

Galerkin-basierte Zeitintegratoren für die nichtlineare Elastodynamik

Arbeitsbericht

August 2002 - Juli 2004

DFG-Geschäftszeichen: STE 544/13-2

Kennwort: Zeitintegratoren

Bearbeiter

Dipl.-Ing. Michael Groß

Antragsteller

Prof. Dr.-Ing. Paul Steinmann
Prof. Dr.-Ing. Peter Betsch

August 2004

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Verallgemeinertes Problem	4
2.1	Hamiltonsche Formulierung	4
2.2	Energieerhaltung	6
2.3	Impulserhaltung	6
2.4	Drehimpulserhaltung	6
3	Die zeitliche Finite-Elemente-Methode	7
3.1	Finite-Elemente-Diskretisierung in der Zeit	7
3.2	Galerkin-basierte Zeitintegration	7
3.3	Kollokationseigenschaft	8
3.4	Gesamtenergieerhaltung	9
3.5	Gesamtimpulserhaltung	9
3.6	Gesamtdrehimpulserhaltung	10
3.7	Implementierung	10
4	Semi-diskrete nichtlineare Elastodynamik	11
4.1	Finite-Elemente-Diskretisierung im Raum	12
4.2	Hamiltonsche Formulierung	13
4.3	Zeitdiskretisierung	14
4.4	Entwurfskriterium für Energieerhaltung	14
4.5	Erweiterter Gradient	15
4.6	Assumed strain approximation	15
4.7	Erweiterter Gradient mit assumed strain approximation	16
4.8	Die erweiterte Galerkin (eG) Methode	16
4.9	Numerische Untersuchungen	17
4.9.1	Implementierung	17
4.9.2	Kompressibles Neo-Hooke Material	19
4.9.3	Diskussion	19
5	Zusammenfassung	20
	Vorträge zur Thematik des Forschungsvorhabens	23
	Veröffentlichungen zur Thematik des Forschungsvorhabens	25

1 Einleitung

Das Ziel des Forschungsvorhabens war die Entwicklung energie- und drehimpulserhaltender Zeitschrittverfahren von höherer Genauigkeitsordnung für die nichtlineare Elastodynamik. Zu diesem Zweck wurde der Finite-Elemente-Ansatz aus den Vorarbeiten [2, 3] der Antragsteller erweitert.

Den energie- und drehimpulserhaltenden Zeitschrittverfahren wurde in diesen Vorarbeiten eine ausgezeichnete numerische Stabilität bei der Berechnung steifer Konfigurationen nachgewiesen. Beispielfhaft wurden Massenpunktsysteme mit steifen Wechselwirkungspotentialen in [2] und die semi-diskrete nichtlineare Elastodynamik mit hoher Materialsteifigkeit in [3] behandelt. Die Erhaltung von Invarianten des zugrundeliegenden dynamischen Systems ist aber auch für nicht-steife Systeme wünschenswert, da die numerischen Lösungen dann im richtigen Lösungsraum enthalten sind (siehe [6]). Dies garantiert eine qualitativ genaue numerische Lösung. Die energie- und drehimpulserhaltenden Zeitschrittverfahren aus diesen Vorarbeiten sind jedoch nur von zweiter Genauigkeitsordnung.

Für lange Zeit wurden Verfahren von zweiter Genauigkeitsordnung den Verfahren von höherer Genauigkeitsordnung vorgezogen; besonders zur Berechnung großer semi-diskreter Systeme in endlich-dimensionalen zeitabhängigen Problemstellungen. Ein möglicher Grund kann ein Theorem in [7] beziehungsweise [8] sein. Dieses Theorem beschreibt die sogenannte *Dahlquist*-Barriere, welche die maximal erreichbare Genauigkeit einer A-stabilen linearen Mehrschrittverfahren auf zweite Genauigkeitsordnung begrenzt. Ein weiterer Nachteil sind die größeren linearen Gleichungssysteme von impliziten Verfahren höherer Genauigkeitsordnung. Die Koeffizientenmatrix dieser linearen Gleichungssysteme kann zusätzlich auch eine größere Bandbreite besitzen.

Andererseits sind energie- und drehimpulserhaltende Zeitschrittverfahren aufgrund ihrer ausgezeichneten numerischen Stabilität besonders attraktiv für Berechnungen von mittlerer bis langer Rechendauer. Aus bekannten Fehlerabschätzungen lässt sich jedoch ein möglicherweise wachsender globaler Fehler voraussagen. Aus diesem Grund kann der Gebrauch eines Verfahrens von niedriger Genauigkeitsordnung unrealistisch kleine Zeitschrittweiten erfordern um den globalen Fehler in Grenzen zu halten. Einen effizienteren Weg scheint dagegen die Verwendung von Verfahren höherer Genauigkeitsordnung darzustellen.

Die meisten der früher entwickelten energie- und drehimpulserhaltenden Zeitschrittverfahren für mechanische Probleme sind jedoch maximal von zweiter Ordnung genau, da sie auf Finite-Differenzen-Verfahren basieren. Ein Verfahren vierter Ordnung konnte dann mittels der sogenannten *Zwischenschritt-Methode* konstruiert werden. Diese Vorgehensweise wurde in [12] und [13] unabhängig voneinander erwähnt. Somit ist die Finite-Differenzen-Methode eine weniger einheitliche Umgebung zum Entwurf von Verfahren höherer Genauigkeitsordnung.

Eine systematischere Entwicklung ermöglicht die kontinuierliche Galerkin-Methode in der Zeit (vergleiche [14, 15, 16, 17]). Weiterhin hat sich herausgestellt, dass diese Methode aufgrund ihrer inhärenten Energie- und Drehimpulserhaltung ausgezeichnet geeignet ist um energie- und drehimpulserhaltende Zeitschrittverfahren zu entwickeln (siehe auch [18] und [19]). Aus diesem Grund stellt die kontinuierliche Galerkin-Methode in der Zeit eine einheitliche Entwicklungsumgebung für energie- und drehimpulserhaltende Zeitschrittverfahren höherer Genauigkeitsordnung dar. In den Arbeiten [20] und [21] wurden bereits energieerhaltende Zeitschrittverfahren basierend auf der kontinuierlichen Galerkin-Methode in der Zeit entwickelt; sie wurden aber ausschließlich auf ein-dimensionale Problemstellungen angewendet.

Eine systematische Entwicklung energie- und drehimpulserhaltender Zeitschrittverfahren für mehrdimensionale mechanische Systeme ist gegenwärtig nicht verfügbar. Das Ziel dieses Projektes war es diese Lücke zu füllen. Es wurden daher energie- und drehimpulserhaltende Zeitschrittverfahren höherer Genauigkeitsordnung durch Modifizierung der cG-Methode aus den Vorarbeiten [2, 3] entwickelt. Die Energieerhaltung wurde dabei mittels einer neuen *Projektionsmethode* erzwungen. Diese Modifikationen führten dann zu einer erweiterten cG-Methode welche als eG-Methode bezeichnet wurde.

Die Anwendung einer Projektionsmethode oder eines diskreten variationellen Prinzips sind die hauptsächlich angewendeten Methoden zum Entwurf energie- und drehimpulserhaltender Zeitschrittverfahren. Die Projektionsmethode projiziert eine numerische Lösung eines nicht-erhaltenden Verfahrens in einen erhaltenden Lösungsraum. Es wurden zahlreiche Projektionstechniken in der einschlägigen Literatur vorgeschlagen. Zum Beispiel wurde in den Arbeiten [10, 22, 23, 24, 25, 26] das Erhaltungsgesetz über einen skalaren Parameter erzwungen, der aus einer zusätzlichen Gleichung im linearen Gleichungssystem bestimmt wurde. Zwei weitere Möglichkeiten können als Veränderung einer gewöhnlichen Quadraturregel bezeichnet werden. In der Arbeit [6] wurde der Quadraturpunkt der Mittelpunktsregel (Kollokationsparameter) so modifiziert, dass das Erhaltungsgesetz erfüllt wurde und die Genauigkeitsordnung der

numerischen Integration erhalten blieb. In der bereits genannten Arbeit [20] wurden dagegen die Gaußschen Gewichte verändert um Invarianten und die Genauigkeit beizubehalten. Es lässt sich jedoch nicht immer eine erfolgreiche Projektion mittels Skalare garantieren, besonders falls mehrere Erhaltungsgesetze gleichzeitig erfüllt werden sollen (siehe [26]). Ausserdem kann eine ausreichende Modifikation von approximierten Tensorfeldern im allgemeinen nicht durch Skalare realisiert werden. Berücksichtigt man diesen Sachverhalt so lassen sich Konvergenzprobleme bei der iterativen Lösung vermeiden. Eine oft ausgeübte Technik im Rahmen der nichtlinearen Elastodynamik ist das Ersetzen einer gewöhnlichen Ableitung durch eine erhaltende diskrete Ableitung (siehe zum Beispiel in [9, 11, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35]). Die Projektionsmethode in der obengenannten Arbeit [21] basiert auf veränderten Testfunktionen der verwendeten kontinuierlichen Galerkin-Methode.

Die Arbeit [36] beschreibt die Herleitung von Zeitschrittverfahren ausgehend von einem diskreten variationellen Prinzip. Diese Verfahren wurden in der Arbeit [37] als *variationelle Integratoren* bezeichnet. Der variationelle Integrator in [38], zum Beispiel, erfüllt die drei grundlegenden Erhaltungseigenschaften eines autonomen Hamiltonschen Systems mit Symmetrie: Erhaltung der symplektischen Form sowie der Gesamtenergie und der Impulsabbildungen. Dies ist möglich durch eine adaptive Zeitschrittweitenänderung nach [39]. Dieser Ansatz wurde in der Arbeit [40] auf die nichtlineare Elastodynamik erweitert und führt auf *asynchrone variationelle Integratoren* mit der Möglichkeit verschiedener Zeitschrittweiten für die unterschiedlichen Elemente im Finite-Elemente-Netz.

In diesem Bericht wird eine weitere Projektionstechnik vorgestellt. Es wird ein gewöhnlicher Gradient eines Potentials durch eine kontinuierliche Funktion ersetzt, welche die Gesamtenergie als Nebenbedingung erfüllt. Diese Projektionstechnik in Verbindung mit einer Kollokation an Gausspunkten führt zu Gesamtenergie- sowie zu Impuls- und Drehimpulserhaltung. Es wird gezeigt, dass diese Projektionstechnik für ein mehr-dimensionales dynamisches System wie die semi-diskrete nichtlineare Elastodynamik gut geeignet ist. Die Untersuchung der Erhaltungseigenschaften sowie des Zeitaufwandes der entwickelten eG-Methode ist Teil der numerischen Untersuchungen. Weiterhin wird ein numerischer Vergleich zwischen der cG- und der eG-Methode vorgestellt. Aus den Diagrammen des relativen Fehlers kann die Effizienz der Zeitschrittverfahren für lineare, quadratische und kubische Finite-Elemente in der Zeit entnommen werden.

2 Verallgemeinertes Problem

Sowohl die semi-diskrete nichtlineare Elastodynamik als auch Massenpunktsysteme beschreiben Bewegungen einer Menge von materiellen Punkten $\bar{\mathcal{B}}$ plziert im Euklidischen Raum $\mathbb{R}^{n_{dim}}$. In der Massenpunktdynamik sind die materiellen Punkte die Massenpunkte und in der semi-diskrete nichtlinearen Elastodynamik werden die materiellen Punkte durch die räumlichen Knoten repräsentiert. Folglich lassen sich die dynamischen Formulierungen dieser Probleme von einer allgemeineren Problemstellung ableiten. In diesem Abschnitt wird die dynamische Formulierung dieses verallgemeinerten Problem es vorgestellt.

2.1 Hamiltonsche Formulierung

Wir definieren eine Menge $\bar{\mathcal{B}}$ von n_{poi} materiellen Punkten, welche in einer Konfiguration \mathcal{B}_t zur Zeit t angeordnet sind. Wir identifizieren jeden materiellen Punkt A , $A = 1, \dots, n_{poi}$, in dieser Konfiguration \mathcal{B}_t über seinen Positionsvektor $\mathbf{q}^A \in \mathbb{R}^{n_{dim}}$. Wir nehmen freie Bewegungen der Menge $\bar{\mathcal{B}}$ an, so dass die Anzahl der Freiheitsgrade $n_{dof} = n_{dim}n_{poi}$ ist. Der Konfigurationsraum Q der materiellen Punkte ist somit eine offene Menge im n_{dof} -dimensionalen Euklidischen Raum $\mathbb{R}^{n_{dof}}$. Punkte in Q werden mit dem Vektor $\mathbf{q} = (\mathbf{q}^1, \dots, \mathbf{q}^{n_{poi}}) \in Q$ bezeichnet, den wir den *Koordinatenvektor* der Konfiguration nennen.

Auf alle materiellen Punkte soll ein konservatives Kraftfeld mit einer potentiellen Energie $V : Q \rightarrow \mathbb{R}$ wirken. Wir nehmen dabei eine potentielle Energie $V(\mathbf{q})$ an, welche einen Gradienten $\nabla_{\mathbf{q}}V$ der Form

$$\nabla_{\mathbf{q}}V(\mathbf{q}) = \mathbb{Q}(\mathbf{q})\mathbf{q}, \quad (1)$$

hat. Die nichtlineare symmetrische Steifigkeitsmatrix $\mathbb{Q} \in \mathbb{R}^{n_{dof} \times n_{dof}}$ hängt dabei vom Koordinatenvektor

der Konfiguration ab und besitzt eine Blockstruktur:

$$\mathbb{Q}(\mathbf{q}) = \mathbf{Q}(\mathbf{q}) \otimes \mathbf{I}_{n_{dim}}, \quad \text{wobei} \quad \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} Q_{11} & \dots & Q_{1n_{poi}} \\ \vdots & & \vdots \\ Q_{n_{poi}1} & \dots & Q_{n_{poi}n_{poi}} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_{poi} \times n_{poi}} \quad (2)$$

Die Matrix $\mathbf{I}_{n_{dim}}$ bezeichnet die $n_{dim} \times n_{dim}$ Einheitsmatrix und das symbol \otimes kennzeichnet das direkte Matrizenprodukt.

Im folgenden soll ein aufgesetzter Punkt eine Differentiation bezüglich der Zeit bedeuten. Wir bezeichnen mit dem Vektor $\dot{\mathbf{q}}$ den Geschwindigkeitsvektor der Konfiguration. Die kinetische Energie T der Konfiguration ist dann gegeben durch eine quadratische Form in dem Geschwindigkeitsvektor:

$$T(\dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbb{M} \dot{\mathbf{q}}, \quad (3)$$

mit einer regulären symmetrischen Massenmatrix $\mathbb{M} \in \mathbb{R}^{n_{dof} \times n_{dof}}$, welche konstant ist und die folgende Blockstruktur hat:

$$\mathbb{M} = \mathbf{M} \otimes \mathbf{I}_{n_{dim}}, \quad \text{wobei} \quad \mathbf{M} = \begin{bmatrix} M_{11} & \dots & M_{1n_{poi}} \\ \vdots & & \vdots \\ M_{n_{poi}1} & \dots & M_{n_{poi}n_{poi}} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_{poi} \times n_{poi}} \quad (4)$$

Es sei erwähnt, dass eine diagonale Strukturmatrix \mathbf{M} eine Konzentration der Masse in den materiellen Punkten bedeutet.

Die Lagrange-Funktion $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$ des verallgemeinerten Problemes ist die Differenz zwischen der kinetischen Energie $T(\dot{\mathbf{q}})$ und der potentiellen Energie $V(\mathbf{q})$. Wir bezeichnen mit \mathbf{p}^A die Impulse der materiellen Punkte. Der entsprechende Impulsvektor $\mathbf{p} = (\mathbf{p}^1, \dots, \mathbf{p}^{n_{poi}}) \in \mathbb{R}^{n_{dof}}$ der Konfiguration ist dann definiert durch

$$\mathbf{p} = \nabla_{\dot{\mathbf{q}}} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = \mathbb{M} \dot{\mathbf{q}}. \quad (5)$$

Die Hamilton-Funktion H ergibt sich aus einer Legendre-Transformation der Lagrange-Funktion bezüglich des Geschwindigkeitsvektors zu $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{p}) - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{p}))$. Da der Impulsvektor eine invertierbare lineare Form im Geschwindigkeitsvektor ist, kann $\dot{\mathbf{q}}$ in der Hamilton-Funktion ersetzt werden. Letztendlich ist H identisch mit der Gesamtenergie der Konfiguration:

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = T^*(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}), \quad \text{wobei} \quad T^*(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \mathbf{p} \cdot \mathbb{M}^{-1} \mathbf{p} \quad (6)$$

die kinetische Energie der Konfiguration in Abhängigkeit des Impulsvektors darstellt. Die Matrix \mathbb{M}^{-1} ist die inverse Massenmatrix, die auch eine Blockstruktur besitzt:

$$\mathbb{M}^{-1} = \mathbf{M}^{-1} \otimes \mathbf{I}_{n_{dim}}, \quad \text{wobei} \quad \mathbf{M}^{-1} = \begin{bmatrix} M_{11}^{-1} & \dots & M_{1,n_{poi}}^{-1} \\ \vdots & & \vdots \\ M_{n_{poi},1}^{-1} & \dots & M_{n_{poi},n_{poi}}^{-1} \end{bmatrix} \quad (7)$$

Seien nun $\mathbf{z} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ Punkte im $2n_{dof}$ -dimensionalen Euklidischen Vektorraum. Die Hamiltonschen kanonischen Gleichungen sind die folgenden gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung:

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbb{J} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}), \quad \text{wobei} \quad \mathbb{J} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \mathbf{I}_{n_{dof}} \quad (8)$$

Die Matrix $\mathbf{I}_{n_{dof}}$ bezeichnet die $n_{dof} \times n_{dof}$ Einheitsmatrix. Einsetzen der Gleichungen (1) und (6) in die Hamiltonschen Gleichungen (8) führt auf die Bewegungsgleichungen

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \mathbb{M}^{-1} \mathbf{p}, \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\mathbb{Q}(\mathbf{q}) \mathbf{q}. \end{aligned}} \quad (9)$$

Dieses System von gewöhnlichen Differentialgleichungen hängt nicht explizit von der Zeit ab.

2.2 Energieerhaltung

Eine Hamilton-Funktion H , welche nicht explizit von der Zeit t abhängt, bleibt konstant während der Bewegung. Die Hamilton-Funktion $H(\mathbf{z}(t_a))$ zur Anfangszeit t_a eines beliebigen Zeitintervalls $I_t = [t_a, t_b]$ ist somit gleich der Hamilton-Funktion $H(\mathbf{z}(t_b))$ zur Endzeit t_b . Da die Gesamtenergie des verallgemeinerten Problems identisch mit der Hamiltonfunktion ist, so ist damit die Gesamtenergie eine Konstante der Bewegung, was leicht mit dem Hauptsatz der Integralrechnung gezeigt werden kann:

$$H(\mathbf{z}(t_b)) - H(\mathbf{z}(t_a)) = \int_{t_a}^{t_b} \dot{H}(\mathbf{z}(t)) dt. \quad (10)$$

Mit den Hamiltonschen Gleichungen (8) ergibt sich die Zeitableitung der Hamiltonfunktion $H(\mathbf{z})$ zu

$$\dot{H}(\mathbf{z}) = \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}) \cdot \dot{\mathbf{z}} = \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}) \cdot \mathbb{J} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}). \quad (11)$$

Die Zeitableitung \dot{H} verschwindet aufgrund der Schiefsymmetrie der Matrix \mathbb{J} und Gleichung (10) führt somit auf $H(\mathbf{z}(t_b)) = H(\mathbf{z}(t_a))$, was wiederum Gesamtenergieerhaltung bedeutet.

2.3 Impulserhaltung

Falls die potentielle Energie V des verallgemeinerten Problems unabhängig vom Ursprung des Koordinatensystems ist, dann ist die Hamiltonfunktion invariant bezüglich einer Translation der Konfiguration. Dies führt zu gleichen Gesamtimpulsen $\mathbf{P} = \sum_{A=1}^{n_{poi}} \mathbf{p}^A$ an den Grenzen des Zeitintervalls $I_t = [t_a, t_b]$, was wiederum mit einer Bedingung an die Steifigkeitsmatrix \mathbb{Q} verbunden ist. Dies kann mit Hilfe des Hauptsatzes der Integralrechnung gezeigt werden:

$$\mathbf{P}(t_b) - \mathbf{P}(t_a) = \int_{t_a}^{t_b} \dot{\mathbf{P}} dt. \quad (12)$$

Erhaltung des Gesamtimpulses ist somit eine Konsequenz der verschwundenen Zeitableitung $\dot{\mathbf{P}}$. Durch Differenzieren des Gesamtimpulses bezüglich der Zeit t und durch die Anwendung der Bewegungsgleichung (9) erhalten wir

$$\dot{\mathbf{P}} = \sum_{A=1}^{n_{poi}} \dot{\mathbf{p}}^A = \sum_{A,B=1}^{n_{poi}} Q_{AB}(\mathbf{q}) \mathbf{q}^B. \quad (13)$$

Folglich verschwindet die Zeitableitung des Gesamtimpulses des verallgemeinerten Problems falls alle internen Kräfte innerhalb der Konfiguration in der Summe verschwinden:

$$\boxed{\sum_{A,B=1}^{n_{poi}} Q_{AB}(\mathbf{q}) \mathbf{q}^B = \mathbf{0}} \quad (14)$$

2.4 Drehimpulserhaltung

Falls die potentielle Energie V des verallgemeinerten Problems unabhängig von der Orientierung des Koordinatensystems ist, dann ist die Hamilton-Funktion H invariant bezüglich einer Rotation der Konfiguration. Diese Symmetrie liefert an den Grenzen des Zeitintervalls $I_t = [t_a, t_b]$ einen konstanten Gesamtdrehimpuls $\mathbf{L} = \sum_{A=1}^{n_{poi}} \mathbf{q}^A \times \mathbf{p}^A$. Dies kann ebenfalls mit dem Hauptsatz der Integralrechnung verifiziert werden:

$$\mathbf{L}(t_b) - \mathbf{L}(t_a) = \int_{t_a}^{t_b} \dot{\mathbf{L}} dt. \quad (15)$$

Die Ableitung des Gesamtdrehimpulses nach der Zeit t und das Einsetzen der Bewegungsgleichung (9) führt auf die folgende Zeitableitung des Gesamtdrehimpulses:

$$\dot{\mathbf{L}} = \sum_{A=1}^{n_{poi}} [\dot{\mathbf{q}}^A \times \mathbf{p}^A + \mathbf{q}^A \times \dot{\mathbf{p}}^A] = \sum_{A,B=1}^{n_{poi}} [M_{AB}^{-1} \mathbf{p}^B \times \mathbf{p}^A + Q_{AB}(\mathbf{q}) \mathbf{q}^A \times \mathbf{q}^B]. \quad (16)$$

Aufgrund der Symmetrie der Massen- und der Steifigkeitsmatrix in Verbindung mit der Schiefsymmetrie des Kreuzproduktes heben sich alle Terme der gleichen Matrix gegenseitig auf und führen zu einer verschwindenden Zeitableitung $\dot{\mathbf{L}}$. Infolgedessen wird der Gesamtdrehimpuls erhalten im Sinne der Gleichung $\mathbf{L}(t_b) = \mathbf{L}(t_a)$ aufgrund der Definition der Massen- und der Steifigkeitsmatrix.

3 Die zeitliche Finite-Elemente-Methode

In diesem Abschnitt nehmen wir eine Galerkin-basierte Zeitdiskretisierung der Hamiltonschen kanonischen Gleichungen vor. Zu diesem Zweck geben wir eine kurze Zusammenfassung der kontinuierlichen Galerkin (cG) Finite-Elemente-Methode aus den Vorarbeiten [2, 3]. Danach zeigen wir einige Eigenschaften des resultierenden Zeitschrittverfahrens. Die erste Eigenschaft ist die Kollokationseigenschaft, welche sich als sehr wichtig bei der Erhaltung von Invarianten erweist. Danach wird die Erhaltung der Invarianten des verallgemeinerten Problems untersucht. Zum Schluss folgt die Implementierung dieser Familie von Zeitschrittverfahren.

3.1 Finite-Elemente-Diskretisierung in der Zeit

Wir teilen das zu interessierende Zeitintervall $\mathcal{T} = [t_0, T]$ in $N_\tau - 1$ nicht-überlappende Teilintervalle \mathcal{T}_n der Länge h_n , $n = 1, \dots, N_\tau - 1$, so dass

$$\mathcal{T} = \bigcup_{n=1}^{N_\tau-1} \mathcal{T}_n. \quad (17)$$

Diese Unterteilung oder Triangulation des Intervalls \mathcal{T} ist verbunden mit einem Netz von Zeitpunkten $t_0 < t_1 < \dots < t_{N_\tau} = T$. Wir transformieren anschliessend jedes Teilintervall $\mathcal{T}_n = [t_{n-1}, t_n]$ auf ein Referenzelement $\mathcal{I}_\alpha = [0, 1]$ bezüglich der normalisierten Koordinate α definiert durch

$$\alpha = \frac{t - t_{n-1}}{h_n}, \quad (18)$$

wobei $h_n = t_n - t_{n-1}$ die Länge von \mathcal{T}_n bezeichnet. Demgemäß ist die Bewegung in jedem Teilintervall \mathcal{T}_n bestimmt durch das folgende Anfangswertproblem bezüglich dem Referenzelement: Gegeben sei der Anfangswert $\mathbf{z}_0 = \mathbf{z}(t_{n-1})$, finde die Bewegung $\zeta_0 : \mathcal{I}_\alpha \times \mathbb{R}^{2n_{\text{dof}}} \ni (\alpha, \mathbf{z}_0) \mapsto \mathbf{z}(\alpha) \in \mathbb{R}^{2n_{\text{dof}}}$, die bestimmt ist durch die Differentialgleichung

$$\boxed{\frac{d\mathbf{z}(\alpha)}{d\alpha} = h_n \mathbb{J} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}(\alpha))} \quad (19)$$

3.2 Galerkin-basierte Zeitintegration

Die Galerkin-Methode bestimmt die Knotenwerte der Lösungsfunktion so, dass das approximierte Residuum der betrachteten Differentialgleichung orthogonal zu allen Funktionen im Testraum ist. Das Residuum der Differentialgleichung (19) hat die folgende Gestalt:

$$\mathbf{R}(\mathbf{z}) = \frac{d\mathbf{z}}{d\alpha} - h_n \mathbb{J} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}). \quad (20)$$

Die cG-Methode basiert auf speziellen Polynomen vom Grade k beziehungsweise $k - 1$ für die Lösungsbeziehungsweise Testfunktionen. Und zwar haben die Testfunktionen die Form $\delta\mathbf{z}(\alpha) = \sum_{I=1}^k \tilde{M}_I(\alpha) \delta\mathbf{z}_I$ mit den Knotenwerten $\delta\mathbf{z}_I = \delta\mathbf{z}((I - 1)/(k - 1))$, $I = 1, \dots, k$, und die Lösungsfunktionen sind definiert durch $\mathbf{z}(\alpha) = \sum_{J=1}^{k+1} M_J(\alpha) \mathbf{z}_J$, wobei $\mathbf{z}_J = \mathbf{z}((J - 1)/k)$, $J = 1, \dots, k + 1$ die Knotenwerte an äquidistanten Zeitknoten bezeichnet. Die Kontinuitätsbedingung $\mathbf{z}_1 = \mathbf{z}_0$ für die Lösungsfunktionen liefert eine kontinuierliche Lösung. Die Funktionen \tilde{M}_I und M_J benennen die Lagrange-Polynome vom Grad $k - 1$ beziehungsweise k bezüglich der entsprechenden äquidistanten Knoten des Referenzelementes.

Die Galerkin-Orthogonalitätsbedingung für das Residuum $\mathbf{R}(\mathbf{z})$ auf dem Referenzelement \mathcal{I}_α ist die schwache Form

$$\int_0^1 \mathbb{J} \delta\mathbf{z}(\alpha) \cdot \mathbf{R}(\mathbf{z}(\alpha)) \, d\alpha = 0. \quad (21)$$

Zieht man den Hauptsatz der Variationsrechnung in Betracht, so erhält man k Vektorgleichungen für k Unbekannte Knotenwerte \mathbf{z}_J , $J = 2, \dots, k + 1$. Diese Vektorgleichungen sind gegliedert in zwei Integralterme. Der erste Term beinhaltet ein Integral über ein Polynom vom Grad $2(k - 1)$. Dieses Integral kann exakt berechnet werden. Jedoch das zweite Integral muss im allgemeinen durch numerische Integration bestimmt werden, weil es die Jacobi-Matrix der beliebigen Hamilton-Funktion H enthält. Wir

beschränken uns auf die Betrachtung der N_q^α -punkt Gaußschen Quadraturregeln, welche ein Polynom vom Grad $2N_q^\alpha - 1$ exakt integrieren.

Seien ξ_l und w_l , $l = 1, \dots, N_q^\alpha$, die Quadraturpunkte bezüglich \mathcal{I}_α und die assoziierten Gewichte, so bekommen wir letztendlich das folgende algebraische Gleichungssystem für die unbekanntenen Knotenwerte:

$$\boxed{\sum_{J=1}^k \int_0^1 \tilde{M}_I M'_J d\alpha \mathbf{z}_J - h_n \sum_{l=1}^{N_q^\alpha} \tilde{M}_I(\xi_l) \mathbb{J} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}(\xi_l)) w_l = \mathbf{0}} \quad I = 1, \dots, k. \quad (22)$$

Die Gleichungen (22) repräsentieren eine Familie von Zeitschrittverfahren höherer Genauigkeitsordnung, welche die Knotenwerte \mathbf{z}_I , $I = 1, \dots, k + 1$, auf den Anfangswert \mathbf{z}_0 beziehen (vergleiche die Vorarbeiten der Antragsteller).

3.3 Kollokationseigenschaft

In diesem Abschnitt zeigen wir die Kollokationseigenschaft der Zeitschrittverfahren (22), welche sich für die Erhaltung von Invarianten als bedeutend erweist. Zu diesem Zweck betrachten wir die Gleichungen (22), lösen jedoch das Integral im ersten Term ebenfalls mit einer N_q^α -Punkt Gaußregel. Dennoch soll dieses Integral exakt integriert werden. Da der entsprechende Integrand ein Polynom vom Grade $2(k - 1)$ ist, wird das Integral mit $N_q^\alpha \geq k - 1$ Gaußpunkten exakt bestimmt. Folglich fordern wir zumindest $k - 1$ Gaußpunkte in den Gleichungen (22). Mittels der Gleichungen (20) erhalten wir die Gleichungen (22) in Form des folgenden homogenen linearen Gleichungssystems:

$$\left[\tilde{\mathbf{W}}(\xi_1, \dots, \xi_{N_q^\alpha}) \otimes \mathbf{I}_{2n_{\text{dof}}} \right] \begin{bmatrix} \mathbf{R}(\mathbf{z}(\xi_1)) w_1 \\ \vdots \\ \mathbf{R}(\mathbf{z}(\xi_{N_q^\alpha})) w_{N_q^\alpha} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (23)$$

mit der Strukturmatrix $\tilde{\mathbf{W}}$, welche wie folgt definiert ist:

$$\tilde{\mathbf{W}}(\xi_1, \dots, \xi_{N_q^\alpha}) = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{w}}(\xi_1) & \dots & \tilde{\mathbf{w}}(\xi_{N_q^\alpha}) \end{bmatrix}, \quad \text{wobei} \quad \tilde{\mathbf{w}}(\alpha) = \begin{bmatrix} \tilde{M}_1(\alpha) \\ \vdots \\ \tilde{M}_k(\alpha) \end{bmatrix} \quad (24)$$

Die Lösung des Gleichungssystems (23) ist eindeutig falls $N_q^\alpha = k$ ist. In diesem Fall erhält man die triviale Lösung falls die Koeffizientenmatrix zusätzlich invertierbar ist. Es sei erwähnt, dass die Inverse eines direkten Matrizenproduktes gegeben ist durch das direkte Matrizenprodukt der inversen Matrizen. Da die Inverse der $2n_{\text{dof}} \times 2n_{\text{dof}}$ Einheitsmatrix $\mathbf{I}_{2n_{\text{dof}}}$ existiert, muss nur noch gezeigt werden, dass $\tilde{\mathbf{W}}(\xi_1, \dots, \xi_k)$ regulär ist. Demzufolge muss die Lagrange-Polynombasis des Testraumes die Haar-Bedingung erfüllen.

Eine Familie von Lagrange-Polynomen erfüllt im allgemeinen die Haar-Bedingung falls sie eine Polynombasis darstellt. Dies kann man leicht nachprüfen indem man diese Familie von Lagrange-Polynomen mit der Monombasis in Verbindung bringt. Die Haar-Matrix $\tilde{\mathbf{W}}$ einer Monombasis die bekannte Vandermondesche Matrix. Aus diesem Grund drücken wir die Monome α^j , $j = 0, \dots, k - 1$, durch die Lagrange-Polynome \tilde{M}_I , $I = 1, \dots, k$ aus. Dies führt auf die Gleichungen $\alpha^j = \sum_{I=1}^k \tilde{M}_I(\alpha) (\alpha_I)^j$. In Matrixschreibweise erhalten wir ein lineares Gleichungssystem der Form $\tilde{\mathbf{v}}(\alpha) = \tilde{\mathbf{V}}(\alpha_1, \dots, \alpha_k) \tilde{\mathbf{w}}(\alpha)$ mit der Vandermondeschen Matrix

$$\tilde{\mathbf{V}}(\alpha_1, \dots, \alpha_k) = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{v}}(\alpha_1) & \dots & \tilde{\mathbf{v}}(\alpha_k) \end{bmatrix}, \quad \text{wobei} \quad \tilde{\mathbf{v}}(\alpha) = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ \alpha^{k-1} \end{bmatrix} \quad (25)$$

Die Strukturmatrix $\tilde{\mathbf{W}}(\xi_1, \dots, \xi_k)$ kann deshalb als Produkt einer inversen Vandermondeschen Matrix mit einer Vandermondeschen Matrix geschrieben werden: $\tilde{\mathbf{W}}(\xi_1, \dots, \xi_k) = \tilde{\mathbf{V}}^{-1}(\alpha_1, \dots, \alpha_k) \tilde{\mathbf{V}}(\xi_1, \dots, \xi_k)$ Folglich ist die Strukturmatrix regulär für paarweise verschiedene Zeitknoten und Gaußpunkte.

Da die Haar-Bedingung für den Testraum mit k Gaußpunkten erfüllt ist, so hat das Gleichungssystem (23) ausschliesslich die triviale Lösung, welche wie folgt geschrieben werden kann:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{d\mathbf{q}(\xi_l)}{d\alpha} &= h_n \mathbb{M}^{-1} \mathbf{p}(\xi_l) \\ \frac{d\mathbf{p}(\xi_l)}{d\alpha} &= -h_n \nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}(\xi_l)) \end{aligned}} \quad l = 1, \dots, k. \quad (26)$$

Die Zeitschrittverfahren (22) in Verbindung mit einer k -Punkt Gaußquadratur erfüllen somit die Hamiltonschen kanonischen Gleichungen exakt an den Gaußpunkten ξ_l . Wir nennen diese Kombination die *cG(k)-Methode*.

3.4 Gesamtenergieerhaltung

Dieser Abschnitt untersucht die Gesamtenergieerhaltung der cG(k)-Methode. Zu diesem Zweck bestimmen wir die Gesamtenergie am Endpunkt des Intervalls \mathcal{I}_α in Abhängigkeit der Gesamtenergie am Anfangspunkt. Da die Approximation der Gesamtenergie kontinuierlich ist, benutzen wir dazu den Hauptsatz der Integralrechnung:

$$H(\mathbf{z}(1)) - H(\mathbf{z}(0)) = \int_0^1 \frac{dT^*(\mathbf{p}(\alpha))}{d\alpha} d\alpha + \int_0^1 \frac{dV(\mathbf{q}(\alpha))}{d\alpha} d\alpha. \quad (27)$$

Nach dem Einsetzen der kinetischen Energie T^* des verallgemeinerten Problem es besteht der erste Integrand aus einem Polynom vom Grade $2k - 1$. Das entsprechende Integral kann somit mit einer k -Punkt Gaußregel exakt integriert werden. Somit lässt sich der Hauptsatz der Integralrechnung bezüglich der kinetischen Energie schreiben als

$$T^*(\mathbf{p}(1)) - T^*(\mathbf{p}(0)) = \sum_{l=1}^k \frac{d\mathbf{p}(\xi_l)}{d\alpha} \cdot \mathbb{M}^{-1} \mathbf{p}(\xi_l) w_l. \quad (28)$$

Die potentielle Energie V wird als beliebige nichtlineare Funktion angenommen. Der entsprechende Hauptsatz der Integralrechnung ist für eine Quadraturregel erfüllt, die der folgenden Gleichung genügt:

$$\boxed{V(\mathbf{q}(1)) - V(\mathbf{q}(0)) = \sum_{l=1}^k \nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}(\xi_l)) \cdot \frac{d\mathbf{q}(\xi_l)}{d\alpha} w_l} \quad (29)$$

Nun ziehen wir die Kollokationseigenschaft der cG(k)-Methode in Betracht und nehmen zusätzlich an, dass die Gleichung (29) erfüllt ist. Einsetzen der Gleichungen (26.1) beziehungsweise (26.2) in die Gleichungen (29) beziehungsweise (28) und anschließende Summation der resultierenden Gleichungen führt auf $H(\mathbf{z}(1)) = H(\mathbf{z}(0))$ unabhängig von der Zeitschrittweite h_n . Demzufolge ist die cG(k)-Methode ein energieerhaltendes Zeitschrittverfahren falls die Bedingung (29) erfüllt ist. Wir verweisen auf diese Gleichung als *Energieerhaltungsbedingung der cG(k)-Methode*.

3.5 Gesamtimpulserhaltung

Dieser Abschnitt überprüft die Gesamtimpulserhaltung der cG(k)-Methode im Rahmen des verallgemeinerten Problem es. Da die Bewegung durch die cG(k)-Methode kontinuierlich approximiert ist, wenden wir ebenfalls den Hauptsatz der Integralrechnung an um die Gesamtimpulse benachbarter Punkte zu bestimmen. Der Hauptsatz der Integralrechnung bezüglich des Gesamtimpulses ist wie folgt:

$$\mathbf{P}(\mathbf{z}(1)) - \mathbf{P}(\mathbf{z}(0)) = \int_0^1 \frac{d\mathbf{P}(\mathbf{z}(\alpha))}{d\alpha} d\alpha = \int_0^1 \sum_{A=1}^{n_{poi}} \frac{d\mathbf{p}^A(\alpha)}{d\alpha} d\alpha. \quad (30)$$

Der Integrand in Gleichung (30) ist eine Summe von Polynomen vom Grade $k - 1$. Das entsprechende Integral wird exakt bestimmt durch eine Gaußquadratur mit k Gaußpunkten. Weiterhin sorgt die Kollokationseigenschaft für eine Erfüllung der Bewegungsgleichungen (9) an k Gaußpunkten. Somit erhält

man

$$\mathbf{P}(\mathbf{z}(1)) - \mathbf{P}(\mathbf{z}(0)) = -h_n \sum_{l=1}^k \sum_{A,B=1}^{n_{poi}} Q_{AB}(\mathbf{q}(\xi_l)) \mathbf{q}^B(\xi_l) w_l. \quad (31)$$

Zieht man Gleichung (14) in Betracht, so führt die cG(k)-Methode zu einer Gesamtimpulserhaltung $\mathbf{P}(\mathbf{z}(1)) = \mathbf{P}(\mathbf{z}(0))$ unabhängig von der Zeitschrittweite.

3.6 Gesamtdrehimpulserhaltung

Eine weitere Invariante des verallgemeinerten Problems ist der Gesamtdrehimpuls, dessen Erhaltung in diesem Abschnitt untersucht wird. Wir wenden den Hauptsatz der Integralrechnung an, um den Drehimpuls am Endpunkt des Referenzelementes zu bestimmen:

$$\mathbf{L}(\mathbf{z}(1)) - \mathbf{L}(\mathbf{z}(0)) = \int_0^1 \frac{d\mathbf{L}(\mathbf{z}(\alpha))}{d\alpha} d\alpha = \int_0^1 \sum_{A=1}^{n_{poi}} \frac{d}{d\alpha} [\mathbf{q}^A(\alpha) \times \mathbf{p}^A(\alpha)] d\alpha. \quad (32)$$

In Übereinstimmung mit der kinetischen Energie T^* wird das Integral im Hauptsatz der Integralrechnung mittels k Gaußpunkten exakt bestimmt:

$$\mathbf{L}(\mathbf{z}(1)) - \mathbf{L}(\mathbf{z}(0)) = \sum_{l=1}^k \sum_{A=1}^{n_{poi}} \left[\frac{d\mathbf{q}^A(\xi_l)}{d\alpha} \times \mathbf{p}^A(\xi_l) + \mathbf{q}^A(\xi_l) \times \frac{d\mathbf{p}^A(\xi_l)}{d\alpha} \right] w_l. \quad (33)$$

Infolge der Anwendung der Gleichungen (26) in Verbindung mit Gleichung (1) und der Argumentation aus Abschnitt 2.4 wird der Gesamtdrehimpuls im Sinne $\mathbf{L}(\mathbf{z}(1)) = \mathbf{L}(\mathbf{z}(0))$ unabhängig von der Zeitschrittweite erhalten.

3.7 Implementierung

Dieser Abschnitt beschreibt die Implementierung der cG(k)-Methode. In Anbetracht der Definition $\mathbf{z} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ kann die cG(k)-Methode des verallgemeinerten Problems wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \sum_{J=1}^k \int_0^1 \tilde{M}_I M'_J d\alpha \mathbf{q}_J - h_n \int_0^1 \tilde{M}_I \mathbb{M}^{-1} \mathbf{p} d\alpha &= \mathbf{0}, \\ \sum_{J=1}^k \int_0^1 \tilde{M}_I M'_J d\alpha \mathbf{p}_J + h_n \sum_{l=1}^k \tilde{M}_I(\xi_l) \mathbb{Q}(\mathbf{q}(\xi_l)) \mathbf{q}(\xi_l) w_l &= \mathbf{0}, \end{aligned} \quad I = 1, \dots, k. \quad (34)$$

Wir ordnen die unbekanntenen Koordinaten und Impulse in den Vektoren $\mathbf{x}_q = (\mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_{k+1})$ beziehungsweise $\mathbf{x}_p = (\mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_{k+1})$ an. Die $2k$ vektoriellen Gleichungen der cG(k)-Methode besitzen in Matrixschreibweise die Form

$$\mathbf{b}' \otimes \mathbf{q}_1 + [\mathbf{A}' \otimes \mathbf{I}_{n_{dof}}] \mathbf{x}_q - h_n \mathbf{b} \otimes [\mathbb{M}^{-1} \mathbf{p}_1] - h_n [\mathbf{A} \otimes \mathbb{M}^{-1}] \mathbf{x}_p = \mathbf{0}, \quad (35)$$

$$\mathbf{b}' \otimes \mathbf{p}_1 + [\mathbf{A}' \otimes \mathbf{I}_{n_{dof}}] \mathbf{x}_p + h_n [\tilde{\mathbf{W}}(\xi_1, \dots, \xi_k) \otimes \mathbf{I}_{n_{dof}}] \mathbf{f}(\mathbf{x}_q) = \mathbf{0}, \quad (36)$$

wobei die folgenden Matrizen der Übersichtlichkeit wegen eingeführt wurden:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{k1} & \dots & A_{kk} \end{bmatrix} \quad \mathbf{A}' = \begin{bmatrix} A'_{11} & \dots & A'_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ A'_{k1} & \dots & A'_{kk} \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix} \quad \mathbf{b}' = \begin{bmatrix} b'_1 \\ \vdots \\ b'_k \end{bmatrix} \quad (37)$$

Die Koeffizienten dieser Matrizen beziehungsweise der Kraftvektor \mathbf{f} sind wie folgt gegeben:

$$\begin{aligned} A_{IJ} &= \int_0^1 \tilde{M}_I M_{J+1} d\alpha, & b_I &= \int_0^1 \tilde{M}_I M_1 d\alpha, \\ A'_{IJ} &= \int_0^1 \tilde{M}_I M'_{J+1} d\alpha, & b'_I &= \int_0^1 \tilde{M}_I M'_1 d\alpha. \end{aligned} \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}_q) = \begin{bmatrix} \mathbb{Q}(\mathbf{q}(\xi_1)) \mathbf{q}(\xi_1) w_1 \\ \vdots \\ \mathbb{Q}(\mathbf{q}(\xi_k)) \mathbf{q}(\xi_k) w_k \end{bmatrix} \quad (38)$$

Da die unbekannten Impulse lineare Kombinationen der unbekannten Koordinaten sind, eliminieren wir den Vektor \mathbf{x}_p und erhalten das folgende Residuum:

$$\mathbf{R}(\mathbf{x}_q) = \frac{1}{h_n} \left[\mathbf{A}_m^R \otimes \mathbb{M} \right] \mathbf{x}_q + \frac{1}{h_n} \mathbf{A}_q^R \otimes [\mathbb{M} \mathbf{q}_1] + \mathbf{A}_p^R \otimes \mathbf{p}_1 + h_n \left[\tilde{\mathbf{W}}(\boldsymbol{\xi}) \otimes \mathbf{I}_{n_{dof}} \right] \mathbf{f}(\mathbf{x}_q) \quad (39)$$

mit den Gausspunkten $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_k)$ und den Matrizen

$$\mathbf{A}_m^R = \mathbf{A}' \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}', \quad \mathbf{A}_q^R = \mathbf{A}' \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}', \quad \mathbf{A}_p^R = \mathbf{b}' - \mathbf{A}' \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}. \quad (40)$$

Somit erhalten wir die unbekanntes Koordinaten durch die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems $\mathbf{R}(\mathbf{x}_q) = \mathbf{0}$. Da wir diese Gleichungen iterativ mittels des allgemeinen Newton-Verfahrens lösen, müssen wir sie linearisieren. Unter Verwendung von i als Iterationsindex erhalten wir die Iterationsformel

$$\mathbf{x}_q^{(i+1)} = \mathbf{x}_q^{(i)} - \mathbf{K}_T^{-1}(\mathbf{x}_q^{(i)}) \mathbf{R}(\mathbf{x}_q^{(i)}), \quad (41)$$

wobei $\mathbf{K}_T(\mathbf{x}_q) = \nabla_{\mathbf{x}_q} \mathbf{R}(\mathbf{x}_q)$ der folgende Tangentenoperator des Residuums (39) bezeichnet:

$$\mathbf{K}_T(\mathbf{x}_q) = \frac{1}{h_n} \left[\mathbf{A}_m^R \otimes \mathbb{M} \right] + h_n \left[\tilde{\mathbf{W}}(\boldsymbol{\xi}) \otimes \mathbf{I}_{n_{dof}} \right] \mathbf{K}(\mathbf{x}_q) \quad (42)$$

mit

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}_q) = \nabla_{\mathbf{x}_q} \mathbf{f}(\mathbf{x}_q) = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_2(\xi_1) w_1 & \dots & \mathbf{K}_{k+1}(\xi_1) w_1 \\ \vdots & & \vdots \\ \mathbf{K}_2(\xi_k) w_k & \dots & \mathbf{K}_{k+1}(\xi_k) w_k \end{bmatrix} \quad (43)$$

Wir initialisieren die unbekanntes Koordinaten für die erste Iteration mit der folgenden Gleichung:

$$\mathbf{x}_q = -\mathbf{A}_q^g \otimes \mathbf{q}_1 - h_n \mathbf{A}_p^g \otimes [\mathbb{M}^{-1} \mathbf{p}_1] \quad (44)$$

mit den Matrizen

$$\mathbf{A}_q^g = [\mathbf{A}']^{-1} \mathbf{b}' = -\mathbf{e}_k, \quad \mathbf{A}_p^g = [\mathbf{A}']^{-1} \mathbf{A} [\mathbf{A}']^{-1} \mathbf{b}' - [\mathbf{A}']^{-1} \mathbf{b}, \quad (45)$$

und dem Vektor $\mathbf{e}_k = (1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^k$. Letztendlich werden die Impulse \mathbf{x}_p aus den nun bekannten Koordinaten \mathbf{q}_A , $A = 1, \dots, k+1$ wie folgt bestimmt:

$$\mathbf{x}_p = \frac{1}{h_n} \left[\mathbf{A}_m^p \otimes \mathbb{M} \right] \mathbf{x}_q + \frac{1}{h_n} \mathbf{A}_q^p \otimes [\mathbb{M} \mathbf{q}_1] - \mathbf{A}_p^p \otimes \mathbf{p}_1 \quad (46)$$

mit den Matrizen

$$\mathbf{A}_m^p = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}', \quad \mathbf{A}_q^p = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}', \quad \mathbf{A}_p^p = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}. \quad (47)$$

Das Abbruchkriterium besteht aus einer Überprüfung der Euklidischen Norm des Residuums auf eine Unterschreitung einer vorgegebenen Toleranzgrenze ϵ .

4 Semi-diskrete nichtlineare Elastodynamik

Wir beschäftigen uns mit einem hyperelastischen festen kontinuierlichen Körper, plziert in einem n_{dim} -dimensionalen Euklidischen Raum. Eine räumliche Finite-Elemente-Diskretisierung, verbunden mit räumlichen Elementknoten, führt auf die sogenannten semi-diskreten Bewegungsgleichungen, ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen in der Zeit t . Da wir an Trajektorien materieller Punkte des festen kontinuierlichen Körpers interessiert sind, wenden wir die Lagrangesche Beschreibung der Bewegung an. Alle räumlichen Knoten zusammen können dann als Konfiguration materieller Punkte des verallgemeinerten Problems in Abschnitt 2 gesehen werden.

4.1 Finite-Elemente-Diskretisierung im Raum

Wir betrachten eine Aufteilung eines festen kontinuierlichen Körpers $\mathcal{B} \subset \mathbb{R}^{n_{dim}}$ in nicht-überlappende Teilbereiche \mathcal{B}^e , $e = 1, \dots, n_{el}$, das heisst

$$\mathcal{B} = \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \mathcal{B}^e \quad (48)$$

Der Teilbereich $\mathcal{B}^e \subset \mathcal{B}$ wird das *e-te Element* genannt, definiert durch eine Menge von materiellen Punkten, den sogenannten Elementknoten. Die Positionen der Elementknoten in der Anfangskonfiguration \mathcal{B}_0^e zur Zeit $t = 0$ werden bezeichnet mit $\mathbf{X}_e^a \in \overline{\mathcal{B}}_0^e$, $a = 1, \dots, n_{en}$, und ihre Positionen in der aktuellen Konfiguration \mathcal{B}_t^e zur Zeit $t \in \mathbb{I} =]0, T]$ werden bezeichnet mit $\mathbf{x}_e^a \in \overline{\mathcal{B}}_t^e$. Die Positionen \mathbf{x}_e^a sind gegeben durch die Abbildungen $\mathbf{q}_e^a : \mathbb{I} \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}}$, so dass $\mathbf{x}_e^a = \mathbf{q}_e^a(t)$ gilt. Wir verweisen auf den Vektor \mathbf{q}_e^a als den *Positionsvektor* des Knoten a im Element \mathcal{B}^e .

Diese Diskretisierung von \mathcal{B} liefert eine Konfiguration $\overline{\mathcal{B}}$ von n_{np} materiellen Punkten, welche wir hier als die räumlichen Knoten bezeichnen. Die Positionen dieser Knoten in der Anfangskonfiguration \mathcal{B}_0 zur Zeit $t = 0$ werden gekennzeichnet durch $\mathbf{X}^A \in \overline{\mathcal{B}}_0$, $A = 1, \dots, n_{np}$ und ihre Positionen in der aktuellen Konfiguration \mathcal{B}_t zur Zeit $t \in \mathbb{I}$ werden gekennzeichnet durch $\mathbf{x}^A \in \overline{\mathcal{B}}_t$. Die Positionen \mathbf{x}^A sind gegeben durch die Abbildungen $\mathbf{q}^A : \mathbb{I} \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim}}$, so dass $\mathbf{x}^A = \mathbf{q}^A(t)$. Wir verweisen auf den Vektor \mathbf{q}^A als den Positionvektor des Knotens A in der Konfiguration $\overline{\mathcal{B}}_t$.

In der semi-diskreten Elastodynamik ist der Euklidische Raum zwischen den räumlichen Knoten kontinuierlich approximiert. Die Position \mathbf{X}_e eines Kontinuumpunktes in der Anfangskonfiguration \mathcal{B}_0^e ist parametrisiert durch die Abbildung $\Psi_e : \square \rightarrow \mathcal{B}_0^e$, und seine Position \mathbf{x}_e in der aktuellen Konfiguration \mathcal{B}_t^e ist parametrisiert durch die Abbildung $\psi_e : \square \times \mathbb{I} \rightarrow \mathcal{B}_t^e$. Gemäß einer standardisierten isoparametrischen Diskretisierung sind diese Abbildungen gegeben durch

$$\mathbf{X}_e = \Psi_e(\boldsymbol{\eta}_e) = \sum_{a=1}^{n_{en}} N_a(\boldsymbol{\eta}_e) \mathbf{X}_e^a, \quad \mathbf{x}_e = \psi_e(\boldsymbol{\eta}_e, t) = \sum_{a=1}^{n_{en}} N_a(\boldsymbol{\eta}_e) \mathbf{q}_e^a(t). \quad (49)$$

Die Menge $\square \subset \mathbb{R}^{n_{dim}}$ ist ein n_{dim} -Hyperwürfel, genannt der Referenzbereich, und $N_a : \square \rightarrow \mathbb{R}$ bezeichnen Lagrangesche Formfunktionen, welche die Bedingung $N_a(\boldsymbol{\eta}_e^b) = \delta_a^b$ erfüllen, wobei $\boldsymbol{\eta}_e^b \in \square$, $b = 1, \dots, n_{en}$ die Elementknoten des e -ten Elementes im Referenzbereich sind.

Die physikalischen Felder werden im isoparametrischen Konzept analog zur Geometrie approximiert. Die Bewegung eines Kontinuumpunktes von der Anfangsposition $\mathbf{X}_e \in \mathcal{B}_0^e$ zu seiner aktuellen Position $\mathbf{x}_e \in \mathcal{B}_t^e$ wird approximiert durch das Feld $\varphi_e : \mathcal{B}^e \times \mathbb{I} \rightarrow \mathcal{B}_t^e$, definiert durch

$$\mathbf{x}_e = \varphi_e(\mathbf{X}_e, t) = \psi_e \circ (\Psi_e)^{-1}(\mathbf{X}_e)(t) = \sum_{a=1}^{n_{en}} N_a(\boldsymbol{\eta}_e(\mathbf{X}_e)) \mathbf{q}_e^a(t). \quad (50)$$

Die Lagrangesche Geschwindigkeit eines Kontinuumpunktes in dem Element \mathcal{B}^e ist gegeben durch die partielle Zeitableitung $\mathbf{v}_e(\mathbf{X}_e, t) = \partial \varphi_e(\mathbf{X}_e, t) / \partial t$. Die lineare Tangentenabbildung des Feldes φ_e ist gegeben durch den Deformationsgradienten

$$\mathbf{F}_e = \nabla_{\mathbf{X}_e} \varphi_e = \sum_{a=1}^{n_{en}} \mathbf{q}_e^a \otimes \mathbf{J}_e^{-T} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\eta}} N_a, \quad \text{wobei } \mathbf{J}_e = \nabla_{\boldsymbol{\eta}} \mathbf{X}_e. \quad (51)$$

Wir betrachten isotropes hyperelastisches Material, für welches der zweite Piola-Kirchhoff Spannungstensor entsprechend dem Element \mathcal{B}^e definiert ist als der Gradient $\mathbf{S}_e = 2 \nabla_{\mathbf{C}_e} W_e$ der skalarwertigen isotropen Spannungsenergiegedichtefunktion $W_e = W_e(\mathbf{C}_e)$ mit dem rechten Cauchy-Green Verzerrungstensor $\mathbf{C}_e = \mathbf{F}_e^T \mathbf{F}_e$ als Argument. Bezugnehmend auf die obige Diskretisierung lautet der rechte Cauchy-Green Tensor

$$\mathbf{C}_e = \sum_{a,b=1}^{n_{en}} [\mathbf{q}_e^a \cdot \mathbf{q}_e^b] \mathbf{N}_{ab}^e, \quad \text{wobei } \mathbf{N}_{ab}^e = \mathbf{J}_e^{-T} \cdot [\nabla_{\boldsymbol{\eta}} N_a \otimes \nabla_{\boldsymbol{\eta}} N_b] \cdot \mathbf{J}_e^{-1}. \quad (52)$$

4.2 Hamiltonsche Formulierung

Die potentielle Energie V der Konfiguration $\bar{\mathcal{B}}$ ist identisch mit der Verzerrungsenergie des Körpers \mathcal{B} . Die Verzerrungsenergie resultiert aus einer Summation über die Verzerrungsenergien $V_e = \int_{\mathcal{B}_0^e} W_e(\mathbf{C}_e) dV$ der Elemente. Der Gradient $\nabla \mathbf{q} V$ der Verzerrungsenergie hat die Form der Gleichung (1). Die entsprechende globale Steifigkeitsmatrix \mathbb{Q} folgt aus einem Zusammenbau der Elementsteifigkeitsmatrizen $\hat{\mathbb{Q}}_e(\mathbf{C}_e)$, das heisst

$$\mathbb{Q} = \mathbf{A} \hat{\mathbb{Q}}_e(\mathbf{C}_e). \quad (53)$$

Die Elementsteifigkeitsmatrizen haben eine Blockstruktur der Form $\hat{\mathbb{Q}}_e = \hat{\mathbb{Q}}_e(\mathbf{C}_e) \otimes \mathbf{I}_{n_{dim}}$ basierend auf der Strukturmatrix

$$\hat{\mathbb{Q}}_e = \begin{bmatrix} \hat{Q}_{11}^e & \cdots & \hat{Q}_{1n_{en}}^e \\ \vdots & & \vdots \\ \hat{Q}_{n_{en}1}^e & \cdots & \hat{Q}_{n_{en}n_{en}}^e \end{bmatrix} \quad (54)$$

mit den Koeffizienten

$$\hat{Q}_{ab}^e(\mathbf{C}_e) = \int_{\mathcal{B}_0^e} \mathbf{S}_e(\mathbf{C}_e) : \mathbf{N}_{ab}^e dV. \quad (55)$$

Die kinetische Energie T der Konfiguration $\bar{\mathcal{B}}$ ist die Vereinigung aller kinetischen Energien T_e der Elemente, definiert als das Volumenintegral über das quadrierte zugehörige Geschwindigkeitsfeld. In Verbindung mit der approximierten Deformation hat die kinetische Energie T_e die Form

$$T_e = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{B}_0^e} \rho_0 \mathbf{v}_e \cdot \mathbf{v}_e dV = \frac{1}{2} \sum_{a,b=1}^{n_{en}} M_{ab}^e \dot{\mathbf{q}}_e^a \cdot \dot{\mathbf{q}}_e^b = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}_e \cdot \mathbb{M}_e \dot{\mathbf{q}}_e, \quad (56)$$

mit dem Elementkoordinatenvektor $\mathbf{q}_e = (\mathbf{q}_e^1, \dots, \mathbf{q}_e^{n_{en}})$ und den folgenden Koeffizienten der Elementmassenmatrix \mathbb{M}_e des e -ten Elementes:

$$M_{ab}^e = \int_{\mathcal{B}_0^e} \rho_0 N_a N_b dV. \quad (57)$$

Die Matrizen \mathbb{M}_e haben eine Blockstruktur der Form $\mathbb{M}_e = \mathbf{M}_e \otimes \mathbf{I}_{n_{dim}}$, mit der entsprechenden Strukturmatrix

$$\mathbf{M}_e = \begin{bmatrix} M_{11}^e & \cdots & M_{1n_{en}}^e \\ \vdots & & \vdots \\ M_{n_{en}1}^e & \cdots & M_{n_{en}n_{en}}^e \end{bmatrix} \quad (58)$$

Ein Matrizenzusammenbau der Elementmassenmatrizen \mathbb{M}_e liefert eine symmetrische globale Massenmatrix

$$\mathbb{M} = \mathbf{A} \mathbb{M}_e, \quad (59)$$

so dass die kinetische Energie und der Impulsvektor \mathbf{p} der Konfiguration gegeben ist durch die Gleichungen (3) beziehungsweise (5).

Der Gesamtimpuls der Konfiguration ist definiert durch eine Summation über die Gesamtimpulse \mathbf{P}_e aller Elemente. Die Gesamtimpulse \mathbf{P}_e haben in der Lagrangeschen Beschreibung die Form

$$\mathbf{P}_e = \int_{\mathcal{B}_0^e} \rho_0 \mathbf{v}_e dV = \sum_{a=1}^{n_{en}} \int_{\mathcal{B}_0^e} \rho_0 N_a dV \dot{\mathbf{q}}_e^a. \quad (60)$$

Im Hinblick auf die Vollständigkeitsbedingung $\sum_{a=1}^{n_{en}} N_a = 1$ erhalten wir die Gesamtimpulse \mathbf{P}_e als die Summe aller Impulse \mathbf{p}_e^a der Elementknoten von $\bar{\mathcal{B}}_t^e$. Eine weitere Summation über die Elemente liefert den

Gesamtimpuls der Konfiguration als $\mathbf{P} = \sum_{A=1}^{n_{np}} \mathbf{p}^A$ wie im verallgemeinerten Problem. Der Gesamtimpuls \mathbf{P} wird erhalten falls Gleichung (14) für jedes Element \mathcal{B}^e erfüllt ist:

$$\sum_{a,b=1}^{n_{en}} \hat{Q}_{ab}^e(\mathbf{C}_e) \mathbf{q}_e^b = \sum_{b=1}^{n_{en}} \int_{\mathcal{B}_0^e} \nabla_\eta \left[\sum_{a=1}^{n_{en}} N_a \right] \cdot \left[\mathbf{J}_e^{-1} \cdot \mathbf{S}_e(\mathbf{C}_e) \cdot \mathbf{J}_e^{-T} \right] \cdot \nabla_\eta N_b \, dV \mathbf{q}_e^b = \mathbf{0}. \quad (61)$$

Die Vollständigkeitsbedingung der räumlichen Lagrangeschen Formfunktionen führt somit zur Gesamtimpulserhaltung.

Der Gesamtdrehimpuls \mathbf{L} der Konfiguration ergibt sich durch Aufsummierung aller Drehimpulse \mathbf{L}_e der räumlichen Elemente, welche gegeben sind durch

$$\mathbf{L}_e = \int_{\mathcal{B}_0^e} \rho_0 \boldsymbol{\varphi}_e \times \mathbf{v}_e \, dV = \sum_{a,b=1}^{n_{en}} \mathbf{q}_e^a \times M_{ab}^e \dot{\mathbf{q}}_e^b = \sum_{a=1}^{n_{en}} \mathbf{q}_e^a \times \mathbf{p}_e^a. \quad (62)$$

Eine weitere Summation über alle Elemente resultiert in $\mathbf{L} = \sum_{A=1}^{n_{np}} \mathbf{q}^A \times \mathbf{p}^A$. Da der Gesamtdrehimpuls die Form wie im verallgemeinerten Problem hat, wird er erhalten infolge der Symmetrie der Massen- und der Steifigkeitsmatrix (siehe Section 2).

4.3 Zeitdiskretisierung

Wir verwenden die cG(k)-Methode als Zeitdiskretisierung der semi-diskreten Bewegungsgleichungen. Dieses Zeitschrittverfahren hat die Form

$$\begin{aligned} \sum_{J=1}^k \int_0^1 \tilde{M}_I M'_J \, d\alpha \mathbf{q}_J - h_n \int_0^1 \tilde{M}_I \mathbb{M}^{-1} \mathbf{p} \, d\alpha &= \mathbf{0}, \\ \sum_{J=1}^k \int_0^1 \tilde{M}_I M'_J \, d\alpha \mathbf{p}_J + h_n \sum_{l=1}^k \tilde{M}_I(\xi_l) \mathbb{Q}^h(\xi_l) \mathbf{q}(\xi_l) w_l &= \mathbf{0}, \end{aligned} \quad I = 1, \dots, k. \quad (63)$$

Die Zeitapproximation $\mathbb{Q}^h(\alpha)$ der globalen Steifigkeitsmatrix ist gegeben über die Elementsteifigkeitsmatrizen $\hat{\mathbb{Q}}_e^h = \hat{\mathbb{Q}}_e(\mathbf{C}_e^h(\alpha))$, wobei $\mathbf{C}_e^h : \mathcal{I}_\alpha \rightarrow \mathbb{R}^{n_{dim} \times n_{dim}}$ eine beliebige Zeitapproximation des rechten Cauchy-Green Tensors des Elementes \mathcal{B}^e kennzeichnet. Die Zeitapproximation $\mathbf{F}_e = \sum_{I=1}^{k+1} M_I(\alpha) \mathbf{F}_I^e$ des Deformationsgradienten des Elementes e , mit den Deformationsgradienten \mathbf{F}_I^e an den Zeitknoten α_I , sei mit *cG-Approximation* bezeichnet. Sie basiert lediglich auf den approximierten Lösungsfunktionen \mathbf{q} . Die cG-Approximation des rechten Cauchy-Green Tensors ist dann gegeben durch $\mathbf{C}_e = \mathbf{F}_e^T \mathbf{F}_e$. Wir bezeichnen die cG(k)-Methode in Verbindung mit der cG-Approximation als Standard-cG(k)-Methode oder kurz cG(k)-Methode. Man erhält als Sonderfall für $k = 1$ die von zweiter Ordnung genaue implizite Mittelpunktsregel:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1 - \frac{h_n}{2} \mathbb{M}^{-1} [\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2] &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1 + \frac{h_n}{2} \mathbb{Q}^h\left(\frac{1}{2}\right) [\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2] &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (64)$$

Im Rahmen der nichtlinearen Elastodynamik wurde die Mittelpunktsregel auch mittels einer Finite-Differenzen-Approximation hergeleitet, zum Beispiel in [22, 34, 49].

4.4 Entwurfskriterium für Energieerhaltung

Wir leiten nun ein Entwurfskriterium durch Lokalisierung der Energieerhaltungsbedingung für die cG(k)-Methode her. Im Fall der semi-diskreten nichtlinearen Elastodynamik lokalisieren wir bezüglich der räumlichen Diskretisierung und erhalten eine Energieerhaltungsbedingung für jedes Element des Netzes. Anschließend lokalisieren wir bezüglich der räumlichen Quadratur und erhalten die folgende Bedingung für einen Kontinuumpunkt im e -ten Element:

$$W_e \left(\mathbf{C}_e^h(1) \right) - W_e \left(\mathbf{C}_e^h(0) \right) = \sum_{l=1}^k \mathbf{S}_e \left(\mathbf{C}_e^h(\xi_l) \right) : \sum_{a,b=1}^{n_{en}} [\mathbf{N}_{ab}^e \otimes \mathbf{q}_e^b(\xi_l)] \cdot \frac{d\mathbf{q}_e^a(\xi_l)}{d\alpha} w_l. \quad (65)$$

Wir nehmen an, dass die Zeitapproximation \mathbf{C}_e^h des rechten Cauchy-Green Tensors die folgende Bedingung erfüllt:

$$\sum_{b=1}^{n_{en}} [2 \mathbf{N}_{ab}^e \otimes \mathbf{q}_e^b] = \nabla_{\mathbf{q}_e^a} \mathbf{C}_e^h \quad (66)$$

Mit dieser Gleichung geht die punktweise Bedingung über in eine Verzerrungsenergiegedichteerhaltungsbedingung:

$$\boxed{W_e(\mathbf{C}_e^h(1)) - W_e(\mathbf{C}_e^h(0)) = \sum_{l=1}^k \nabla_{\mathbf{C}_e} W_e(\mathbf{C}_e^h(\xi_l)) : \frac{\partial \mathbf{C}_e^h(\xi_l)}{\partial \alpha} w_l} \quad (67)$$

Das Entwurfskriterium ist somit die Gleichung (67). Diese Gleichung muss jedoch in Verbindung mit der Gleichung (66) angewendet werden, um die Gradientenform (1) der inneren Kräfte aufrechtzuerhalten.

4.5 Erweiterter Gradient

Wir sehen jetzt das Entwurfskriterium (67) als Nebenbedingung an den Gradienten der Verzerrungsenergiegedichtefunktion an. Wir haben somit eine tensorwertige Funktion $DW_e(\alpha)$ zu bestimmen, die das Entwurfskriterium als Nebenbedingung erfüllt und minimal vom gewöhnlichen Gradienten $\nabla_{\mathbf{C}_e} W_e(\mathbf{C}_e^h(\alpha))$ abweicht. Das Entwurfskriterium kann als folgende Nebenbedingung geschrieben werden:

$$\mathcal{G}_e(DW_e(\alpha)) = W_e(\mathbf{C}_e^h(1)) - W_e(\mathbf{C}_e^h(0)) - \int_0^1 DW_e(\alpha) : \frac{\partial \mathbf{C}_e^h(\alpha)}{\partial \alpha} d\alpha. \quad (68)$$

Das zugehörige Lagrange-Funktional \mathcal{L}_e des variationellen Problem es ist dann gegeben durch

$$\mathcal{L}_e = \frac{1}{2} \int_0^1 \|DW_e(\alpha) - \nabla_{\mathbf{C}_e} W_e(\mathbf{C}_e^h(\alpha))\|^2 d\alpha + \lambda_e \mathcal{G}_e(DW_e(\alpha)). \quad (69)$$

Nach dem Lösen der entsprechenden Euler-Lagrange-Gleichungen hat die Lösung die Form des folgenden erweiterten Gradienten:

$$\boxed{DW_e(\alpha) = \nabla_{\mathbf{C}_e} W_e(\mathbf{C}_e^h(\alpha)) + \frac{\mathcal{G}_e(\nabla_{\mathbf{C}_e} W_e)}{\mathcal{N}_e} \frac{\partial \mathbf{C}_e^h(\alpha)}{\partial \alpha}} \quad (70)$$

mit

$$\mathcal{N}_e = \int_0^1 \frac{\partial \mathbf{C}_e^h(\alpha)}{\partial \alpha} : \frac{\partial \mathbf{C}_e^h(\alpha)}{\partial \alpha} d\alpha. \quad (71)$$

Wir wenden ebenfalls eine k -Punkt Gaussquadratur zur Bestimmung der verbleibenden Zeitintegrale an.

4.6 Assumed strain approximation

Hier trennen wir von der cG-Approximation jenen Teil, der invariant bezüglich Starrkörperbewegungen ist. Zu diesem Zweck betrachten wir eine allgemeine Starrkörperbewegung eines Elementes \mathcal{B}^e . Solch eine Starrkörperbewegung ist definiert durch eine sogenannte Euklidische Transformation mit der Form $\mathbf{x}_e^a(t) = \mathbf{a}_e(t) + \mathbf{R}_e(t) \mathbf{X}_e^a$. Der Vektor $\mathbf{a}_e(t) \in \mathbb{R}^{n_{dim}}$ bezeichnet eine Translation und der Tensor $\mathbf{R}_e(t) \in SO(n_{dim})$ führt zu einer axialen Rotation. Die entsprechenden Deformationsgradienten an den Zeitknoten α_I , $I = 2, \dots, k+1$, sind gegeben durch $\mathbf{F}_I^e = \mathbf{R}_I^e \in SO(n_{dim})$, den Rotationstensoren an den Zeitknoten α_I mit der Orthogonalitätseigenschaft $(\mathbf{R}_I^e)^T \mathbf{R}_I^e = \mathbf{I}_{n_{dim}}$. Wir beginnen mit der cG-Approximation des Verzerrungsmaßes, welches in der nichtlinearen Elastodynamik durch den rechten Cauchy-Green repräsentiert wird:

$$\mathbf{C}_e = \mathbf{F}_e^T \mathbf{F}_e = \sum_{I=1}^{k+1} M_I(\alpha) \mathbf{C}_I^e - \sum_{I=1}^k \sum_{J=I+1}^{k+1} M_I M_J [\mathbf{F}_I^e - \mathbf{F}_J^e]^T [\mathbf{F}_I^e - \mathbf{F}_J^e], \quad (72)$$

wobei $\mathbf{C}_I^e = (\mathbf{F}_I^e)^T \mathbf{F}_I^e$ der rechte Cauchy-Green Tensor an dem Zeitknoten α_I bezeichnet. Da die Tensoren \mathbf{R}_I^e Elemente der speziellen orthogonalen Gruppe $SO(n_{dim})$ sind, mit der Matrixmultiplikation

als Gruppenoperation, so ist eine Differenz zweier orthogonaler Tensoren im allgemeinen kein orthogonaler Tensor mehr. Der letzte Term der Gleichung (72) wird deshalb von einer Starrkörperbewegung verändert. Unter Einbezug der Orthogonalitätseigenschaft ist jedoch der erste Term unbeeinflusst von einer Starrkörperbewegung. Der erste Term in Gleichung (72) wird als *assumed strain approximation* des rechten Cauchy-Green Tensors bezeichnet (siehe Vorarbeit [3]):

$$\mathbf{C}_e = \sum_{I=1}^{k+1} M_I(\alpha) \mathbf{C}_I^e \quad (73)$$

Die assumed strain approximation ist deshalb jener Teil der cG-Approximation, welcher indifferent hinsichtlich Starrkörperbewegungen ist (vergleiche [34]).

4.7 Erweiterter Gradient mit assumed strain approximation

Wir führen jetzt die assumed strain approximation in den erweiterten Gradienten unter Beibehaltung seiner Energieerhaltungseigenschaft ein. Wir haben zu diesem Zweck das Entwurfskriterium im Gradienten wie folgt zu schreiben:

$$\underline{\mathcal{G}}_e = W_e(\mathbf{C}_e(1)) - W_e(\mathbf{C}_e(0)) - \sum_{l=1}^k \nabla_{\mathbf{C}_e} W_e(\mathbf{C}_e(\xi_l)) : \frac{\partial \mathbf{C}_e(\xi_l)}{\partial \alpha} w_l. \quad (74)$$

Der zugehörige erweiterte Gradienten mit k -Punkt Gaußquadratur hat dann die folgende Form:

$$\underline{\mathcal{D}}W_e = \nabla_{\mathbf{C}_e} W_e(\mathbf{C}_e(\alpha)) + \frac{\underline{\mathcal{G}}_e}{\underline{\mathcal{N}}_e} \frac{\partial \mathbf{C}_e(\alpha)}{\partial \alpha} \quad (75)$$

wobei

$$\underline{\mathcal{N}}_e = \sum_{l=1}^k \frac{\partial \mathbf{C}_e(\xi_l)}{\partial \alpha} : \frac{\partial \mathbf{C}_e(\xi_l)}{\partial \alpha} w_l. \quad (76)$$

4.8 Die erweiterte Galerkin (eG) Methode

Die erweiterte cG(k)-Methode oder kurz eG(k)-Methode soll die cG(k)-Methode ergänzt um den erweiterten Gradienten und die assumed strain approximation bezeichnen. Diese Familie von energie- und drehimpulserhaltenden Zeitschrittverfahren von höherer Genauigkeitsordnung hat die Form

$$\begin{cases} \sum_{J=1}^k \int_0^1 \tilde{M}_I M'_J \, d\alpha \mathbf{q}_J - h_n \int_0^1 \tilde{M}_I \mathbb{M}^{-1} \mathbf{p} \, d\alpha = \mathbf{0}, \\ \sum_{J=1}^k \int_0^1 \tilde{M}_I M'_J \, d\alpha \mathbf{p}_J + h_n \sum_{l=1}^k \tilde{M}_I(\xi_l) \underline{\mathcal{Q}}(\xi_l) \mathbf{q}(\xi_l) w_l = \mathbf{0}, \end{cases} \quad I = 1, \dots, k. \quad (77)$$

Die Zeitapproximation $\underline{\mathcal{Q}}(\alpha)$ der Steifigkeitsmatrix ist gegeben durch die Elementsteifigkeitsmatrizen $\underline{\mathcal{Q}}_e(\alpha)$ entsprechend den Koeffizienten

$$\underline{\mathcal{Q}}_{ab}^e(\alpha) = \int_{\mathcal{B}_0^e} 2 \underline{\mathcal{D}}W_e(\alpha) : \mathbf{N}_{ab}^e \, dV \quad (78)$$

der Elementstrukturmatrizen \mathbf{N}_{ab}^e . Die eG(1)-Methode für die semi-diskrete Elastodynamik ist äquivalent zu den energie- und drehimpulserhaltenden Verfahren in [34]. Dieses Zeitschrittverfahren, welches auf einer Finite-Differenzen-Approximation von zweiter Genauigkeitsordnung basiert, ist gegeben durch die Gleichungen

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1 - \frac{h_n}{2} \mathbb{M}^{-1} [\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2] &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1 + \frac{h_n}{2} \underline{\mathcal{Q}}\left(\frac{1}{2}\right) [\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2] &= \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (79)$$

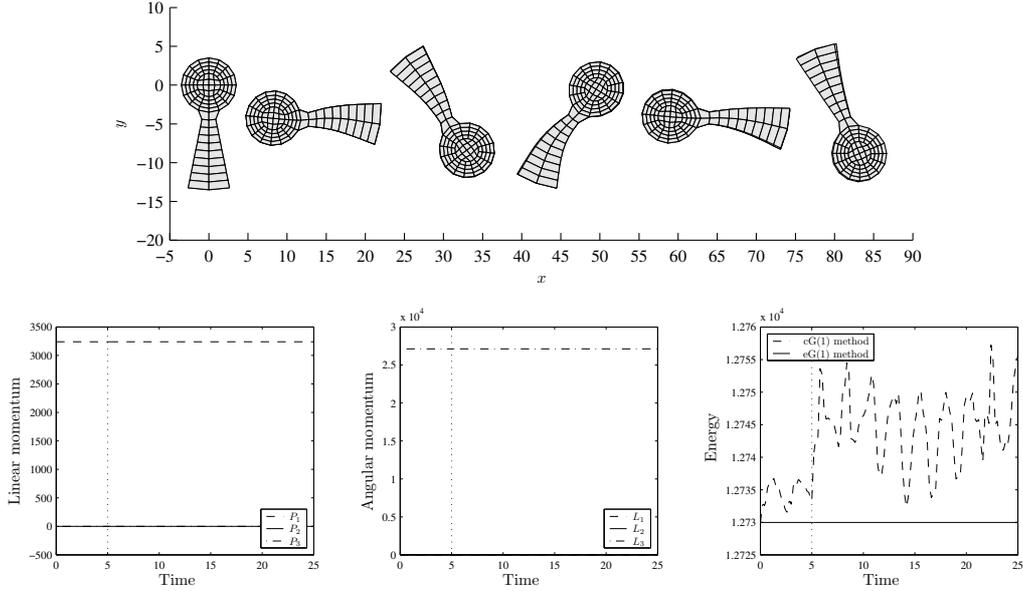


Abbildung 1: Bewegung und zugehörige Invarianten eines ebenen ein-blättrigen Propellers (Neo-Hooke-Material mit $\lambda = 3000$, $\mu = 750$, $\rho_0 = 8.93$) diskretisiert durch $n_{np} = 119$ Knoten in $n_{el} = 100$ vierknotigen Lagrange-Elementen und berechnet mittels der cG(1)- sowie mittels der eG(1)-Methode mit einer Zeitschrittweite $h_n = 0.1/0.2$. Die Propeller der eG(1)-Methode sind obenauf dargestellt. Die gepunktete Linie kennzeichnet den Wechsel der Zeitschrittweite bei $T = 5$.

wobei der Gradient der Verzerrungsenergiegedichtefunktion bezüglich des Elementes e approximiert ist durch den folgenden Differenzenquotienten:

$$\underline{D}W_e\left(\frac{1}{2}\right) = \nabla_{\mathbf{C}_e} W_e\left(\frac{\mathbf{C}_1^e + \mathbf{C}_2^e}{2}\right) + \frac{\underline{G}_e}{\underline{N}_e} [\mathbf{C}_2^e - \mathbf{C}_1^e], \quad (80)$$

mit den Ausdrücken

$$\begin{aligned} \underline{G}_e &= W_e(\mathbf{C}_2^e) - W_e(\mathbf{C}_1^e) - \nabla_{\mathbf{C}_e} W_e\left(\frac{\mathbf{C}_1^e + \mathbf{C}_2^e}{2}\right) : [\mathbf{C}_2^e - \mathbf{C}_1^e], \\ \underline{N}_e &= \|\mathbf{C}_2^e - \mathbf{C}_1^e\|^2. \end{aligned} \quad (81)$$

4.9 Numerische Untersuchungen

In diesem Abschnitt präsentieren wir die Implementierung der eG(k)-Methode für die nichtlineare Elastodynamik. Wir verifizieren dann die Erhaltungseigenschaften der eG(k)-Methode in numerischen Beispielen und geben einen Vergleich zwischen der cG(k)- und der eG(k)-Methode im Hinblick auf Erhaltung der Invarianten, Genauigkeit und numerischen Aufwand wieder. Letztendlich wird auch die Effizienz von zeitlichen Finiten-Elementen höherer Genauigkeitsordnung diskutiert.

4.9.1 Implementierung

Die Implementierung sowohl der cG(k)- als auch der eG(k)-Methode folgt von Abschnitt 3.7. Wir haben eine Toleranz $\epsilon = 10^{-8}$ im Abbruchkriterium des Newton-Verfahrens verwendet. Die Blöcke \mathbf{K}_J , $J = 2, \dots, k+1$, des Tangentenoperators haben selbst auch eine Blockstruktur:

$$\mathbf{K}_J^e = \mathbf{A} \begin{array}{c} n_{el} \\ \vdots \\ e=1 \end{array} \begin{bmatrix} {}^e\mathbf{K}_J^{11} & \dots & {}^e\mathbf{K}_J^{1n_{en}} \\ \vdots & & \vdots \\ {}^e\mathbf{K}_J^{n_{en}1} & \dots & {}^e\mathbf{K}_J^{n_{en}n_{en}} \end{bmatrix} \quad (82)$$

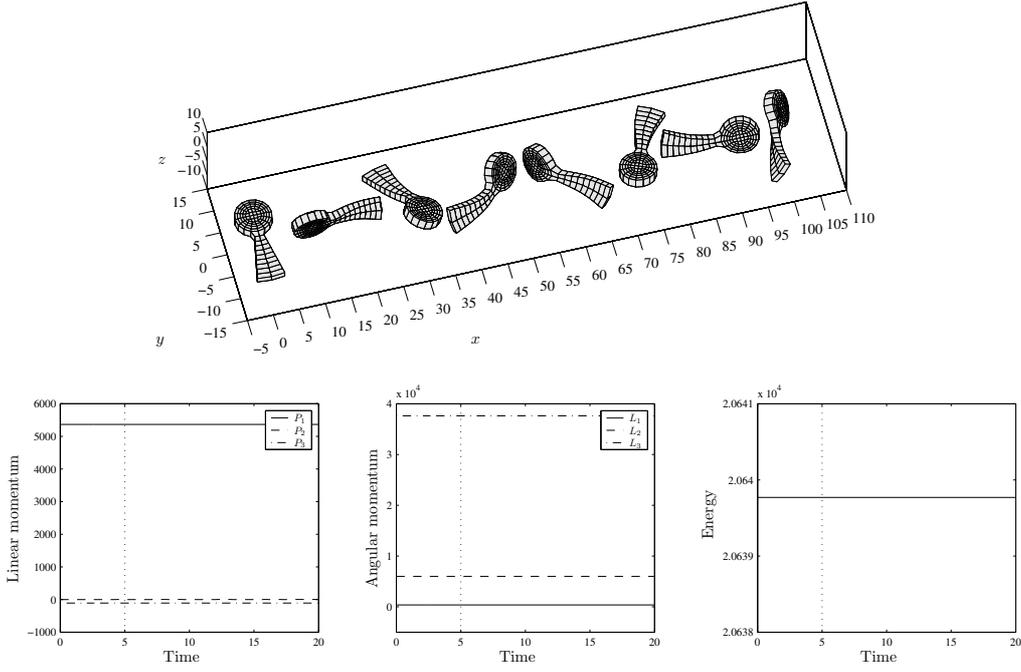


Abbildung 2: Bewegung und zugehörige Invarianten eines räumlichen ein-blättrigen Propellers (Neo-Hooke-Material mit $\lambda = 3000$, $\mu = 750$, $\rho_0 = 8.93$) diskretisiert durch $n_{np} = 238$ Knoten in $n_{el} = 100$ acht-knotigen Lagrange-Elementen und berechnet mittels der eG(1)-Methode mit einer Zeitschrittweite $h_n = 0.1/0.2$. Die gepunktete Linie kennzeichnet den Wechsel der Zeitschrittweite bei $T = 5$.

Wir schreiben die Blöcke ${}^e\mathbf{K}_J^{ab}$ als Summen eines geometrischen und eines materiellen Anteils, so dass ${}^e\mathbf{K}_J^{ab} = {}^e\mathbf{K}_{\text{Geo}_J}^{ab} + {}^e\mathbf{K}_{\text{Mat}_J}^{ab}$ gilt. Wir definieren die folgenden Abkürzungen für eine kompaktere Darstellung der Tangentenmatrizen:

$$\mathbf{B}_a^e = \mathbf{F}_e \otimes \nabla_\eta N_a \cdot \mathbf{J}_e^{-1} \quad \left[{}^e\mathbf{B}_J^b\right]^T = \mathbf{J}_e^{-T} \cdot \nabla_\eta N_b \otimes \left[\mathbf{F}_J^e\right]^T \quad (83)$$

Die geometrischen und materiellen Anteile der cG-Methode lauten mit diesen Abkürzungen

$$\begin{aligned} {}^e\mathbf{K}_{\text{Geo}_J}^{ab} &= M_J \mathbf{Q}_{ab}^e \mathbf{I}_{n_{dim}}, \\ {}^e\mathbf{K}_{\text{Mat}_J}^{ab} &= M_J \int_{\mathcal{B}_0^e} \mathbf{B}_a^e : \left[4 \nabla_{\mathbf{C}_e}^2 W_e(\mathbf{C}_e)\right] : \left[\mathbf{B}_b^e\right]^T dV. \end{aligned} \quad (84)$$

Die geometrischen Anteile der eG-Methode nehmen eine ähnliche Form an als jene der cG-Methode, da ein geometrischer Anteil ausschliesslich aus der Differentiation der Lösungsfunktion \mathbf{q} hervorgeht. Jedoch die entsprechenden materiellen Anteile sind komplizierter infolge der zusätzlichen Terme des erweiterten Gradienten:

$$\begin{aligned} {}^e\mathbf{K}_{\text{Geo}_J}^{ab} &= M_J \mathbf{Q}_{ab}^e \mathbf{I}_{n_{dim}}, \\ {}^e\mathbf{K}_{\text{Mat}_J}^{ab} &= \int_{\mathcal{B}_0^e} \mathbf{B}_a^e : \left[M_J 4 \nabla_{\mathbf{C}_e}^2 W_e(\mathbf{C}_e) + M_J' 4 \frac{\mathcal{G}_e}{\underline{\mathcal{N}}_e} \mathbf{1}_{sym} \right] : \left[\mathbf{B}_J^b \right]^T dV + \\ &+ \int_{\mathcal{B}_0^e} \mathbf{B}_a^e : \left[\delta_{J,k+1} \frac{2}{\underline{\mathcal{N}}_e} \frac{\partial \mathbf{C}_e(\alpha)}{\partial \alpha} \otimes \mathbf{S}_J^e - \frac{4}{\underline{\mathcal{N}}_e} \frac{\partial \mathbf{C}_e(\alpha)}{\partial \alpha} \otimes \underline{\mathbf{L}}_1^e \right] : \left[\mathbf{B}_J^b \right]^T dV - \\ &- \int_{\mathcal{B}_0^e} \mathbf{B}_a^e : \left[\frac{4 \mathcal{G}_e}{\underline{\mathcal{N}}_e^2} \frac{\partial \mathbf{C}_e}{\partial \alpha} \otimes \underline{\mathbf{L}}_2^e \right] dV, \end{aligned} \quad (85)$$

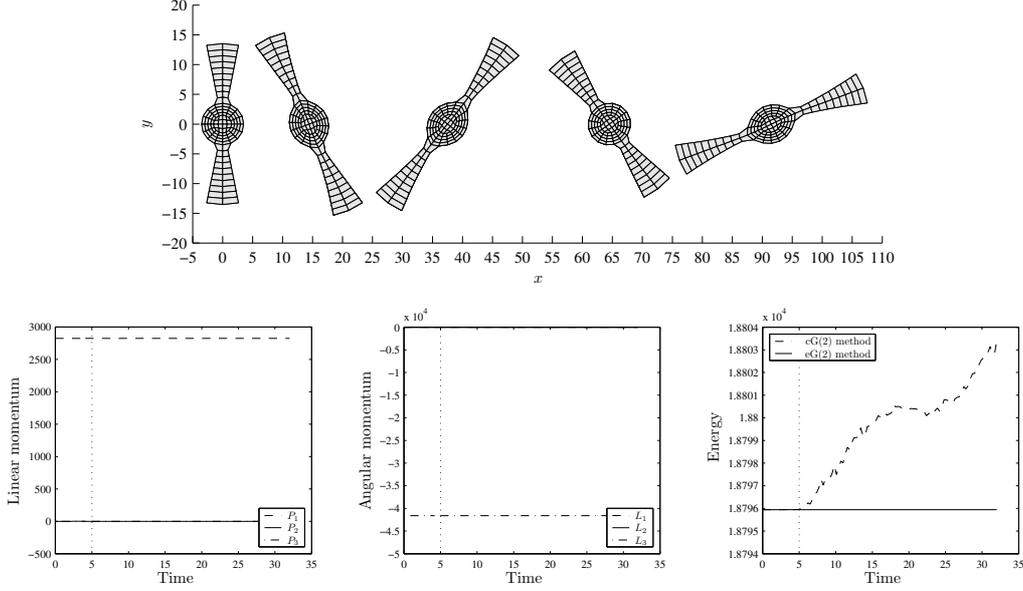


Abbildung 3: Bewegung und zugehörige Invarianten eines ebenen 2-blättrigen Propellers (Neo Hooke Material mit $\lambda = 3000$, $\mu = 750$, $\rho_0 = 8.93$) diskretisiert durch $n_{np} = 149$ Knoten in $n_{el} = 120$ vier-knotigen Lagrange-Elementen und berechnet mittels der cG(2)- sowie mittels der eG(2)-Methode mit einer Zeitschrittweite $h_n = 0.1/0.3$. Die Propeller der eG(2)-Methode sind oben auf dargestellt. Die gepunktete Linie kennzeichnet eine Zeitschrittweitenänderung bei $T = 5$.

wobei

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{L}}_1^e &= \sum_{l=1}^k \left[M_J(\xi_l) \frac{\partial \mathbf{C}_e(\xi_l)}{\partial \alpha} : \nabla_{\mathbf{C}_e}^2 W_e(\mathbf{C}_e(\xi_l)) + M'_J(\xi_l) \left[\nabla_{\mathbf{C}_e} W_e(\mathbf{C}_e(\xi_l)) + \frac{\underline{\mathbf{g}}_e}{\underline{\mathcal{N}}_e} \frac{\partial \mathbf{C}_e(\xi_l)}{\partial \alpha} \right] \right] w_l, \\ \underline{\mathbf{L}}_2^e &= \sum_{l=1}^k \frac{\partial \mathbf{C}_e(\xi_l)}{\partial \alpha} : \left[M'_J [\mathbf{B}^e(\xi_l)]^T + M_J \left[\frac{\partial \mathbf{B}^e(\xi_l)}{\partial \alpha} \right]^T \right] w_l. \end{aligned} \quad (86)$$

4.9.2 Kompressibles Neo-Hooke Material

Wir betrachten k -blättrige ebene und räumliche Propeller diskretisiert mit vier- beziehungsweise acht-knotigen Lagrange-Elementen. Die Propeller sind mit ihrem Mittelpunkt im entsprechenden Euklidischen Raum positioniert. Mit vorgegebenem Anfangswinkelgeschwindigkeitsvektor $\boldsymbol{\omega}_0$ und Anfangstranslationsgeschwindigkeitsvektor \mathbf{v}_T werden die Anfangsknotengeschwindigkeiten \mathbf{v}_0^A , $A = 1, \dots, n_{np}$, nach der Gleichung $\mathbf{v}_0^A = \mathbf{v}_T + \boldsymbol{\omega}_0 \times \mathbf{q}_0^A$ bestimmt. Die Propeller bestehen aus kompressiblem Neo-Hooke-Material mit den Lamé-Konstanten $\lambda = 3000$ und $\mu = 750$. Die Bewegung startet in einer spannungsfreien Anfangskonfiguration mit einer homogenen Massendichte $\rho_0 = 8.93$. Die Verzerrungsenergiedichtefunktion des kompressiblen Neo-Hooke-Materials ist wie folgt:

$$W_e(\mathbf{C}_e) = \frac{\mu}{2} [\text{tr } \mathbf{C}_e - 3] + \frac{\lambda}{2} [\ln J_e]^2 - \mu \ln J_e, \quad \text{mit } J_e = \sqrt{\mathbf{C}_e}. \quad (87)$$

4.9.3 Diskussion

In den Abbildungen 1, 3 und 5 werden die Bewegungen der zwei-dimensionalen Propeller und die zugehörigen Invarianten dargestellt. Diese Bewegungen wurden zum Vergleich sowohl mit der cG- als auch mit der eG-Methode berechnet. Die Abbildungen 2, 4 und 6 zeigen die Bewegungen der betrachteten räumlichen Propeller, und die entsprechenden Invarianten berechnet mit der eG-Methode. Wir sehen, dass die eG-Methode die Erhaltungsgesetze unabhängig von dem Scharparameter k und von der Zeitschrittweite

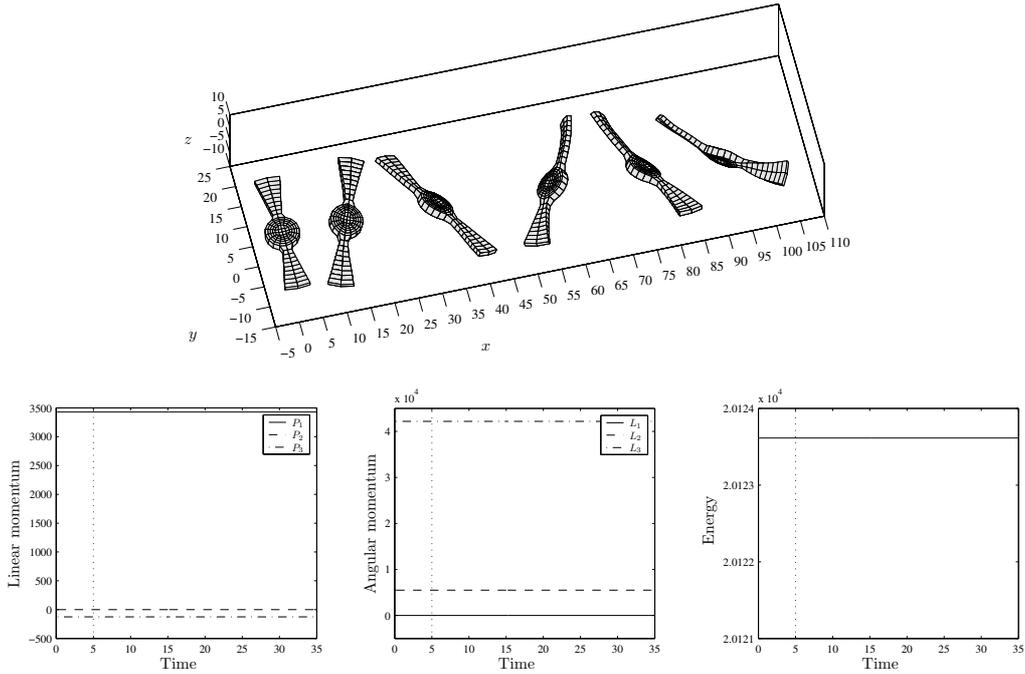


Abbildung 4: Bewegung und zugehörige Invarianten eines räumlichen zwei-blättrigen Propellers (Neo Hooke Material mit $\lambda = 3000$, $\mu = 750$, $\rho_0 = 8.93$) diskretisiert durch $n_{np} = 298$ Knoten in $n_{el} = 120$ acht-knotigen Lagrange-Elementen und berechnet mittels der eG(2)-Methode mit einer Zeitschrittweite $h_n = 0.1/0.2$). Die Zeitschrittweite wurde geändert bei $T = 5$.

h_n erfüllt. Der Gesamtimpuls und der Gesamtdrehimpuls berechnet mit der cG-Methode ist ebenfalls konstant über der Zeit im Gegensatz zur zugehörigen Gesamtenergie. Die cG-Methode zeigt ein Blow-up-Verhalten, da ihre Gesamtenergie nach einer Zeitschrittweitenänderung steigt. Die Gesamtenergie der cG-Methode hängt ferner von k sowie von der Zeitschrittweite h_n ab.

Das linke Diagramm der Abbildung 7 stellt den Logarithmus des relativen Fehlers zur Zeit T über dem Logarithmus der zugehörigen Zeitschrittweite h_n dar. Die Referenzlösung zur Zeit T ist berechnet mittels der eG(4)-Methode mit einem Zeitschritt $h_n = 0.001$. Die Graphen sind Geraden infolge der logarithmischen Skala beider Achsen. Die Steigung der Geraden gibt die Genauigkeitsordnung $\mathcal{O}(h_n^{2k})$ beider betrachteten Methoden an. Wir beobachten für beide Methoden bei steigenden k , dass sich die Steigung der Geraden vergrößert und der Achsenabschnitt der Geraden fällt. Aus diesem Grund führt ein größeres k auf eine größere Zeitschrittweite zur Berechnung der Lösung zur Zeit T mit vorgegebener Genauigkeit. Das rechte Diagramm in Abbildung 7 zeigt einen doppelt-logarithmischen Schrieb des relativen Fehler über der zugehörigen CPU-Zeit. Wir erhielten ebenfalls Geraden aufgrund einer linearen Ausgleichsrechnung. Zuerst vergleichen wir die benötigte CPU-Zeit beider Methoden. Wir sehen für beide Methoden, dass je größer k gewählt wird, desto kleiner ist die benötigte CPU-Zeit. Eine größeres k führt folglich zu einer Ersparnis von CPU-Zeit aufgrund kleinerer Zeitschrittweiten und niedrigerer Iterationszahlen. Zieht man die Steigung der Geraden in Betracht, so sieht man im Hinblick auf die benötigte CPU-Zeit, dass ein größeres k ab einem bestimmten relativen Fehler gerechtfertigt ist. Dieser relative Fehler ist für die cG-Methode höher als für die eG-Methode. Zweitens, vergleicht man die CPU-Zeiten beider Methoden für einen festen Scharparameter k , so beobachtet man dass die CPU-Zeit der eG-Methode im allgemeinen größer ist als die der cG-Methode. Der Grund für diese Beobachtung ist der komplexere innere Kraftvektor und der entsprechende Tangentenoperator der eG-Methode.

5 Zusammenfassung

Wir beschäftigten uns mit der kontinuierlichen Galerkin-Methode in der Zeit im Rahmen der semi-diskreten nichtlinearen Elastodynamik. Die resultierende Familie von k -stufigen Einschrittverfahren be-

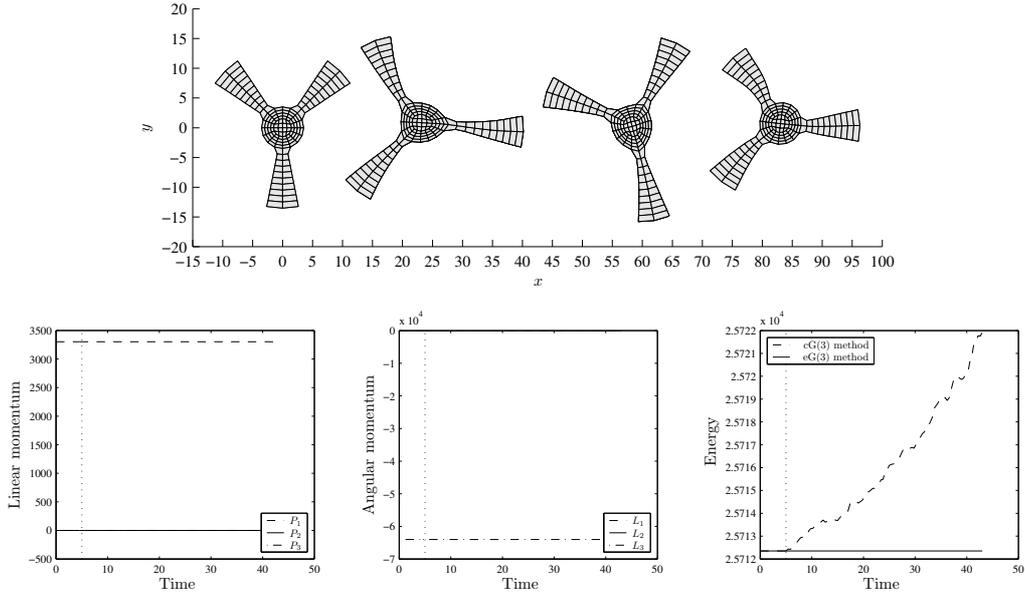


Abbildung 5: Bewegung und zugehörige Invarianten eines ebenen drei-blättrigen Propellers (Neo Hooke Material mit $\lambda = 3000$, $\mu = 750$, $\rho_0 = 8.93$) diskretisiert durch $n_{np} = 179$ Knoten in $n_{el} = 140$ vierknotigen Lagrange-Elementen und berechnet mittels der cG(3)- sowie mittels der eG(3)-Methode mit einer Zeitschrittweite $h_n = 0.1/0.4$. Die Propeller der eG(3)-Methode sind oben auf dargestellt. Die gepunkteten Linien kennzeichnen den Wechsel der Zeitschrittweite bei $T = 5$.

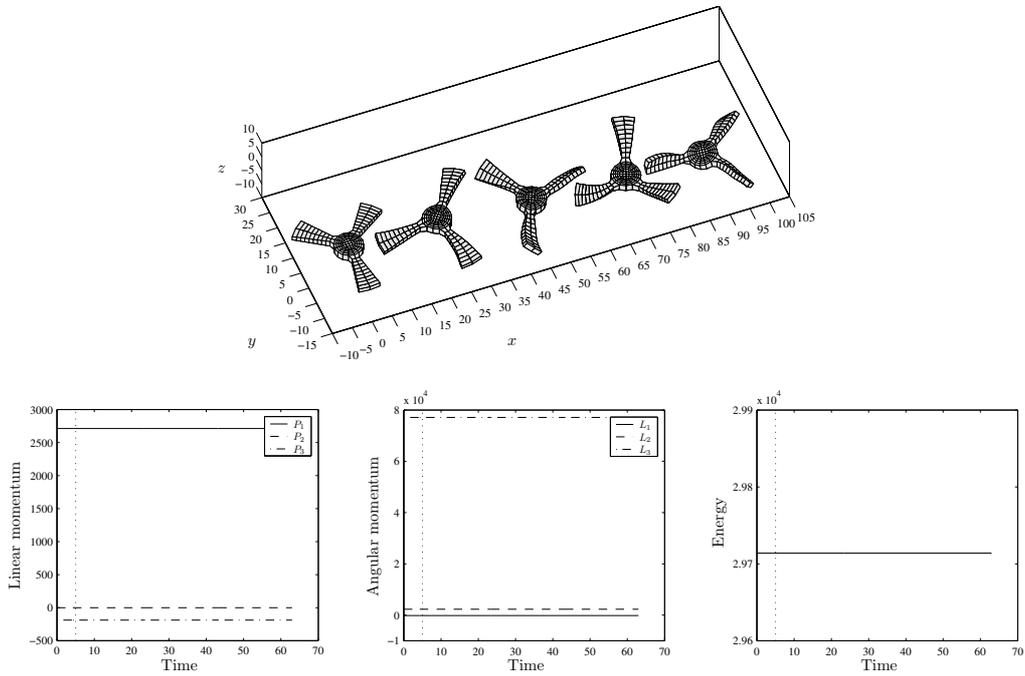


Abbildung 6: Bewegung und zugehörige Invarianten eines räumlichen drei-blättrigen Propellers (Neo Hooke Material mit $\lambda = 3000$, $\mu = 750$, $\rho_0 = 8.93$) diskretisiert durch $n_{np} = 358$ Knoten in $n_{el} = 140$ acht-knotigen Lagrange-Elementen und berechnet mittels der eG(3)-Methode mit einer Zeitschrittweite $h_n = 0.1/0.2$. Die Zeitschrittweite wurde geändert bei $T = 5$.

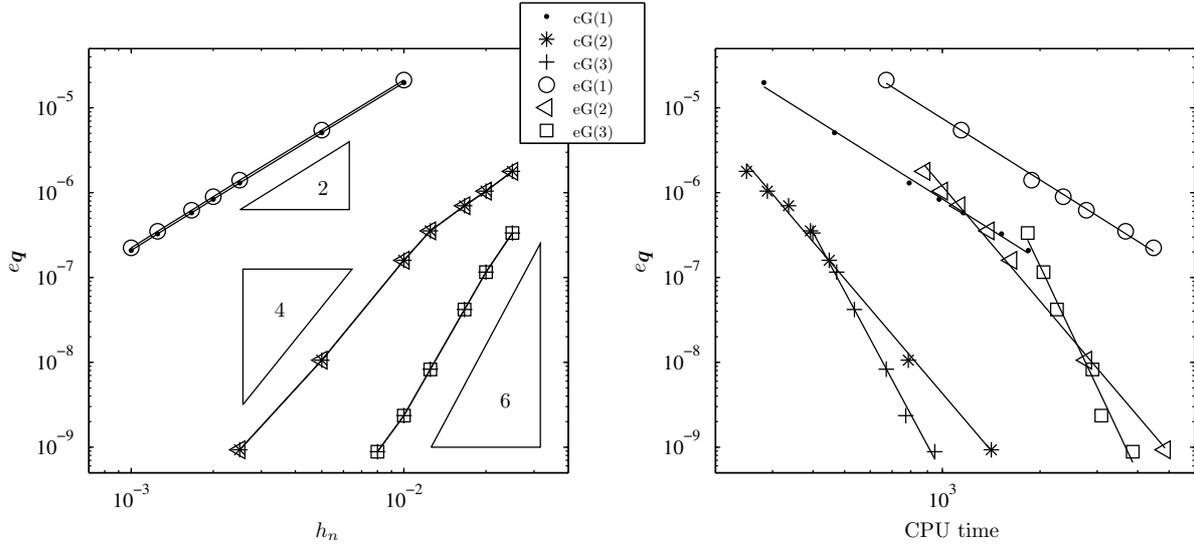


Abbildung 7: Genauigkeits- und Effizienzvergleich der cG- mit der eG-Methode für $k = 1, 2, 3$ ermittelt mit der Bewegung des ebenen ein-blättrigen Propellers (Neo Hooke Material mit $\lambda = 3000$, $\mu = 750$, $\rho_0 = 8.93$) diskretisiert durch $n_{np} = 119$ Knoten in $n_{el} = 100$ vier-knotigen Lagrange-Elementen zur Zeit $T = 1$.

einhalten numerisch zu integrierende Zeitintegrale. Die Erhaltungseigenschaften dieser Verfahren sind dann verbunden mit einer Kollokation an k Quadraturpunkten. Da die betrachteten Impulsabbildungen maximal quadratische Invarianten sind, wurde eine k -Punkt Gaußregel mit der Genauigkeitsordnung $2k$ zur Erhaltung der Impulsabbildungen verwendet. Wir bezeichnen diese Familie von Zeitschrittverfahren als die $cG(k)$ -Methode.

Die gewöhnliche $cG(k)$ -Methode ist jedoch nicht energieerhaltend und verwendet keine objektive Zeitapproximation für das betrachtete Verzerrungsmaß. Aus diesem Grund wurde Energieerhaltung mittels einer Projektionsmethode erzwungen, die unabhängig vom Verzerrungsmaß ist. Diese Projektion führte zu einem erweiterten Gradienten, der in der $cG(k)$ -Methode in Verbindung mit einer objektiven zeitlichen Approximation des Verzerrungsmasses angewendet wurde. Es resultierte eine Familie von energie- und drehimpulserhaltenden Zeitschrittverfahren der Genauigkeitsordnung $2k$, welche die $eG(k)$ -Methode genannt wurde.

Die präsentierten numerischen Untersuchungen belegen das ausgezeichnete Verhalten der $eG(k)$ -Methode in Langzeitberechnungen von Bewegungen mit grossen Verzerrungen sowie von steifen Konfigurationen. Es wurde gezeigt, dass die relative Genauigkeit der $eG(k)$ -Methode und die der $cG(k)$ -Methode praktisch identisch sind. Ferner existiert ein optimaler relativer Fehler für welchen eine höhere Genauigkeitsordnung empfohlen werden kann. Dieser Grenzwert liegt jedoch in einem niederen Genauigkeitsbereich, so dass eine Methode mit höherer Genauigkeitsordnung im allgemeinen empfohlen werden kann, wenn die Lösung eine bestimmte Genauigkeit vorweisen soll.

Vorträge zur Thematik des Forschungsvorhabens

1. Groß M. Time-Stepping Schemes for Nonlinear Hamiltonian Systems Based on the Discontinuous Galerkin Method. *Seminar für Mechanik*, Universität Kaiserslautern, Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik, 11.05.2000,
2. Betsch P. and Steinmann P. Time Finite Elements for Nonlinear Elastodynamics. *20th International (IUTAM) Congress of Theoretical and Applied Mechanics*, Chicago, Illinois, 30.08.2000.
3. Betsch P. and Steinmann P. Time Finite Elements for Nonlinear Dynamics of Solids. *239. WE-Heraeus-Seminar on Modelling and Algorithms for Problems in Solid Mechanics*, Physikzentrum Bad Honnef, Deutschland, 05.09.2000.
4. Betsch P. The Continuous Galerkin Method for Stiff Hamiltonian Dynamical Systems. *Seminar im 'Dipartimento di Costruzioni e Trasporti'*, Universität Padua, Italien, 02.10.2000.
5. Betsch P. and Steinmann P. Energy-Momentum Schemes for Constrained Mechanical Systems. *GAMM-Jahrestagung*, Zürich, Schweiz, 13.02.2001.
6. Groß M., Betsch P., and Steinmann P. Comparison of Galerkin Methods in Time with Application to Classical Mechanics. *GAMM-Jahrestagung*, Zürich, Schweiz, 13.02.2001.
7. Steinmann P. and Betsch P. Constrained Mechanical Systems. I. A New Galerkin-based Time Integrator. *Trends in Computational Structural Mechanics*, Lake Constance, Austria/Germany, 22.05.2001.
8. Betsch P. and Steinmann P. Constrained Mechanical Systems. II. Rigid Body Dynamics. *Trends in Computational Structural Mechanics*, Lake Constance, Austria/Germany, 22.05.2001.
9. Betsch P. and Steinmann P. Galerkin-Based Energy-Momentum Schemes for Flexible Multibody Dynamics. *2nd European Conference on Computational Mechanics*, Cracow, Poland, 28.06.2001.
10. Steinmann P. and Betsch P. Conservative Integrators for Constrained Mechanical Systems. I. The Mixed Galerkin Method. *6th U.S. National Congress on Computational Mechanics*, Dearborn, Michigan, USA, 03.08.2001,
11. Betsch P. and Steinmann P. Conservative Integrators for Constrained Mechanical Systems. II. Flexible Multibody Dynamics. *6th U.S. National Congress on Computational Mechanics*, Dearborn, Michigan, USA, 03.08.2001.
12. Betsch P. and Steinmann P. Galerkin Methods for the Discretization of Flexible Multibody Dynamics. *EUROMECH 427 conference on Computational Techniques and Applications in Nonlinear Dynamics of Structures and Multibody Systems*, Cachan, France, 24.09.2001.
13. Betsch P. Advanced Numerical Methods in Nonlinear Structural Dynamics. *COMMAS Summer School 2001 on Computational Mechanics of Materials and Structures*, Three 90-minutes lectures, Universität Stuttgart, 01/02.10.2001.
14. Betsch P. Zur Simulation der Dynamik deformierbarer Mehrkörpersysteme. *Kolloquium 'Technische Mechanik'*, Universität Stuttgart, Fakultät für Konstruktions- und Fertigungstechnik, 19.10.2001.
15. Betsch P. Zur Dynamik deformierbarer Mehrkörpersysteme. *Kolloquium für Mechanik*, Universität Kaiserslautern, Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik, 20.12.2001,
16. Betsch P. and Steinmann P. Energy-Momentum Schemes for the Dynamics of Beams and Flexible Multibody Systems. *GAMM-Jahrestagung*, Augsburg, Deutschland, 28.03.2002.
17. Groß M., Betsch P., and Steinmann P. Higher-order Energy-Momentum Schemes for Nonlinear Elastodynamics. *GAMM-Jahrestagung*, Augsburg, Deutschland, 28.03.2002.
18. Betsch P. Nichtlineare Finite-Elemente-Methoden zur Beschreibung deformierbarer Mehrkörpersysteme. Universität Siegen, Fachbereich 11, 09.04.2002.

19. Groß M., Betsch P., and Steinmann P. Mechanische Zeitintegratoren beliebiger Genauigkeitsordnung für die nichtlineare Elastodynamik. *Südwestdeutsches Mechanik-Kolloquium*, Kaiserslautern, Deutschland, 09.11.2002.
20. Groß M., Betsch P., and Steinmann P. Mechanical Integrators of Higher-Order for Nonlinear Elastodynamics. *GAMM-Jahrestagung*, Padua, Italien, 26.03.2003.
21. Betsch P. and Steinmann P. The discrete null space method for the energy-consistent integration of constrained mechanical systems. *GAMM-Jahrestagung*, Padua, Italien, 26.03.2003.
22. Lauer S., Betsch P., and Steinmann P. Mechanical integrators for constrained mechanical systems. *GAMM-Jahrestagung*, Padua, Italien, 26.03.2003.
23. Leyendecker S. Mechanische Integratoren für zwei Arten von Gleichungen für Bewegungen mit Zwangsbedingungen. *Seminar für Mechanik*, Technische Universität Kaiserslautern, 08.05.2003.
24. Betsch P. and Steinmann P. The discrete null space method for flexible multibody dynamics. *ECCOMAS Conference on Advances in Computational Multibody Dynamics*, Lisabon, Portugal, 01.07.2003.
25. Leyendecker S., Betsch P. and Steinmann P. Conserving integration schemes for constrained mechanical systems. *5th ICIAM*, Sydney, Australien, 07.07.2003.
26. Groß M. Zeitintegration mit der Finite-Elemente-Methode. *Seminar für Mechanik*, Technische Universität Kaiserslautern, 04.12.2003.
27. Betsch P. PDAE-Systeme in der flexiblen Mehrkörperdynamik *ASIM Workshop 'Grundlagen und Methoden der Modellbildung und Simulation'*, Universität Siegen, 02.03.2004.
28. Leyendecker S., Betsch P. and Steinmann P. Mechanical integrators for constrained Hamiltonian systems *2nd International Workshop on Continuum Mechanics*. Sterzing, Italy, 07.03.2004.
29. Leyendecker S., Betsch P. and Steinmann P. Mechanical integrators for constrained dynamics of geometrically exact beams. *GAMM-Jahrestagung*, Dresden, Deutschland, 23.03.2004.
30. Groß M. Stabile Langzeitintegration bei großen Rotationen und Verformungen *IWRMM Block-Seminar*, Universität Karlsruhe, 28.05.2004.
31. Betsch P. A unified computational framework for structural mechanics and flexible multibody dynamics *4th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*, Jyväskylä, Finnland, 27.07.2004.

Veröffentlichungen zur Thematik des Forschungsvorhabens

1. Groß M. Numerische Untersuchungen diskreter dynamischer System im Rahmen der Petrov-Galerkin-Methode. Studienarbeit, *UKL/LTM Report*, U99-01, Technische Universität Kaiserslautern, 1999.
2. Betsch P. and Steinmann P. Inherently Energy Conserving Time Finite Elements for Classical Mechanics. *Journal of Computational Physics*, 160:88-116, 2000.
3. Betsch P. and Steinmann P. Conservation Properties of a Time FE Method. Part I: Time-Stepping Schemes for N-Body Problems. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 49:599-638, 2000.
4. Groß M. Time-Stepping Schemes for Nonlinear Hamiltonian Systems Based on the Discontinuous Galerkin Method. Diplomarbeit, *UKL/LTM Report*, U00-02, Technische Universität Kaiserslautern, 2000.
5. Groß M., Betsch P. and Steinmann P. Comparison of Galerkin Methods Applied to Classical Mechanics. *UKL/LTM Report*, J00-07, Technische Universität Kaiserslautern, 2000.
6. Betsch P. and Steinmann P. Conservation Properties of a Time Finite Element Method. Part II: Time-Stepping Schemes for Nonlinear Elastodynamics. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 50:1931-1955, 2001.
7. Betsch P. and Steinmann P. Constrained Integration of Rigid Body Dynamics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, 191:467-488, 2001.
8. Steinmann P. and Betsch P.. Constrained Mechanical Systems. I. A New Galerkin-based Time Integrator. *Proceedings of Trends in Computational Structural Mechanics*, 557-566, Schloss Hofen, Lochau, Austria, 20-23.05.2001.
9. Betsch P. and Steinmann P. Constrained Mechanical Systems. II. Rigid body dynamics. *Proceedings of Trends in Computational Structural Mechanics*, 567-575, Schloss Hofen, Lochau, Austria, 20-23.05.2001.
10. Betsch P. and Steinmann P. Galerkin-based Energy-Momentum Schemes for Flexible Multibody Dynamics. *Proceedings of the European Conference on Computational Mechanics (ECCM'01)*, Cracow, Poland, June 26-29.06.2001.
11. Betsch P. and Steinmann P. Conservation Properties of a Time Finite Element Method. Part III: Mechanical Systems with Holonomic Constraints. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 53:2271-2304, 2002.
12. Betsch P. and Steinmann P. Frame-indifferent Beam Finite Elements based upon the Geometrically Exact Beam Theory. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 54:1775-1788, 2002.
13. Betsch P. and Steinmann P. A DAE Approach to Flexible Multibody Dynamics. *Multibody System Dynamics*, 8:367-391, 2002.
14. Betsch P. Computational Methods for Flexible Multibody Dynamics, Habilitationsschrift, *UKL/LTM Report*, T 02-02, Mai 2002.
15. Betsch P. and Steinmann P. Constrained dynamics of geometrically exact beams. *Computational Mechanics*, 31:49-59, 2003.
16. Leyendecker S., Betsch P. and Steinmann P. Energy-conserving integration of constrained Hamiltonian systems - a comparison of approaches. *Computational Mechanics*, 33:174-185, 2004.
17. Menzel A., Betsch P., Stein E., Steinann P. Konzepte der Numerik endlicher Rotationen. *Technische Mechanik*, 24(1):61-66, 2004.
18. Betsch P. A unified approach to the energy-consistent numerical integration of nonholonomic mechanical systems and flexible multibody dynamics, *GAMM Mitteilungen*, 27:66-87, 2004.

19. Gross M. Conserving Time Integrators for Nonlinear Elastodynamics. Dissertation, *UKL/LTM Report*, T 04-01, März 2004.
20. Gross M., Betsch P. and Steinmann P. Conservation properties of a time FE method – part IV: Higher order energy and momentum conserving schemes. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 63, 1849-1897, 2005.

Literatur

- [1] Richtmyer R.B. and Morton K.W. Difference Methods for Initial-Value Problems. *Interscience*, New York, 1967.
- [2] Betsch P. and Steinmann P. Conservation Properties of a Time FE Method. Part I: Time-Stepping Schemes for N-Body Problems. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 49:599–638, 2000.
- [3] Betsch P. and Steinmann P. Conservation Properties of a Time FE Method. Part II: Time-Stepping Schemes for Nonlinear Elastodynamics. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 50:1931–1955, 2001.
- [4] Betsch P. and Steinmann P. Conservation Properties of a Time FE Method. Part III: Mechanical Systems with Holonomic Constraints, *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 53:2271–2304, 2002.
- [5] Hairer E. and Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff Problems. *Springer*, 1991.
- [6] Simo J.C., Tarnow N., and Wong K.K. Exact Energy-Momentum Conserving Algorithms and Symplectic Schemes for Nonlinear Dynamics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, (100):63–116, 1992.
- [7] Dahlquist G. A special stability problem for linear multistep methods. *BIT*, (3):27–43, 1963.
- [8] Dahlquist G. and Björck Å. *Numerical Methods*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1974.
- [9] Greenspan D. *Discrete Models*. Addison-Wesley, 1973.
- [10] Hughes T. J. R., Caughey T. K., and Liu W. K. Finite-Element Methods for Nonlinear Elastodynamics which Conserve Energy. *Journal of Applied Mechanics*, 45:366–370, 1978.
- [11] Gonzalez O. *Design and Analysis of Conserving Integrators for Nonlinear Hamiltonian Systems with Symmetry*. Ph.D. Dissertation, SUDAM Report No. 96-x, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, Stanford California, 1996.
- [12] Tarnow N. and Simo J. C. How to render second order time-stepping algorithms fourth order accurate while retaining the stability and conservation properties. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, (115):233–252, 1994.
- [13] De Frutos J. and Sanz-Serna J. M. An Easily Implementable Fourth-Order Method for the Time Integration of Wave Problems. *Journal of Computational Physics*, (103):160–168, 1992.
- [14] Hulme B. L. Discrete Galerkin and Related One-Step Methods for Ordinary Differential Equations. *Mathematics of Computation*, 26(120):881–891, 1972.
- [15] Hulme B. L. One-Step Piecewise Polynomial Galerkin Methods for Initial Value Problems. *Mathematics of Computation*, 26(118):415–426, 1972.
- [16] Eriksson K., Estep D., Hansbo P., and Johnson C. *Computational Differential Equations*. Cambridge University Press, 1996.
- [17] Betsch P. and Steinmann P. Inherently Energy Conserving Time Finite Elements for Classical Mechanics. *Journal of Computational Physics*, 160:88–116, 2000.
- [18] Betsch P. and Steinmann P. Conservation Properties of a Time FE Method. Part III: Mechanical Systems with Holonomic Constraints. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 53:2271–2304, 2002.
- [19] Betsch P. *Computational Methods for Flexible Multibody Dynamics*. UKL/LTM T 02-02, Department of Mechanical Engineering, University of Kaiserslautern, 2002.
- [20] French D.A. and Schaeffer J.W. Continuous Finite Element Methods Which Preserve Energy Properties for Nonlinear Problems. *Applied Mathematics and Computation*, (39):271–295, 1990.
- [21] Hansbo P. A Note on Energy Conservation for Hamiltonian Systems Using Continuous Time Finite Elements. *Commun. Numer. Meth. Engng.*, (17):863–869, 2001.

- [22] Simo J.C. and Tarnow N. The Discrete Energy-Momentum Method. Conserving Algorithms for Nonlinear Elastodynamics. *Z. angew. Math. Phys.*, (43):757–792, 1992.
- [23] Simo J.C. and Tarnow N. A New Energy and Momentum Conserving Algorithm for The Non-Linear Dynamics of Shells. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 37:2527–2549, 1994.
- [24] Zhong H.G. and Crisfield M.A. An Energy Conserving Co-rotational Procedure for the Dynamics of Shell Structures. *Engrg. Comput.*, 15(5):552–576, 1998.
- [25] Laursen T. A. and Meng X. N. A New Solution Procedure for Application of Energy-Conserving Algorithms to General Constitutive Models in Nonlinear Elastodynamics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190:6309–6322, 2001.
- [26] Tarnow N. *Energy and Momentum Conserving Algorithms for Hamiltonian Systems in the Nonlinear Dynamics of Solids*. Ph.D. Dissertation, SUDAM Report No. 93-4, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, Stanford California, 1993.
- [27] Greenspan D. Conservative Numerical Methods for $\ddot{x} = f(x)$. *Journal of Computational Physics*, 56:28–41, 1984.
- [28] Greenspan D. Completely Conservative, Covariant Numerical Methodology. *Computers and Mathematics with Applications*, 29(4):37–43, 1995.
- [29] LaBudde R. A. and Greenspan D. Energy and Momentum Conserving Methods of Arbitrary Order for the Numerical Integration of Equations of Motion, I. Motion of a Single Particle. *Numer. Math.*, 25:323–346, 1976.
- [30] LaBudde R. A. and 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. *Numer. Math.*, 26:1–16, 1976.
- [31] LaBudde R. A. and Greenspan D. Discrete Mechanics - A General Treatment. *Journal of Computational Physics*, 15:134–167, 1974.
- [32] Simo J. C. and Gonzalez O. Assessment of Energy-Momentum and Symplectic Schemes for Stiff Dynamical Systems. In *American Society of Mechanical Engineers*, New Orleans, Louisiana, 1993. ASME Winter Annual Meeting.
- [33] Gonzalez O. Time Integration and Discrete Hamiltonian Systems. *Journal of Nonlinear Science*, 6:449–467, 1996.
- [34] Gonzalez O. Exact Energy and Momentum Conserving Algorithms for General Models in Nonlinear Elasticity. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, (190):1763–1783, 2000.
- [35] Gonzalez O. and Simo J. C. On the Stability of Symplectic and Energy-Momentum Algorithms for Nonlinear Hamiltonian Systems with Symmetry. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, (134):197–222, 1996.
- [36] Wendlandt J.M. Mechanical Integrators Derived from a Discrete Variational Principle. *Physica D*, (106):223–246, 1997.
- [37] Kane C., Marsden J.E., Ortiz M., and West M. Variational integrators and the Newmark algorithm for conservative and dissipative mechanical systems. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, (49):1295–1325, 2000.
- [38] Kane C., Marsden J.E., and Ortiz M. Symplectic-energy-momentum preserving variational integrators. *Journal of Mathematical Physics*, 40(7):3353–3371, 1999.
- [39] Zhong G. and Marsden J.E. Lie Poisson Hamilton Jacobi Theory and Lie Poisson Integrators. *Physics Letters A*, 133(3):134–139, 1988.

- [40] Lew A., Marsden J.E., Ortiz M., and West M. Asynchronous Variational Integrators. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 167(2):85–146, 2003.
- [41] Stuart A. M. and Humphries A. R. *Dynamical Systems and Numerical Analysis*. Cambridge University Press, 1998.
- [42] Sanz Serna J.M. Runge-Kutta Schemes for Hamiltonian Systems. *BIT*, 28:877–883, 1988.
- [43] Crisfield M.A. A Consistent Co-rotational Formulation for Non-linear, Three-Dimensional, Beam-Elements. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 81:131-150, 1990.
- [44] Crisfield M.A. and Shi J. A Co-rotational Element/Time-Integration Strategy for Non-linear Dynamics. *Int. J. Numer. Meth. Engrg.*, 37:1897-1913, 1994.
- [45] Crisfield M.A. and Shi J. An Energy Conserving Co-rotational Procedure for Nonlinear Dynamics with Finite Elements. *Nonlinear Dynamics*, 9:37-52, 1996.
- [46] Ascher U.M. and Reich S. On Some Difficulties in Integrating Highly Oscillatory Hamiltonian Systems. *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, (4):281–296, 1998.
- [47] Armero F. and Romero I. On the formulation of high-frequency dissipative time-stepping algorithms for nonlinear dynamics. Part I: low-order methods for two model problems and nonlinear elastodynamics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190:2603–2649, 2001.
- [48] Armero F. and Romero I. On the formulation of high-frequency dissipative time-stepping algorithms for nonlinear dynamics. Part II: second order methods. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190:6783–6824, 2001.
- [49] Simo J. C. and Gonzalez O. Recent Results On The Numerical Integration Of Infinite-Dimensional Hamiltonian Systems. In Hughes T.J.R., Onate E., and Zienkiewicz O.C., editors, *Recent Developments in Finite Element Analysis*, pages 255–271, Barcelona, Spain, 1994. International Center of Numerical Methods in Engineering.
- [50] Groß M. *Conserving Time Integrators for Nonlinear Elastodynamics*. Ph.D. Dissertation, UKL/LTM T 04-01, Department of Mechanical Engineering, University of Kaiserslautern, 2004.
- [51] Sanz Serna J.M. Symplectic Integrators for Hamiltonian Problems: An Overview. *Acta Numerica*, 1:243–286, 1992.
- [52] Bauchau O. A. and Bottasso C. L. On the design of energy preserving and decaying schemes for flexible, nonlinear multi-body systems. *Comp. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 169:61–79, 1999.
- [53] Bottasso C. L. Borri M. and Trainelli L. Integration of elastic multibody systems by invariant conserving/dissipating algorithms. II. Numerical schemes and applications. *Comp. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190:3701–3733, 2001.