablen x_1, y_1 vorhanden sind, ergibt sich:

$$\begin{aligned} f_{xy}^1(y_1) &= f(y_1) & f_{yx}^1(y_1) &= f(y_1) \\ f_{xy}^1(x_1) &= f(x_1) & f_{yx}^1(x_1) &= f(x_1) \\ Df_{xy}^1(z_1) &= Df(z_1) & Df_{yx}^1(z_1) &= Df(z_1) \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

In Gl. (B.41) eingesetzt, folgt:

$$\begin{aligned} Df_{xy}^1(x_1, y_1) &= Df(z_1) + \frac{f(y_1) - f(x_1) - Df(z_1) \cdot (y_1 - x_1)}{(y_1 - x_1)^2} (y_1 - x_1) \\ Df_{yx}^1(x_1, y_1) &= Df(z_1) + \frac{f(y_1) - f(x_1) - Df(z_1) \cdot (y_1 - x_1)}{(y_1 - x_1)^2} (y_1 - x_1) \end{aligned} \quad (\text{B.43})$$

Beide Anteile sind identisch. Für den Fall $r = 1$ entspricht der partitionierte diskrete Gradient gerade dem diskreten Gradienten aus Gl. (B.33):

$$Df_1 = Df(z_1) + \frac{f(y_1) - f(x_1) - Df(z_1) \cdot (y_1 - x_1)}{(y_1 - x_1)^2} (y_1 - x_1) \quad (\text{B.44})$$

Sind die Variablen x_i und y_i Skalare, vereinfacht sich die Gleichung weiter zu:

$$Df_1 = \frac{f(y_1) - f(x_1)}{y_1 - x_1} \quad (\text{B.45})$$

B.3.2. Partitionierte diskrete Gradienten - $r = 3$

Wird für die partitionierten diskreten Gradienten der Fall $r = 3$ gewählt, folgt für die Gl. (B.34):

$$Df(x, y) \cdot u = Df_1 \cdot (y_1 - x_1) + Df_2 \cdot (y_2 - x_2) + Df_3 \cdot (y_3 - x_3) \quad (\text{B.46})$$

Die zugehörigen partitionierten diskreten Gradienten lauten:

$$\begin{aligned} Df_1 &= \frac{1}{2} [Df_{xy}^1(x_1, y_1) + Df_{yx}^1(x_1, y_1)] \\ Df_2 &= \frac{1}{2} [Df_{xy}^2(x_2, y_2) + Df_{yx}^2(x_2, y_2)] \\ Df_3 &= \frac{1}{2} [Df_{xy}^3(x_3, y_3) + Df_{yx}^3(x_3, y_3)] \end{aligned} \quad (\text{B.47})$$

Die sechs Anteile des partitionierten diskreten Gradienten werden wie folgt gebildet:

$$\begin{aligned} Df_{xy}^1(x_1, y_1) &= Df_{xy}^1(z_1) + \frac{f_{xy}^1(y_1) - f_{xy}^1(x_1) - Df_{xy}^1(z_1) \cdot (y_1 - x_1)}{(y_1 - x_1)^2} (y_1 - x_1) \\ Df_{yx}^1(x_1, y_1) &= Df_{yx}^1(z_1) + \frac{f_{yx}^1(y_1) - f_{yx}^1(x_1) - Df_{yx}^1(z_1) \cdot (y_1 - x_1)}{(y_1 - x_1)^2} (y_1 - x_1) \\ Df_{xy}^2(x_2, y_2) &= Df_{xy}^2(z_2) + \frac{f_{xy}^2(y_2) - f_{xy}^2(x_2) - Df_{xy}^2(z_2) \cdot (y_2 - x_2)}{(y_2 - x_2)^2} (y_2 - x_2) \\ Df_{yx}^2(x_2, y_2) &= Df_{yx}^2(z_2) + \frac{f_{yx}^2(y_2) - f_{yx}^2(x_2) - Df_{yx}^2(z_2) \cdot (y_2 - x_2)}{(y_2 - x_2)^2} (y_2 - x_2) \\ Df_{xy}^3(x_3, y_3) &= Df_{xy}^3(z_3) + \frac{f_{xy}^3(y_3) - f_{xy}^3(x_3) - Df_{xy}^3(z_3) \cdot (y_3 - x_3)}{(y_3 - x_3)^2} (y_3 - x_3) \\ Df_{yx}^3(x_3, y_3) &= Df_{yx}^3(z_3) + \frac{f_{yx}^3(y_3) - f_{yx}^3(x_3) - Df_{yx}^3(z_3) \cdot (y_3 - x_3)}{(y_3 - x_3)^2} (y_3 - x_3) \end{aligned} \quad (\text{B.48})$$

Die Auswertung der Funktionen f_{xy}^i und f_{yx}^i erfolgt wieder nach Gl. (B.39):

$$\begin{aligned}
 f_{xy}^1(y_1) &= f(y_1, y_2, y_3) & f_{xy}^2(y_2) &= f(x_1, y_2, y_3) & f_{xy}^3(y_3) &= f(x_1, x_2, y_3) \\
 f_{xy}^1(x_1) &= f(x_1, y_2, y_3) & f_{xy}^2(x_2) &= f(x_1, x_2, y_3) & f_{xy}^3(x_3) &= f(x_1, x_2, x_3) \\
 f_{yx}^1(y_1) &= f(y_1, x_2, x_3) & f_{yx}^2(y_2) &= f(y_1, y_2, x_3) & f_{yx}^3(y_3) &= f(y_1, y_2, y_3) \\
 f_{yx}^1(x_1) &= f(x_1, x_2, x_3) & f_{yx}^2(x_2) &= f(y_1, x_2, x_3) & f_{yx}^3(x_3) &= f(y_1, y_2, x_3)
 \end{aligned} \tag{B.49}$$

Die Ableitungen $D f_{xy}^i(z_i)$ und $D f_{yx}^i(z_i)$ ergeben:

$$\begin{aligned}
 D f_{xy}^1(z_1) &= D_{z_1} f(z_1, y_2, y_3) & D f_{yx}^1(z_1) &= D_{z_1} f(z_1, x_2, x_3) \\
 D f_{xy}^2(z_2) &= D_{z_2} f(x_1, z_2, y_3) & D f_{yx}^2(z_2) &= D_{z_2} f(y_1, z_2, x_3) \\
 D f_{xy}^3(z_3) &= D_{z_3} f(x_1, x_2, z_3) & D f_{yx}^3(z_3) &= D_{z_3} f(y_1, y_2, z_3)
 \end{aligned} \tag{B.50}$$

Im Fall, dass $x_i, y_i \in \mathbb{R}$, vereinfachen sich die partitionierten diskreten Gradienten zu:

$$\begin{aligned}
 Df_1 &= \frac{f(y_1, y_2, y_3) - f(x_1, y_2, y_3)}{2(y_1 - x_1)} + \frac{f(y_1, x_2, x_3) - f(x_1, x_2, x_3)}{2(y_1 - x_1)} \\
 Df_2 &= \frac{f(x_1, y_2, y_3) - f(x_1, x_2, y_3)}{2(y_2 - x_2)} + \frac{f(y_1, y_2, x_3) - f(y_1, x_2, x_3)}{2(y_2 - x_2)} \\
 Df_3 &= \frac{f(x_1, x_2, y_3) - f(x_1, x_2, x_3)}{2(y_3 - x_3)} + \frac{f(y_1, y_2, y_3) - f(y_1, y_2, x_3)}{2(y_3 - x_3)}
 \end{aligned} \tag{B.51}$$

B.4. Newton-Raphson-Verfahren des Modellproblems

Zur Lösung des nichtlinearen Modellproblems wird das Newton-Raphson-Verfahren verwendet. Dabei werden zunächst die lokalen und globalen Residualvektoren aufgestellt, um danach die zugehörigen Tangentenmatrizen zu berechnen. Die Einträge der Tangentenmatrix werden sowohl für die Mittelpunktsregel als auch für den erweiterten TC Integrator beschrieben.

Die thermische Zwangsbedingung führt zu einer Erweiterung des globalen Residuums und der globalen Tangentenmatrix. Das Abbruchkriterium des Newton-Raphson-Verfahrens wird aus der Energiebilanz hergeleitet.

B.4.1. Residuum

Das Newton-Raphson-Verfahren ist durch die Iterationsvorschrift aus Gl. (2.113) beschrieben. Das thermoviskoelastische Doppelpendel besitzt zwei Residuen: ein lokales

Residuum $\mathbf{R}^{loc} \in \mathbb{R}^2$ und ein globales Residuum $\mathbf{R}^{glo} \in \mathbb{R}^8$, wobei \mathbf{R}^{loc} das Anfangswertproblem der viskosen Evolutionsgleichung beinhaltet:

$$\mathbf{R}^{loc} = \begin{bmatrix} \frac{c_{i_{1n+1}} - c_{i_{1n}}}{h_n} - \frac{4 c_{i_{1n+\frac{1}{2}}}^2}{V_1^{vol}} \Gamma_{1\frac{1}{2}} \\ \frac{c_{i_{2n+1}} - c_{i_{2n}}}{h_n} - \frac{4 c_{i_{2n+\frac{1}{2}}}^2}{V_2^{vol}} \Gamma_{2\frac{1}{2}} \end{bmatrix} \quad (\text{B.52})$$

Das globale Residuum \mathbf{R}^{glo} setzt sich aus den Bewegungsgleichungen und der thermischen Evolutionsgleichung zusammen:

$$\mathbf{R}^{glo} = \begin{bmatrix} \frac{2 m_1}{h_n^2} (\mathbf{q}_{1n+1} - \mathbf{q}_{1n}) - \frac{2}{h_n} \mathbf{p}_{1n} + \frac{S_{1\frac{1}{2}}}{L_1^2} \mathbf{q}_{1n+\frac{1}{2}} - \frac{S_{2\frac{1}{2}}}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} \\ \frac{2 m_2}{h_n^2} (\mathbf{q}_{2n+1} - \mathbf{q}_{2n}) - \frac{2}{h_n} \mathbf{p}_{2n} + \frac{S_{2\frac{1}{2}}}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} \\ \frac{s_{1n+1} - s_{1n}}{h_n} - \kappa \left(\frac{\theta_{2\frac{1}{2}}}{\theta_{1\frac{1}{2}}} - 1 \right) - \frac{D_{1\frac{1}{2}}^{int}}{\theta_{1\frac{1}{2}}} \\ \frac{s_{2n+1} - s_{2n}}{h_n} - \kappa \left(\frac{\theta_{1\frac{1}{2}}}{\theta_{2\frac{1}{2}}} - 1 \right) - \frac{D_{2\frac{1}{2}}^{int}}{\theta_{2\frac{1}{2}}} \end{bmatrix} \quad (\text{B.53})$$

Durch den linearen Zusammenhang des Impulses $\mathbf{p}_{k_{n+1}}$ und des Positionsvektors $\mathbf{q}_{k_{n+1}}$

$$\mathbf{p}_{k_{n+1}} = \frac{2 m_k}{h_n} (\mathbf{q}_{k_{n+1}} - \mathbf{q}_{k_n}) - \mathbf{p}_{k_n} \quad (\text{B.54})$$

kann durch Einsetzen in den dritten und vierten Eintrag des Anfangswertproblems die Größe des Residuums von $\mathbf{R}^{glo} \in \mathbb{R}^{14}$ auf $\mathbf{R}^{glo} \in \mathbb{R}^8$ verkleinert werden. Dadurch wird der Zustandsvektor der Unbekannten \mathbf{z}_{n+1} zu:

$$\mathbf{z}_{n+1} = [\mathbf{q}_{1n+1}, \mathbf{q}_{2n+1}, s_{1n+1}, s_{2n+1}, c_{i_{1n+1}}, c_{i_{2n+1}}] \quad (\text{B.55})$$

Die Gl. (B.54) bildet somit das *Update* (Aktualisierung) für den Impuls, der nach jedem Zeitschritt vollzogen werden muss. Die Aufspaltung des Anfangswertproblems in zwei Residuen folgt aus der internen Variablen c_{i_k} , die nach Bestimmung der Verzerrungen c_k in jeder Iteration neu bestimmt werden muss. Somit folgt ein lokales Newton-Raphson-Verfahren für die interne Variable c_{i_k} im Newton-Raphson-Verfahren des globalen Systems.

B.4.2. Tangentenmatrix

Nach Laursen und Meng [55] wird zur Bestimmung einer Tangentenmatrix des Residuums \mathbf{R} , das abhängig ist von \mathbf{z}_{n+1} , folgende Gleichungen aufgestellt

$$G(\mathbf{z}_{n+1}, \delta \mathbf{w}) + \Delta G(\mathbf{z}_{n+1}, \delta \mathbf{w}) = 0 \quad (\text{B.56})$$

mit

$$\begin{aligned}
 G(\mathbf{z}_{n+1}, \delta \mathbf{w}) &= \delta \mathbf{w} \cdot \mathbf{R} \\
 \Delta G(\mathbf{z}_{n+1}, \delta \mathbf{w}) &= \Delta_{\mathbf{q}_{1_{n+1}}} G(\mathbf{z}_{n+1}, \delta \mathbf{w}) + \Delta_{\mathbf{q}_{2_{n+1}}} G(\mathbf{z}_{n+1}, \delta \mathbf{w}) \\
 &\quad + \Delta_{s_{1_{n+1}}} G(\mathbf{z}_{n+1}, \delta \mathbf{w}) + \Delta_{s_{2_{n+1}}} G(\mathbf{z}_{n+1}, \delta \mathbf{w}) \\
 &\quad + \Delta_{c_{i_{1_{n+1}}}} G(\mathbf{z}_{n+1}, \delta \mathbf{w}) + \Delta_{c_{i_{2_{n+1}}}} G(\mathbf{z}_{n+1}, \delta \mathbf{w})
 \end{aligned} \tag{B.57}$$

und weiterhin:

$$\begin{aligned}
 \Delta_{(\cdot)_{n+1}} G(\mathbf{z}_{n+1}, \delta \mathbf{w}) &= \delta \mathbf{w} \cdot \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial (\cdot)_{n+1}} \Delta (\cdot)_{n+1} \\
 &= \delta \mathbf{w} \cdot \mathbf{K}_{(\cdot)} \Delta (\cdot)_{n+1}
 \end{aligned} \tag{B.58}$$

Nach Einsetzen der Gl. (B.57) und Gl. (B.58) in Gl. (B.56) folgt:

$$\begin{aligned}
 \delta \mathbf{w} \cdot \mathbf{R} &= -\delta \mathbf{w} \cdot \left(\mathbf{K}_{\mathbf{q}_1} \Delta \mathbf{q}_{1_{n+1}} + \mathbf{K}_{\mathbf{q}_2} \Delta \mathbf{q}_{2_{n+1}} + \mathbf{K}_{s_1} \Delta s_{1_{n+1}} \right. \\
 &\quad \left. + \mathbf{K}_{s_2} \Delta s_{2_{n+1}} + \mathbf{K}_{c_{i_1}} \Delta c_{i_{1_{n+1}}} + \mathbf{K}_{c_{i_2}} \Delta c_{i_{2_{n+1}}} \right)
 \end{aligned} \tag{B.59}$$

Lokale Tangentenmatrix

Das lokale Residuum \mathbf{R}^{loc} ist lediglich von den internen Variablen c_{i_k} und den Verzerrungen c_k abhängig. Somit sind die Ableitungen des lokalen Residuums \mathbf{R}^{loc} nach den Entropien $s_{1_{n+1}}$ und $s_{2_{n+1}}$ null und werden nicht berücksichtigt. Aus Gl. (B.59) folgt für das lokale Residuum

$$\delta \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{R}^{loc} = -\delta \mathbf{c}_i \cdot \left(\mathbf{K}_{\mathbf{q}_1}^{loc} \Delta \mathbf{q}_{1_{n+1}} + \mathbf{K}_{\mathbf{q}_2}^{loc} \Delta \mathbf{q}_{2_{n+1}} + \mathbf{K}_{c_{i_1}}^{loc} \Delta c_{i_{1_{n+1}}} + \mathbf{K}_{c_{i_2}}^{loc} \Delta c_{i_{2_{n+1}}} \right) \tag{B.60}$$

mit dem Vektor:

$$\delta \mathbf{c}_i = \begin{bmatrix} \delta c_{i_1} \\ \delta c_{i_2} \end{bmatrix} \tag{B.61}$$

Die Vektoren und Matrizen aus Gl. (B.60) können weiter zusammengefasst werden:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{K}_q^{loc} &= \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\mathbf{q}_1}^{loc} & \mathbf{K}_{\mathbf{q}_2}^{loc} \end{bmatrix} & \Delta \mathbf{q}_{n+1} &= \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{q}_{1_{n+1}} \\ \Delta \mathbf{q}_{2_{n+1}} \end{bmatrix} \\
 \mathbf{K}_{c_i}^{loc} &= \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{c_{i_1}}^{loc} & \mathbf{K}_{c_{i_2}}^{loc} \end{bmatrix} & \Delta \mathbf{c}_{i_{n+1}} &= \begin{bmatrix} \Delta c_{i_{1_{n+1}}} \\ \Delta c_{i_{2_{n+1}}} \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{B.62}$$

Die Tangentenmatrizen $\mathbf{K}_q^{loc} \in \mathbb{R}^{2 \times 6}$ und $\mathbf{K}_{c_i}^{loc} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ sowie die Vektoren $\Delta \mathbf{q}_{n+1} \in \mathbb{R}^6$ und $\Delta \mathbf{c}_{i_{n+1}} \in \mathbb{R}^2$ liefern:

$$\mathbf{R}^{loc} = -\mathbf{K}_q^{loc} \Delta \mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{K}_{c_i}^{loc} \Delta \mathbf{c}_{i_{n+1}} \tag{B.63}$$

Die aktuellen internen Variablen $\mathbf{c}_{i_{n+1}}^{k+1} = \begin{bmatrix} c_{i_{1_{n+1}}}^{k+1} & c_{i_{2_{n+1}}}^{k+1} \end{bmatrix}^T$ werden bei einem festen Zustandsvektor $\mathbf{q}_{n+1}^{k+1} = \mathbf{q}_{n+1}^k$ in der lokalen Iterationsschleife gesucht. Dies bedeutet, dass

der Vektor $\Delta \mathbf{q}_{n+1}$ zu null wird, da keine Veränderung vorliegt. Die aktuellen internen Variablen $\mathbf{c}_{i_{n+1}}^{k+1}$ folgen zu

$$\Delta \mathbf{c}_{i_{n+1}} = -\mathbf{K}_{c_i}^{loc^{-1}} \mathbf{R}^{loc} \quad (\text{B.64})$$

mit

$$\Delta(\cdot) = (\cdot)^{k+1} - (\cdot)^k \quad (\text{B.65})$$

um die Analogie zu Gl. (2.113) herzustellen.

Wird die Gl. (B.63) im globalen Newton-Raphson-Verfahren betrachtet, ist das lokale Residuum bereits konvergiert. Dies bedeutet, dass $\mathbf{R}^{loc}(\mathbf{c}_{i_{n+1}}^k) = \mathbf{0}$, und für Gl. (B.63) folgt:

$$\Delta \mathbf{c}_{i_{n+1}} = -\mathbf{K}_{c_i}^{loc^{-1}} \mathbf{K}_q^{loc} \Delta \mathbf{q}_{n+1} \quad (\text{B.66})$$

Globale Tangentenmatrix

Das globale Residuum \mathbf{R}^{glo} ist von allen Variablen des Zustandsvektors abhängig. Mit der Zusammenfassung der Matrizen und Vektoren ergibt sich:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_q^{glo} &= \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\mathbf{q}_1}^{glo} & \mathbf{K}_{\mathbf{q}_2}^{glo} \end{bmatrix} & \Delta \mathbf{q}_{n+1} &= \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{q}_{1_{n+1}} \\ \Delta \mathbf{q}_{2_{n+1}} \end{bmatrix} \\ \mathbf{K}_s^{glo} &= \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{s_1}^{glo} & \mathbf{K}_{s_2}^{glo} \end{bmatrix} & \Delta \mathbf{s}_{n+1} &= \begin{bmatrix} \Delta s_{1_{n+1}} \\ \Delta s_{2_{n+1}} \end{bmatrix} \\ \mathbf{K}_{c_i}^{glo} &= \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{c_{i_1}}^{glo} & \mathbf{K}_{c_{i_2}}^{glo} \end{bmatrix} & \Delta \mathbf{c}_{i_{n+1}} &= \begin{bmatrix} \Delta c_{i_{1_{n+1}}} \\ \Delta c_{i_{2_{n+1}}} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.67})$$

Daraus folgt für das globale Residuum aus Gl. (B.59):

$$\mathbf{R}^{glo} = -\mathbf{K}_q^{glo} \Delta \mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{K}_s^{glo} \Delta \mathbf{s}_{n+1} - \mathbf{K}_{c_i}^{glo} \Delta \mathbf{c}_{i_{n+1}} \quad (\text{B.68})$$

Die Tangentenmatrizen haben die Dimension $\mathbf{K}_q^{glo} \in \mathbb{R}^{6 \times 6}$, $\mathbf{K}_s^{glo} \in \mathbb{R}^{6 \times 2}$ und $\mathbf{K}_{c_i}^{glo} \in \mathbb{R}^{6 \times 2}$. Der Vektor der Entropien besitzt die Dimension $\Delta \mathbf{s}_{n+1} \in \mathbb{R}^2$. Wird der Vektor der internen Variablen $\Delta \mathbf{c}_{i_{n+1}}$ durch Gl. (B.66) ersetzt, dann kann das globale Residuum umgeschrieben werden zu:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^{glo} &= -\mathbf{K}_q^{glo} \Delta \mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{K}_s^{glo} \Delta \mathbf{s}_{n+1} + \mathbf{K}_{c_i}^{glo} \mathbf{K}_{c_i}^{loc^{-1}} \mathbf{K}_q^{loc} \Delta \mathbf{q}_{n+1} \\ &= - \begin{bmatrix} \mathbf{K}_q^{glo} - \mathbf{K}_{c_i}^{glo} \mathbf{K}_{c_i}^{loc^{-1}} \mathbf{K}_q^{loc} & \mathbf{K}_s^{glo} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{q}_{n+1} \\ \Delta \mathbf{s}_{n+1} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.69})$$

Die aktuellen Werte für die Positionsvektoren $\mathbf{q}_{n+1} = [\mathbf{q}_{1_{n+1}}, \mathbf{q}_{2_{n+1}}]$ und Entropien $\mathbf{s} = [s_{1_{n+1}}, s_{2_{n+1}}]$ berechnen sich zu:

$$\begin{bmatrix} \Delta \mathbf{q}_{n+1} \\ \Delta \mathbf{s}_{n+1} \end{bmatrix} = -\mathbf{K}^{glo^{-1}} \mathbf{R}^{glo} \quad (\text{B.70})$$

\mathbf{K}^{glo} ist dabei:

$$\mathbf{K}^{glo} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_q^{glo} - \mathbf{K}_{c_i}^{glo} \mathbf{K}_{c_i}^{loc^{-1}} \mathbf{K}_q^{loc} & \mathbf{K}_s^{glo} \end{bmatrix} \quad (\text{B.71})$$

B.4.3. Einträge der Tangentenmatrizen

Die nachfolgenden Matrizen sind allgemein gültig für die Mittelpunktsregel und den erweiterten TC Integrator. Die speziellen Ableitungen für jeden Integrator werden zum Schluss erläutert. Aus dem lokalen Residuum \mathbf{R}^{loc} entstehen zwei Tangentenmatrizen \mathbf{K}_q^{loc} und $\mathbf{K}_{c_i}^{loc}$. Die Einträge für das thermoviskoelastische Doppelpendel lauten:

$$\mathbf{K}_q^{loc} = \begin{bmatrix} 4 c_{i_1 n+\frac{1}{2}}^2 \frac{\partial \Gamma_{1\frac{1}{2}}}{V_1^{vol} \partial \mathbf{q}_{1n+1}} & \mathbf{0} \\ 4 c_{i_2 n+\frac{1}{2}}^2 \frac{\partial \Gamma_{2\frac{1}{2}}}{V_2^{vol} \partial \mathbf{q}_{2n+1}} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{K}_{c_i}^{loc} = \begin{bmatrix} \frac{1}{h_n} - \frac{4 c_{i_1 n+\frac{1}{2}}}{V_1^{vol}} \Gamma_{1\frac{1}{2}} - \frac{4 c_{i_1 n+\frac{1}{2}}^2}{V_1^{vol}} \frac{\partial \Gamma_{1\frac{1}{2}}}{\partial c_{i_1 n+\frac{1}{2}}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{h_n} - \frac{4 c_{i_2 n+\frac{1}{2}}}{V_2^{vol}} \Gamma_{2\frac{1}{2}} - \frac{4 c_{i_2 n+\frac{1}{2}}^2}{V_2^{vol}} \frac{\partial \Gamma_{2\frac{1}{2}}}{\partial c_{i_2 n+\frac{1}{2}}} \end{bmatrix} \quad (\text{B.72})$$

Die globale Tangentenmatrix \mathbf{K}_q^{glo} ist voll besetzt:

$$\mathbf{K}_q^{glo} = \begin{bmatrix} \left(\frac{2m_1}{h_n^2} + K^1 + K^2 \right) \mathbf{I} + \mathbf{K}^1 - \mathbf{K}_1^2 & -K^2 \mathbf{I} - \mathbf{K}_2^2 \\ -K^2 \mathbf{I} + \mathbf{K}_1^2 & \left(\frac{2m_2}{h_n^2} + K^2 \right) \mathbf{I} + \mathbf{K}_2^2 \\ K_{21} \frac{\partial \theta_{1\frac{1}{2}}}{\partial \mathbf{q}_{1n+1}} - \frac{1}{\theta_{1\frac{1}{2}}} \left(\kappa \frac{\partial \theta_{2\frac{1}{2}}}{\partial \mathbf{q}_{1n+1}} + \frac{\partial D_{1\frac{1}{2}}^{int}}{\partial \mathbf{q}_{1n+1}} \right) & -\frac{\kappa}{\theta_{1\frac{1}{2}}} \frac{\partial \theta_{2\frac{1}{2}}}{\partial \mathbf{q}_{2n+1}} \\ K_{12} \frac{\partial \theta_{2\frac{1}{2}}}{\partial \mathbf{q}_{1n+1}} - \frac{1}{\theta_{2\frac{1}{2}}} \left(\kappa \frac{\partial \theta_{1\frac{1}{2}}}{\partial \mathbf{q}_{1n+1}} + \frac{\partial D_{2\frac{1}{2}}^{int}}{\partial \mathbf{q}_{1n+1}} \right) & K_{12} \frac{\partial \theta_{2\frac{1}{2}}}{\partial \mathbf{q}_{2n+1}} - \frac{1}{\theta_{2\frac{1}{2}}} \frac{\partial D_{2\frac{1}{2}}^{int}}{\partial \mathbf{q}_{2n+1}} \end{bmatrix} \quad (\text{B.73})$$

Die Tangentenmatrix \mathbf{K}_s^{glo} des globalen Residuums \mathbf{R}^{glo} wird für das Doppelpendel folgendermaßen gebildet

$$\mathbf{K}_s^{glo} = \begin{bmatrix} \frac{\partial S_{1\frac{1}{2}}}{\partial s_{1n+1}} \frac{\mathbf{q}_{1n+\frac{1}{2}}}{L_1^2} & -\frac{\partial S_{2\frac{1}{2}}}{\partial s_{2n+1}} \frac{\mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}}}{L_2^2} \\ \mathbf{0} & \frac{\partial S_{2\frac{1}{2}}}{\partial s_{2n+1}} \frac{\mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}}}{L_2^2} \\ \frac{1}{h_n} + K_{21} \frac{\partial \theta_{1\frac{1}{2}}}{\partial s_{1n+1}} & -\frac{\kappa}{\theta_{1\frac{1}{2}}} \frac{\partial \theta_{2\frac{1}{2}}}{\partial s_{2n+1}} \\ -\frac{\kappa}{\theta_{2\frac{1}{2}}} \frac{\partial \theta_{1\frac{1}{2}}}{\partial s_{1n+1}} & \frac{1}{h_n} + K_{12} \frac{\partial \theta_{2\frac{1}{2}}}{\partial s_{2n+1}} \end{bmatrix} \quad (\text{B.74})$$

mit den Abkürzungen:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}^1 &= \frac{\mathbf{q}_{1_{n+\frac{1}{2}}}}{L_1^2} \otimes \frac{\partial S_{1_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{1_{n+1}}} & \mathbf{K}_j^2 &= \frac{\mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}}}{L_2^2} \otimes \frac{\partial S_{2_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} \\ K^j &= \frac{S_{j_{\frac{1}{2}}}}{2L_j^2} & K_{ij} &= \left(\kappa \theta_{i_{\frac{1}{2}}} + D_{j_{\frac{1}{2}}}^{int} \right) \frac{1}{\theta_{j_{\frac{1}{2}}}^2} \end{aligned} \quad (\text{B.75})$$

Die dritte globale Tangentenmatrix $\mathbf{K}_{c_i}^{glo}$ lautet:

$$\mathbf{K}_{c_i}^{glo} = \begin{bmatrix} \frac{\partial S_{1_{\frac{1}{2}}}}{\partial c_{i_{1_{n+1}}}} \frac{\mathbf{q}_{1_{n+\frac{1}{2}}}}{L_1^2} & -\frac{\partial S_{2_{\frac{1}{2}}}}{\partial c_{i_{2_{n+1}}}} \frac{\mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}}}{L_2^2} \\ \mathbf{0} & \frac{\partial S_{2_{\frac{1}{2}}}}{\partial c_{i_{2_{n+1}}}} \frac{\mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}}}{L_2^2} \\ -\frac{1}{\theta_{1_{\frac{1}{2}}}} \frac{\partial D_{1_{\frac{1}{2}}}^{int}}{\partial c_{i_{1_{n+1}}}} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\theta_{2_{\frac{1}{2}}}} \frac{\partial D_{2_{\frac{1}{2}}}^{int}}{\partial c_{i_{2_{n+1}}}} \end{bmatrix} \quad (\text{B.76})$$

Mittelpunktsregel

Die Mittelpunktsregel liefert für die Ableitung von $\Gamma_{k_{\frac{1}{2}}}$ aus Gl. (2.89)₂ nach den Positionsvektoren $\mathbf{q}_{j_{n+1}}$ und den internen Variablen $c_{i_{k_{n+1}}}$ die Beiträge für die lokalen Tangenten \mathbf{K}_q^{loc} und $\mathbf{K}_{c_i}^{loc}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Gamma_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} &= -\frac{\partial^2 e_k}{\partial c_{i_k} \partial c_k} \left(c_{k_{\frac{1}{2}}}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right) \frac{\partial c_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} \\ \frac{\partial \Gamma_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial c_{i_{k_{n+1}}}} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 e_k}{\partial c_{i_k}^2} \left(c_{k_{\frac{1}{2}}}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.77})$$

mit den Ableitungen der Verzerrungen:

$$\frac{\partial c_{1_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{1_{n+1}}} = \frac{1}{L_1^2} \mathbf{q}_{1_{n+\frac{1}{2}}} \quad \frac{\partial c_{2_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{2_{n+1}}} = \frac{1}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} \quad \frac{\partial c_{2_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{1_{n+1}}} = -\frac{1}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} \quad (\text{B.78})$$

Die globalen Tangentenmatrizen \mathbf{K}_q^{glo} , \mathbf{K}_s^{glo} und $\mathbf{K}_{c_i}^{glo}$ benötigen die Ableitungen der Spannungen $S_{k_{\frac{1}{2}}}$ aus Gl. (2.89)₁, die Ableitungen der Temperaturen $\theta_{k_{\frac{1}{2}}}$ und der inneren Dissipation $D_{k_{\frac{1}{2}}}^{int}$ aus Gl. (2.85). Die Spannung $S_{k_{\frac{1}{2}}}$ wird nach den Positionsvektoren

$\mathbf{q}_{j_{n+1}}$, den Entropien $s_{k_{n+1}}$ und den internen Variablen $c_{i_{k_{n+1}}}$ abgeleitet:

$$\begin{aligned}\frac{\partial S_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} &= 2 \frac{\partial^2 e_k}{\partial c_k^2} \left(c_{k_{\frac{1}{2}}}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right) \frac{\partial c_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} \\ \frac{\partial S_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial s_{k_{n+1}}} &= \frac{\partial^2 e_k}{\partial c_k \partial s_k} \left(c_{k_{\frac{1}{2}}}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right) \\ \frac{\partial S_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial c_{i_{k_{n+1}}}} &= \frac{\partial^2 e_k}{\partial c_k \partial c_{i_k}} \left(c_{k_{\frac{1}{2}}}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right)\end{aligned}\quad (\text{B.79})$$

Die Temperaturen $\theta_{k_{\frac{1}{2}}}$ sind nur von den Positionsvektoren $\mathbf{q}_{j_{n+1}}$ und den Entropien $s_{k_{n+1}}$ abhängig. Dies liefert die zwei Ableitungen:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \theta_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} &= \frac{\partial^2 e_k}{\partial s_k \partial c_k} \left(c_{k_{\frac{1}{2}}}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right) \frac{\partial c_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} \\ \frac{\partial \theta_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial s_{k_{n+1}}} &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2 e_k}{\partial s_k^2} \left(c_{k_{\frac{1}{2}}}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right)\end{aligned}\quad (\text{B.80})$$

Die innere Dissipation $D_{k_{\frac{1}{2}}}^{int}$ wird nach den Positionsvektoren $\mathbf{q}_{j_{n+1}}$ und den internen Variablen $c_{i_{k_{n+1}}}$ abgeleitet:

$$\begin{aligned}\frac{\partial D_{k_{\frac{1}{2}}}^{int}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} &= \frac{8}{V_k^{vol}} c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}}^2 \Gamma_{k_{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \Gamma_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} \\ \frac{\partial D_{k_{\frac{1}{2}}}^{int}}{\partial c_{i_{k_{n+1}}}} &= \frac{4}{V_k^{vol}} c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \Gamma_{k_{\frac{1}{2}}}^2 + \frac{8}{V_k^{vol}} c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}}^2 \Gamma_{k_{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \Gamma_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial c_{i_{k_{n+1}}}}\end{aligned}\quad (\text{B.81})$$

Erweiterter TC Integrator

Die Ableitungen der Spannungen $\Gamma_{k_{\frac{1}{2}}}$ und $S_{k_{\frac{1}{2}}}$ und den Temperaturen $\theta_{k_{\frac{1}{2}}}$ lassen sich für den erweiterten TC Integrator sehr einfach aus Gl. (2.98), Gl. (2.102) und Gl. (2.97)₁ gewinnen

$$\begin{aligned}\frac{\partial S_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} &= 2 \frac{\partial \mathcal{D}_{c_k} e_k}{\partial c_{k_{n+1}}} \frac{\partial c_{k_{n+1}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} & \frac{\partial \Gamma_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} &= - \frac{\partial \mathcal{D}_{c_{i_k}} e_k}{\partial c_{k_{n+1}}} \frac{\partial c_{k_{n+1}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} & \frac{\partial \theta_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} &= \frac{\partial \mathcal{D}_{s_k} e_k}{\partial c_{k_{n+1}}} \frac{\partial c_{k_{n+1}}}{\partial \mathbf{q}_{j_{n+1}}} \\ \frac{\partial S_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial s_{k_{n+1}}} &= 2 \frac{\partial \mathcal{D}_{c_k} e_k}{\partial s_{k_{n+1}}} & \frac{\partial \Gamma_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial c_{i_{k_{n+1}}}} &= - \frac{\partial \mathcal{D}_{c_{i_k}} e_k}{\partial c_{i_{k_{n+1}}}} & \frac{\partial \theta_{k_{\frac{1}{2}}}}{\partial s_{k_{n+1}}} &= \frac{\partial \mathcal{D}_{s_k} e_k}{\partial s_{k_{n+1}}}\end{aligned}\quad (\text{B.82})$$

mit den Ableitungen des Deformationsmaßes:

$$\frac{\partial c_{1_{n+1}}}{\partial \mathbf{q}_{1_{n+1}}} = \frac{2}{L_1^2} \mathbf{q}_{1_{n+1}} \quad \frac{\partial c_{2_{n+1}}}{\partial \mathbf{q}_{2_{n+1}}} = \frac{2}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+1} \quad \frac{\partial c_{2_{n+1}}}{\partial \mathbf{q}_{1_{n+1}}} = -\frac{2}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+1} \quad (\text{B.83})$$

Die innere Dissipation $D_{k\frac{1}{2}}^{int}$ aus Gl. (2.97)₂ wird nach Gl. (B.81) bestimmt.

Ableitung der partitionierten diskreten Gradienten

Im Folgenden werden die Ableitungen der diskreten partitionierten Gradienten aufgeführt. Das Symbol $\Delta(\cdot)$ entspricht hier der Differenz $(\cdot)_{n+1} - (\cdot)_n$. Für die Ableitungen der Spannungen $\mathbb{D}_{c_k} e_k$ folgt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbb{D}_{c_k} e_k}{\partial c_{k_{n+1}}} &= \frac{\frac{\partial e_k}{\partial c_k} (c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}}) + \frac{\partial e_k}{\partial c_k} (c_{k_{n+1}}, s_{k_n}, c_{i_{k_n}})}{2 \Delta c_k} - \frac{\mathbb{D}_{c_k} e_k}{\Delta c_k} \\ \frac{\partial \mathbb{D}_{c_k} e_k}{\partial s_{k_{n+1}}} &= \frac{\frac{\partial e_k}{\partial s_k} (c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}}) - \frac{\partial e_k}{\partial s_k} (c_{k_n}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}})}{2 \Delta c_k} \\ \frac{\partial \mathbb{D}_{c_k} e_k}{\partial c_{i_{k_{n+1}}}} &= \frac{\frac{\partial e_k}{\partial c_{i_k}} (c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}}) - \frac{\partial e_k}{\partial c_{i_k}} (c_{k_n}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}})}{2 \Delta c_k} \end{aligned} \quad (\text{B.84})$$

Für den Grenzfallfall, dass $c_{k_{n+1}} = c_{k_n}$, ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbb{D}_{c_k} e_k}{\partial c_{k_{n+1}}} &= \frac{1}{4} \frac{\partial^2 e_k}{\partial c_k^2} (c_{k_{n+\frac{1}{2}}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}}) + \frac{1}{4} \frac{\partial^2 e_k}{\partial c_k^2} (c_{k_{n+\frac{1}{2}}}, s_{k_n}, c_{i_{k_n}}) \\ \frac{\partial \mathbb{D}_{c_k} e_k}{\partial s_{k_{n+1}}} &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2 e_k}{\partial c_k \partial s_k} (c_{k_{n+\frac{1}{2}}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}}) \\ \frac{\partial \mathbb{D}_{c_k} e_k}{\partial c_{i_{k_{n+1}}}} &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2 e_k}{\partial c_k \partial c_{i_k}} (c_{k_{n+\frac{1}{2}}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}}) \end{aligned} \quad (\text{B.85})$$

Die Ableitungen der Temperaturen $\mathbb{D}_{s_k} e_k$ nach den Entropien $s_{k_{n+1}}$ und den Verzerrungen $c_{k_{n+1}}$ lassen sich analog berechnen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbb{D}_{s_k} e_k}{\partial s_{k_{n+1}}} &= \frac{\frac{\partial e_k}{\partial s_k} (c_{k_n}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}}) + \frac{\partial e_k}{\partial s_k} (c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_n}})}{2 \Delta s_k} - \frac{\mathbb{D}_{s_k} e_k}{\Delta s_k} \\ \frac{\partial \mathbb{D}_{s_k} e_k}{\partial c_{k_{n+1}}} &= \frac{\frac{\partial e_k}{\partial c_k} (c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_n}}) - \frac{\partial e_k}{\partial c_k} (c_{k_{n+1}}, s_{k_n}, c_{i_{k_n}})}{2 \Delta s_k} \end{aligned} \quad (\text{B.86})$$

Der Grenzfall von $s_{k_{n+1}} = s_{k_n}$ wirkt sich auf die Ableitungen wie folgt aus:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{D}_{s_k} e_k}{\partial s_{k_{n+1}}} &= \frac{1}{4} \frac{\partial e_k}{\partial s_k^2} \left(c_{k_n}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_{n+1}}} \right) + \frac{1}{4} \frac{\partial e_k}{\partial s_k^2} \left(c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_n}} \right) \\ \frac{\partial \mathcal{D}_{s_k} e_k}{\partial c_{k_{n+1}}} &= \frac{1}{2} \frac{\partial e_k}{\partial s_k \partial c_k} \left(c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+\frac{1}{2}}}, c_{i_{k_n}} \right)\end{aligned}\quad (\text{B.87})$$

Die Ableitungen des diskreten Gradienten $\mathcal{D}_{c_{i_k}} e_k$ mit der Abhängigkeit von $c_{i_{k_{n+1}}}$ und $c_{k_{n+1}}$ lauten:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{D}_{c_{i_k}} e_k}{\partial c_{i_{k_{n+1}}}} &= \frac{\frac{\partial e_k}{\partial c_{i_k}} \left(c_{k_n}, s_{k_n}, c_{i_{k_{n+1}}} \right) + \frac{\partial e_k}{\partial c_{i_k}} \left(c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}} \right)}{2 \Delta c_{i_k}} - \frac{\mathcal{D}_{c_{i_k}} e_k}{\Delta c_{i_k}} \\ \frac{\partial \mathcal{D}_{c_{i_k}} e_k}{\partial c_{k_{n+1}}} &= \frac{\frac{\partial e_k}{\partial c_k} \left(c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+1}}} \right) - \frac{\partial e_k}{\partial c_k} \left(c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_n}} \right)}{2 \Delta c_{i_k}}\end{aligned}\quad (\text{B.88})$$

Auch hier lässt sich der Grenzfall aufführen für $c_{i_{k_{n+1}}} = c_{i_{k_n}}$:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{D}_{c_{i_k}} e_k}{\partial c_{i_{k_{n+1}}}} &= \frac{1}{4} \frac{\partial^2 e_k}{\partial c_{i_k}^2} \left(c_{k_n}, s_{k_n}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right) + \frac{1}{4} \frac{\partial^2 e_k}{\partial c_{i_k}^2} \left(c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right) \\ \frac{\partial \mathcal{D}_{c_{i_k}} e_k}{\partial c_{k_{n+1}}} &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2 e_k}{\partial c_{i_k} \partial c_k} \left(c_{k_{n+1}}, s_{k_{n+1}}, c_{i_{k_{n+\frac{1}{2}}}} \right)\end{aligned}\quad (\text{B.89})$$

B.4.4. Zwangsbedingung

Die thermische Zwangsbedingung führt zu einer Erweiterung des globalen Residuums und der globalen Tangentenmatrix, die im Folgenden beschrieben werden.

Residuum mit Zwangsbedingung

Das globale Residuum mit der Zwangsbedingung ϕ lautet:

$$\mathbf{R}^{glo} = \begin{bmatrix} \frac{2 m_1}{h_n^2} (\mathbf{q}_{1_{n+1}} - \mathbf{q}_{1_n}) - \frac{2}{h_n} \mathbf{p}_{1_n} + \frac{S_{1_{\frac{1}{2}}}}{L_1^2} \mathbf{q}_{1_{n+\frac{1}{2}}} - \frac{S_{2_{\frac{1}{2}}}}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} \\ \frac{2 m_2}{h_n^2} (\mathbf{q}_{2_{n+1}} - \mathbf{q}_{2_n}) - \frac{2}{h_n} \mathbf{p}_{2_n} + \frac{S_{2_{\frac{1}{2}}}}{L_2^2} \mathbf{r}_{n+\frac{1}{2}} \\ \frac{s_{1_{n+1}} - s_{1_n}}{h_n} - \kappa \left(\frac{\theta_{2_{\frac{1}{2}}}}{\theta_{1_{\frac{1}{2}}}} - 1 \right) - \frac{D_{1_{\frac{1}{2}}}^{int}}{\theta_{1_{\frac{1}{2}}}} + Z_{1_{\frac{1}{2}}} \\ \frac{s_{2_{n+1}} - s_{2_n}}{h_n} - \kappa \left(\frac{\theta_{1_{\frac{1}{2}}}}{\theta_{2_{\frac{1}{2}}}} - 1 \right) - \frac{D_{2_{\frac{1}{2}}}^{int}}{\theta_{2_{\frac{1}{2}}}} \\ \phi \end{bmatrix}\quad (\text{B.90})$$

Dabei kann für ϕ die Zwangsbedingung $\phi_{1_{n+1}}$ oder $\phi_{1_{\frac{1}{2}}}$ eingesetzt werden. Der zugehörige Zustandsvektor lautet:

$$\mathbf{z}_{n+1} = [\mathbf{q}_{1_{n+1}}, \mathbf{q}_{2_{n+1}}, s_{1_{n+1}}, s_{2_{n+1}}, \lambda_{1_{n+1}}, c_{i_{1_{n+1}}}, c_{i_{2_{n+1}}}] \quad (\text{B.91})$$

Tangente mit Zwangsbedingung

Die Zwangsbedingungen $\phi = \phi_{1_{n+1}}$ oder $\phi = \phi_{1_{\frac{1}{2}}}$ sind lediglich von dem Konfigurationsvektor $\mathbf{q}_{1_{n+1}}$ und der Entropie $s_{1_{n+1}}$ abhängig. Die thermische Zwangslast $Z_{1_{\frac{1}{2}}}$ beinhaltet den Lagrangeschen Multiplikator. Sie liefert eine erweiterte Tangentematrix:

$$\mathbf{K}^{glo} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_q^{glo} - \mathbf{K}_{c_i}^{glo} \mathbf{K}_{c_i}^{loc^{-1}} \mathbf{K}_q^{loc} & \mathbf{K}_s^{glo} & \mathbf{K}_\lambda^{glo} \\ \mathbf{K}_q^{bed} & \mathbf{K}_s^{bed} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (\text{B.92})$$

Die Tangentematrix \mathbf{K}_λ^{glo} für beide Zwangsbedingungen ist:

$$\mathbf{K}_\lambda^{glo} = [\mathbf{0}, \mathbf{0}, 1, 0] \quad (\text{B.93})$$

Die Tangentematrizen \mathbf{K}_q^{bed} und \mathbf{K}_s^{bed} lauten für die Zwangsbedingung $\phi = \phi_{1_{n+1}}$:

$$\mathbf{K}_q^{bed} = \begin{bmatrix} \left. \frac{\partial^2 e_1}{\partial s_1 \partial c_1} \right|_{n+1} & \frac{\partial c_{1_{n+1}}}{\partial \mathbf{q}_{1_{n+1}}} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}^T \quad \mathbf{K}_s^{bed} = \begin{bmatrix} \left. \frac{\partial^2 e_1}{\partial s_1^2} \right|_{n+1} \\ 0 \end{bmatrix}^T \quad (\text{B.94})$$

Für die Zwangsbedingung $\phi = \phi_{1_{\frac{1}{2}}}$ folgt:

$$\mathbf{K}_q^{bed} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \theta_{1_{\frac{1}{2}}}}{\partial \mathbf{q}_{1_{n+1}}} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}^T \quad \mathbf{K}_s^{bed} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \theta_{1_{\frac{1}{2}}}}{\partial s_{1_{n+1}}} \\ 0 \end{bmatrix}^T \quad (\text{B.95})$$

B.4.5. Abbruchkriterium

Als Abbruchkriterium für das lokale und globale Newton-Raphson-Verfahren werden Energiebilanzen verwendet. Das Abbruchkriterium A_{krit}^{loc} des lokalen Newton-Raphson-Verfahrens wird wie folgt gebildet:

$$\begin{aligned} A_{krit}^{loc} &= -h_n \begin{bmatrix} \Gamma_{1_{\frac{1}{2}}} \\ \Gamma_{2_{\frac{1}{2}}} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{R}^{loc} \\ &= - \sum_{k=1}^2 \left[\Gamma_{k_{\frac{1}{2}}} \left(c_{i_{k_{n+1}}} - c_{i_{k_n}} \right) - h_n D_{k_{\frac{1}{2}}}^{int} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.96})$$

Die Norm dieses Abbruchkriteriums muss die vorgegebene Toleranz ε^{loc} unterschreiten:

$$|A_{krit}^{loc}| \leq \varepsilon^{loc} \quad (\text{B.97})$$

Das globale Newton-Raphson-Verfahren unterliegt dem Abbruchkriterium A_{krit}^{glo} :

$$A_{krit}^{glo} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{1_{n+1}} - \mathbf{q}_{1_n} \\ \mathbf{q}_{2_{n+1}} - \mathbf{q}_{2_n} \\ h_n \theta_{1_{\frac{1}{2}}} \\ h_n \theta_{2_{\frac{1}{2}}} \\ h_n \lambda_{1_{n,n+1}} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{R}^{glo} + A_{krit}^{loc} \quad (\text{B.98})$$

Dieses Abbruchkriterium ergibt die Energiebilanz. Analog zu Gl. (B.97) muss die Norm des Abbruchkriteriums A_{krit}^{glo} die vorgegebene Toleranz ε^{glo} unterschreiten.

C. Anhang - Kontinuum

C.1. Innere Energie des Kontinuums

Das Materialmodell aus Groß [25] ist in Lagrangeschen Variablen beschrieben und wird für das Kontinuum in die Poissonschen Variablen überführt. Die Vorgehensweise der Transformation wurde bereits in Kapitel B.1 beschrieben. Die innere Energie e setzt sich aus drei Anteilen zusammen. Die drei Anteile sind die freie kompressible Energie ψ^{com} , die freie viskose Energie ψ^{vis} und die innere thermische Energie e^{the}

$$e(\mathcal{C}, s, \mathcal{C}_i) = \psi^{com}(\mathcal{C}) + \psi^{vis}(\mathcal{C}, \mathcal{C}_i) + e^{the}(\mathcal{C}, s) \quad (\text{C.1})$$

mit den tensorwertigen Skalarfunktionen

$$\begin{aligned} \psi^{com} &= \frac{\mu}{2} (\text{tr } \mathcal{C} - n_{dim} - 2 \ln J) + \psi^{vol}(J) \\ \psi^{vis} &= \frac{\mu_e}{2} (\text{tr } \Lambda - n_{dim} - 2 \ln J_e) + \psi^{vol}(J_e) \\ e^{the} &= k [\theta(\mathcal{C}, s) - \theta_\infty] + \theta_\infty n_{dim} \beta \frac{\partial \psi^{vol}(J)}{\partial J} \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

und der Temperatur:

$$\theta(\mathcal{C}, s) = \theta_\infty \exp \left(\frac{s}{k} - \frac{n_{dim} \beta}{k} \frac{\partial \psi^{vol}(J)}{\partial J} \right) \quad (\text{C.3})$$

Die volumetrischen Anteile $\psi^{vol}(J_{(\cdot)})$ und deren partiellen Ableitungen nach $J_{(\cdot)}$ lauten:

$$\begin{aligned} \psi^{vol}(J_{(\cdot)}) &= \frac{\lambda_{(\cdot)}}{2} [\ln^2 J_{(\cdot)} + (J_{(\cdot)} - 1)^2] \\ \frac{\partial \psi^{vol}(J_{(\cdot)})}{\partial J_{(\cdot)}} &= \lambda_{(\cdot)} \left[\frac{1}{J_{(\cdot)}} \ln J_{(\cdot)} + J_{(\cdot)} - 1 \right] \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Die Parameter μ und λ bzw. μ_e und λ_e geben die elastischen bzw. viskosen Lamé-Parameter wieder. n_{dim} beschreibt die Dimension des Kontinuums. Da das betrachtete

Gebiet $\mathcal{B}_0 \in \mathbb{R}^3$ ist, ist $n_{dim} = 3$. Die Wärmekapazität wird durch den Parameter k wiedergegeben und der Kopplungsparameter durch β . Analog zur Jacobideterminante J aus Gl. (4.17) erfolgt die Bestimmung der viskosen Jacobideterminante J_e durch den Tensor Λ :

$$J_e = \sqrt{\det \Lambda} \quad (\text{C.5})$$

C.1.1. Ableitungen für das Anfangswertproblem

Das Anfangswertproblem beinhaltet die Ableitungen der inneren Energie e nach dem rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensor \mathcal{C} , der internen Variable C_i und der Entropie s aus Gl. (C.1). Letzteres entspricht der Temperatur θ aus Gl. (C.3). Die Ableitung der inneren Energie e nach dem rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensor \mathcal{C} wird in drei Teile aufgeteilt

$$\frac{\partial e}{\partial \mathcal{C}} = \frac{\partial \psi^{com}}{\partial \mathcal{C}} + \frac{\partial e^{the}}{\partial \mathcal{C}} + \frac{\partial \psi^{vis}}{\partial \mathcal{C}} \quad (\text{C.6})$$

mit den Anteilen

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi^{com}}{\partial \mathcal{C}} &= \frac{\mu}{2} [I - \mathcal{C}^{-1}] + \frac{\partial \psi^{vol}(J)}{\partial J} \frac{1}{2} J \mathcal{C}^{-1} \\ \frac{\partial e^{the}}{\partial \mathcal{C}} &= n_{dim} \beta \frac{\partial^2 \psi^{vol}(J)}{\partial J^2} (\theta_\infty - \theta) \frac{1}{2} J \mathcal{C}^{-1} \\ \frac{\partial \psi^{vis}}{\partial \mathcal{C}} &= \left(\frac{\partial \psi^{vis}}{\partial \Lambda} C_i^{-1} \right)^{sym} \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

und der doppelten Ableitung des volumetrischen Anteils:

$$\frac{\partial^2 \psi^{vol}(J_{(\cdot)})}{\partial J_{(\cdot)}^2} = -\frac{\lambda_{(\cdot)}}{J_{(\cdot)}^2} [\ln J_{(\cdot)} - J_{(\cdot)}^2 - 1] \quad (\text{C.8})$$

Die Ableitung der inneren Energie e nach der internen Variable C_i liefert

$$\frac{\partial \psi^{vis}}{\partial C_i} = - \left(C_i^{-1} \frac{\partial \psi^{vis}}{\partial \Lambda} \Lambda \right)^{sym} \quad (\text{C.9})$$

mit der Ableitung:

$$\frac{\partial \psi^{vis}(\Lambda)}{\partial \Lambda} = \frac{\mu_e}{2} [I - \Lambda^{-T}] + \frac{\partial \psi^{vol}(J_e)}{\partial J_e} \frac{1}{2} J_e \Lambda^{-T} \quad (\text{C.10})$$

Der symmetrische Anteil eines Tensor \mathcal{A} ist wie folgt definiert:

$$\mathcal{A}^{sym} = \frac{1}{2} (\mathcal{A} + \mathcal{A}^T) \quad (\text{C.11})$$

C.1.2. Ableitungen für die Tangenten

Die Tangenten des Newton-Raphson-Verfahrens aus Kapitel C.4.2 bestehen aus den doppelten Ableitungen der inneren Energie e nach dem rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensor C , den Entropien s und den internen Variablen C_i . Weiterhin werden die gemischten Ableitungen benötigt. Zunächst wird die doppelte Ableitung der inneren Energie e nach dem rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensor C berechnet. Die Ableitung lässt sich in drei Teile aufspalten:

$$\frac{\partial^2 e}{\partial C^2} = \frac{\partial^2 \psi^{com}}{\partial C^2} + \frac{\partial^2 e^{the}}{\partial C^2} + \frac{\partial^2 \psi^{vis}}{\partial C^2} \quad (C.12)$$

Die drei Anteile werden wie folgt berechnet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi^{com}}{\partial C^2} &= B_1 (C^{-1} \otimes C^{-1})^{sym} + B_2 C^{-1} \otimes C^{-1} \\ \frac{\partial^2 \psi^{vis}}{\partial C^2} &= A_1 (C^{-1} \otimes C^{-1})^{sym} + A_2 C^{-1} \otimes C^{-1} \\ \frac{\partial^2 e^{the}}{\partial C^2} &= D_1 (C^{-1} \otimes C^{-1})^{sym} + D_2 C^{-1} \otimes C^{-1} \end{aligned} \quad (C.13)$$

Die Abkürzungen A_k sind analog zu den Abkürzungen B_k mit $k = [1, 2]$ aufgebaut:

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{\mu}{2} - \frac{\lambda}{2} (\ln J + J^2 - J) & A_1 &= \frac{\mu_e}{2} - \frac{\lambda_e}{2} (\ln J_e + J_e^2 - J_e) \\ B_2 &= \frac{\lambda}{4} (2J^2 - J + 1) & A_2 &= \frac{\lambda_e}{4} (2J_e^2 - J_e + 1) \end{aligned} \quad (C.14)$$

Die Abkürzungen D_1 und D_2 für die Ableitungen der inneren thermischen Energie lauten:

$$\begin{aligned} D_1 &= \frac{1}{2} n_{dim} \beta (\theta - \theta_\infty) J \frac{\partial^2 \psi^{vol}(J)}{\partial J^2} \\ D_2 &= \frac{1}{4} n_{dim} \beta (\theta_\infty - \theta) J \left(\frac{\partial^3 \psi^{vol}(J)}{\partial J^3} J + \frac{\partial^2 \psi^{vol}(J)}{\partial J^2} \right) \\ &\quad + \frac{n_{dim}^2 \beta^2}{4k} \left(\frac{\partial^2 \psi^{vol}(J)}{\partial J^2} \right)^2 \theta J^2 \end{aligned} \quad (C.15)$$

Mit der dreifachen Ableitung der freien volumetrischen Energie nach der Jacobideterminante ergibt sich:

$$\frac{\partial^3 \psi^{vol}(J_{(\cdot)})}{\partial J_{(\cdot)}^3} = \frac{\lambda_{(\cdot)}}{J_{(\cdot)}^3} (2 \ln J_{(\cdot)} - 3) \quad (C.16)$$

Die doppelte Ableitung der viskosen freien Energie ψ^{vis} nach dem Tensor A ist mit $[\underline{\mathcal{A}} \otimes \underline{\mathcal{B}}]_{abcd} = A_{ad} B_{bc}$ gegeben durch:

$$\frac{\partial^2 \psi^{vis}}{\partial A^2} = A_1 A^{-T} \underline{\otimes} A^{-1} + A_2 A^{-T} \otimes A^{-T} \quad (C.17)$$

Zusätzlich wird die doppelte Ableitung der inneren Energie e nach den internen Variablen C_i benötigt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi^{vis}}{\partial C_i^2} &= A_1 (C_i^{-1} \otimes C_i^{-1})^{sym} + A_2 (C_i^{-1} \otimes C_i^{-1}) \\ &+ \left(C_i^{-1} \otimes C_i^{-1} \frac{\partial \psi^{vis T}}{\partial \Lambda} \Lambda \right)^{SYM} + \left(\Lambda^T \frac{\partial \psi^{vis}}{\partial \Lambda} C_i^{-1} \otimes C_i^{-1} \right)^{SYM} \end{aligned} \quad (C.18)$$

Der symmetrische Anteil $[\cdot]^{SYM}$ (große Symmetrie) eines vierstufigen Tensors $\mathcal{A} \otimes \mathcal{B}$ ist durch die symmetrischen Anteile $[\cdot]^{sym}$ (kleine Symmetrie) definiert:

$$(\mathcal{A} \otimes \mathcal{B})^{SYM} = \frac{1}{2} [(\mathcal{A} \otimes \mathcal{B})^{sym} + (\mathcal{B} \otimes \mathcal{A})^{sym}] \quad (C.19)$$

Für die kleine Symmetrie gilt die Rechenregel:

$$(\mathcal{A} \otimes \mathcal{B})^{sym} = \frac{1}{2} (\mathcal{A} \overline{\otimes} \mathcal{B} + \mathcal{A} \underline{\otimes} \mathcal{B}) \quad (C.20)$$

Als letzte doppelte Ableitung bleibt die Ableitung der inneren Energie e nach der Entropie s . Dies entspricht der Ableitung der Temperatur θ nach der Entropie s :

$$\frac{\partial^2 e}{\partial s^2} = \frac{1}{k} \theta \quad (C.21)$$

Die thermische innere Energie e^{the} ist nicht von der internen Variable C_i und die viskose freie Energie ψ^{vis} nicht von der Entropie s abhängig. Dadurch sind vier Kombinationen für die gemischten Ableitungen möglich:

$$\frac{\partial^2 e}{\partial s \partial C} = \frac{\partial^2 e}{\partial C \partial s} \quad \frac{\partial^2 e}{\partial C_i \partial C} = \left(\frac{\partial^2 e}{\partial C \partial C_i} \right)^T \quad (C.22)$$

Die gemischten Ableitungen lauten:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 e}{\partial s \partial C} &= -\frac{n_{dim} \beta}{2k} \frac{\partial^2 \psi^{vol}(J)}{\partial J^2} \theta J C^{-1} \\ \frac{\partial^2 \psi^{vis}}{\partial C_i \partial C} &= -A_1 (C_i^{-1} \otimes C^{-1})^{SYM} - A_2 (C_i^{-1} \otimes C^{-1}) - \left(C_i^{-1} \otimes C_i^{-1} \partial_\Lambda \psi^{vis T} \right)^{SYM} \\ \frac{\partial^2 \psi^{vis}}{\partial C \partial C_i} &= -A_1 (C_i^{-1} \otimes C^{-1})^{SYM} - A_2 (C^{-1} \otimes C_i^{-1}) - \left(C_i^{-1} \otimes C_i^{-1} \partial_\Lambda \psi^{vis T} \right)^{SYM} \end{aligned} \quad (C.23)$$

C.2. Viskosität und viskose Nachgiebigkeit

C.2.1. Viskosität

Für die Herleitung der Evolutionsgleichung wird ein isotroper Tensor vierter Stufe eingeführt, der von dem Elastizitätstensor \mathbb{E} abgeleitet wird. In der Viskoelastizität wird der analoge vierstufige Tensor als Viskositätstensor \mathbb{V} bezeichnet. Nach Betten [10] lässt sich der Elastizitätstensor E_{ijkl} in Indexschreibweise darstellen als

$$E_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (\text{C.24})$$

dabei werden die Lamé-Parameter μ und λ , sowie der Kompressionsmodul K wie folgt definiert:

$$\mu = E^{dev} \quad \lambda = K - \frac{2}{n_{dim}} \mu \quad K = E^{vol} \quad (\text{C.25})$$

Die Lamé-Parameter und der Kompressionsmodul sind immer positiv ($\mu, \lambda, K > 0$). In Tensorschreibweise folgt daher:

$$\mathbb{E} = \left(E^{vol} - \frac{2}{n_{dim}} E^{dev} \right) I \otimes I + 2 E^{dev} \mathbb{I}^{sym} \quad (\text{C.26})$$

Für gummiartige Stoffe wird der Elastizitätstensor \mathbb{E} in einen deviatorischen und einen volumetrischen Anteil aufgespalten, da diese Stoffe sehr große Unterschiede in Kompression und Scherung aufweisen

$$\mathbb{E} = 2 E^{dev} \mathbb{I}^{dev} + E^{vol} n_{dim} \mathbb{I}^{vol} \quad (\text{C.27})$$

mit den vierstufigen deviatorischen und volumetrischen Tensoren

$$\begin{aligned} \mathbb{I}^{dev} &= \mathbb{I}^{sym} - \mathbb{I}^{vol} \\ \mathbb{I}^{vol} &= \frac{1}{n_{dim}} I \otimes I \end{aligned} \quad (\text{C.28})$$

und der kleinen Symmetrie des vierstufigen Einheitstensors:

$$\mathbb{I}^{sym} = \frac{1}{2} (I \overline{\otimes} I + I \underline{\otimes} I) \quad (\text{C.29})$$

Diese Schreibweise wird nun in die Viskoelastodynamik übernommen. Somit lautet der Viskositätstensor \mathbb{V} mit den Parametern V^{dev} und V^{vol} :

$$\mathbb{V} = 2 V^{dev} \mathbb{I}^{dev} + V^{vol} n_{dim} \mathbb{I}^{vol} \quad (\text{C.30})$$

C.2.2. Viskose Nachgiebigkeit

Der viskose Nachgiebigkeitstensor \mathbb{V}^{-1} lässt sich durch die Sherman-Morrison Formel berechnen. Diese lautet

$$\mathbb{A}^{-1} = \mathbb{B}^{-1} - \alpha \frac{\mathbb{B}^{-1} : \mathcal{C} \otimes \mathcal{D} : \mathbb{B}^{-1}}{1 + \alpha \mathcal{D} : \mathbb{B}^{-1} : \mathcal{C}} \quad (\text{C.31})$$

für einen vierstufigen Tensor \mathbb{A} :

$$\mathbb{A} = \mathbb{B} + \alpha \mathcal{C} \otimes \mathcal{D} \quad (\text{C.32})$$

Hierbei muss \mathbb{B} invertierbar sein. Somit kann für den viskosen Nachgiebigkeitstensor \mathbb{V}^{-1} geschrieben werden:

$$\mathbb{V}^{-1} = \frac{1}{2V^{dev}} \mathbb{I}^{devT} + \frac{1}{V^{vol} n_{dim}} \mathbb{I}^{vol} \quad (\text{C.33})$$

Im Folgenden werden die Symmetrieeigenschaften und die nicht-negative innere Dissipation $D^{int} \geq 0$ überprüft. Dabei wird der vierstufige deviatorische Einheitstensor \mathbb{I}^{dev} in den vierstufigen Einheitstensor \mathbb{I}^{devT} umgewandelt.

Überprüfung der Symmetrieeigenschaften

Der viskose Nachgiebigkeitstensor \mathbb{V}^{-1} muss die Symmetrie der rechten Seite von Gl. (4.64) erfüllen. Dazu wird das Tensorprodukt $\mathbb{V}^{-1} : \Sigma^{vis}$ mit dem bereits bekannten viskosen Nachgiebigkeitstensor aus Gl. (C.33) ausgeführt:

$$\mathbb{V}^{-1} : \Sigma^{vis} = \frac{1}{4V^{dev}} \left(\Sigma^{vis} + \Sigma^{visT} \right) + \left(\frac{1}{n_{dim}^2 V^{vol}} - \frac{1}{2n_{dim} V^{dev}} \right) I \text{ tr } \Sigma^{vis} \quad (\text{C.34})$$

Durch Einsetzen dieser Gleichung in die rechte Seite der Gl. (4.64) kann überprüft werden, ob der gewählte vierstufige, viskose Nachgiebigkeitstensor \mathbb{V}^{-1} die Symmetrieeigenschaften erfüllt:

$$2 c_i \mathbb{V}^{-1} : \Sigma^{vis} = \frac{1}{V^{dev}} \left[c_i c_i \frac{\partial \psi^{vis}}{\partial c_i} + c_i \frac{\partial \psi^{vis}}{\partial c_i} c_i \right] + \left[\frac{2}{n_{dim}^2 V^{vol}} - \frac{1}{n_{dim} V^{dev}} \right] c_i \text{ tr } \Sigma^{vis} \quad (\text{C.35})$$

Der erste Term bringt eine Asymmetrie in die Gleichung ein. Diese Asymmetrie kann auf den symmetrischen Einheitstensor \mathbb{I}^{sym} des viskosen Nachgiebigkeitstensors \mathbb{V}^{-1} aus Gl. (C.28)₁ zurückverfolgt werden. Der deviatorische Anteil des viskosen Nachgiebigkeitstensors \mathbb{V}^{-1} wird deshalb umgeformt zu

$$\mathbb{I}^{devT} = \mathbb{I}^T - \mathbb{I}^{vol} \quad (\text{C.36})$$

mit $\mathbb{I}^T = I \otimes I$.

Überprüfung $D^{int} \geq 0$

Als Nächstes wird $D^{int} \geq 0$ überprüft. Dazu wird der neu definierte viskose Nachgiebigkeitstensor \mathbb{V}^{-1} in die Dissipation aus Gl. (4.65) eingesetzt:

$$\Sigma^{vis} : \mathbb{V}^{-1} : \Sigma^{vis} = \frac{1}{2V^{dev}} \left(\Sigma^{vis} : \Sigma^{visT} - \frac{1}{n_{dim}} (\text{tr } \Sigma^{vis})^2 \right) + \frac{1}{n_{dim}^2 V^{vol}} (\text{tr } \Sigma^{vis})^2 \geq 0 \quad (\text{C.37})$$

Im Weiteren werden die Terme $\Sigma^{vis} : \Sigma^{visT}$ und $\text{tr } \Sigma^{vis}$ umgeformt und es wird gezeigt, dass Gl. (C.37) gilt. Dazu wird das Square-root Theorem verwendet. Für einen symmetrischen, positiv definiten Tensor (in diesem Fall \mathcal{C}) liefert das Square-root Theorem (s. Gurtin [30]) folgende Aussage:

$$\mathcal{C} = \sqrt{\mathcal{C}} \sqrt{\mathcal{C}} \quad (\text{C.38})$$

Dadurch kann der Term $\Sigma^{vis} : \Sigma^{visT}$ wie folgt beschrieben werden:

$$\Sigma^{vis} : \Sigma^{visT} = \mathcal{B} : \mathcal{B} = \|\mathcal{B}\|^2 > 0 \quad (\text{C.39})$$

Das Skalarprodukt $\Sigma^{vis} : \Sigma^{visT} > 0$, da es sich durch die Norm von $\mathcal{B} = \mathcal{C}^{\frac{1}{2}} 2 \frac{\partial \psi^{vis}}{\partial \mathcal{C}} \mathcal{C}^{\frac{1}{2}}$ darstellen lässt. Weiterhin folgt, dass die Spur der Tensoren Σ^{vis} und \mathcal{B} übereinstimmt:

$$\text{tr } \mathcal{B} = \text{tr } \Sigma^{vis} \quad (\text{C.40})$$

Die Gl. (C.37) kann daurch wie folgt geschrieben werden:

$$\frac{1}{2V^{dev}} \left(\mathcal{B} : \mathcal{B} - \frac{1}{n_{dim}} (\text{tr } \mathcal{B})^2 \right) + \frac{1}{n_{dim}^2 V^{vol}} (\text{tr } \mathcal{B})^2 \geq 0 \quad (\text{C.41})$$

Die folgenden Zusammenhänge

$$\begin{aligned} \mathcal{B} : \mathcal{B} - \frac{1}{n_{dim}} (\text{tr } \mathcal{B})^2 &= \left| \mathcal{B} - \frac{1}{n_{dim}} \text{tr } \mathcal{B} \mathbf{I} \right|^2 > 0 \\ (\text{tr } \mathcal{B})^2 &> 0 \end{aligned} \quad (\text{C.42})$$

liefern die Bedingungen für die Parameter V^{dev} und V^{vol} :

$$V^{dev} > 0 \quad V^{vol} > 0 \quad (\text{C.43})$$

C.3. Voigt-Notation

Die Voigtsche Notation wandelt das Skalarprodukt zwischen symmetrischen Tensoren zweiter Stufe oder symmetrischen Tensoren zweiter und vierter Stufe in eine Vektor- bzw. Vektor-Matrix-Schreibweise um.

C.3.1. Skalarmultiplikation zweistufiger Tensoren

Eine Skalarmultiplikation zwischen zwei Tensoren \mathcal{A} und \mathcal{B} wird dargestellt als:

$$\mathcal{A} : \mathcal{B} = A_{ij} B_{ij} \quad (\text{C.44})$$

Die Indizes werden durch $i, j = [1, 2, 3]$ wiedergegeben. Ist der Tensor \mathcal{A} symmetrisch ($\mathcal{A} = \mathcal{A}^T$), dann kann diese Symmetrie ausgenutzt werden, um die Tensoren in eine Vektor-Schreibweise (auch Voigt-Notation genannt) zu überführen. Daraus ergibt sich:

$$\mathcal{A} : \mathcal{B} = [\mathcal{A}]_{vn1} \cdot [\mathcal{B}]_{vn2} \quad (\text{C.45})$$

Gilt zusätzlich für den Tensor $\mathcal{B} = \mathcal{B}^T$, dann folgt daraus:

$$\mathcal{A} : \mathcal{B} = [\mathcal{A}]_{vn1} \cdot [\mathcal{B}]_{vn3} \quad (\text{C.46})$$

Die zugehörigen Vektoren lauten:

$$[\mathcal{A}]_{vn1} = \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{22} \\ A_{33} \\ A_{12} \\ A_{23} \\ A_{13} \end{bmatrix} \quad [\mathcal{B}]_{vn2} = \begin{bmatrix} B_{11} \\ B_{22} \\ B_{33} \\ B_{12} + B_{21} \\ B_{23} + B_{32} \\ B_{13} + B_{31} \end{bmatrix} \quad [\mathcal{B}]_{vn3} = \begin{bmatrix} B_{11} \\ B_{22} \\ B_{33} \\ 2 B_{12} \\ 2 B_{23} \\ 2 B_{13} \end{bmatrix} \quad (\text{C.47})$$

C.3.2. Voigt-Notation der viskosen Evolutionsgleichung

Die starke Form der viskosen Evolutionsgleichung lautet:

$$\dot{\mathcal{C}}_i = 2 \mathcal{C}_i \mathbb{V}^{-1} : \Sigma^{vis} \quad (\text{C.48})$$

Diese kann so umgeschrieben werden, dass ein Skalarprodukt zwischen dem inelastischen Spannungstensor Γ und einem neuen vierstufigen Tensor \mathbb{C}_i entsteht:

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{C}}_i &= 4 [V_1 \mathcal{C}_i \otimes \mathcal{C}_i + V_2 \mathcal{C}_i \otimes \mathcal{C}_i] : \Gamma \\ &= \mathbb{C}_i : \Gamma \end{aligned} \quad (\text{C.49})$$

Die viskosen Vorfaktoren sind:

$$V_1 = \frac{1}{2 V^{dev}} \quad V_2 = \frac{1}{V^{vol} n_{dim}^2} - \frac{1}{2 V^{dev} n_{dim}} \quad (\text{C.50})$$

Die Voigt-Notation für die viskose Evolutionsgleichung lautet

$$[\dot{\mathcal{C}}_i]_{vn1} = [\mathbb{C}_i]_{vn} [\Gamma]_{vn3} \quad (\text{C.51})$$

mit

$$[\mathbb{C}_i]_{vn} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & a(C_{1112} + C_{1121}) & a(C_{1113} + C_{1131}) & a(C_{1123} + C_{1132}) \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & a(C_{2212} + C_{2221}) & a(C_{2213} + C_{2231}) & a(C_{2223} + C_{2232}) \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & a(C_{3312} + C_{3321}) & a(C_{3313} + C_{3331}) & a(C_{3323} + C_{3332}) \\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1233} & a(C_{1212} + C_{1221}) & a(C_{1213} + C_{1231}) & a(C_{1223} + C_{1232}) \\ C_{2311} & C_{2322} & C_{2333} & a(C_{2312} + C_{2321}) & a(C_{2313} + C_{2331}) & a(C_{2323} + C_{2332}) \\ C_{1311} & C_{1322} & C_{1333} & a(C_{1312} + C_{1321}) & a(C_{1313} + C_{1331}) & a(C_{1323} + C_{1332}) \end{bmatrix} \quad (\text{C.52})$$

und dem Vorfaktor $a = \frac{1}{2}$.

C.4. Newton-Raphson-Verfahren des Kontinuums

Das Residuum und die Tangente des Newton-Raphson-Verfahrens werden zunächst für ein System ohne thermische Zwangsbedingungen betrachtet. Danach erfolgt die Erweiterung des Residuum und der Tangente auf ein System mit thermischen Zwangsbedingungen und das Abbruchkriterium des Newton-Raphson-Verfahrens wird definiert.

C.4.1. Residuum

Die zeitlich und räumlich diskretisierten Evolutionsgleichungen des thermoviskoelastischen Kontinuums sowie die diskrete Projektion der Temperatur aus dem Kapitel 4.6.2 werden in zwei Residuen aufgeteilt.

Das lokale Residuum $\mathbf{R}^{loc} \in \mathbb{R}^6$ beinhaltet das Anfangswertproblem der viskosen Evolutionsgleichungen pro Element in Voigt-Notation:

$$\mathbf{R}^{loc} = \frac{[\mathbb{C}_{i_{n+1}}^e - \mathbb{C}_{i_n}^e]_{vn1}}{h_n} - \left[\mathbb{C}_i^e \left(\mathbb{C}_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e \right) \right]_{vn} \left[\Gamma_{\frac{1}{2}}^e \right]_{vn3} \quad (\text{C.53})$$

Das globale Residuum $\mathbf{R}^{glo^{eA}} \in \mathbb{R}^8$ wird aus den diskreten Bewegungsgleichungen, der diskreten thermischen Evolutionsgleichung sowie der diskreten Projektion gebildet:

$$\mathbf{R}^{glo^{eA}} = \sum_{B=1}^{n_{af}} \begin{bmatrix} H^{AB} \frac{\mathbf{x}_{n+1}^{eB} - \mathbf{x}_n^{eB}}{h_n} - M_{\rho_0^{-1}}^{AB} \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{eB} \\ H^{AB} \frac{\mathbf{p}_{n+1}^{eB} - \mathbf{p}_n^{eB}}{h_n} - \left(\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}} - \mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} \right) \\ H^{AB} \frac{s_{n+1}^{eB} - s_n^{eB}}{h_n} - \left(T_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}} - T_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} \right) \\ H^{AB} \theta_{\frac{1}{2}}^{eB} - \int_{\Omega_{\square}} N^A \theta_{\frac{1}{2}}^e \det \mathcal{J}^e \end{bmatrix} \quad (\text{C.54})$$

Die erste Bewegungsgleichung aus Gl. (C.54) kann nach \mathbf{p}_{n+1}^{eB} aufgelöst und in die zweite Bewegungsgleichung der Gl. (C.54) eingesetzt werden:

$$\mathbf{p}_{n+1}^{eB} = 2 \rho_0 \frac{\mathbf{x}_{n+1}^{eB} - \mathbf{x}_n^{eB}}{h_n} - \mathbf{p}_n^{eB} \quad (\text{C.55})$$

Diese Gleichung liefert das Update für den Impuls. Das zu lösende System $\mathbf{R}^{glo} \in \mathbb{R}^5$ wird dadurch kleiner:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{R}^{ela^{eA}} \\ R^{the^{eA}} \\ R^{pro^{eA}} \end{bmatrix} = \sum_{B=1}^{n_{af}} \begin{bmatrix} 2 M^{AB} \frac{\mathbf{x}_{n+1}^{eB} - \mathbf{x}_n^{eB}}{h_n^2} - 2 H^{AB} \frac{\mathbf{p}_n^{eB}}{h_n} - \left(\mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}} - \mathbf{F}_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} \right) \\ H^{AB} \frac{s_{n+1}^{eB} - s_n^{eB}}{h_n} - \left(T_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}} - T_{\frac{1}{2}}^{int^{eA}} \right) \\ H^{AB} \theta_{\frac{1}{2}}^{p^{eB}} - \int_{\Omega_{\square}} N^A \theta_{\frac{1}{2}}^e \det \mathcal{J}^e \end{bmatrix} \quad (\text{C.56})$$

Das globale Residuum wird in das elastische Residuum $\mathbf{R}^{ela^{eA}} \in \mathbb{R}^3$, das thermische Residuum $R^{the^{eA}} \in \mathbb{R}$ und das Residuum der Projektion $R^{pro^{eA}} \in \mathbb{R}$ aufgeteilt. Die Masse $M^{AB} = \rho_0 H^{AB}$ setzt sich aus der Dichte ρ_0 und dem Integral über den Ansatzfunktionen H^{AB} zusammen.

Das lokale System \mathbf{R}^{loc^e} und das globale Residuum $\mathbf{R}^{glo^{eA}}$ werden nach dem Zustandsvektor der Unbekannten gelöst:

$$\mathbf{z}_{n+1}^{eB} = \left[\mathbf{x}_{n+1}^{eB}, s_{n+1}^{eB}, \theta_{\frac{1}{2}}^{p^{eB}}, [C_{in+1}^e]_{vn1} \right] \quad (\text{C.57})$$

Die Residuen werden durch das Newton-Raphson-Verfahren gelöst. Das globale Newton-Raphson-Verfahren kann erst gelöst werden, wenn das Lokale konvergiert ist. Die interne Variable $[C_{in+1}^e]_{vn1}$ wird auf Elementebene (lokal) berechnet.

C.4.2. Tangenten

Lokale Tangenten

Zur Berechnung der Tangenten des lokalen Residuums \mathbf{R}^{loc^e} wird für das thermoviskoelastische Kontinuum nach Laursen und Meng [55] vorgegangen

$$G^{loc}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{C_i}^e) + \Delta G^{loc}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{C_i}^e) = 0 \quad (\text{C.58})$$

mit:

$$\begin{aligned} G^{loc}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{C_i}^e) &= \delta \mathbf{w}_{C_i}^e : \mathcal{R}^{loc^e} \\ \Delta G^{loc}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{C_i}^e) &= \Delta_{\mathbf{x}_{n+1}^{eB}} G^{loc}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{C_i}^e) + \Delta_{C_{in+1}^e} G^{loc}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{C_i}^e) \end{aligned} \quad (\text{C.59})$$

Da das lokale Residuum \mathcal{R}^{loc^e} (in Voigt-Notation \mathbf{R}^{loc^e}) nur von den Positionsvektoren \mathbf{x}_{n+1}^{eB} und der internen Variablen $C_{i_{n+1}}^e$ abhängig ist, werden die Ableitungen nach der Entropie s_{n+1}^{eB} und der projizierten Temperatur $\theta^{p^{eB}}$ vernachlässigt.

Die Ableitungen $\Delta_{(\cdot)} G^{loc}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{C_i}^e)$ ergeben einen drei- bzw. vierstufigen Tangententensor $\mathbb{K}_x^{loc^{eB}} = \frac{\partial \mathcal{R}^{loc^e}}{\partial \mathbf{x}_{n+1}^{eB}}$ und $\mathbb{K}_{C_i}^{loc^e} = \frac{\partial \mathcal{R}^{loc^e}}{\partial C_{i_{n+1}}^e}$:

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{x}_{n+1}^{eB}} G^{loc}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{C_i}^e) &= \sum_{B=1}^{n_{af}} \delta \mathbf{w}_{C_i}^e : \mathbb{K}_x^{loc^{eB}} \Delta \mathbf{x}_{n+1}^{eB} \\ \Delta_{C_{i_{n+1}}^e} G^{loc}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{C_i}^e) &= \delta \mathbf{w}_{C_i}^e : \mathbb{K}_{C_i}^{loc^e} : \Delta C_{i_{n+1}}^e \end{aligned} \quad (\text{C.60})$$

Werden die bekannten Größen in Gl. C.58 eingesetzt, liefert dies

$$\delta \mathbf{w}_{C_i}^e : \mathcal{R}^{loc^e} = -\delta \mathbf{w}_{C_i}^e : \left(\sum_{B=1}^{n_{af}} \mathbb{K}_x^{loc^{eB}} \Delta \mathbf{x}_{n+1}^{eB} + \mathbb{K}_{C_i}^{loc^e} : \Delta C_{i_{n+1}}^e \right) \quad (\text{C.61})$$

und weiterhin:

$$\mathcal{R}^{loc^e} = - \left(\sum_{B=1}^{n_{af}} \mathbb{K}_x^{loc^{eB}} \Delta \mathbf{x}_{n+1}^{eB} + \mathbb{K}_{C_i}^{loc^e} : \Delta C_{i_{n+1}}^e \right) \quad (\text{C.62})$$

Im lokalen Newton-Raphson-Verfahren wird der aktuelle Tensor der internen Variablen $C_{i_{n+1}}^e$ bei fest stehenden Positionsvektoren $\mathbf{x}_{n+1}^{eB} = \mathbf{x}_n^{eB}$ gesucht. Somit ist das Inkrement $\Delta \mathbf{x}_{n+1}^{eB} = \mathbf{x}_{n+1}^{eB^{k+1}} - \mathbf{x}_{n+1}^{eB^k} = \mathbf{0}$. Das lokale Newton-Raphson-Verfahren wird mit der folgenden Gleichung gelöst:

$$\Delta C_{i_{n+1}}^e = -\mathbb{K}_{C_i}^{loc^e}{}^{-1} : \mathcal{R}^{loc^e} \quad (\text{C.63})$$

Das globale Residuum kann erst gelöst werden, wenn für Gl. (C.62) $\mathcal{R}^{loc^e} = \mathbf{0}$ gilt. Dadurch lässt sich das Inkrement $\Delta C_{i_{n+1}}^e$ bei der Berechnung der Tangenten des globalen Residuums $\mathbf{R}^{glo^{eA}}$ ersetzen mit:

$$\Delta C_{i_{n+1}}^e = -\mathbb{K}_{C_i}^{loc^e}{}^{-1} : \sum_{B=1}^{n_{af}} \mathbb{K}_x^{loc^{eB}} \Delta \mathbf{x}_{n+1}^{eB} \quad (\text{C.64})$$

Globale Tangenten

Zur Berechnung der globalen Tangenten wird eine Aufspaltung des globalen Residuums $\mathbf{R}^{glo^{eA}} = [\mathbf{R}^{ela^{eA}}, R^{the^{eA}}, R^{pro^{eA}}]$ in das elastische, das thermische und das projizierte Residuum verwendet. Die Tangenten dieser drei Teile werden wie folgt berechnet

$$G^{(\cdot)}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{(-)}^{eA}) + \Delta G^{(\cdot)}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{(-)}^{eA}) = 0 \quad (\text{C.65})$$

mit:

$$\begin{aligned}
 G^{(\cdot)}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{(-)}^{eA}) &= \sum_{A=1}^{n_{af}} \delta \mathbf{w}_{(-)}^{eA} \cdot \mathbf{R}^{(\cdot)eA} \\
 \Delta G^{(\cdot)}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{(-)}^{eA}) &= \Delta_{\mathbf{x}_{n+1}^{eB}} G^{(\cdot)}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{(-)}^{eA}) + \Delta_{s_{n+1}^{eB}} G^{(\cdot)}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{(-)}^{eA}) \\
 &\quad + \Delta_{\theta_{\frac{1}{2}}^{eB}} G^{(\cdot)}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{(-)}^{eA}) + \Delta_{C_{i_{n+1}}^e} G^{(\cdot)}(\mathbf{z}_{n+1}^{eB}, \delta \mathbf{w}_{(-)}^{eA})
 \end{aligned} \tag{C.66}$$

Für das thermische und das projizierte Residuum wird der Vektor $\mathbf{R}^{(\cdot)eA}$ zu einem Skalar (R^{theeA} und R^{proeA}).

Das elastische Residuum \mathbf{R}^{elaeA} ist von allen Größen des Zustandsvektors \mathbf{z}_{n+1}^{eB} mit Ausnahme der projizierten Temperaturen θ^{eB} abhängig. Dies liefert:

$$\begin{aligned}
 \sum_{A=1}^{n_{af}} \delta \mathbf{w}_x^{eA} \cdot \mathbf{R}^{elaeA} &= - \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \delta \mathbf{w}_x^{eA} \cdot \int_{\Omega_{\square}} \left(\mathbf{K}_x^{elaeAB} \Delta \mathbf{x}_{n+1}^{eB} + \mathbf{K}_s^{elaeAB} \Delta s_{n+1}^{eB} \right) \det \mathcal{J}^e \\
 &\quad - \sum_{A=1}^{n_{af}} \delta \mathbf{w}_x^{eA} \cdot \int_{\Omega_{\square}} \mathbb{K}_{C_i}^{elaeA} : \Delta C_{i_{n+1}}^e \det \mathcal{J}^e
 \end{aligned} \tag{C.67}$$

Durch diese Schreibweise kann das Inkrement $\Delta C_{i_{n+1}}^e$ mit Gl. (C.64) ersetzt werden, da das Inkrement nur Tangenten enthält, die im Element bzw. unter dem Integral ausgewertet werden müssen:

$$\sum_{A=1}^{n_{af}} \delta \mathbf{w}_x^{eA} \cdot \mathbf{R}^{elaeA} = - \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \delta \mathbf{w}_x^{eA} \cdot \mathbf{K}^{elaeAB} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_{n+1}^{eB} \\ \Delta s_{n+1}^{eB} \\ \Delta \theta_{\frac{1}{2}}^{eB} \end{bmatrix} \tag{C.68}$$

Die gesamte Tangente des elastischen Residuums wird durch \mathbf{K}^{elaeAB} beschrieben:

$$\mathbf{K}^{elaeAB} = \int_{\Omega_{\square}} \left[\mathbf{K}_x^{elaeAB} - \mathbb{K}_{C_i}^{elaeA} : \mathbb{K}_{C_i}^{loc e-1} : \mathbb{K}_x^{loc eB} \quad \mathbf{K}_s^{elaeAB} \quad \mathbf{0} \right] \det \mathcal{J}^e \tag{C.69}$$

Analog können die Tangenten für das thermische Residuum R^{theeA} und das projizierte Residuum R^{proeA} hergeleitet werden. Dabei ist das thermische Residuum R^{theeA} von allen Variablen des Zustandsvektors \mathbf{z}_{n+1}^{eB} abhängig. Wird zusätzlich das Inkrement $\Delta C_{i_{n+1}}^e$ durch Gl. (C.64) ersetzt, liefert dies:

$$\sum_{A=1}^{n_{af}} \delta \mathbf{w}_s^{eA} R^{theeA} = - \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \delta \mathbf{w}_s^{eA} \mathbf{K}^{theeAB} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_{n+1}^{eB} \\ \Delta s_{n+1}^{eB} \\ \Delta \theta_{\frac{1}{2}}^{eB} \end{bmatrix} \tag{C.70}$$

Dabei bezeichnet $\mathbf{K}^{the^{eAB}}$ die gesamte thermische Tangente des thermischen Residuums $R^{the^{eA}}$. Die Ableitungen des externen thermischen Anteils $T_{\frac{1}{2}}^{ext^{eA}}$ liefern mit Gl. (4.171) einen Anteil zur Tangente, da die projizierte Temperatur $\theta_{\frac{1}{2}}^{p^{eA}}$ darin enthalten ist:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}^{the^{eAB}} &= \int_{\Omega_{\square}} \left[\mathbf{K}_x^{the^{eAB}} - \mathcal{K}_{C_i}^{the^{eA}} : \mathbb{K}_{C_i}^{loc^{e-1}} : \mathbb{K}_x^{loc^{eB}} \quad K_s^{the^{eAB}} \quad K_{\theta_p}^{the^{eAB}} \right] \det \mathcal{J}^e \\ &- \int_{\partial\Omega_{\square}} \left[\mathbf{0} \quad 0 \quad K_{\theta_p^{ext}}^{the^{eAB}} \right] \det \mathcal{J}_r^e \end{aligned} \quad (\text{C.71})$$

Das projizierte Residuum $R^{pro^{eA}}$ wird durch den Positionsvektor \mathbf{x}_{n+1}^{eB} , die Entropien s_{n+1}^{eB} und die projizierten Temperaturen $\theta_{\frac{1}{2}}^{p^{eB}}$ beschrieben:

$$\sum_{A=1}^{n_{af}} \delta \mathbf{w}_{\theta_p}^{eA} R^{pro^{eA}} = - \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \delta \mathbf{w}_{\theta_p}^{eA} \mathbf{K}^{pro^{eAB}} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_{n+1}^{eB} \\ \Delta s_{n+1}^{eB} \\ \Delta \theta_{\frac{1}{2}}^{p^{eB}} \end{bmatrix} \quad (\text{C.72})$$

Die gesamte Tangente des projizierten Residuums lautet:

$$\mathbf{K}^{pro^{eAB}} = \int_{\Omega_{\square}} \left[\mathbf{K}_x^{pro^{eAB}} \quad K_s^{pro^{eAB}} \quad K_{\theta_p}^{pro^{eAB}} \right] \det \mathcal{J}^e \quad (\text{C.73})$$

Für das globale Newton-Raphson-Verfahren werden die Knotenvektoren in einem Vektor zusammengefasst:

$$\left[(\cdot)_{n+1}^{e^{ges}} \right] = \begin{bmatrix} (\cdot)_{n+1}^{e1} \\ \vdots \\ (\cdot)_{n+1}^{en_{af}} \end{bmatrix} \quad (\text{C.74})$$

Dies liefert für die Inkremente, die über die Elemente assembliert werden:

$$\bigcup_{e=1}^{n_e} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_{n+1}^{e^{ges}} \\ \Delta s_{n+1}^{e^{ges}} \\ \Delta \theta_{\frac{1}{2}}^{p^{e^{ges}}} \end{bmatrix} = \bigcup_{e=1}^{n_e} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{n+1}^{e^{ges}} \\ s_{n+1}^{e^{ges}} \\ \theta_{\frac{1}{2}}^{p^{e^{ges}}} \end{bmatrix}^{k+1} - \bigcup_{e=1}^{n_e} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{n+1}^{e^{ges}} \\ s_{n+1}^{e^{ges}} \\ \theta_{\frac{1}{2}}^{p^{e^{ges}}} \end{bmatrix}^k \quad (\text{C.75})$$

Werden Gl. (C.68), Gl. (C.70) und Gl. (C.72) zusammengesetzt, liefert dies die Rechenvorschrift für das Newton-Raphson-Verfahren:

$$\bigcup_{e=1}^{n_e} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_{n+1}^{e^{ges}} \\ \Delta s_{n+1}^{e^{ges}} \\ \Delta \theta_{\frac{1}{2}}^{p^{e^{ges}}} \end{bmatrix} = - \left(\bigcup_{e=1}^{n_e} \begin{bmatrix} \mathbf{K}^{ela^{e^{ges}}} \\ \mathbf{K}^{the^{e^{ges}}} \\ \mathbf{K}^{pro^{e^{ges}}} \end{bmatrix} \right)^{-1} \bigcup_{e=1}^{n_e} \begin{bmatrix} \mathbf{R}^{ela^{e^{ges}}} \\ R^{the^{e^{ges}}} \\ R^{pro^{e^{ges}}} \end{bmatrix} \quad (\text{C.76})$$

C.4.3. Einträge der Tangenten

Die Einträge der Tangenten sind abhängig von den verwendeten Integratoren, deshalb werden zunächst die Einträge der lokalen Tangenten für die Mittelpunktsregel und den erweiterten TC Integrator vorgestellt. Anschließend werden die globalen Tangenten für beide Integratoren berechnet. Um Missverständnissen vorzubeugen, werden die Tangenten der Mittelpunktsregel mit $[\cdot]_{MP}$ und die Tangenten des erweiterten TC Integrators mit $[\cdot]_{ETC}$ gekennzeichnet.

Einträge der lokalen Tangenten

Bei der Berechnung des lokalen Newton-Raphson-Verfahrens treten die Tangenten $\mathbb{K}_{C_i}^{loc^e}$ und $\mathbb{K}_x^{loc^eB}$ auf. Die Tangente $\mathbb{K}_{C_i}^{loc^e}$ beinhaltet sowohl für die Mittelpunktsregel als auch für den erweiterten TC Integrator folgenden Term, die an $[\cdot]$ ausgewertet werden muss:

$$\mathbb{K}_{1[\cdot]}^e = V_1 \left[A_1^e \mathbb{I}^{sym} + A_2^e C_i^e \otimes C_i^{e-1} + \left(I \otimes \frac{\partial \psi^{vis^e}}{\partial \Lambda^e} \Lambda^e + C^e \frac{\partial \psi^{vis^e}}{\partial \Lambda^e} C_i^{e-1} \otimes I \right)^{SYM} \right]_{[\cdot]} \quad (C.77)$$

Die Tangente $\mathbb{K}_{C_i}^{loc^e}$ wird für die Mittelpunktsregel an $C_{\frac{1}{2}}^e, C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e$ ausgewertet. Dies ermöglicht eine sehr kompakte Darstellung:

$$\begin{aligned} [\mathbb{K}_{C_i}^{loc^e}]_{MP} &= \frac{1}{h_n} \mathbb{I}^{sym} + \left[2 \mathbb{K}_1^e + 4 V_1 \left(I \otimes C_i^e \frac{\partial \psi^{vis^e}}{\partial C_i^e} \right)^{SYM} \right]_{C_{\frac{1}{2}}^e, C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e} \\ &\quad + 2 V_2 \left[C_i^e \otimes C_i^e : \frac{\partial^2 \psi^{vis^e}}{\partial C_i^{e2}} + \mathbb{I}^{sym} \operatorname{tr} \left(C_i^e \frac{\partial \psi^{vis^e}}{\partial C_i^e} \right) + C_i^e \otimes \frac{\partial \psi^{vis^e}}{\partial C_i^e} \right]_{C_{\frac{1}{2}}^e, C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e} \end{aligned} \quad (C.78)$$

Die Tangente $\mathbb{K}_{C_i}^{loc^e}$ des erweiterten TC Integrators wird durch die Verwendung der partitionierten diskreten Gradienten komplizierter:

$$\begin{aligned} [\mathbb{K}_{C_i}^{loc^e}]_{ETC} &= \frac{1}{h_n} \mathbb{I}^{sym} + \mathbb{K}_{1_{C_n^e, C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e}}^e + \mathbb{K}_{1_{C_{n+1}^e, C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e}}^e + 4 V_1 \left(I \otimes C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e D_{C_i}^e e \right)^{SYM} \\ &\quad + 2 V_1 C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e (C_{i_{n+1}}^e - C_{i_n}^e) C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e \otimes \left(\frac{\partial J_{C_n^e, s_n^e}^e}{\partial C_{i_{n+1}}^e} + \frac{\partial J_{C_{n+1}^e, s_{n+1}^e}^e}{\partial C_{i_{n+1}}^e} \right) \\ &\quad + 2 V_1 \left(J_{C_n^e, s_n^e}^e + J_{C_{n+1}^e, s_{n+1}^e}^e \right) \left(C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e \otimes C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e \right)^{sym} + 2 V_2 C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e \otimes D_{C_i}^e e \\ &\quad + 2 V_2 \mathbb{I}^{sym} \operatorname{tr} \left(C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e D_{C_i}^e e \right) + 4 V_2 C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e \otimes C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e : \frac{\partial D_{C_i}^e e}{\partial C_{i_{n+1}}^e} \end{aligned} \quad (C.79)$$

Wird die Tangente $\mathbb{K}_x^{loc^{eB}}$ für beide Integratoren berechnet, muss der folgende Term in die Tangenten eingebunden werden:

$$\mathbb{K}_{2[\cdot]}^e = -4 V_1 \left[\left(I \otimes \frac{\partial \psi^{vis^e T}}{\Lambda^e} \right)^{SYM} + A_1^e \left(I \otimes C_i^e C^{e-1} \right)^{SYM} + A_2^e C_i^e \otimes C^{e-1} \right]_{[\cdot]} \quad (C.80)$$

Die Auswertung der lokalen Tangente $\mathbb{K}_x^{loc^{eB}}$ für die Mittelpunktsregel an $C_{\frac{1}{2}}^e, C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e$ ergibt:

$$\left[\mathbb{K}_x^{loc^{eB}} \right]_{MP} = \left(\mathbb{K}_2^e + 4 V_2 C_i^e \otimes C_i^e \frac{\partial^2 \psi^{vis^e}}{\partial C_i^e \partial C^e} \right)_{C_{\frac{1}{2}}^e, C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e} : \mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eB} \quad (C.81)$$

Dadurch lautet die lokale Tangente $\mathbb{K}_x^{loc^{eB}}$ des erweiterten TC Integrators:

$$\begin{aligned} \left[\mathbb{K}_x^{loc^{eB}} \right]_{ETC} &= \mathbb{K}_{2_{C_{n+1}^e, C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e}}^e + 8 V_2 C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e \otimes C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e : \frac{\partial \mathbb{D}_{C_i}^e e}{\partial C_{n+1}^e} : \mathbb{B}_{n+1}^{eB} \\ &+ 4 V_1 C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e (C_{i_{n+1}}^e - C_{i_{n+1}}^e) C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e \otimes \frac{\partial J_{C_{n+1}^e, s_{n+1}^e}^e}{\partial C_{n+1}^e} : \mathbb{B}_{n+1}^{eB} \end{aligned} \quad (C.82)$$

Einträge der globalen elastischen Tangente

Durch das elastische Residuum $\mathbf{R}^{ela^{eA}}$, das von den Variablen \mathbf{x}_{n+1}^{eB} , s_{n+1}^{eB} und $C_{i_{n+1}}^e$ abhängig ist, lassen sich drei Tangenten bestimmen. Dies sind die Tangentenmatrix $\mathbf{K}_x^{ela^{eAB}}$, der Vektor $\mathbf{K}_s^{ela^{eAB}}$ und der dreistufige Tensor $\mathbb{K}_{C_i}^{ela^{eA}}$. Die globalen elastischen Tangenten $\mathbf{K}_x^{ela^{eAB}}$ für beide Integratoren lauten:

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{K}_x^{ela^{eAB}} \right]_{MP} &= \left(\frac{2 \rho_0}{h_n^2} N^A N^B + \text{Grad } N^A \cdot \frac{\partial e^e}{\partial C^e} \text{Grad } N^B \right)_{C_{\frac{1}{2}}^e, s_{n+\frac{1}{2}}^e, C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e} \mathbf{I} \\ &+ 2 \mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eAT} : \left[\frac{\partial^2 e^e}{\partial C^e{}^2} \right]_{C_{\frac{1}{2}}^e, s_{n+\frac{1}{2}}^e, C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e} : \mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eB} \end{aligned} \quad (C.83)$$

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{K}_x^{ela^{eAB}} \right]_{ETC} &= \left(\frac{2 \rho_0}{h_n^2} N^A N^B + \text{Grad } N^A \cdot D_C e \text{Grad } N^B \right) \mathbf{I} \\ &+ 4 \mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eAT} : \frac{\partial \mathbb{D}_C^e e}{\partial C_{n+1}^e} : \mathbb{B}_{n+1}^{eB} \end{aligned}$$

Die Tangenten $\mathbb{K}_{C_i}^{ela^{eA}}$ beider Integratoren ergeben sich zu:

$$\begin{aligned} \left[\mathbb{K}_{C_i}^{ela^{eA}} \right]_{MP} &= \mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eAT} : \frac{\partial^2 e^e}{\partial c^e \partial c_i^e} \Big|_{c_{\frac{1}{2}}^e, c_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e} \\ \left[\mathbb{K}_{C_i}^{ela^{eA}} \right]_{ETC} &= 2 \mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eAT} : \frac{\partial \mathbb{D}_c^e e}{\partial c_{i_{n+1}}^e} \end{aligned} \quad (C.84)$$

Die Tangenten $\mathbf{K}_s^{ela^{eAB}}$ des globalen elastischen Residuums werden dargestellt durch:

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{K}_s^{ela^{eAB}} \right]_{MP} &= \mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eAT} : \frac{\partial^2 e^e}{\partial c^e \partial s^e} \Big|_{c_{\frac{1}{2}}^e, s_{n+\frac{1}{2}}^e} N^B \\ \left[\mathbf{K}_s^{ela^{eAB}} \right]_{ETC} &= 2 \mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eAT} : \frac{\partial \mathbb{D}_c^e e}{\partial s_{n+1}^e} N^B \end{aligned} \quad (C.85)$$

Einträge der globalen thermischen Tangente

Die globale thermische Tangente $\mathbf{K}_x^{the^{eAB}}$ ist ein liegender Vektor. Zur Vereinfachung wird zunächst ein zweistufiger Tensor $\mathfrak{K}_{\mathfrak{S}}^e$ eingeführt

$$\mathfrak{K}_{\mathfrak{S}_{[1]}}^e = \left[\frac{1}{2} \left(\mathbf{G}^A \cdot \mathfrak{K} \text{Grad} \theta_{\frac{1}{2}}^{p^e} \right) c^{-1} - \left(\mathbf{G}^A \cdot \mathfrak{K} \otimes \text{Grad} \theta_{\frac{1}{2}}^{p^e} \cdot c^{-1} \right)^{sym} \right]_{[1]} \quad (C.86)$$

mit dem Vektor:

$$\mathbf{G}^A = \frac{\text{Grad} N^A}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} - \frac{N^A}{\left(\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e} \right)^2} \text{Grad} \theta_{\frac{1}{2}}^{p^e} \quad (C.87)$$

Die Tangenten $\mathbf{K}_x^{the^{eAB}}$ für die Mittelpunktsregel und den erweiterten TC Integrator lauten somit:

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{K}_x^{the^{eAB}} \right]_{MP} &= \mathfrak{K}_{\mathfrak{S}_{c_{\frac{1}{2}}}}^e : \mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eB} - \frac{N^A}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} \frac{\partial e^e}{\partial c_i^e} \Big|_{c_{\frac{1}{2}}^e, c_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e} : \left[\mathbb{K}_x^{loc^{eB}} \right]_{MP} \\ &\quad - 4 \frac{N^A}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} \left[c_i^e \mathbb{V}^{-1} : c_i^e \frac{\partial e^e}{\partial c_i^e} \right]_{c_{\frac{1}{2}}^e, c_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e} : \frac{\partial^2 e^e}{\partial c_i^e \partial c^e} \Big|_{c_{\frac{1}{2}}^e, c_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e} : \mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eB} \\ \left[\mathbf{K}_x^{the^{eAB}} \right]_{ETC} &= \mathfrak{K}_{\mathfrak{S}_{c_{n+\frac{1}{2}}}}^e : \mathbb{B}_{n+1}^{eB} - \frac{N^A}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} D_{c_i}^e e : \left[\mathbb{K}_x^{loc^{eB}} \right]_{ETC} \\ &\quad - 8 \frac{N^A}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} \left(c_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e \mathbb{V}^{-1} : c_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e D_{c_i}^e e \right) : \frac{\partial D_{c_i}^e e}{\partial c_{n+1}^e} : \mathbb{B}_{n+1}^{eB} \end{aligned} \quad (C.88)$$

Hier kann eine bereits berechnete Tangente $\mathbb{K}_x^{loc^{eB}}$ verwendet werden. Dieser Zusammenhang folgt aus der Ableitung der inneren Dissipation $D_{\frac{1}{2}}^{int^e}$ des thermischen Residuums $R^{the^{eA}}$.

Analog dazu kann die globale thermische Tangente $\mathcal{K}_{C_i}^{the^{eA}}$ durch die lokale Tangente $\mathbb{K}_{C_i}^{loc^e}$ ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \left[\mathcal{K}_{C_i}^{the^{eA}} \right]_{MP} &= -2 \frac{N^A}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} \left[C_i^e \mathbb{V}^{-1} : C_i^e \frac{\partial e^e}{\partial C_i^e} \right]_{C_{\frac{1}{2}}^e, C_{n+\frac{1}{2}}^e} : \frac{\partial^2 e^e}{\partial C_i^{e2}} \Big|_{C_{\frac{1}{2}}^e, C_{n+\frac{1}{2}}^e} \\ &\quad - \frac{N^A}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} \frac{\partial e^e}{\partial C_i^e} \Big|_{C_{\frac{1}{2}}^e, C_{n+\frac{1}{2}}^e} : \left([\mathbb{K}_{C_i}^{loc^e}]_{MP} - \frac{1}{h_n} \mathbb{I}^{sym} \right) \\ \left[\mathcal{K}_{C_i}^{the^{eA}} \right]_{ETC} &= -2 \frac{N^A}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} \left(C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e \mathbb{V}^{-1} : C_{i_{n+\frac{1}{2}}}^e D_{C_i}^e e \right) : \frac{\partial D_{C_i}^e e}{\partial C_{i_{n+1}}^e} \\ &\quad - \frac{N^A}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} D_{C_i}^e e : \left([\mathbb{K}_{C_i}^{loc^e}]_{ETC} - \frac{1}{h_n} \mathbb{I}^{sym} \right) \end{aligned} \quad (C.89)$$

Die Tangenten $K_s^{the^{eAB}}$, $K_{\theta^p}^{the^{eAB}}$ und $K_{\theta_{ext}^p}^{the^{eAB}}$ werden für beide Integratoren gleich berechnet, daher wird keine Unterscheidung vorgenommen:

$$\begin{aligned} K_s^{the^{eAB}} &= \frac{1}{h_n} N^A N^B \\ K_{\theta^p}^{the^{eAB}} &= -\frac{1}{\left(\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}\right)^2} \left[\text{Grad } N^A N^B - 2 \frac{N^A}{\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}} N^B \text{ Grad } \theta_{\frac{1}{2}}^{p^e} + N^A \text{ Grad } N^B \right] \cdot \mathcal{K}_{\frac{1}{2}}^e \text{ Grad } \theta_{\frac{1}{2}}^{p^e} \\ &\quad + \mathbf{G}^A \cdot \mathcal{K}_{\frac{1}{2}}^e \text{ Grad } N^B + \frac{N^A}{\left(\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}\right)^2} N^B D_{\frac{1}{2}}^{int^e} \\ K_{\theta_{ext}^p}^{the^{eAB}} &= -\frac{Q_{\frac{1}{2}}^e}{\left(\theta_{\frac{1}{2}}^{p^e}\right)^2} N^A N^B \end{aligned} \quad (C.90)$$

Der Wärmeleitensor $\mathcal{K}_{\frac{1}{2}}^e$ und die inneren Dissipation $D_{\frac{1}{2}}^{int^e}$ müssen mit dem jeweiligen Integrator ausgewertet werden.

Einträge der globalen projizierten Tangente

Die Tangenten $\mathbf{K}_x^{pro^{eAB}}$ für die Mittelpunktsregel und den erweiterten TC Integrator lauten:

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{K}_x^{pro^{eAB}} \right]_{MP} &= -N^A \frac{\partial^2 e^e}{\partial s^e \partial C^e} \Big|_{C_{\frac{1}{2}}, s_{n+\frac{1}{2}}} : \mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eB} \\ \left[\mathbf{K}_x^{pro^{eAB}} \right]_{ETC} &= -2 N^A \frac{\partial D_s^e e}{\partial C_{n+1}^e} : \mathbb{B}_{n+1}^{eB} \end{aligned} \quad (C.91)$$

Weiterhin ergeben die Ableitung des projizierten Residuums $R^{pro^{eA}}$ nach der Entropie s_{n+1}^{eB} die Tangente $K_s^{pro^{eAB}}$:

$$\begin{aligned} \left[K_s^{pro^{eAB}} \right]_{MP} &= -\frac{1}{2} N^A \frac{\partial^2 e^e}{\partial s^{e^2}} \Big|_{C_{\frac{1}{2}}, s_{n+\frac{1}{2}}} N^B \\ \left[K_s^{pro^{eAB}} \right]_{ETC} &= -N^A \frac{\partial D_s^e e}{\partial s_{n+1}^e} N^B \end{aligned} \quad (C.92)$$

Die Tangente $K_{\theta p}^{pro^{eAB}}$ ist lediglich von den Ansatzfunktionen N^A und N^B und nicht von der zeitlichen Diskretisierung abhängig. Daher wird hier nicht zwischen den Integratoren unterschieden:

$$K_{\theta p}^{pro^{eAB}} = N^A N^B \quad (C.93)$$

C.4.4. Ableitung der partitionierten diskreten Gradienten

Die partitionierten diskreten Gradienten finden ihre Verwendung im erweiterten TC Integrator. Dadurch sind die Ableitungen der partitionierten diskreten Gradienten nur in dessen Tangenten zu finden.

Im Weiteren wird bei der Ableitung der partitionierten diskreten Gradienten zur einfacheren Darstellung auf den Elementindex e verzichtet. Für die lokalen und die thermischen globalen Tangenten werden die Ableitungen des partitionierten diskreten Gradienten $D_{C_i} e$ nach dem rechten Cauchy-Greenschens Deformationstensor C_{n+1} und der internen Variablen $C_{i_{n+1}}$ benötigt. Die Ableitungen der partitionierten diskreten Gradienten der Deformation $D_C e$ und der Entropie $D_s e$ treten in den globalen elastischen und projizierten Tangenten auf. Hierbei muss $D_C e$ nach den Größen $(C_{n+1}, s_{n+1}, C_{i_{n+1}})$ und $D_s e$ nach den Größen (C_{n+1}, s_{n+1}) abgeleitet werden.

Allgemein werden folgende Abkürzungen verwendet, um die Differenz zweier Zeitpunkte sowie deren Norm zu berechnen. Zusätzlich wird auch der Quotient dieser Abkürzungen benötigt:

$$\Delta(\cdot) = (\cdot)_{n+1} - (\cdot)_n \quad N_{(\cdot)} = \|\Delta(\cdot)\|^2 \quad \mathcal{M}_{(\cdot)} = \frac{\Delta(\cdot)}{N_{(\cdot)}} \quad (C.94)$$

Ableitung von $D_{C_i}e$

Die Ableitung des partitionierten diskreten Gradienten $D_{C_i}e$ nach einem Tensor zweiter Stufe, wie dem rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensor C_{n+1} oder wie in diesem Fall der internen Variable $C_{i_{n+1}}$, liefert einen vierstufigen Tensor:

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{C_i}e}{\partial C_{i_{n+1}}} &= \frac{1}{4} \frac{\partial^2 e}{\partial C_i^2} \Big|_{C_n, C_{i_{n+\frac{1}{2}}}} + \frac{J_{C_n, s_n} + J_{C_{n+1}, s_{n+1}}}{2} \mathbb{I}^{sym} \\ &+ \frac{1}{4} \frac{\partial^2 e}{\partial C_i^2} \Big|_{C_{n+1}, C_{i_{n+\frac{1}{2}}}} + \frac{\Delta C_i}{2} \otimes \frac{\partial [J_{C_n, s_n} + J_{C_{n+1}, s_{n+1}}]}{\partial C_{i_{n+1}}} \end{aligned} \quad (C.95)$$

Die Ableitungen von $J_{(\cdot)}$ nach der internen Variable $C_{i_{n+1}}$ werden gesondert betrachtet:

$$\frac{\partial J_{(\cdot)}}{\partial C_{i_{n+1}}} = N_{C_i}^{-1} \frac{\partial e}{\partial C_i} \Big|_{(C_{i_{n+1}}, \cdot)} - N_{C_i}^{-1} \frac{\partial e}{\partial C_i} \Big|_{(C_{i_{n+\frac{1}{2}}}, \cdot)} - \frac{\mathcal{M}_{C_i}}{2} : \frac{\partial^2 e}{\partial C_i^2} \Big|_{(C_{i_{n+\frac{1}{2}}}, \cdot)} - 2 J_{(\cdot)} \mathcal{M}_{C_i} \quad (C.96)$$

Mit der Ableitung des diskreten Gradienten $D_{C_i}e$ aus Gl. (4.142) nach dem rechten Cauchy-Green-Tensor C_{n+1} folgt:

$$\frac{\partial D_{C_i}e}{\partial C_{n+1}} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial C_i \partial C} \Big|_{(C_{n+1}, C_{i_{n+\frac{1}{2}}})} + \frac{\Delta C_i}{2} \otimes \frac{\partial J_{C_{n+1}, s_{n+1}}}{\partial C_{n+1}} \quad (C.97)$$

Die Ableitung von $J_{C_{n+1}, s_{n+1}}$ nach C_{n+1} lautet:

$$\frac{\partial J_{(\cdot)}}{\partial C_{n+1}} = N_{C_i}^{-1} \frac{\partial e}{\partial C} \Big|_{(C_{i_{n+1}}, \cdot)} - N_{C_i}^{-1} \frac{\partial e}{\partial C} \Big|_{(C_{i_n}, \cdot)} - \mathcal{M}_{C_i} : \frac{\partial^2 e}{\partial C_i \partial C} \Big|_{(C_{i_{n+\frac{1}{2}}}, \cdot)} \quad (C.98)$$

Im Spezialfall, wenn für die interne Variable $C_{i_{n+1}} = C_{i_n}$ gilt, werden $J_{(\cdot)}$ und dessen Ableitungen zu null. Dies gilt auch für die lokalen Tangenten des erweiterten TC Integrators aus Kapitel C.4.3.

Ableitung von $D_C e$

Die Einträge der globalen elastischen Tangente beinhalten die Ableitungen des partitionierten diskreten Gradienten $D_C e$ nach den Variablen $(C_{n+1}, s_{n+1}, C_{i_{n+1}})$. Zunächst wird die Ableitung nach dem rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensor C_{n+1} vorgestellt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_C e}{\partial C_{n+1}} &= \frac{1}{4} \frac{\partial^2 e}{\partial C^2} \Big|_{(C_{n+\frac{1}{2}}, s_{n+1}, C_{i_{n+1}})} + \frac{H_{s_{n+1}, C_{i_{n+1}}} + H_{s_n, C_{i_n}}}{2} \mathbb{I}^{sym} \\ &+ \frac{1}{4} \frac{\partial^2 e}{\partial C^2} \Big|_{(C_{n+\frac{1}{2}}, s_n, C_{i_n})} + \frac{\Delta C}{2} \otimes \frac{\partial (H_{s_{n+1}, C_{i_{n+1}}} + H_{s_n, C_{i_n}})}{\partial C_{n+1}} \end{aligned} \quad (C.99)$$

Die Ableitung von $H_{(\cdot)}$ nach dem rechten Cauchy-Green-Tensor C_{n+1} wird wieder einzeln betrachtet:

$$\frac{\partial H_{(\cdot)}}{\partial C_{n+1}} = N_c^{-1} \frac{\partial e}{\partial C} \Big|_{(C_{n+1}, \cdot)} - N_c^{-1} \frac{\partial e}{\partial C} \Big|_{(c_{n+\frac{1}{2}}, \cdot)} - \frac{\mathcal{M}_C}{2} : \frac{\partial^2 e}{\partial C^2} \Big|_{(c_{n+\frac{1}{2}}, \cdot)} - 2 H_{(\cdot)} \mathcal{M}_C \quad (\text{C.100})$$

Die Ableitungen des diskreten Gradienten $D_C e$ aus Gl. (4.141)₁ nach der internen Variable $C_{i_{n+1}}$ und der Entropie s_{n+1} beziehen sich lediglich auf den ersten und zweiten Term der Gleichung, da hier die Abhängigkeit von den momentanen Größen $(\cdot)_{n+1}$ vorhanden ist.

Für die Ableitung des partitionierten diskreten Gradienten $D_C e$ nach der internen Variable $C_{i_{n+1}}$ folgt:

$$\frac{\partial D_C e}{\partial C_{i_{n+1}}} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial C \partial C_i} \Big|_{(c_{n+\frac{1}{2}}, C_{i_{n+1}})} + \frac{\Delta C}{2} \otimes \frac{\partial H_{s_{n+1}, C_{i_{n+1}}}}{\partial C_{i_{n+1}}} \quad (\text{C.101})$$

Die zugehörige Ableitungsvorschrift von $H_{(\cdot)}$ lautet:

$$\frac{\partial H_{(\cdot)}}{\partial C_{i_{n+1}}} = N_c^{-1} \frac{\partial e}{\partial C_i} \Big|_{(C_{n+1}, \cdot)} - N_c^{-1} \frac{\partial e}{\partial C_i} \Big|_{(c_n, \cdot)} - \mathcal{M}_C : \frac{\partial^2 e}{\partial C \partial C_i} \Big|_{(c_{n+\frac{1}{2}}, \cdot)} \quad (\text{C.102})$$

Die Ableitung des partitionierten diskreten Gradienten $D_C e$ nach der Entropie s_{n+1} ergibt einen zweistufigen Tensor:

$$\frac{\partial D_C e}{\partial s_{n+1}} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 e}{\partial C \partial s} \Big|_{(c_{n+\frac{1}{2}}, s_{n+1})} + \frac{\Delta C}{2} \frac{\partial H_{s_{n+1}, C_{i_{n+1}}}}{\partial s_{n+1}} \quad (\text{C.103})$$

Die skalare Ableitung von $H_{(\cdot)}$ nach s_{n+1} liefert eine skalare Größe:

$$\frac{\partial H_{(\cdot)}}{\partial s_{n+1}} = N_c^{-1} \frac{\partial e}{\partial s} \Big|_{(C_{n+1}, \cdot)} - N_c^{-1} \frac{\partial e}{\partial s} \Big|_{(c_n, \cdot)} - \mathcal{M}_C : \frac{\partial^2 e}{\partial C \partial s} \Big|_{(c_{n+\frac{1}{2}}, \cdot)} \quad (\text{C.104})$$

Tritt der Spezialfall $s_{n+1} = s_n$ für die Entropie auf, werden $H_{(\cdot)}$ und dessen Ableitungen zu null. Dies muss dementsprechend auch in den globalen elastischen Tangenten aus Kapitel C.4.3 berücksichtigt werden.

Ableitung von $D_s e$

Die Ableitungen der partitionierten diskreten Gradienten $D_s e$ nach dem rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensor C_{n+1} und der Entropie s_{n+1} treten in den Einträgen der

projizierten Tangenten auf. Da die Entropie s_{n+1} eine skalare Größe ist, können auch die Ableitungen vereinfacht werden:

$$\begin{aligned}\frac{\partial D_s e}{\partial s_{n+1}} &= \frac{1}{2 \Delta s} \left. \frac{\partial e}{\partial s} \right|_{(c_n, s_{n+1})} + \frac{1}{2 \Delta s} \left. \frac{\partial e}{\partial s} \right|_{(c_{n+1}, s_{n+1})} - \frac{1}{\Delta s} D_s e \\ \frac{\partial D_s e}{\partial c_{n+1}} &= \frac{1}{2 \Delta s} \left. \frac{\partial e}{\partial c} \right|_{(c_{n+1}, s_{n+1}, c_{i_n})} - \frac{1}{2 \Delta s} \left. \frac{\partial e}{\partial c} \right|_{(c_{n+1}, s_n, c_{i_n})}\end{aligned}\quad (\text{C.105})$$

Im Spezialfall, dass für die Entropie $s_{n+1} = s_n$ gilt, vereinfacht sich die Ableitung zu:

$$\begin{aligned}\frac{\partial D_s e}{\partial s_{n+1}} &= \frac{1}{4} \left. \frac{\partial^2 e}{\partial s^2} \right|_{(c_n, s_{n+\frac{1}{2}})} + \frac{1}{4} \left. \frac{\partial^2 e}{\partial s^2} \right|_{(c_{n+1}, s_{n+\frac{1}{2}})} \\ \frac{\partial D_s e}{\partial c_{n+1}} &= \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 e}{\partial s \partial c} \right|_{(c_{n+1}, s_{n+\frac{1}{2}})}\end{aligned}\quad (\text{C.106})$$

C.4.5. Zwangsbedingungen

Um die Zwangsbedingungen der thermischen Dirichlet-Ränder mit in das System einzubinden, müssen das globale Residuum und die globale Tangente aus Gl. (C.76) erweitert werden.

Residuum mit Zwangsbedingungen

Das erweiterte Residuum lautet:

$$\mathbf{R}^e = \begin{bmatrix} \mathbf{R}^{ela^{eges}} \\ R^{the^{eges}} + Z_{\frac{1}{2}}^{eges} \\ R^{pro^{eges}} \\ \phi^{eges} \end{bmatrix}\quad (\text{C.107})$$

Der Zustandsvektor wird mit den Lagrangeschen Multiplikatoren erweitert:

$$\mathbf{z}_{n+1}^{eges} = \left[\mathbf{x}_{n+1}^{eges}, s_{n+1}^{eges}, \theta_{\frac{1}{2}}^{p^{eges}}, \lambda_{n,n+1}^{eges}, [C_{i_{n+1}}^e]_{vn1} \right]\quad (\text{C.108})$$

Tangente mit Zwangsbedingungen

Die Zwangsbedingungen ϕ^{eges} sind lediglich von der Konfiguration φ_{n+1}^{eA} und der Entropie s_{n+1}^{eA} abhängig. Die thermischen Zwangslasten $Z_{\frac{1}{2}}^{eges}$ sind von den Lagrangeschen

Multiplikatoren $\lambda_{n,n+1}^{eA}$ abhängig. Dies liefert folgende erweiterte Tangentenmatrix

$$\mathbf{K}^e = \begin{bmatrix} \mathbf{K}^{ela^{e ges}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}^{the^{e ges}} & \mathbf{I} \\ \mathbf{K}^{pro^{e ges}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}^{bed^{e ges}} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (\text{C.109})$$

wobei

$$\mathbf{K}^{bed^{eAB}} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_x^{bed^{eAB}} & \mathbf{K}_s^{bed^{eAB}} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (\text{C.110})$$

mit den Tangenteneinträgen

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_x^{bed^{eAB}} &= (H^{eAC})^{-1} \int_{\Omega_{\square}} N^C \frac{\partial^2 e^e}{\partial s^e \partial C^e} \Big|_{C_{n+1}, s_{n+1}} : \mathbb{B}_{n+1}^{eB} \det \mathcal{J}^e \\ \mathbf{K}_s^{bed^{eAB}} &= (H^{eAC})^{-1} \int_{\Omega_{\square}} N^C \frac{\partial^2 e^e}{\partial s^{e2}} \Big|_{C_{n+1}, s_{n+1}} N^B \det \mathcal{J}^e \end{aligned} \quad (\text{C.111})$$

ist.

C.4.6. Abbruchkriterium

Für das lokale und das globale Newton-Raphson-Verfahren werden die Abbruchkriterien $A_{krit}^{loc^e}$ und A_{krit}^{glo} benötigt. Das lokale Abbruchkriterium gibt einen Teil der Energiebilanz wieder, das den viskosen Anteil auf Elementebene widerspiegelt:

$$\begin{aligned} A_{krit}^{loc^e} &= h_n \mathbf{w}_{C_i}^e : \mathcal{R}^{loc^e} \\ &= -\Gamma_{\frac{1}{2}}^e : (C_{i_{n+1}}^e - C_{i_n}^e) + h_n D_{\frac{1}{2}}^{int^e} \end{aligned} \quad (\text{C.112})$$

Die Lösung des Newton-Raphson-Verfahrens ist gefunden, wenn für das lokale Abbruchkriterium $A_{krit}^{loc^e}$ mit der vorgegebenen Toleranz ε^{loc} gilt:

$$|A_{krit}^{loc^e}| \leq \varepsilon^{loc} \quad (\text{C.113})$$

Das globale Abbruchkriterium für das globale Newton-Raphson-Verfahren entspricht der Gesamtenergiebilanz:

$$A_{krit}^{glo} = h_n \bigcup_{e=1}^{n_e} \begin{bmatrix} \mathbf{w}_p^{e ges} \\ \mathbf{w}_s^{e ges} \\ \mathbf{w}_{\theta p}^{e ges} \\ \mathbf{w}_{\lambda}^{e ges} \end{bmatrix} \cdot \bigcup_{e=1}^{n_e} \begin{bmatrix} \mathbf{R}^{ela^{e ges}} \\ R^{the^{e ges}} + Z_{\frac{1}{2}}^{e ges} \\ R^{pro^{e ges}} \\ \phi^{e ges} \end{bmatrix} + \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_{\square}} A_{krit}^{loc^e} \det \mathcal{J}^e \quad (\text{C.114})$$

Das Newton-Raphson-Verfahren ist konvergiert, wenn für das globale Abbruchkriterium A_{krit}^{glo} mit der vorgegebenen Toleranz ε^{glo} gilt:

$$|A_{krit}^{glo}| \leq \varepsilon^{glo} \quad (\text{C.115})$$

C.5. Thermoelastisches System mit Lagrangeschen Variablen

In diesem Kapitel soll das Beispiel des thermoelastischen Kontinuums mit mechanischen Dirichlet-Rändern und thermischen Zwangsbedingungen aus Kapitel 5.2 verifiziert werden. Dabei wird die Mittelpunktsregel und der erweiterte TC Integrator in Poissonschen Variablen $(\varphi, \mathbf{p}, s, C_i)$ mit einer Mittelpunktsregel in Lagrangeschen Variablen $(\varphi, \hat{\mathbf{v}}, \hat{\theta})$ für ein thermoelastisches System verglichen.

C.5.1. Energie und Entropie

Die Gesamtenergie \hat{H} in Lagrangeschen Variablen setzt sich aus der kinetischen Energie \hat{T} und der inneren Energie \hat{E}

$$\hat{H} = \hat{T}(\hat{\mathbf{v}}) + \hat{E}(\varphi, \hat{\theta}) \quad (\text{C.116})$$

mit den Anteilen

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \int_{\mathcal{B}_0} \frac{1}{2} \rho_0 \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{v}} \\ \hat{E} &= \int_{\mathcal{B}_0} \hat{\psi}(\varphi, \hat{\theta}) + \hat{\theta} \hat{s}(\varphi, \hat{\theta}) \end{aligned} \quad (\text{C.117})$$

zusammen. Die freie Energie $\hat{\psi}$ setzt sich aus den Anteilen der freien kompressiblen Energie ψ^{com} und der freien thermischen Energie $\hat{\psi}^{the}$ zusammen, die aus Kapitel A bereits bekannt sind. Die Gesamtentropie ist durch

$$\hat{S} = \int_{\mathcal{B}_0} \hat{s}(\varphi, \hat{\theta}) \quad (\text{C.118})$$

gegeben.

C.5.2. Evolutionsgleichungen

Die starken Evolutionsgleichungen für ein thermoelastisches Kontinuum unter Verwendung Lagrangescher Variablen lauten:

$$\begin{aligned}\dot{\varphi} &= \hat{\mathbf{v}} \\ \rho_0 \dot{\mathbf{v}} &= \text{Div } \mathcal{P} \\ \dot{\hat{s}} &= -\frac{1}{\hat{\theta}} \text{Div } \mathbf{Q}\end{aligned}\tag{C.119}$$

Der erste und zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor sowie die Entropie werden wie folgt gebildet:

$$\mathcal{P} = \mathcal{F} \mathcal{S} \quad \mathcal{S} = 2 \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial \mathbf{C}} \quad \hat{s} = -\frac{\partial \hat{\psi}}{\partial \hat{\theta}}\tag{C.120}$$

Der Piola-Kirchhoffsche Wärmeflussvektor wird durch die primären Variablen beschrieben:

$$\mathbf{Q} = -\mathcal{K} \text{Grad } \hat{\theta}\tag{C.121}$$

Durch Multiplikation der starken Formen mit den Testfunktionen w und anschließender Integration über das Gebiet \mathcal{B}_0 folgen die schwachen Evolutionsgleichungen zu:

$$\begin{aligned}\int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_\varphi \cdot \dot{\varphi} &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_\varphi \cdot \hat{\mathbf{v}} \\ \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 \mathbf{w}_v \cdot \dot{\mathbf{v}} &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_v \cdot \text{Div } \mathcal{P} \\ \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_\theta \dot{\hat{s}} &= - \int_{\mathcal{B}_0} \frac{\mathbf{w}_\theta}{\hat{\theta}} \text{Div } \mathbf{Q}\end{aligned}\tag{C.122}$$

Dabei sind die geeigneten Testfunktionen der schwachen Evolutionsgleichung definiert als:

$$\mathbf{w}_\varphi = \rho_0 \dot{\hat{\mathbf{v}}} \quad \mathbf{w}_v = \dot{\varphi} \quad \mathbf{w}_\theta = \hat{\theta}\tag{C.123}$$

C.5.3. Diskrete Evolutionsgleichungen

Die schwachen Evolutionsgleichungen aus Gl. (C.122) werden durch eine Mittelpunktsregel im Zeitlichen diskretisiert. Externe Lasten werden für das Beispiel aus Kapitel 5.2 nicht benötigt und somit in den folgenden Gleichungen vernachlässigt. Die semidiskreten

Gleichungen des thermoelastischen Systems lauten:

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_\varphi \cdot \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{h_n} &= \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_\varphi \cdot \hat{\mathbf{v}}_{n+\frac{1}{2}} \\
 \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 \mathbf{w}_v \cdot \frac{\hat{\mathbf{v}}_{n+1} - \hat{\mathbf{v}}_n}{h_n} &= - \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}}^T \text{Grad } \mathbf{w}_v : \mathcal{S}_{\frac{1}{2}} \\
 \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{w}_\theta \frac{\hat{s}_{n+1} - \hat{s}_n}{h_n} &= \int_{\mathcal{B}_0} \text{Grad} \left(\frac{\mathbf{w}_\theta}{\hat{\theta}_{n+\frac{1}{2}}} \right) \cdot \mathcal{K}_{\frac{1}{2}} \hat{\theta}_{n+\frac{1}{2}}^2 \text{Grad} \left(\frac{1}{\hat{\theta}_{n+\frac{1}{2}}} \right)
 \end{aligned} \tag{C.124}$$

Der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor $\mathcal{S}_{\frac{1}{2}}$, die Entropien $\hat{s}_{(\cdot)}$ und der isotrope Wärmeleitensor $\mathcal{K}_{\frac{1}{2}}$ werden wie folgt berechnet:

$$\mathcal{S}_{\frac{1}{2}} = 2 \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial \mathcal{C}} \left(\mathcal{C}_{\frac{1}{2}}, \hat{\theta}_{n+\frac{1}{2}} \right) \quad \hat{s}_{(\cdot)} = - \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial \hat{\theta}} \left(\mathcal{C}_{(\cdot)}, \hat{\theta}_{(\cdot)} \right) \quad \mathcal{K}_{\frac{1}{2}} = \kappa \sqrt{\det \mathcal{C}_{\frac{1}{2}}} \mathcal{C}_{\frac{1}{2}}^{-1} \tag{C.125}$$

Die Auswertung des rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensors am Mittelpunkt des Positionsvektors $\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}$ bzw. am Mittelpunkt des Deformationsgradienten $\mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}}$ ergibt:

$$\mathcal{C}_{\frac{1}{2}} = \mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}}^T \mathcal{F}_{n+\frac{1}{2}} \tag{C.126}$$

Die zugehörigen Testfunktionen werden nach der zeitlichen Diskretisierung folgendermaßen gebildet:

$$\mathbf{w}_\varphi = \rho_0 \frac{\hat{\mathbf{v}}_{n+1} - \hat{\mathbf{v}}_n}{h_n} \quad \mathbf{w}_v = \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{h_n} \quad \mathbf{w}_\theta = \hat{\theta}_{n+\frac{1}{2}} \tag{C.127}$$

Weiterhin wird eine räumliche Diskretisierung durchgeführt. Die Referenzkonfiguration \mathbf{X} und die Momentankonfiguration φ werden durch die approximierten Größen \mathbf{X}^e und \mathbf{x}^e dargestellt:

$$\mathbf{X}^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A \mathbf{X}^{eA} \quad \mathbf{x}^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A \mathbf{x}^{eA} \tag{C.128}$$

Die Approximationen der Geschwindigkeiten $\hat{\mathbf{v}}$ und der Temperaturen $\hat{\theta}$ lauten:

$$\hat{\mathbf{v}}^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A \hat{\mathbf{v}}^{eA} \quad \hat{\theta}^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A \hat{\theta}^{eA} \tag{C.129}$$

Zudem werden die Testfunktionen angenähert:

$$\mathbf{w}_\varphi^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A \mathbf{w}_\varphi^{eA} \quad \mathbf{w}_v^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A \mathbf{w}_v^{eA} \quad w_\theta^e = \sum_{A=1}^{n_{af}} N^A w_\theta^{eA} \tag{C.130}$$

Da die Temperatur $\hat{\theta}^e$ eine primäre Variable ist, wird sie im Raum diskretisiert und somit ist die Testfunktion $w_\theta^e = \hat{\theta}^e$ im Testraum vorhanden. Eine Projektion ist überflüssig.

Die zeitlich und räumlich diskretisierten Evolutionsgleichungen des thermoelastischen Kontinuums ohne externe Lasten lauten

$$\begin{aligned} \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_\varphi^{eA} \cdot H^{AB} \frac{\mathbf{x}_{n+1}^{eB} - \mathbf{x}_n^{eB}}{h_n} &= \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_\varphi^{eA} \cdot H^{AB} \hat{\mathbf{v}}_{n+\frac{1}{2}}^{eB} \\ \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_v^{eA} \cdot M^{AB} \frac{\hat{\mathbf{v}}_{n+1}^{eB} - \hat{\mathbf{v}}_n^{eB}}{h_n} &= - \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_v^{eA} \cdot \int_{\Omega_\square} \mathbb{B}_{n+\frac{1}{2}}^{eAT} : \mathcal{S}_{\frac{1}{2}}^e \det \mathcal{J}^e \quad (\text{C.131}) \\ \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A,B=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_\theta^{eA} \int_{\Omega_\square} N^A \frac{\hat{s}_{n+1}^e - \hat{s}_n^e}{h_n} \det \mathcal{J}^e &= - \bigcup_{e=1}^{n_e} \sum_{A=1}^{n_{af}} \mathbf{w}_\theta^{eA} T_{\frac{1}{2}}^{int^eA} \end{aligned}$$

mit

$$T_{\frac{1}{2}}^{int^eA} = \int_{\Omega_\square} \left[\frac{\text{Grad } N^A}{\theta_{n+\frac{1}{2}}^e} - \frac{N^A}{\theta_{n+\frac{1}{2}}^{e2}} \text{Grad } \theta_{n+\frac{1}{2}}^e \right] \cdot \mathcal{K}_{\frac{1}{2}}^e \text{Grad } \theta_{n+\frac{1}{2}}^e \det \mathcal{J}^e \quad (\text{C.132})$$

und der Abkürzung $M^{AB} = \rho_0 H^{AB}$. Aus Gl. (C.131) wird das Residuum \mathbf{R} für das Newton-Raphson-Verfahren gebildet. Die Ableitung nach den primären Variablen zum momentanen Zeitpunkt liefert die analytische Tangente \mathbf{K} . Durch Streichung der Zeilen und Spalten können für das thermoelastische System die mechanischen und thermischen Dirichlet-Ränder eingebunden werden. Als Abbruchkriterium wird in diesem Fall die Norm des Residuums verwendet ($|\mathbf{R}| \leq \varepsilon^{glo}$).

C.5.4. Netzverfeinerung

Im Weiteren werden die Auswirkungen des verwendeten Netzes auf die Konfiguration und die Temperatur des Kontinuums mit Lagrangeschen Variablen ermittelt. Hierzu werden die Ergebnisse des Beispiels aus Kapitel 5.2 für vier verschiedene Netze miteinander verglichen (s. Tabelle C.1 und Abbildung C.1).

Zur Berechnung werden die gleichen Anfangsbedingungen gewählt, wie sie in Kapitel 5.2 vorgegeben sind. Sämtliche Parameter, die mit der viskosen Evolutionsgleichung einhergehen, bleiben unberücksichtigt, da hier ein rein thermoelastisches System beschrieben wird. Lediglich die Zeitschrittweite wird auf einen Wert von $h_n = 2$ ms festgelegt. Durch die Verfeinerung des Netzes in φ wird die Anzahl der Randlemente für den thermischen Dirichlet-Rand $\partial\mathcal{B}_\theta$ und den mechanischen Dirichlet-Rand $\partial\mathcal{B}_\varphi$ erhöht.

Netze	Anzahl der Elemente in			Anzahl der Elemente
	z	r	φ	
N 1	1	13	8	416
N 2	1	13	12	624
N 3	1	17	12	816
N 4	1	17	16	1088

Tabelle C.1.: Netze für die Berechnung

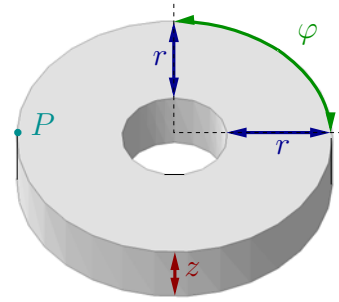


Abbildung C.1.: Scheibe

Abbildung C.2 stellt die Gesamtenergie \hat{H} , die Gesamtentropie \hat{S} und die Lyapunov-Funktion $\hat{V} = \hat{H} - \theta_\infty \hat{S}$ des Systems gegenüber. Zusätzlich werden die y -Koordinate und die Temperatur des Knotenpunktes P (s. Abbildung C.1) für die vier verschiedenen Netze verglichen. Der Knotenpunkt in der Referenzkonfiguration lautet $P = (-1,5/0/0, 5)$. Zur genaueren Betrachtung der Gesamtenergie \hat{H} , der Gesamtentropie \hat{S} und der Lyapunov-Funktion \hat{V} wird die Tabelle C.2 herangezogen.

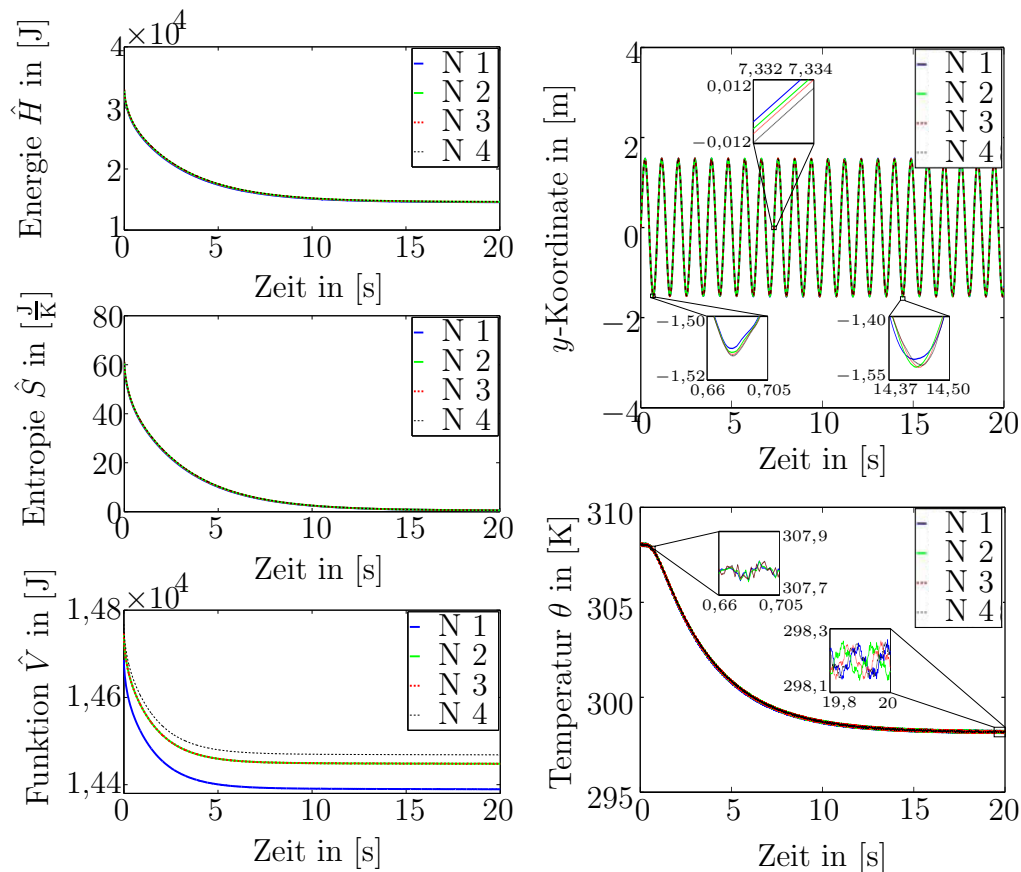


Abbildung C.2.: Gesamtenergie \hat{H} , Gesamtentropie \hat{S} und Lyapunov-Funktion \hat{V} (links) - y -Koordinate und Temperatur des Punktes P (rechts) für die vier Netze N 1 - N 4

Die Gesamtenergie \hat{H} und die Gesamtentropie \hat{S} fallen für die verschiedenen Netze N 1 - N 4 ab (s. Abbildung C.2), da der Dirichlet-Rand $\partial\mathcal{B}_\theta$ eine Wärmeabfuhr aus dem System zulässt. In Tabelle C.2 ist zu erkennen, dass die Startwerte ansteigen, wenn das Netz verfeinert wird. Durch die Geometrie des Kontinuums, die einen Scheibe darstellt, kommt es bei der Verfeinerung des Netzes zu einer Erhöhung des Volumens. Die Rundungen der Scheibe können immer besser abgebildet werden. Dies erkennt man anhand der Lyapunov-Funktion \hat{V} (s. Abbildung C.2 und Tabelle C.2). Die Endwerte der Simulation bei $t = 20$ s sind in Tabelle C.2 gegeben. Die Werterangfolge der Gesamtenergie \hat{H} , der Gesamtentropie \hat{S} und der Lyapunov-Funktion \hat{V} wird durch die Oszillationen der Funktionen ständig verändert.

Netze	Anfangswerte bei $t = 0$ s			Endwerte bei $t = 20$ s		
	\hat{H}	\hat{S}	\hat{V}	\hat{H}	\hat{S}	\hat{V}
N 1	32815,3955	60,8062	14686,0304	14559,8134	0,5712	14389,5002
N 2	32950,8850	61,0603	14745,7459	14625,9874	0,5972	14447,9284
N 3	33017,9026	61,2802	14747,2207	14622,6313	0,5857	14448,0012
N 4	33065,8822	61,3708	14768,1779	14642,7249	0,5849	14468,3494

Tabelle C.2.: Anfangs- und Endwerte der Gesamtenergie \hat{H} , der Gesamtentropie \hat{S} und der Lyapunov-Funktion \hat{V} für die verschiedenen Netze

Die y -Koordinate und die Temperatur θ des Punktes P zeigen für alle vier Netze das gleiche Verhalten (s. Abbildung C.2). Die y -Koordinate oszilliert um den Nullpunkt und die Temperatur θ fällt im Punkt P ab. Durch die Kopplung der Temperatur θ und der Konfiguration φ mit Hilfe des Stoffgesetzes dehnt sich das Kontinuum in radialer Richtung der Scheibe aus. Weiterhin liefert dies eine Oszillation der Temperatur θ . Die Temperatur fällt auf einen Wert um θ_∞ ab.

Wie in Abbildung C.2 dargestellt, kann der Zeitverlauf der Koordinaten φ und Temperaturen θ der Scheibe bereits durch ein Netz mit geringer Elementanzahl (N 1) sehr gut wiedergegeben werden. Die Abweichung der Gesamtenergie \hat{H} , der Gesamtentropie \hat{S} und der Lyapunov-Funktion \hat{V} durch die unterschiedlichen Netze liegt im Bereich $< 1\%$. Das Netzes N 1 ist somit eine gute Approximation zur Berechnung der Ergebnisse.

Abbildung C.3 zeigt die Temperaturverläufe und die Standbilder der Scheibe zu den Zeitpunkten $t = [0; 1,2; 2,2; 4,4]$ s. Die Scheibe kühlt durch den Dirichlet-Rand $\partial\mathcal{B}_\theta$ aus. Durch die anfängliche Geschwindigkeit bewegt sich der Ring in Richtung der y -Achse und dreht sich um die z -Achse.

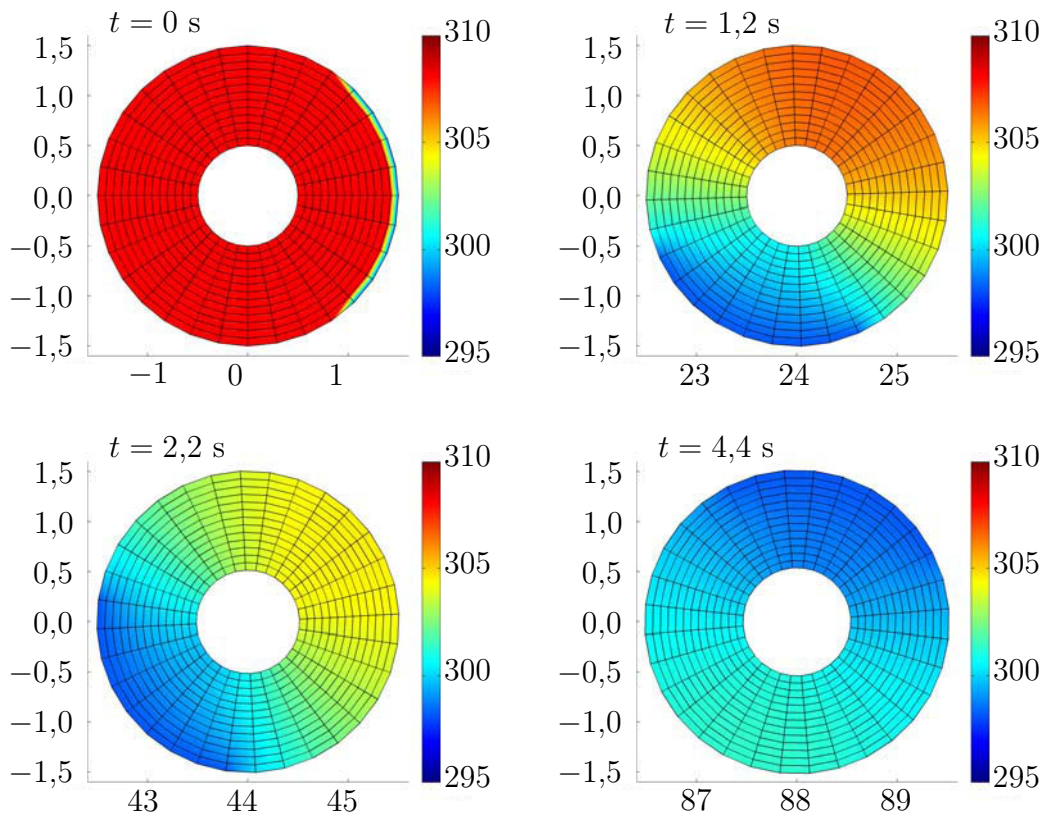


Abbildung C.3.: Standbilder der Scheibe mit der Darstellung des Temperaturverlaufes nach $t = [0; 1,2; 2,2; 4,4]$ s - Berechnung durch die Mittelpunktsregel in Lagrangeschen Variablen bei einer Zeitschrittweite von $h_n = 2$ ms und durch das Netz N 1

C.5.5. Vergleich der Lagrangeschen mit den Poissonschen Variablen

In diesem Kapitel wird die Mittelpunktsregel in Lagrangeschen Variablen mit der Mittelpunktsregel und dem erweiterten TC Integrator in Poissonschen Variablen verglichen. Ein weiteres Mal wird das Beispiel des thermoelastischen Kontinuums mit mechanischen Dirichlet-Rändern und thermischen Zwangsbedingungen aus Kapitel 5.2 herangezogen. Die verwendeten Vorgaben und Parameter können aus Kapitel 5.2 entnommen werden. Die Diskretisierung wird mit einer Zeitschrittweite von $h_n = 2$ ms und dem Netz N 1 (s. Tabelle C.1) durchgeführt.

In Abbildung C.4 werden die Gesamtenergie \hat{H} , die Gesamtentropie \hat{S} und die Lyapunov-Funktion \hat{V} sowie die y -Koordinate und die Temperatur des Punktes P für drei verschiedene Diskretisierungen dargestellt. Diese Diskretisierungen bestehen aus der Mittelpunktsregel in Lagrangeschen Variablen (MPL), der Mittelpunktsregel (MP) und dem erweiterten TC Integrator (ETC) in Poissonschen Variablen. Dabei werden bei der Mittelpunktsregel in Lagrangeschen Variablen lediglich Zeilen und Spalten gestrichen, um

die Dirichlet-Ränder $\partial\mathcal{B}_\theta$ in das thermoelastische System einzubinden. Bei der Mittelpunktsregel und dem erweiterten TC Integrator in Poissonschen Variablen werden die Temperaturen θ am Knoten durch Zwangsbedingungen am Rand $\partial\mathcal{B}_\lambda$ eingefordert.

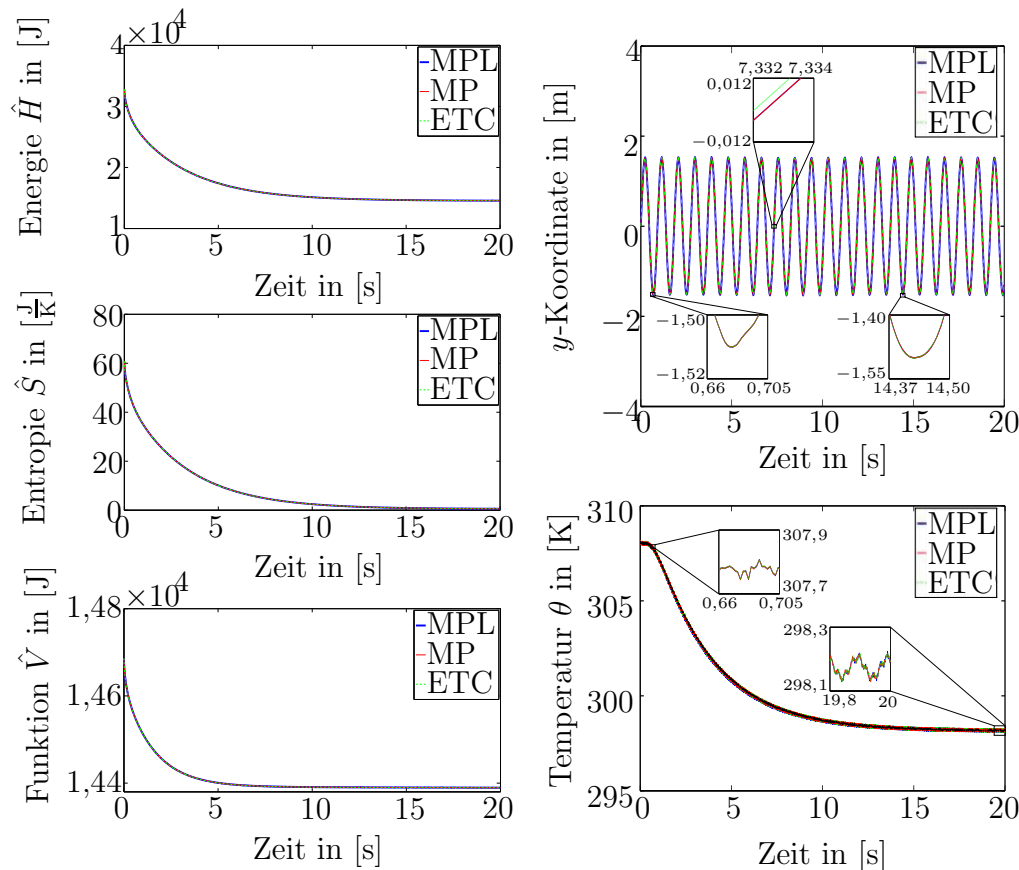


Abbildung C.4.: Gesamtenergie \hat{H} , Gesamtentropie \hat{S} und Lyapunov-Funktion \hat{V} (links) - y -Koordinate und Temperatur des Punktes P (rechts) für die Mittelpunktsregel in Lagrangeschen Variablen (MPL) und Poissonschen Variablen (MP) sowie für den erweiterten TC Integrator (ETC) in Poissonschen Variablen

Die drei unterschiedlichen Diskretisierungen liefern sehr ähnliche Ergebnisse. Die Gesamtenergie \hat{H} , die Gesamtentropie \hat{S} und die Lyapunov-Funktion \hat{V} fallen durch die vorgegebenen Randbedingungen ab. Die y -Koordinate des Punktes P oszilliert bei allen Zeitintegrationen um den Nullpunkt. Es sind keine nennenswerten Unterschiede zu erkennen. Dies gilt auch für den Temperaturverlauf des Punktes P . Die Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren ist somit eine geeignete Methode, um Temperaturen am Rand zu erzwingen.

Literaturverzeichnis

- [1] ARMERO, F. ; SIMO, J.C.: A new unconditionally stable fractional step method for non-linear coupled thermomechanical problems. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 35 (1992), S. 737–766
- [2] BARGMANN, S.: *Theory and numerics of non-classical thermo-hyperelasticity*. Dissertationsschrift, UKL/LTM T 08-02, Lehrstuhl für Technische Mechanik, Technische Universität Kaiserslautern, 2008
- [3] BESDO, D.: Zur Formulierung von Stoffgesetzen der Plastomechanik im Dehnungsraum nach Ilyushins Postulat. In: *Ing. Archiv* 51 (1981), S. 1–8
- [4] BETSCH, P.: The discrete null space method for the energy consistent integration of constrained mechanical systems. Part I: Holonomic constraint. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 194 (2005), S. 5159–5190
- [5] BETSCH, P.: Energy-consistent numerical integration of mechanical systems with mixed holonomic and nonholonomic constraints. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 195 (2006), S. 7020–7035
- [6] BETSCH, P. ; LEYENDECKER, S.: The discrete null space method for the energy consistent integration of constrained mechanical systems. Part II: Multibody dynamics. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 67 (2006), S. 499–552
- [7] BETSCH, P. ; STEINMANN, P.: Inherently energy conserving time finite elements for classical mechanics. In: *J. Comp. Phys.* 160 (2000), S. 88–116
- [8] BETSCH, P. ; STEINMANN, P.: Conservation properties of a time FE method–Part II: Time-stepping schemes for non-linear elastodynamics. In: *Int. J. Numer. Meth. Engrg* 50 (2001), S. 1931–1955
- [9] BETSCH, P. ; STEINMANN, P.: Conservation properties of a time FE method–Part III: Mechanical systems with holonomic constraints. In: *Int. J. Numer. Meth. Engrg* 53 (2002), S. 2271–2304
- [10] BETTEN, J.: *Kontinuumsmechanik. Elasto-, Plasto-, Kriechmechanik*. Springer-Verlag, 1993

- [11] BORNEMANN, P. B. ; GALVANETTO, U.: Discrete dynamics of implicit time integration schemes for a dissipative system. In: *Commun. Numer. Meth. Engng* 19 (2003), S. 737–748
- [12] BÜTHE, I. ; FÄNDRICH, K. ; GEROLD, F. ; HOFMANN, D. ; KLEPEK, G. ; LAMMERTING, H. ; MALBURG, A. ; SELZ, G. ; STUTZ, H. ; SCHMIDT, H.-U. ; SCHWENKE, W. ; TAUBENMANN, P.: *Polyurethane. Spezialkunststoffe für Industrie und Handwerk - Verarbeitung, Eigenschaften, Anwendung*. Expert Verlag, 1989
- [13] CARLSON, D.E.: *Linear thermoelasticity*. In S. Flügge, ed., *Handbuch der Physik* Bd. VI/2a, Springer-Verlag, 1972
- [14] CARSLAW, H.S. ; JAEGER, J.C.: *Conduction of Heat in Solids*. Oxford University Press, 1959
- [15] COLEMAN, B.D. ; M.E.GURTIN: Thermodynamics with internal state variables. In: *J. Chem. Phys.* 47 (1967), S. 597–613
- [16] DAL, H. ; KALISKE, M.: Bergström-Boyce model for nonlinear finite rubber viscoelasticity: theoretical aspects and algorithmic treatment for the FE method. In: *Comput. Mech.* 44 (2009), S. 809–823
- [17] DENZER, R. ; BARTH, F. J. ; STEINMANN, P.: Studies in elastic fracture mechanics based on the material force method. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 58 (2003), S. 1817–1835
- [18] GARCIA ORDEN, J.C. ; ROMERO, I.: Energy-Entropy-Momentum integration of discrete thermo-visco-elastic dynamics. In: *Eur. J. Mech. A/Solids* 32 (2012), S. 76–87
- [19] GONZALEZ, O.: *Design and analysis of conserving integrators for nonlinear Hamiltonian systems with symmetry*. Ph.D. Thesis, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, 1996
- [20] GONZALEZ, O.: Exact Energy and Momentum Conserving Algorithms for General Models in Nonlinear Elasticity. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 190 (2000), S. 1763–1783
- [21] GREEN, A. ; NAGHDI, P.: A re-examination of the basic postulates of thermomechanics. In: *Proc. R. Soc. Lond.* 432 (1991), S. 171–194
- [22] GREEN, M.S. ; TOBOLSKY, A.V.: A New Approach to the Theory of Relaxing Polymeric Media. In: *The Journal of Chemical Physics* 14 (1946), S. 80–92

-
- [23] GRMELA, M. ; ÖTTINGER, H.C.: Dynamics and thermodynamics of complex fluids. I. Development of a general formalism. In: *Physical Review E* 56 (1997), Nr. 6, S. 6620–6632
- [24] GROSS, M.: *Conserving Time Integrators for Nonlinear Elastodynamics*. Dissertationsschrift, UKL/LTM T 04-01, Lehrstuhl für Technische Mechanik, Technische Universität Kaiserslautern, 2004
- [25] GROSS, M.: *Higher-order accurate and energy-momentum consistent discretisation of dynamic finite deformation thermo-viscoelasticity*. Habilitationsschrift, Band II, Institut für Numerische Mechanik, Universität Siegen, urn:nbn:de:hbz:467-3890, 2009
- [26] GROSS, M. ; BETSCH, P.: Energy - momentum consistent finite element discretization of dynamic finite viscoelasticity. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 81 (2010), S. 1341–1386
- [27] GROSS, M. ; BETSCH, P.: Galerkin-based energy-momentum consistent time-stepping algorithms for classical nonlinear thermo-elastodynamics. In: *Math. Comp. Sim.* 82 (2011), S. 718–770
- [28] GROSS, M. ; BETSCH, P. ; STEINMANN, P.: Conservation properties of a time FE method—Part IV: Higher order energy and momentum conserving schemes. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 63 (2005), S. 1849–1897
- [29] GURTIN, M.E.: Thermodynamics and stability. In: *Arch. Rational Mech. Anal.* 59 (1975), S. 63–96
- [30] GURTIN, M.E.: *An Introduction to Continuum Mechanics*. Academic Press, 1982
- [31] HARTMANN, S.: *Finite-Elemente Berechnung inelastischer Kontinua. Interpretation als Aggrebro-Differentialgleichungssysteme*. Habilitationsschrift, Bericht 1/2003, Institut für Mechanik, Universität Kassel, 2003
- [32] HAUPT, P.: *Continuum mechanics and theory of materials, 2nd edition*. Springer-Verlag, 2000
- [33] HESCH, C.: *Mechanische Integratoren für Kontaktvorgänge deformierbarer Körper unter großen Verzerrungen*. Dissertationsschrift, Band I, Lehrstuhl für Numerische Mechanik, Universität Siegen, urn:nbn:de:hbz:467-3156, 2007
- [34] HESCH, C. ; BETSCH, P.: A mortar method for energy-momentum conserving schemes in frictionless dynamic contact problems. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 77 (2009), S. 1468–1500

- [35] HESCH, C. ; BETSCH, P.: Energy-momentum consistent algorithms for dynamic thermomechanical problems – Application to mortar domain decomposition problems. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 86 (2011), S. 1277–1302
- [36] HOLZAPFEL, G.A.: On large strain viscoelasticity: Continuum formulation and finite element applications to elastomeric structures. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 39 (1996), S. 3903–3926
- [37] HOLZAPFEL, G.A.: *Nonlinear solid mechanics. A continuum approach for engineering*. John Wiley & Sons Ltd., 2000
- [38] HOLZAPFEL, G.A. ; SIMO, J.C.: Entropy elasticity of isotropic rubber-like solids at finite strains. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 132 (1996), S. 17–44
- [39] HOLZAPFEL, G.A. ; SIMO, J.C.: A new viscoelastic constitutive model for continuous media at finite thermomechanical changes. In: *International Journal of Solids and Structures* 33 (1996), Nr. 20-22, S. 3019–3034
- [40] HUGHES, T.J.R. ; T.K. CAUGHEY ; LIU, W.K.: Finite-Element Methods for Nonlinear Elastodynamics which Conserve Energy. In: *J. Appl. Mech.* 45 (1978), S. 366–370
- [41] HUTTER, K.: The foundations of thermodynamics, its basic postulates and implications. A review of modern thermodynamics. In: *Acta mechanica* 27 (1977), S. 1–54
- [42] HÜTTER, M. ; SVENDSEN, B.: On the formulation of continuum thermodynamic models for solids as General Equations for Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling. In: *J. Elast.* 104 (2011), S. 357–368
- [43] HÜTTER, M. ; SVENDSEN, B.: Thermodynamic model formulation for viscoplastic solids as General Equations for Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling. In: *Continuum Mech. Thermodyn.* 24 (2012), S. 211–227
- [44] HÜTTER, M. ; TERVOORT, T.A.: Finite anisotropic elasticity and material frame-indifference from a non-equilibrium thermodynamic perspective. In: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 152 (2008), S. 45–52
- [45] HÜTTER, M. ; TERVOORT, T.A.: Thermodynamic considerations on non-isothermal finite anisotropic elasto-viscoplasticity. In: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 152 (2008), S. 53–65
- [46] JONGSCHAAP, R.J.J.: The matrix model, a driven state variables approach to non-equilibrium thermodynamics. In: *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 96 (2001), S. 63–76

-
- [47] JONGSCHAAP, R.J.J. ; HAAS, K.H. de ; DAMEN, C.A.J.: A generic matrix representation of configuration tensor rheological models. In: *Journal of Rheology* 38 (1994), Nr. 4, S. 769–796
- [48] JUNG, M. ; LANGER, U.: *Methode der finiten Elemente für Ingenieure*. Vieweg & Teubner, 2001
- [49] KRÜGER, M. ; GROSS, M. ; BETSCH, P.: A comparison of structure-preserving integrators for discrete thermoelastic systems. In: *Comput. Mech.* 47 (2011), S. 701–722
- [50] LABUDDE, R.A. ; GREENSPAN, D.: Energy and momentum conserving methods of arbitrary order for the numerical integration of equations of motion - I. Motion of a single particle. In: *Num. Math.* 25 (1976), S. 323–346
- [51] LABUDDE, R.A. ; GREENSPAN, D.: Energy and momentum conserving methods of arbitrary order for the numerical integration of equations of motion - II. Motion of a system of particles. In: *Num. Math.* 26 (1976), S. 1–16
- [52] LANDAU, L.D.: *Collected Papers of L.D. Landau, edited by D. ter Haar*. Pergamon Press, 1965
- [53] LANDAU, L.D. ; LIFSHITZ, E.M.: *Mechanics*. Pergamon Press, Volume 1, 1960
- [54] LANGEHEINECKE, K. ; JANY, P. ; THILKE, G.: *Thermodynamik für Ingenieure*. Vieweg & Teubner, 7. Auflage, 2008
- [55] LAURSEN, T.A. ; MENG, X.N.: A new solution procedure for application of energy-conserving algorithms to general constitutive models in nonlinear elastodynamics. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 190 (2001), S. 6309–6322
- [56] LE TALLEC, P. ; RAHIER, C.: Numerical models of steady rolling for non-linear viscoelastic structures in finite deformations. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 37 (1994), S. 1159–1186
- [57] LE TALLEC, P. ; RAHIER, C. ; KAISS, A.: Three-dimensional incompressible viscoelasticity in large strains: Formulation and numerical approximation. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 109 (1993), S. 233–258
- [58] LION, A.: A physically based method to represent the thermo-mechanical behaviour of elastomers. In: *Acta Mech.* 123 (1997), S. 1–25
- [59] LION, A.: On the large deformation behaviour of reinforced rubber at different temperatures. In: *J. Mech. Phys. Solids* 45 (1997), Nr. 11/12, S. 1805–1834

- [60] LION, A.: *Thermomechanik von Elastomeren. Experimente und Materialtheorie.* Habilitationsschrift, Bericht 1/2000, Institut für Mechanik, Universität Kassel, 2000
- [61] LUBLINER, J.: A model of rubber viscoelasticity. In: *Mechanics Research Communications* 12 (1985), S. 93–99
- [62] MARKERT, B.: *Porous media viscoelasticity with application to polymeric foams.* Dissertationsschrift, Report No. II-12, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl II (Kontinuumsmechanik), Universität Stuttgart, 1983
- [63] MARSDEN, J.E. ; HUGHES, T.J.R.: *Mathematical foundations of elasticity.* Prentice-Hall Inc., 1983
- [64] MAUGIN, G.A. ; KALPAKIDES, V.K.: A Hamiltonian formulation for elasticity and thermoelasticity. In: *J. Phys. A: Math. Gen.* 35 (2002), S. 10775–10788
- [65] MIEHE, C.: *Zur numerischen Behandlung thermomechanischer Prozesse.* Dissertationsschrift, F 88/6, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover, 1988
- [66] MIEHE, C.: *Kanonische Modelle Multiplikativer Elasto-Plastizität. Thermodynamische Formulierung und numerische Implementation.* Habilitationsschrift, F 93/1, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover, 1993
- [67] MIEHE, C.: Aspects of the formulation and finite element implementation of large strain isotropic elasticity. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 37 (1994), S. 1981–2004
- [68] MIELKE, A.: Formulation of thermoelastic dissipative material behavior using GENERIC. In: *Continuum Mech. Thermodyn.* 23 (2011), S. 233–256
- [69] MOHR, R. ; MENZEL, A. ; STEINMANN, P.: A consistent time FE-method for large strain elasto-plasto-dynamics. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 197 (2008), Nr. 33-40, S. 3024–3044
- [70] MOONEY, M.: A theory of large elastic deformation. In: *J. Appl. Phys.* 11 (1940), S. 582–592
- [71] MÜLLER, M. ; GROSS, M. ; BETSCH, P.: Dynamic finite deformation viscoelasticity in principal stretches: Energy-consistent time integration using mixed finite elements. In: *M. Papadrakakis, N.D. Lagaros and M. Fragiadakis, editors, Proceedings of 2nd International Conference on Computational Methods in Structural Dynamics and Earthquake Engineering (COMPDYN), Rhodes Island, Greece (22-24 June 2009)*

-
- [72] NOELS, L. ; STAINIER, L. ; PONTHOT, J.P.: An energy-momentum conserving algorithm for nonlinear hypoelastic constitutive models. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 59 (2004), S. 83–114
- [73] NOELS, L. ; STAINIER, L. ; PONTHOT, J.P.: On The Use of Large Time Steps with An Energy-Momentum Conserving Algorithm for Non-linear Hypoelastic Constitutive Models. In: *Int. J. Solids Struct.* 41 (2004), S. 663–693
- [74] NOLL, W.: A mathematical theory of the mechanical behavior of continuous media. In: *Arch. Rational Mech. Anal.* 2 (1958), S. 197–226
- [75] NOLL, W.: A new mathematical theory of simple materials. In: *Arch. Rational Mech. Anal.* 48 (1972), S. 1–50
- [76] OGDEN, R.W.: Large deformation isotropic elasticity: on the correlation of theory and experiment for compressible rubberlike solids. In: *Proc. R. Soc. Lond. A* 328 (1972), S. 567–583
- [77] OGDEN, R.W.: Large deformation isotropic elasticity: on the correlation of theory and experiment for incompressible rubberlike solids. In: *Proc. R. Soc. Lond. A* 326 (1972), S. 565–584
- [78] ORTIZ, M. ; PHILLIPS, R.: Nanomechanics of defects in solids. In: *Advances in Applied Mechanics* 36 (1999), S. 1–79
- [79] ÖTTINGER, H.C.: General projection operator formalism for the dynamics and thermodynamics of complex fluids. In: *Physical Review E* 57 (1998), Nr. 2, S. 1416–1420
- [80] ÖTTINGER, H.C.: *Beyond equilibrium thermodynamics*. John Wiley & Sons Inc., 2005
- [81] ÖTTINGER, H.C. ; GRMELA, M.: Dynamics and thermodynamics of complex fluids. II. Illustrations of a general formalism. In: *Physical Review E* 56 (1997), Nr. 6, S. 6633–6655
- [82] REESE, S.: *Theorie und Numerik des Stabilitätsverhaltens hyperelastischer Festkörper*. Dissertationsschrift, D 17, Institut für Technische Mechanik, Technische Hochschule Darmstadt, 1994
- [83] REESE, S.: *Thermomechanische Modellierung gummiartiger Polymerstrukturen*. Habilitationsschrift, F 01/4, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover, 2000
- [84] REESE, S. ; GOVINDJEE, S.: A theory of finite viscoelasticity and numerical aspects. In: *Int. J. Solids Struct.* 35 (1998), S. 3455–3482

- [85] REESE, S. ; GOVINDJEE, S.: Theoretical and numerical aspects in the thermo-viscoelastic material behaviour of rubber-like polymers. In: *Mechanics of time-dependent materials* 1 (1998), S. 357–396
- [86] REIMPELL, J.: *Fahrwerktechnik: Stoßdämpfer*. Vogel Verlag, 1983
- [87] REIMPELL, J. ; STOLL, H.: *Fahrwerktechnik: Stoß- und Schwingungsdämpfer*. Vogel Verlag, 1989
- [88] RICHTMYER, R.D. ; MORTON, K.W.: *Difference Methods for Initial-Value Problems, 2nd edition*. Wiley-Interscience, 1967
- [89] RIVLIN, R.S.: Large elastic deformations of isotropic materials I. Fundamental concepts. In: *Phil. Trans. R. Soc. London, Series A* 240 (1948), S. 459–490
- [90] ROMERO, I.: Thermodynamically consistent time-stepping algorithms for non-linear thermomechanical systems. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 79 (2009), S. 706–732
- [91] ROMERO, I.: Algorithms for coupled problems that preserve symmetries and the laws of thermodynamics. PartI: Monolithic integrators and their application to finite strain thermoelasticity. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 199 (2010), S. 1841 – 1858
- [92] ROMERO, I.: Algorithms for coupled problems that preserve symmetries and the laws of thermodynamics. PartII: Fractional step methods. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 199 (2010), S. 2235 – 2248
- [93] SÄNGER, N.: *Elemente für die Dynamik flexibler Mehrkörpersysteme*. Dissertationsschrift, Band IV, Lehrstuhl für Numerische Mechanik, Universität Siegen, urn:nbn:de:hbz:467-5611, 2011
- [94] SEDLAN, K.: *Viskoelastisches Materialverhalten von Elastomerwerkstoffen: Experimentelle Untersuchung und Modellbildung*. Dissertationsschrift, Bericht 2/2001, Institut für Mechanik, Universität Kassel, 2000
- [95] SIMO, J.C.: On a fully three-dimensional finite-strain viscoelastic damage model: Formulation and computational aspects. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 60 (1987), S. 153–173
- [96] SIMO, J.C.: *Numerical analysis and simulation of plasticity*. In Ciarlet P.G. und Lions J.L. (Eds.), *Handbook of Numerical Analysis*, Vol. VI., Elsevier, 1998
- [97] SIMO, J.C. ; ARMERO, F.: Geometrically non-linear enhanced strain mixed methods and the method of incompatible modes. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 33 (1992), S. 1413–1449

-
- [98] SIMO, J.C. ; ARMERO, F. ; TAYLOR, R.L.: Improved versions of assumed enhanced strain tri-linear elements for 3D finite deformation problems. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 110 (1993), S. 359–386
- [99] SIMO, J.C. ; MIEHE, C.: Associative coupled thermoplasticity at finite strains: Formulation, numerical analysis and implementation. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 98 (1992), S. 41–104
- [100] SIMO, J.C. ; RIFAI, S.: A class of mixed assumed strain methods and the method of incompatible modes. In: *Int. J. Numer. Meth. Engrng* 29 (1990), S. 1595–1638
- [101] SIMO, J.C. ; TARNOW, N.: The discrete energy-momentum method. Conserving algorithms for nonlinear elastodynamics. In: *Z. Angew. Math. phys* 43 (1992), S. 757–792
- [102] SIMO, J.C. ; TARNOW, N. ; WONG, K.K.: Exact energy-momentum conserving algorithms and symplectic schemes for nonlinear dynamics. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 100 (1992), Nr. 1, S. 63–116
- [103] SIMO, J.C. ; TAYLOR, R.L.: Penalty function formulations for incompressible nonlinear elastostatics. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 35 (1982), S. 107–118
- [104] SIMO, J.C. ; TAYLOR, R.L.: Quasi-incompressible finite elasticity in principal stretches. Continuum basis and numerical algorithms. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 85 (1991), S. 273–310
- [105] SIMO, J.C. ; TAYLOR, R.L. ; WRIGGERS, P.: A note on finite-element implementation of pressure boundary loading. In: *Comm. Appl. Numer. Methods* 7 (1991), S. 513–525
- [106] SIMO, J.C. ; WONG, K.K.: Unconditionally stable algorithms for rigid body dynamics that exactly preserve energy and momentum. In: *Int. J. Numer. Meth. Engrng* 31 (1991), S. 19–52
- [107] TRELOAR, L.R.G.: The elasticity of a network of long-chain molecules-II. In: *Transactions of the Faraday Society* 39 (1943), S. 241–246
- [108] UHLAR, S.: *Energy consistent integration of hybrid multibody systems*. Dissertationsschrift, Band III, Institut für Numerische Mechanik, Universität Siegen, urn:nbn:de:hbz:467–4086, 2009
- [109] UHLAR, S. ; BETSCH, P.: Energy-consistent integration of multibody systems with friction. In: *Journal of Mechanical Science and Technology* 23 (2009), S. 901–909

- [110] WILLNER, K.: *Kontinuums- und Kontaktmechanik: Synthetische und analytische Darstellung*. Springer-Verlag, 1990
- [111] WOOD, W.L.: *Practical time-stepping schemes*. Oxford University Press, 1990
- [112] WRIGGERS, P.: *Nichtlineare Finite-Elemente-Methoden*. Springer, 2001
- [113] WRIGGERS, P. ; REESE, S.: A note on enhanced strain methods for large deformations. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 135 (1996), S. 201–209

Schriftenreihe des Lehrstuhls für Numerische Mechanik

Band I

Mechanische Integratoren für Kontaktvorgänge deformierbarer Körper unter großen Verzerrungen,

C. Hesch, Dissertation, 2008, urn:nbn:de:hbz:467-3156

Band II

Higher-order accurate and energy-consistent discretisation of dynamic finite deformation thermo-viscoelasticity,

M. Groß, Habilitationsschrift, 2009, urn:nbn:de:hbz:467-3890

Band III

Energy Consistent Time-Integration of Hybrid Multibody Systems,

S. Uhlar, Dissertation, 2009, urn:nbn:de:hbz:467-4086

Band IV

Elemente für die Dynamik flexibler Mehrkörpersysteme,

N. Sängler, Dissertation, 2011, urn:nbn:de:hbz:467-5611

Band V

Mechanical integrators for the optimal control in multibody dynamics,

R. Siebert, Dissertation, 2012, urn:nbn:de:hbz:467-6520

Band VI

Energie-Entropie-konsistente Zeitintegratoren für die nichtlineare Thermoviskoelastodynamik,

M. Krüger, Dissertation, 2013, urn:nbn:de:hbz:467-7312