

# **Galerkin basierte Zeitintegratoren für die nichtlineare Elastodynamik**

## **Arbeitsbericht**

August 2000 - April 2002

DFG-Geschäftszeichen: STE 544/13-1

Kennwort: Zeitintegratoren

Bearbeiter

**Dipl.-Ing. Michael Groß**

Antragsteller

**Prof. Dr.-Ing. Paul Steinmann**

**Dr.-Ing. Peter Betsch**

April 2002

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Vorgehensweise</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Räumliche FE-Diskretisierung</b>	<b>4</b>
3.1	Semidiskrete Hamiltonsche Formulierung . . . . .	4
3.2	Erhaltungsgrößen . . . . .	6
<b>4</b>	<b>Zeitliche FE-Diskretisierung</b>	<b>7</b>
4.1	Zeitschrittverfahren . . . . .	7
4.2	Erhaltungsgrößen . . . . .	8
<b>5</b>	<b>Lineare zeitliche finite Elemente</b>	<b>12</b>
5.1	Modifikation der inneren Knotenkraft . . . . .	13
5.2	Modifikation des Quadraturgewichtes . . . . .	14
<b>6</b>	<b>Zeitliche finite Elemente beliebigen Grades</b>	<b>15</b>
6.1	Modifikation der Quadraturgewichte . . . . .	15
6.2	Modifikation der Ableitung . . . . .	16
<b>7</b>	<b>Numerische Untersuchungen</b>	<b>17</b>
7.1	Lineare zeitliche finite Elemente in der Elastodynamik . . . . .	18
7.2	Quadratische zeitliche finite Elemente beim Einkörperproblem . . . . .	19
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>23</b>
<b>9</b>	<b>Ausblick</b>	<b>24</b>
	<b>Vorträge zur Thematik des Forschungsvorhabens</b>	<b>29</b>
	<b>Veröffentlichungen zur Thematik des Forschungsvorhabens</b>	<b>30</b>
	<b>Literatur</b>	<b>31</b>

# 1 Einleitung

Die numerische Zeitintegration in der nichtlinearen Elastodynamik war in den letzten Jahren Gegenstand verstärkter Forschungsaktivitäten. Wesentlicher Grund hierfür ist, dass häufig eingesetzte Verfahren, deren Eigenschaften bezüglich Stabilität, Energieerhaltung und numerische Dissipation in der linearen Elastodynamik bekannt sind, in der nichtlinearen Elastodynamik zu schlechten oder sogar physikalisch falschen Ergebnissen führen können. Neuere Untersuchungen zeigen, dass im Rahmen der nichtlinearen Theorie die korrekte numerische Reproduktion mechanischer Erhaltungsgrößen wie Energie und Drehimpuls, zentrale Qualitätsmerkmale eines Zeitintegrators sind. Zeitintegratoren die diese Erhaltungseigenschaften besitzen, werden im folgenden als *mechanische Integratoren* bezeichnet.

Die in den letzten Jahren für die nichtlineare Elastodynamik entwickelten mechanischen Integratoren basieren ausschließlich auf finiten Differenzenverfahren. Daher ist das Ziel dieses Forschungsvorhabens die Entwicklung mechanischer Integratoren auf der Grundlage einer zeitlichen FE-Diskretisierung. Die Vorarbeiten [2, 3] der Antragsteller zeigten, dass diese Vorgehensweise eine systematische Entwicklung mechanischer Integratoren beliebiger Genauigkeitsordnung erlaubt.

Die konzeptionell neue Vorgehensweise beruht auf einer zeitlichen FE-Diskretisierung der nichtlinearen, endlich-dimensionalen Bewegungsgleichungen in Hamiltonscher Form, die auf eine inhärent energieerhaltende FE-Formulierung führt. Aus dieser FE-Formulierung resultiert eine Familie von impliziten Einschrittverfahren, bei denen im Hinblick auf die algorithmischen Erhaltungseigenschaften die numerische Auswertung von Zeitintegralen eine zentrale Rolle spielt. Neben der Anwendung gängiger Quadraturformeln besteht die Möglichkeit neue konsistente Quadraturformeln zu konstruieren, die die algorithmische Energie- und Drehimpulserhaltung sichert. Die inhärent energieerhaltende FE-Formulierung liefert hierbei Designkriterien für die Konstruktion der neuen Quadraturformeln. Die Entwicklung neuer Quadraturformeln, die auf energie- und drehimpulserhaltende, implizite Einschrittverfahren führen, ist somit zentraler Bestandteil des Forschungsvorhabens. Die so erhaltenen neuen Zeitschrittverfahren werden in das am LTM vorhandene FE-Forschungsprogramm implementiert und deren algorithmische Erhaltungseigenschaften sowie deren Genauigkeit an repräsentativen Beispielen der nichtlinearen Elastodynamik verifiziert.

## 2 Vorgehensweise

Zuerst werden die endlich-dimensionalen (semidiskreten) Bewegungsgleichungen durch eine räumliche Diskretisierung der nichtlinearen Elastodynamik mit Hilfe von isoparametrischen Verschiebungselementen gewonnen. Die kanonische Form der semidiskreten Bewegungsgleichungen, formuliert in den Verschiebungsfreiheitsgraden und den assoziierten Impulsen, bildet somit den Ausgangspunkt für die zeitliche FE-Diskretisierung. Die zugehörige schwache Form ergibt sich durch eine Skalarmultiplikation mit vektoriiellen Testfunktionen und anschließender Integration über das zu betrachtende Zeitintervall. Die zeitliche Approximation der Verschiebungen, Impulsen und Testfunktionen erfolgt dann analog der Vorarbeiten [2, 3] im Rahmen der kontinuierlichen Petrov-Galerkin-Methode.

Anschließend wird im Rahmen des subparametrischen FE-Konzeptes ein zeitliches Referenzelement eingeführt. Die zeitlichen Formfunktionen werden mit Lagrangeschen Polynomen in allgemeiner Form für beliebige Polynomgrade aufgestellt. Während die Raumintegrale wie üblich mit Gaußschen Quadraturregeln berechnet werden, ist die Berechnung der Zeitintegrale der zentrale Bestandteil des Projektes. Integrale in denen lediglich die Formfunktionen auftreten, können unmittelbar exakt berechnet werden. Die Integrale in denen neben Formfunktionen auch die inneren Knotenkräfte der räumlichen Diskretisierung vorkommen, sind mit Quadraturregeln zu approximieren. Als Materialmodelle werden allgemeine hyperelastische Stoffgesetze verwendet.

Aus dem erhaltenen impliziten algebraischen Gleichungssystem resultieren nach einer Vorgabe des Polynomgrades  $k$  der zeitlichen FE-Approximation, verbunden mit einer konkreten Wahl einer Integrationsregel zur Berechnung der Zeitintegrale, spezifische Zeitschrittalgorithmen. Es wird nun wie folgt vorgegangen:

- 1) Zuerst werden lineare Zeitelemente ( $k = 1$ ) untersucht. Als denkbar einfachstes konstitutives Modell wird das St. Venant-Kirchhoff Modell eingesetzt und anschließend beliebige hyperelastische Stoffgesetze betrachtet. Die Wahl der Integrationsmethode führt nun auf folgende Arbeiten:
  - 1.1) Implementierung in das FE-Forschungsprogramm am LTM:  
Dabei werden die Zeitintegrale zuerst mit gewöhnlichen Gaußschen Quadraturformeln approximiert. Für die räumliche FE-Approximation werden bilineare Verschiebungselemente benutzt. Durch eine Berechnung zweidimensionaler Beispiele wird die inhärente Energieerhaltungseigenschaft der zugrundeliegenden FE-Formulierung und die Genauigkeitsordnung verifiziert.

1.2) Entwicklung neuer energie- und drehimpulserhaltender Quadraturformeln:

Dazu werden zunächst die Designkriterien für eine Erhaltung von Drehimpuls und Energie abgeleitet. Basierend auf diesen Designkriterien werden Quadraturformeln konstruiert. Anhand numerischer Beispiele wird die Genauigkeitsordnung festgestellt. Weiterhin wird untersucht, ob bereits bekannte Erhaltungsalgorithmen, die auf der Finiten-Differenzen-Methode basieren, als Spezialfall der resultierenden Zeitschrittverfahren enthalten sind.

2) Zweitens werden theoretisch beliebige Polynomgrade betrachtet. Praktisch werden quadratische Zeitelemente untersucht und entsprechend den Punkten 1.1) und 1.2) verfahren.

### 3 Räumliche FE-Diskretisierung

Die hier untersuchte zeitliche FE-Methode basiert auf der Betrachtung eines endlich-dimensionalen nichtlinearen Hamiltonschen Systems. Bei Betrachtung der nichtlinearen Elastodynamik wird deshalb zuerst eine räumliche FE-Diskretisierung des betrachteten Körpers durchgeführt (siehe auch [4]). Daraus erhalten wir die Hamiltonschen Gleichungen in semidiskreter Form, mit denen wir dann die Erhaltungssätze bezüglich Gesamtenergie, Gesamtdrehimpuls und Gesamtimpuls für den räumlich diskretisierten Körper formulieren.

#### 3.1 Semidiskrete Hamiltonsche Formulierung

Wir betrachten die Bewegung eines Körpers  $\mathcal{B}$  in einem  $n_{dim}$ -dimensionalen Euklidischen Raum mit  $n_{dim} \leq 3$  im Zeitintervall  $I_t = [0, T]$ . Die Bewegung beginnt mit der Referenzkonfiguration  $\mathcal{B}_0$  zum Zeitpunkt  $t = t_0$ . Ein beliebiger Zustand  $\mathbf{x}(t)$  des Körpers für  $t > 0$  geht aus der Referenzkonfiguration  $\mathcal{B}_0$  durch die Deformationsabbildung  $\varphi(\mathbf{X}, t)$  hervor. Dabei bezeichnet  $\mathbf{X}$  die Position des Körpers in der Referenzkonfiguration  $\mathcal{B}_0$  (materielle Formulierung). Die Approximation dieser Abbildung nach dem verschiebungsbasierten FE-Konzept (siehe [20]) ist

$$\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X}, t) = \sum_{A=1}^{n_{node}} N_A(\mathbf{X}) \mathbf{q}^A(t). \quad (1)$$

wobei über die räumlichen Knoten  $A = 1, \dots, n_{node}$  summiert wurde und  $N_A$  bzw.  $\mathbf{q}^A$  die zugehörigen globalen Formfunktionen bzw. Positionsvektoren bezeichnen. Die materielle Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  ist somit

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \sum_{A=1}^{n_{node}} N_A \dot{\mathbf{q}}^A. \quad (2)$$

Aus der Deformationsabbildung (1) resultiert der Deformationsgradient

$$\mathbf{F} = \nabla \varphi = \sum_{A=1}^{n_{node}} \mathbf{q}^A \otimes \nabla N_A. \quad (3)$$

Als Verzerrungsmaß dient der rechte Cauchy-Green-Tensor

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \sum_{A,B=1}^{n_{node}} \mathbf{q}^A \cdot \mathbf{q}^B \nabla N_A \otimes \nabla N_B. \quad (4)$$

Im Rahmen der nichtlinearen Elastodynamik betrachten wir hyperelastische Materialien, deren symmetrischer zweiter Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor  $\mathbf{S}$  sich aus der skalarwertigen Verzerrungsenergiedichte  $W(\mathbf{C})$  ableitet:

$$\mathbf{S} = 2 \nabla W(\mathbf{C}). \quad (5)$$

Die innere potentielle Energie (Verzerrungsenergie)  $V_{int}$  bzw. die potentielle Energie  $V_{ext}$  der konservativen äußeren Kräfte ist gegeben durch

$$V_{int} = \int_{\mathcal{B}_0} W(\mathbf{C}) \, dV \quad \text{bzw.} \quad V_{ext} = - \int_{\mathcal{B}_0} \rho_R \mathbf{b} \cdot \varphi \, dV - \int_{\partial \mathcal{B}_0} \mathbf{t} \cdot \varphi \, dA, \quad (6)$$

mit den Massenkraften  $\mathbf{b}$ , dem Oberflächenspannungsvektor  $\mathbf{t}$  und der Dichte  $\rho_R$  in der Referenzkonfiguration. Die Deformationsabbildung (1) führt dann auf

$$V_{ext} = - \sum_{A=1}^{n_{node}} \mathbf{q}^A \cdot \mathbf{F}_{ext}^A. \quad (7)$$

mit den äußeren Knotenkräften

$$\mathbf{F}_{ext}^A = \int_{B_0} N_A \rho_R \mathbf{b} \, dV + \int_{\partial B_0} N_A \mathbf{t} \, dA. \quad (8)$$

Fasst man die Knotenkoordinaten  $\mathbf{q}^A$  und die äußeren Knotenkräfte  $\mathbf{F}_{ext}^A$  in den Vektoren

$$\mathbf{q}^T = [(\mathbf{q}^1)^T \dots (\mathbf{q}^{n_{node}})^T] \quad (9)$$

$$\mathbf{F}_{ext}^T = [(\mathbf{F}_{ext}^1)^T \dots (\mathbf{F}_{ext}^{n_{node}})^T] \quad (10)$$

zusammen, so erhält man

$$V_{ext} = -\mathbf{q} \cdot \mathbf{F}_{ext}. \quad (11)$$

Die kinetische Energie  $T$  des Körpers wird aus der materiellen Geschwindigkeit (2) berechnet.

$$T = \frac{1}{2} \int_{B_0} \rho_R \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \, dV = \frac{1}{2} \sum_{A,B=1}^{n_{node}} M_{AB} \dot{\mathbf{q}}^A \cdot \dot{\mathbf{q}}^B \quad \text{mit} \quad M_{AB} = \int_{B_0} \rho_R N_A N_B \, dV. \quad (12)$$

Werden die Komponenten  $M_{AB}$  in der Massenmatrix  $\mathbf{M} = \{M_{AB} \mathbf{I}_{n_{dim}}\}_{A,B=1}^{n_{node}}$  zusammengefasst, so hat die kinetische Energie die Form

$$T = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{M} \dot{\mathbf{q}}. \quad (13)$$

Aus der Lagrangeschen Funktion  $L = T - V_{int} - V_{ext}$  erhält man den generalisierten Knotenimpulsvektor

$$\mathbf{p} = \nabla_{\dot{\mathbf{q}}} L = \mathbf{M} \dot{\mathbf{q}}, \quad (14)$$

wobei  $\mathbf{p}^T = [(\mathbf{p}^1)^T \dots (\mathbf{p}^{n_{node}})^T]$  die Knotenimpulse  $\mathbf{p}^A$  enthält. Die Hamiltonsche Funktion  $H$  folgt aus einer Legendre-Transformation von  $L$  bezüglich des generalisierten Knotengeschwindigkeitsvektors  $\dot{\mathbf{q}}$  und hat somit die Form

$$H = \frac{1}{2} \mathbf{p} \cdot \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p} + V_{int} + V_{ext}. \quad (15)$$

Die inverse Massenmatrix hat dabei die Form  $\mathbf{M}^{-1} = \{M_{AB}^{-1} \mathbf{I}_{n_{dim}}\}_{A,B=1}^{n_{node}}$  mit den Komponenten  $M_{AB}^{-1}$ .

Aus der Hamiltonschen Funktion (15) resultieren die folgenden semidiskreten Hamiltonschen Gleichungen der Bewegung der räumlichen Knoten des Körpers  $\mathcal{B}$ :

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \nabla_{\mathbf{p}} H = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p}, \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\nabla_{\mathbf{q}} H = \mathbf{F}_{ext} - \mathbf{F}_{int}, \end{aligned} \quad (16)$$

mit dem inneren Knotenkraftvektor

$$\mathbf{F}_{int} = \nabla_{\mathbf{q}} V_{int} = \int_{B_0} \nabla W(\mathbf{C}) : \nabla_{\mathbf{q}} \mathbf{C} \, dV = \mathbf{Q} \mathbf{q}. \quad (17)$$

Die Matrix  $\mathbf{Q}$  hat die Form  $\mathbf{Q} = \{Q_{AB} \mathbf{I}_{n_{dim}}\}_{A,B=1}^{n_{node}}$  wobei die Komponenten  $Q_{AB}$  gegeben sind durch

$$Q_{AB} = \int_{B_0} S_{AB} \, dV \quad \text{mit} \quad S_{AB} = \mathbf{S} : \nabla N_A \otimes \nabla N_B. \quad (18)$$

## 3.2 Erhaltungsgrößen

In diesem Abschnitt werden die Sätze zur Erhaltung der Gesamtenergie, des Gesamtdrehimpulses und des Gesamtimpulses der räumlichen Diskretisierung des Körpers  $\mathcal{B}$  unter Verwendung der semidiskreten Hamiltonschen Gleichungen (16) aufgestellt.

**Energieerhaltung.** Die Bewegung des Körpers  $\mathcal{B}$  wird mit Koordinaten bezüglich eines inertialen Bezugssystems beschrieben. Weiterhin liegen neben skleronomen und holonomen Zwangsbedingungen auch nur konservative Kräfte vor. Somit ist nach dem Eulerschen Theorem für homogene Funktionen die Gesamtenergie mit der Hamiltonschen Funktion identisch [22]. Die zeitliche Differentiation der Hamiltonschen Funktion (15) ergibt

$$\dot{H} = \dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p} + [\mathbf{Q} \mathbf{q} - \mathbf{F}_{ext}] \cdot \dot{\mathbf{q}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{F}}_{ext}. \quad (19)$$

Durch Einsetzen der semidiskreten Hamiltonschen Gleichungen (16) in Gleichung (19) erhält man  $\dot{H} = 0$  und damit eine konstante Gesamtenergie, wenn die wirkenden äußeren Kräfte nicht explizit von der Zeit abhängen. ■

**Drehimpulserhaltung.** Der Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{L}$  der räumlichen Diskretisierung bezüglich des Ursprungs des inertialen Bezugssystems ist

$$\mathbf{L} = \int_{\mathcal{B}_0} \rho_R \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{v} \, dV = \sum_{A=1}^{n_{node}} \mathbf{q}^A \times \mathbf{p}^A. \quad (20)$$

Differenziert man den Drehimpuls (20) nach der Zeit, so erhält man

$$\dot{\mathbf{L}} = \sum_{A=1}^{n_{node}} [\dot{\mathbf{q}}^A \times \mathbf{p}^A + \mathbf{q}^A \times \dot{\mathbf{p}}^A]. \quad (21)$$

Unter Berücksichtigung der Symmetrie von  $M_{AB}^{-1}$  und  $Q_{AB}$  verschwinden aufgrund der Schiefsymmetrie des Vektorproduktes folgende Summen:

$$\sum_{A,B=1}^{n_{node}} M_{AB}^{-1} \mathbf{p}^B \times \mathbf{p}^A = \mathbf{0} \quad \text{und} \quad \sum_{A,B=1}^{n_{node}} Q_{AB} \mathbf{q}^B \times \mathbf{q}^A = \mathbf{0}. \quad (22)$$

Setzt man die semidiskreten Hamiltonschen Gleichungen (16) in Gleichung (21) ein und berücksichtigt die Gleichungen (22), so erhält man  $\dot{\mathbf{L}} = \mathbf{T}$  mit dem angreifenden Moment

$$\mathbf{T} = \sum_{A=1}^{n_{node}} \mathbf{q}^A \times \mathbf{F}_{ext}^A. \quad (23)$$

Der Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{L}$  bleibt somit erhalten, wenn keine äußeren Kräfte  $\mathbf{F}_{ext}^A$  angreifen. ■

**Impulserhaltung.** Der Gesamtimpuls  $\mathbf{P}$  der räumlichen Diskretisierung ist gegeben als

$$\mathbf{P} = \int_{\mathcal{B}_0} \rho_R \mathbf{v} \, dV. \quad (24)$$

Da wir für die globalen Formfunktionen  $N_A$  Lagrangesche Polynome verwenden, ist die folgende Bedingung erfüllt:

$$\sum_{A=1}^{n_{node}} N_A = 1. \quad (25)$$

Diese Bedingung beschreibt die Vollständigkeit der Interpolation durch Lagrangesche Polynome (siehe [20]). Nach Einsetzen der semidiskreten Hamiltonschen Gleichung (16.2) und der Berücksichtigung der Vollständigkeitsbedingung (25), folgt

$$\mathbf{P} = \sum_{A=1}^{n_{node}} \mathbf{p}^A. \quad (26)$$

Zeitliche Differentiation des Impulses (26) und anschließendes Einsetzen der semidiskreten Hamiltonschen Gleichung (16.2) ergibt

$$\dot{\mathbf{P}} = \mathbf{N} - \sum_{A=1}^{n_{node}} \mathbf{F}_{int}^A = \mathbf{N} - \int_{\mathcal{B}_0} \nabla \left( \sum_{A=1}^{n_{node}} N_A \right) \cdot \mathbf{S} \sum_{B=1}^{n_{node}} \nabla N_B dV \mathbf{q}^B. \quad (27)$$

mit der angreifenden Gesamtkraft

$$\mathbf{N} = \sum_{A=1}^{n_{node}} \mathbf{F}_{ext}^A. \quad (28)$$

Durch die Vollständigkeitsbedingung (25) verschwindet die Summe der inneren Knotenkräfte und es folgt  $\dot{\mathbf{P}} = \mathbf{N}$ . Somit ist der Impuls während der Bewegung konstant, wenn keine äußeren Kräfte auf die räumliche Diskretisierung einwirken. ■

## 4 Zeitliche FE-Diskretisierung

In Kapitel 3 wurden die semidiskreten Hamiltonschen Gleichungen aus der räumlichen Diskretisierung des Körpers  $\mathcal{B}$  gewonnen. Das Zeitschrittverfahren zur Lösung der Hamiltonschen Gleichungen wird jetzt durch eine zeitliche Diskretisierung der semidiskreten Hamiltonschen Gleichungen mit der Petrov-Galerkin-Methode bestimmt (siehe [4]). Anschließend werden die Erhaltung von Gesamtenergie, Gesamtdrehimpuls und Gesamtimpuls nach jedem Zeitschritt untersucht.

### 4.1 Zeitschrittverfahren

Zur Anwendung der Petrov-Galerkin-Methode auf die semidiskreten Hamiltonschen Gleichungen wird auf die symplektische Notation übergegangen (siehe [8]). Die Variable in der symplektischen Notation ist der Vektor  $\mathbf{z} = [\mathbf{q}^T \ \mathbf{p}^T]^T$ . Die semidiskreten Hamiltonschen Gleichungen (16) haben nun die Form

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{J} \nabla H(\mathbf{z}) \quad (29)$$

mit der symplektischen Matrix bzw. Jacobimatrix

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \mathbf{O} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{O} \end{bmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \nabla H(\mathbf{z}) = \begin{bmatrix} \mathbf{Q} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{M}^{-1} \end{bmatrix} \mathbf{z} - \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{ext} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}. \quad (30)$$

Die Matrix  $\mathbf{O}$  bzw.  $\mathbf{I}$  bezeichnet die Null- bzw. Einheitsmatrix und  $\mathbf{0}$  ist der Nullvektor.

Wir diskretisieren das betrachtete Zeitintervall  $I_t = [0, T]$  durch Betrachtung der Zeitpunkte  $0 < t_1 < \dots < t_{n-1} < t_n < T$  und erhalten somit globale Zeitelemente  $I_n = [t_{n-1}, t_n]$  der Länge  $h_n = t_n - t_{n-1}$ . Nach der elementorientierten Betrachtungsweise führen wir mit der Transformation

$$T: \alpha(t) = \frac{t - t_{n-1}}{h_n} \quad (31)$$

ein Masterelement  $I_\alpha = [0, 1]$  ein. Somit haben wir die Petrov-Galerkin-Methode bezüglich der folgenden Differentialgleichung anzuwenden:

$$\frac{d\mathbf{z}}{d\alpha} = h_n \mathbf{J} \nabla H(\mathbf{z}). \quad (32)$$

Die schwache Form dieser Differentialgleichung bezüglich des Masterelementes  $I_\alpha$  ist gegeben durch

$$\int_0^1 \mathbf{J} \delta \mathbf{z}^h \cdot \left[ \frac{d\mathbf{z}^h}{d\alpha} - h_n \mathbf{J} \nabla H(\mathbf{z}^h) \right] d\alpha = 0, \quad (33)$$

wobei

$$\delta \mathbf{z}^h(\alpha) = \sum_{I=1}^k \tilde{M}_I(\alpha) \delta \mathbf{z}_I \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{z}^h(\alpha) = \sum_{I=1}^{k+1} M_I(\alpha) \mathbf{z}_I \quad (34)$$

die Approximationen der Test- bzw. Lösungsfunktion darstellt. Die Vektoren  $\delta z_I$  und  $z_I$  bezeichnen die Werte an den Knoten  $\alpha_I$ ,  $I = 1, \dots, k + 1$ . Die Knoten  $\alpha_I$  sind äquidistant auf dem Masterelement verteilt, beginnend bei  $\alpha = 0$  und endend bei  $\alpha = 1$ . Die Formfunktionen  $\tilde{M}_I$  bzw.  $M_I$  sind Lagrangesche Polynome vom Grad  $k - 1$  bzw.  $k$ . Wir bezeichnen die Funktionen  $\tilde{M}_I$  im folgenden als die *reduzierten Formfunktionen*. Mit Hilfe der reduzierten Formfunktionen gilt:

$$\frac{dz^h}{d\alpha} = \sum_{I=1}^k \tilde{M}_I(\alpha) \tilde{z}_I. \quad (35)$$

wobei  $\tilde{z}_I$  Linearkombinationen der Knotenwerte  $z_I$  sind. Im folgenden nennen wir die Knotenwerte  $\tilde{z}_I$  die *reduzierten Knotenwerte*. Einsetzen der Funktionen (34) in die schwache Form (33) ergibt das folgende algebraische Gleichungssystem:

$$\sum_{J=1}^k \int_0^1 \tilde{M}_I \tilde{M}_J d\alpha \tilde{z}_J - h_n \int_0^1 \tilde{M}_I \mathbf{J} \nabla H(z^h) d\alpha = \mathbf{0}, \quad (36)$$

für  $I = 1, \dots, k$ .

Die zeitliche FE-Methode (36) soll im Weiteren in Anlehnung an die Terminologie in [6] als *cG(k)-Methode* bezeichnet werden.

## 4.2 Erhaltungsgrößen

Um aus dem algebraischen Gleichungssystem der cG(k)-Methode energie- und drehimpulserhaltende implizite Einzschrittverfahren zu gewinnen, benötigen wir Designkriterien. Folglich werden mathematische Beweise formuliert die Aufschluss darauf geben unter welchen Bedingungen die Gesamtenergie, der Gesamtdrehimpuls und der Gesamtimpuls nach jedem Zeitschritt erhalten bleiben. Die physikalische Bedingung der notwendigen Abwesenheit von äußeren Kräften  $\mathbf{F}_{ext}$  sei erfüllt.

Die Beweise für die Erhaltungsgrößen lassen sich analog zu den Beweisen bezüglich der semidiskreten Formulierung in Abschnitt 3.2 formulieren, wenn man zuerst zeigt, dass die cG(k)-Methode eine *Kollokationsmethode* ist. Dies bedeutet, dass die algebraischen Gleichungen der cG(k)-Methode die zugrundeliegende Differentialgleichung (starke Form) in den Quadraturpunkten exakt erfüllen.

**Kollokation.** Wir betrachten die algebraischen Gleichungen (36) der cG(k)-Methode. Das erste Integral enthält nur ein Polynom vom Grad  $2k - 2$ . Die Integration könnte somit exakt durchgeführt werden. Wird jedoch die exakte Integration durch eine Quadraturformel  $I_h$  der Form

$$I_h \{f\} = \sum_{l=1}^{N_q^\alpha} f(\xi_l) w_l \quad (37)$$

mit  $N_q^\alpha$  Quadraturpunkten  $\xi_l$ ,  $l = 1, \dots, N_q^\alpha$ , und den assoziierten Gewichten  $w_l$  ersetzt, so ist das Ergebnis nur unter Verwendung von  $N_q^\alpha \geq k$  Radau- bzw. Gaußpunkten mit den Ordnungen  $\mathcal{O}(h_n^{2N_q^\alpha - 1})$  bzw.  $\mathcal{O}(h_n^{2N_q^\alpha})$  oder mit  $N_q^\alpha \geq k + 1$  Lobattopunkten (Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^{2N_q^\alpha - 2})$ ) identisch (siehe [17]). Das zweite Integral enthält die im allgemeinen nichtlineare Jacobimatrix  $\nabla H$ . Hier muss eine approximierende Quadraturformel benutzt werden.

Wir ersetzen jetzt die Integrale durch eine Quadraturformel der Form (37) und resubstituieren dazu die Ableitung der Formfunktion in Gleichung (36). Folglich ergibt sich:

$$\sum_{l=1}^{N_q^\alpha} \tilde{M}_I(\xi_l) \left[ \frac{dz^h(\xi_l)}{d\alpha} - h_n \mathbf{J} \nabla H(z^h(\xi_l)) \right] w_l = \mathbf{0}, \quad (38)$$

mit  $I = 1, \dots, k$ . Die  $k$  Gleichungen (38) lassen sich in Matrixschreibweise als ein homogenes lineares Gleichungssystem



stem (LGS) in der Variablen  $\boldsymbol{x}$  mit  $\boldsymbol{x}_l = \mathcal{R}(\xi_l) w_l, l = 1, \dots, N_q^\alpha$ , schreiben:

$$\begin{bmatrix} \tilde{M}_1(\xi_1) & \tilde{M}_1(\xi_2) & \dots & \tilde{M}_1(\xi_{N_q^\alpha}) \\ \tilde{M}_2(\xi_1) & \tilde{M}_2(\xi_2) & \dots & \tilde{M}_2(\xi_{N_q^\alpha}) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \tilde{M}_k(\xi_1) & \tilde{M}_k(\xi_2) & \dots & \tilde{M}_k(\xi_{N_q^\alpha}) \end{bmatrix} \otimes \boldsymbol{I} \begin{bmatrix} \mathcal{R}(\xi_1) w_1 \\ \mathcal{R}(\xi_2) w_2 \\ \vdots \\ \mathcal{R}(\xi_{N_q^\alpha}) w_{N_q^\alpha} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (39)$$

mit

$$\mathcal{R}(\alpha) = \frac{d\boldsymbol{z}^h(\alpha)}{d\alpha} - h_n \boldsymbol{J} \nabla H(\boldsymbol{z}^h(\alpha)). \quad (40)$$

In Gleichung (39) bedeutet  $\otimes$  das direkte Matrizenprodukt und  $\boldsymbol{I}$  die  $n_{dim} \times n_{dim}$  Einheitsmatrix. Demnach ist  $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{(k n_{dim}) \times (N_q^\alpha n_{dim})}$  die Koeffizientenmatrix und  $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{(N_q^\alpha n_{dim})}$  die Unbekannte des homogenen LGS (39).

Damit das homogene LGS (39) eindeutig lösbar ist, muss  $N_q^\alpha = k$  gewählt werden. In diesem Fall besteht die Lösungsmenge nur aus der trivialen Lösung  $\boldsymbol{x}_l = \mathcal{R}(\xi_l) w_l = \mathbf{0}$ , für  $l = 1, \dots, N_q^\alpha = k$ , wenn der Rang der Koeffizientenmatrix gegeben ist durch  $Rg \boldsymbol{A} = k n_{dim}$ . Da für alle  $l$  kein Quadraturgewicht  $w_l$  null ist, folgt daraus

$$\frac{d\boldsymbol{z}^h(\xi_l)}{d\alpha} = h_n \boldsymbol{J} \nabla H(\boldsymbol{z}^h(\xi_l)). \quad (41)$$

für  $l = 1, \dots, k$ . Das heisst die Koeffizientenmatrix  $\boldsymbol{A}$  darf nicht singulär sein. Somit muss abschließend noch gezeigt werden, dass die Determinante  $\det \boldsymbol{A}$  nicht verschwindet.

Da die Determinante der Einheitsmatrix  $\boldsymbol{I}$  eins ist, ist die Determinate des Produktes  $\boldsymbol{B} \otimes \boldsymbol{I}$  gegeben durch  $(\det \boldsymbol{B})^{n_{dim}}$  [30]. Die Determinate  $\det \boldsymbol{A}$  ist damit ungleich null, wenn gilt:

$$\det \boldsymbol{B} = \det \begin{bmatrix} \tilde{M}_1(\xi_1) & \tilde{M}_1(\xi_2) & \dots & \tilde{M}_1(\xi_k) \\ \tilde{M}_2(\xi_1) & \tilde{M}_2(\xi_2) & \dots & \tilde{M}_2(\xi_k) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \tilde{M}_k(\xi_1) & \tilde{M}_k(\xi_2) & \dots & \tilde{M}_k(\xi_k) \end{bmatrix} \neq 0. \quad (42)$$

Da  $\tilde{M}_I, I = 1, \dots, k$ , die Lagrangesche Polynome bezüglich der Knoten  $\alpha_I$  eine Basis des Vektorraumes  $\mathcal{P}(0, 1)$  sind, kann jedes Polynom  $P \in \mathcal{P}(0, 1)$  dargestellt werden als

$$P(\alpha) = \sum_{I=1}^k \tilde{M}_I(\alpha) P(\alpha_I). \quad (43)$$

Somit auch die Monombasis  $\{\alpha^j\}_{j=0}^{k-1}$  des Vektorraumes  $\mathcal{P}(0, 1)$ . Das heisst es gilt für beliebige Knoten  $\alpha_I \in [0, 1]$

$$\alpha^j = \sum_{I=1}^k \tilde{M}_I(\alpha) (\alpha_I)^j, \quad (44)$$

für  $j = 0, \dots, k-1$  (siehe [19]). In Matrixschreibweise haben die  $k$  Gleichungen (44) die folgende Form:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ \alpha^{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ (\alpha_1)^{k-1} & \dots & (\alpha_k)^{k-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{M}_1(\alpha) \\ \vdots \\ \tilde{M}_k(\alpha) \end{bmatrix} \quad (45)$$

Die erste Zeile ist die Vollständigkeitsbedingung bezüglich der Lagrangeschen Polynome  $\tilde{M}_I$ . Die quadratische Matrix in Gleichung (45) ist die sogenannte Vandermondesche Matrix  $\boldsymbol{V}(\alpha_1, \dots, \alpha_k)$ , deren Determinante die folgende Form hat

$$\det \boldsymbol{V}(\alpha_1, \dots, \alpha_k) = \prod_{I>J} (\alpha_I - \alpha_J). \quad (46)$$

Für paarweise verschiedene beliebige  $\alpha_I, I = 1, \dots, k$ , ist die Vandermondesche Matrix somit immer regulär.

Mit Gleichung (45) lässt sich nun die Matrix  $\mathbf{B}$  darstellen als

$$\mathbf{B} = \mathbf{V}^{-1}(\alpha_1, \dots, \alpha_k) \mathbf{V}(\xi_1, \dots, \xi_k), \quad (47)$$

deren Determinante  $\det \mathbf{B}$  gegeben ist durch:

$$\det \mathbf{B} = \prod_{I>J} \frac{\xi_I - \xi_J}{\alpha_I - \alpha_J}. \quad (48)$$

Folglich ist die Matrix  $\mathbf{B}$  für paarweise verschiedene Knoten  $\alpha_I$  und Quadraturpunkte  $\xi_I$ , für  $I = 1, \dots, k$ , regulär.

Das bedeutet letztendlich, dass unter Verwendung von  $k$  paarweise verschiedenen Quadraturpunkten  $\xi_I$  die Koeffizientenmatrix  $\mathbf{A}$  regulär ist und deshalb die Gleichung (41) gültig ist. ■

Die Beweise die die Erhaltung der Energie, des Drehimpulses und des Impulses durch die cG( $k$ )-Methode belegen, verlaufen alle nach einem Schema: Zuerst wird der Hauptsatz der Integral- und Differentialrechnung bezüglich der betrachteten Erhaltungsgröße angewendet. Dann wird das Integral durch eine Quadraturformel ersetzt, und zuletzt die Kollokationseigenschaft der cG( $k$ )-Methode verwendet.

**Energieerhaltung.** Der Hauptsatz der Integral- und Differentialrechnung bezüglich der Hamiltonsche Funktion  $H = T + V$  lautet:

$$H(\mathbf{z}^h(1)) - H(\mathbf{z}^h(0)) = \int_0^1 \frac{dT(\mathbf{p}^h(\alpha))}{d\alpha} d\alpha + \int_0^1 \frac{dV(\mathbf{q}^h(\alpha))}{d\alpha} d\alpha. \quad (49)$$

Das Integral über die Ableitung der kinetischen Energie lässt sich exakt lösen, da der Integrand nur aus einem Polynom vom Grad  $2k - 1$  besteht:

$$\int_0^1 \frac{dT(\mathbf{p}^h(\alpha))}{d\alpha} d\alpha = \int_0^1 \frac{d\mathbf{p}^h(\alpha)}{d\alpha} \cdot \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p}^h(\alpha) d\alpha. \quad (50)$$

Wird in Gleichung (50) das Integral durch eine Quadraturformel  $I_h$  der Form (37) ersetzt, so ist die exakte Berechnung des Integrals nur mittels  $N_q^\alpha = k$  Gaußpunkten gegeben. Denn da das Polynom  $dT/d\alpha$  einen Grad  $2k - 1$  besitzt, wird es nur durch eine Gaußsche Quadraturformel mit der Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^{2k})$  exakt integriert. Für eine Gaußsche Quadratur mit  $k$  Gaußpunkten gilt deshalb:

$$T(\mathbf{p}^h(1)) - T(\mathbf{p}^h(0)) = \int_0^1 \frac{d\mathbf{p}^h(\alpha)}{d\alpha} \cdot \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p}^h(\alpha) d\alpha \equiv \sum_{l=1}^k \frac{d\mathbf{p}^h(\xi_l)}{d\alpha} \cdot \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p}^h(\xi_l) w_l. \quad (51)$$

Da das Potential  $V$  im allgemeinen eine nichtlineare Funktion in  $\alpha$  ist, muss für das zweite Integral in Gleichung (49) eine approximierende Quadraturformel benutzt werden. Damit aber die exakte Integration gewährleistet ist muss folgende Bedingung erfüllt werden:

$$\int_0^1 \frac{dV(\mathbf{q}^h(\alpha))}{d\alpha} d\alpha = I_h \left\{ \frac{dV(\mathbf{q}^h(\alpha))}{d\alpha} \right\}. \quad (52)$$

Mit  $dV/d\alpha = \nabla_{\mathbf{q}} V \cdot d\mathbf{q}/d\alpha$  und einer Gaußschen Quadraturformel gilt somit nach Gleichung (52) das folgende *Designkriterium* für eine energieerhaltende Quadraturregel:

$$\boxed{V(\mathbf{q}^h(1)) - V(\mathbf{q}^h(0)) = \sum_{l=1}^k \nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}^h(\xi_l)) \cdot \frac{d\mathbf{q}^h(\xi_l)}{d\alpha} w_l} \quad (53)$$

Da  $k$  paarweise verschiedene Quadraturpunkte verwendet werden, herrscht bei der cG( $k$ )-Methode Kollokation, so dass die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen in jedem Quadraturpunkt exakt erfüllt werden:

$$\frac{d\mathbf{q}^h(\xi_l)}{d\alpha} = h_n \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p}^h(\xi_l), \quad (54)$$

$$\frac{d\mathbf{p}^h(\xi_l)}{d\alpha} = -h_n \nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}^h(\xi_l)). \quad (55)$$

Nun setzen wir Gleichung (54) bzw. (55) in Gleichung (53) bzw. Gleichung (51) ein:

$$T(\mathbf{p}^h(1)) - T(\mathbf{p}^h(0)) = \frac{1}{h_n} \sum_{l=1}^k \frac{d\mathbf{p}^h(\xi_l)}{d\alpha} \cdot \frac{d\mathbf{q}^h(\xi_l)}{d\alpha} w_l, \quad (56)$$

$$V(\mathbf{q}^h(1)) - V(\mathbf{q}^h(0)) = -\frac{1}{h_n} \sum_{l=1}^k \frac{d\mathbf{p}^h(\xi_l)}{d\alpha} \cdot \frac{d\mathbf{q}^h(\xi_l)}{d\alpha} w_l. \quad (57)$$

Die Addition der beiden Gleichungen (57) und (56) unter Berücksichtigung der Definition der Hamiltonschen Funktion ergibt die Gleichung

$$H(\mathbf{z}^h(1)) - H(\mathbf{z}^h(0)) = 0. \quad (58)$$

Folglich bleibt die Hamiltonsche Funktion  $H$  (die Gesamtenergie des betrachteten Systems) nach jedem Zeitschritt erhalten, wenn  $k$  Gaußpunkte verwendet werden und das Designkriterium (53) erfüllt wird. ■

**Drehimpulserhaltung.** Der Hauptsatz der Integral- und Differentialrechnung angewendet auf die Drehimpulsvektorfunktion  $\mathbf{L}(\mathbf{z}^h(\alpha))$  hat die Form:

$$\mathbf{L}(\mathbf{z}^h(1)) - \mathbf{L}(\mathbf{z}^h(0)) = \int_0^1 \frac{d\mathbf{L}(\mathbf{z}^h(\alpha))}{d\alpha} d\alpha, \quad (59)$$

$$= \int_0^1 \sum_{A=1}^{n_{node}} \frac{d}{d\alpha} [\mathbf{q}^{Ah}(\alpha) \times \mathbf{p}^{Ah}(\alpha)] d\alpha, \quad (60)$$

$$= \int_0^1 \sum_{A=1}^{n_{node}} \left[ \frac{d\mathbf{q}^{Ah}(\alpha)}{d\alpha} \times \mathbf{p}^{Ah}(\alpha) + \mathbf{q}^{Ah}(\alpha) \times \frac{d\mathbf{p}^{Ah}(\alpha)}{d\alpha} \right] d\alpha. \quad (61)$$

Der nächste Schritt ist das Ersetzen des Integrals durch eine Quadraturformel der Form (37). Werden die Lösungsfunktionen  $\mathbf{q}^h$  bzw.  $\mathbf{p}^h$  eingesetzt und die Vektorprodukte ausmultipliziert, so steht vor jedem Vektorprodukt ein Polynom vom Grad  $2k - 1$ . Die Integration kann somit mit  $k$  Gaußpunkten exakt durchgeführt werden. Es gilt somit:

$$\mathbf{L}(\mathbf{z}^h(1)) - \mathbf{L}(\mathbf{z}^h(0)) = \sum_{l=1}^k \sum_{A=1}^{n_{node}} \left[ \frac{d\mathbf{q}^{Ah}(\xi_l)}{d\alpha} \times \mathbf{p}^{Ah}(\xi_l) + \mathbf{q}^{Ah}(\xi_l) \times \frac{d\mathbf{p}^{Ah}(\xi_l)}{d\alpha} \right] w_l. \quad (62)$$

Da aufgrund der Kollokationseigenschaft der cG( $k$ )-Methode die Hamiltonschen Gleichungen in den  $k$  Quadraturpunkten exakt erfüllt werden, gilt bei der Abwesenheit von äußeren Kräften:

$$\frac{d\mathbf{q}^{Ah}(\xi_l)}{d\alpha} = h_n \sum_{B=1}^{n_{node}} M_{AB}^{-1} \mathbf{p}^{Bh}(\xi_l), \quad (63)$$

$$\frac{d\mathbf{p}^{Ah}(\xi_l)}{d\alpha} = -h_n \sum_{B=1}^{n_{node}} Q_{AB}^h(\xi_l) \mathbf{q}^{Bh}(\xi_l). \quad (64)$$

Werden nun die Hamiltonschen Gleichungen (63), (64) unter der Beachtung der Beziehungen (22) in Gleichung (62) eingesetzt, so folgt:

$$\mathbf{L}(\mathbf{z}^h(1)) - \mathbf{L}(\mathbf{z}^h(0)) = \mathbf{0}. \quad (65)$$

Wird also die cG( $k$ )-Methode mit  $k$  Gaußpunkten integriert, so bleibt der Drehimpuls nach jedem Zeitschritt erhalten. ■

**Impulserhaltung.** Zuletzt die Erhaltung des Gesamtimpulses  $\mathbf{P}$  des Körpers:

$$\mathbf{P}(\mathbf{z}^h(1)) - \mathbf{P}(\mathbf{z}^h(0)) = \int_0^1 \frac{d\mathbf{P}(\mathbf{z}^h(\alpha))}{d\alpha} d\alpha = \int_0^1 \sum_{A=1}^{n_{node}} \frac{d\mathbf{p}^{Ah}(\alpha)}{d\alpha} d\alpha. \quad (66)$$

Die Integration erfolgt über ein Polynom vom Grad  $k - 1$ . Die Verwendung von  $k$  Gaußpunkten führt somit allemal zu einer exakten Integration. Somit gilt:

$$\mathbf{P}(z^h(1)) - \mathbf{P}(z^h(0)) = \sum_{l=1}^k \sum_{A=1}^{n_{node}} \frac{d\mathbf{p}^{Ah}(\xi_l)}{d\alpha} w_l. \quad (67)$$

Wir setzen nun Gleichung (64) in Gleichung (67) ein und erhalten:

$$\mathbf{P}(z^h(1)) - \mathbf{P}(z^h(0)) = -h_n \sum_{l=1}^k \sum_{A,B=1}^{n_{node}} Q_{AB}(\xi_l)^h \mathbf{q}^{Bh}(\xi_l) w_l. \quad (68)$$

Mit Gleichung (18) erhalten wir aus Gleichung (68):

$$\mathbf{P}(z^h(1)) - \mathbf{P}(z^h(0)) = -h_n \sum_{l=1}^k \int_{B_0} \nabla \left( \sum_{A=1}^{n_{node}} N_A \right) \cdot \mathbf{S}^h(\xi_l) \sum_{B=1}^{n_{node}} \nabla N_B dV \mathbf{q}^{Bh}(\xi_l) w_l. \quad (69)$$

Für die räumlichen Formfunktionen  $N_A$  gilt die Vollständigkeitsbedingung (25), so dass der Gradient dieser Summe folglich der Nullvektor ist. Somit haben wir

$$\mathbf{P}(z^h(1)) - \mathbf{P}(z^h(0)) = \mathbf{0}. \quad (70)$$

Wir haben somit auch Impulserhaltung unter Verwendung von  $k$  Gaußpunkten. ■

Die Essenz aus diesen Beweisen sind die folgenden *Designkriterien* zur Konstruktion mechanischer Integratoren aus der cG( $k$ )-Methode:

D.1 Die nicht exakt lösbaren Integrale mit einer Gaußschen Quadraturformel der Form (37) mit  $N_q^\alpha = k$  Gaußpunkten integrieren,

D.2 welche zusätzlich die Gleichung (53) erfüllt.

Das Problem der Konstruktion mechanischer Integratoren ist demnach die Erfüllung der Forderung D.2. Wenn man die Gleichung (53) betrachtet, sieht man prinzipiell zwei Möglichkeiten für beliebige Potentiale  $V$  aus dieser Gleichung die Struktur eines mechanischen Integrators zu bestimmen: 1) die Bestimmung eines geeigneten Gradienten  $\nabla \mathbf{q} V$  und 2) eine geeignete Veränderung der Gewichte  $w_l$ . Es ist aber zu beachten, dass die Modifikationen konsistent zur ursprünglichen cG( $k$ )-Methode sind. Genauer: Bei 1) dürfen sich die Hamiltonschen Gleichungen im Rahmen der Genauigkeit der cG( $k$ )-Methode nicht ändern, und bei 2) darf die Veränderung der Gewichte nicht die Genauigkeit der Gaußschen Quadraturformel beeinflussen. Im folgenden werden beide Möglichkeiten untersucht.

## 5 Lineare zeitliche finite Elemente

In [21] wurde gezeigt, dass die cG( $k$ )-Methode die Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^{2k})$  hat, wenn die Integrale der cG( $k$ )-Methode mit  $k$  Gaußpunkten und den assoziierten Gewichten berechnet werden. Die Verwendung von  $k$  Gaußpunkten schreibt auch D.1 vor, so dass wir bei Verwendung von linearen finiten Elementen  $k = 1$  einen mechanischen Integrator der Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^2)$  erhalten, wenn wir auch D.2 erfüllen.

Die Integration der cG(1)-Methode mit einem Gaußpunkt  $\xi_1 = 1/2$  und einem zunächst beliebigen Gewicht  $\tilde{w}$  führt auf

$$\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1 - \frac{h_n}{2} \mathbf{M}^{-1} [\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2] = \mathbf{0}, \quad (71)$$

$$\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1 + h_n \left[ \mathbf{F}_{int}^h(\xi_1) \tilde{w} - \hat{\mathbf{F}}_{ext} \right] = \mathbf{0}, \quad (72)$$

mit  $\hat{\mathbf{F}}_{ext} = \int_0^1 \mathbf{F}_{ext} d\alpha$ . Die innere Knotenkraft  $\mathbf{F}_{int}^h(\alpha)$  ist gegeben durch

$$\mathbf{F}_{int}^h(\alpha) = \mathbf{Q}^h(\alpha) \mathbf{q}^h(\alpha). \quad (73)$$

Da Drehimpulserhaltung nur bei Abwesenheit von äußeren Kräften erfüllt ist, muss sich das Kriterium D.2 nur auf die Verzerrungsenergie  $V_{int}$  beziehen. Die Forderung D.2 lässt sich deshalb wie folgt formulieren:

$$\int_{B_0} \left[ W(\mathbf{C}^h(1)) - W(\mathbf{C}^h(0)) \right] dV = \int_{B_0} \left( \sum_{l=1}^k \nabla W(\mathbf{C}^h(\xi_l)) : \frac{d\mathbf{C}^h(\xi_l)}{d\alpha} w_l \right) dV. \quad (74)$$

Lokalisierung bezüglich des Raumes liefert nun eine lokale Form der Bedingung D.2:

$$W(\mathbf{C}^h(1)) - W(\mathbf{C}^h(0)) = \sum_{l=1}^k \nabla W(\mathbf{C}^h(\xi_l)) : \frac{d\mathbf{C}^h(\xi_l)}{d\alpha} w_l. \quad (75)$$

Bei der cG(1)-Methode mit einem Gaußpunkt  $\xi_1 = 1/2$  und einem Gewicht  $\tilde{w}$  hat die Gleichung (75) die Form:

$$W(\mathbf{C}^h(1)) - W(\mathbf{C}^h(0)) = \nabla W(\mathbf{C}^h(\xi_1)) : \frac{d\mathbf{C}^h(\xi_1)}{d\alpha} \tilde{w}. \quad (76)$$

Die Modifikationen zur Erhaltung eines mechanischen Integrators gehen nun dahin, a) die innere Knotenkraft (73) konsistent zu verändern und  $\tilde{w}$  gleich dem Gaußschen Gewicht  $w_1 = 1$  zu setzen, oder b) die innere Knotenkraft (73) zu belassen und das Gewicht  $\tilde{w}$  so zu bestimmen, dass Gleichung (76) erfüllt wird. In beiden Fällen muss das Produkt der inneren Knotenkraft  $\mathbf{F}_{int}^A$  mit dem Gewicht  $\tilde{w}$  für die cG(1)-Methode die Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^2)$  besitzen und die Bedingung (76) erfüllen.

Letztendlich resultieren beide Modifikationen in einem neuen energieerhaltenden Spannungstensor  $\mathbf{S}$  der den ursprünglichen Spannungstensor  $\mathbf{S}^h(\xi_1)$  ersetzt. Dabei ist  $\mathbf{S}$  eine Approximation der Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^2)$  der Spannungen. Wir erhalten dann eine neue innere Knotenkraft

$$\mathbf{F}_{int} := \mathbf{Q} \mathbf{q}(\xi_1), \quad (77)$$

die eine Approximation der Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^2)$  der Knotenkraft  $\mathbf{F}_{int}$  und somit wie gefordert konsistent zu der cG(1)-Methode ist.

## 5.1 Modifikation der inneren Knotenkraft

Wir zeigen zuerst zwei Varianten einer konsistenten Veränderung der inneren Knotenkraft  $\mathbf{F}_{int}$ . Bei beiden wird jedoch der rechte Cauchy-Green-Tensors  $\mathbf{C}^h(\xi_1)$  durch einen diskreten rechten Cauchy-Green-Tensor  $\mathbf{C}$  ersetzt, der die Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^2)$  der cG(1)-Methode gewährleistet wegen der Beziehung

$$\mathbf{C}(\xi_1) = \mathbf{C} + \mathcal{O}(h_n^2). \quad (78)$$

Die Varianten unterscheiden sich in der Wahl des Gradienten der Verzerrungsenergiedichte  $W$ , aus dem die Spannungen berechnet werden. Bei der ersten Variante wird der analytische Gradient  $DW$  benutzt. Dies führt dazu, dass die Energieerhaltung nur bei einem Material, hier bei *St. Venant-Kirchhoff* Material, erfüllt ist. Bei der zweiten Variante wird ein diskreter Gradient  $DW$  der Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^2)$  der Verzerrungsenergiedichte eingeführt, der für *beliebige Verzerrungsenergiedichten* die Gesamtenergie erhält.

Das St. Venant-Kirchhoff Material ist definiert durch die Verzerrungsenergiedichte

$$W(\mathbf{C}) = \frac{1}{2} \mathbf{E} : \mathfrak{D} : \mathbf{E} \quad \text{mit} \quad \mathbf{E}(\mathbf{C}) = \frac{1}{2} [\mathbf{C} - \mathbf{I}], \quad (79)$$

wobei  $\mathbf{E}$  bzw.  $\mathfrak{D}$  den Green-Lagrange-Verzerrungstensor bzw. den vierstufigen Elastizitätstensor bezeichnet. Demzufolge ist der Spannungstensor gegeben durch

$$\mathbf{S} = 2 \nabla W = 2 \mathfrak{D} : \mathbf{E}. \quad (80)$$

Zur Erlangung der Energieerhaltung wird nun der Spannungstensor  $\mathbf{S}^h(\xi_1)$  durch folgenden diskreten Spannungstensor  $\mathbf{S}$  ersetzt:

$$\mathbf{S} = 2 \nabla W(\mathbf{C}), \quad (81)$$

mit dem diskreten rechten Cauchy-Green-Tensor

$$\mathbf{C} = (1 - \xi_1) \mathbf{C}_1 + \xi_1 \mathbf{C}_2. \quad (82)$$

Es wird also der rechte Cauchy-Green-Tensor  $\mathbf{C}$  approximiert mit einem mittleren rechten Cauchy-Green-Tensor und nicht durch  $\mathbf{C}^h$  in der Mittelpunktskonfiguration. Durch die Linearität in Gleichung (80) gilt für den Spannungstensor das Gleiche. In [4] wird (82) als die *assumed strain modification* des rechten Cauchy-Green Tensors bezeichnet. Die energieerhaltende Wirkung wurde in [4, 26] gezeigt. Weiter wurde in [26] gezeigt, dass das entsprechende Finite-Differenzen-Verfahren, die Mittelpunktsregel, mit der Approximation (81) die Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^2)$  besitzt. Die Konsistenz zu linearen finiten Elementen ist also gegeben.

Nun zur Betrachtung beliebiger hyperelastischer Materialmodelle durch die Definition eines diskreten Gradienten. Die Einführung eines diskreten Gradienten geht zurück auf [13]. Für Massenpunktsysteme wurde im Rahmen der Lagrangeschen bzw. Hamiltonschen Mechanik in [23, 24, 25, 14, 15] bzw. [10, 28] ein diskreter Gradient der Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^2)$  angegeben. Letztere Ausführungen wurden in [11] auf die nichtlineare Elastodynamik erweitert. Nach [11] wird nun der Gradient  $\nabla W(\mathbf{C}^h(\xi_1))$  durch den folgenden diskreten Gradienten  $DW$  ersetzt:

$$DW := \nabla W(\mathbf{C}) + \frac{W(\mathbf{C}_2) - W(\mathbf{C}_1) - \nabla W(\mathbf{C}) : \frac{d\mathbf{C}^h(\xi_1)}{d\alpha}}{\frac{d\mathbf{C}^h(\xi_1)}{d\alpha} : \frac{d\mathbf{C}^h(\xi_1)}{d\alpha}} \frac{d\mathbf{C}^h(\xi_1)}{d\alpha}. \quad (83)$$

Dieser diskrete Gradient bleibt durch die Symmetrie des rechten Cauchy-Green-Tensors symmetrisch, d.h der diskrete Spannungstensor  $\mathbf{S} = 2 DW$  ist auch symmetrisch. In [11] wird gezeigt, dass der diskrete Gradient die Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^2)$  aufweist. Die Energieerhaltungsbedingung (76) wird mit dem diskreten Gradienten (83) offensichtlich erfüllt.

## 5.2 Modifikation des Quadraturgewichtes

Nun wenden wir uns der Bestimmung des Quadraturgewichtes  $\tilde{w}$  zur Erzwingung von Energieerhaltung für beliebige Verzerrungsenergiegedichten zu. In [7] wurde zu diesem Thema eine systematische Methode dargelegt. Darin wird nach der *least-squares*-Methode (siehe [18]) die Abweichung  $\tilde{w} - w_1$  des Gewichtes  $\tilde{w}$  von dem Gaußschen Gewicht  $w_1$  unter der Nebenbedingung der Energieerhaltung minimiert und dadurch die Ordnung einer Gaußschen Quadraturformel erreicht. Zu minimieren ist hier die Lagrangesche Funktion

$$\mathcal{L}(\tilde{w}, \lambda) = \frac{1}{2} (\tilde{w} - w_1)^2 + \lambda \mathcal{G}(\tilde{w}) \quad (84)$$

wobei  $\lambda$  der Lagrangesche Multiplikator und  $\mathcal{G}(\tilde{w})$  die folgende Nebenbedingung ist:

$$\mathcal{G}(\tilde{w}) = W(\mathbf{C}^h(1)) - W(\mathbf{C}^h(0)) - \nabla W(\mathbf{C}^h(\xi_1)) : \frac{d\mathbf{C}^h(\xi_1)}{d\alpha} \tilde{w} = 0 \quad (85)$$

(Vergleiche auch [16] Seite 40). Das Minimum der Lagrangeschen Funktion (84) ist das Gewicht

$$\tilde{w} = \frac{W(\mathbf{C}^h(1)) - W(\mathbf{C}^h(0))}{\nabla W(\mathbf{C}^h(\xi_1)) : \frac{d\mathbf{C}^h(\xi_1)}{d\alpha}}, \quad (86)$$

Somit bleibt  $\tilde{w}$  nahe bei  $w_1 = 1$ . Dies bestätigt auch eine Taylorreihenentwicklung der Verzerrungsenergiegedichte  $W(\mathbf{C}^h(\alpha))$  bezüglich  $\alpha$  in einer Umgebung von  $\alpha = \xi_1$  im Zähler. Denn es gilt:

$$\tilde{w} = 1 + \mathcal{O}(h_n^2) = w_1 + \mathcal{O}(h_n^2) \implies \lim_{h_n \rightarrow 0} \tilde{w} = w_1. \quad (87)$$

Ähnliche Betrachtungen werden auch in [27] im Rahmen der Mittelpunktsregel angestellt. Die Genauigkeitsordnung  $\mathcal{O}(h_n^{2k})$  der Gaußschen Quadratur ist somit erreicht. Das neue Gewicht (86) ist zeitlich veränderlich. Deshalb wurde in [7] der Begriff *dynamic integration rule* geprägt. Man erhält also durch Skalierung des Spannungstensors  $\mathbf{S}^h(\xi_1)$  einen neuen Spannungstensor

$$\mathbf{S} = 2 \nabla W(\mathbf{C}^h(\xi_1)) \frac{W(\mathbf{C}^h(1)) - W(\mathbf{C}^h(0))}{\nabla W(\mathbf{C}^h(\xi_1)) : \frac{d\mathbf{C}^h(\xi_1)}{d\alpha}}. \quad (88)$$

Die dynamisch integrierte cG(1)-Methode ist bei den sogenannten *Projektionsmethoden* einzuordnen (siehe [27, 16]), denn die für beliebige Gewichte stets drehipulserhaltende Lösung (die Lösung liegt also auf der Mannigfaltigkeit  $L = \text{const.}$ ), wird durch das neue Gewicht  $\tilde{w}$  auf die Mannigfaltigkeit  $H = \text{const.}$  projiziert [27, 9].

## 6 Zeitliche finite Elemente beliebigen Grades

Ein wesentliches Ziel des Forschungsvorhabens ist die Konstruktion mechanischer Integratoren mit einer Genauigkeit von höherer Ordnung für beliebige Verzerrungsenergiedichten  $W$ . Wir wollen nun die Methoden aus Kapitel 5 auf beliebige zeitliche finite Elemente verallgemeinern.

Es wird zuerst ein einfaches Modellproblem untersucht, das die wesentlichen Merkmale der Elastodynamik beinhaltet: große und relativ langsame Absolutbewegungen zusammen mit hochfrequenten Relativbewegungen. Solche Bewegungen lassen sich an einem Massenpunkt untersuchen der sich in einem Zentralkraftfeld bewegt. Dieses Modellproblem wird als Einkörperproblem bezeichnet [8]. Die Jacobimatrix der Hamiltonsche Funktion hat auch hier die Form (30). Jedoch sind für einen Massenpunkt die Vektoren  $\mathbf{q}$  und  $\mathbf{p}$  jetzt der kartesische Koordinatenvektor  $\mathbf{q} = [q_1, q_2]^T$  und der Impulsvektor  $\mathbf{p} = [p_1, p_2]^T$ . Ferner haben die Matrizen  $\mathbf{Q}$  und  $\mathbf{M}^{-1}$  die Form

$$\mathbf{Q} = \frac{D\hat{V}(r)}{r} \mathbf{I} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{M}^{-1} = \frac{1}{m} \mathbf{I}, \quad (89)$$

wobei das Potential  $\hat{V} = \hat{V}(r)$  der Zentralkraft eine Funktion des Radius  $r = \|\mathbf{q}\|$  ist, so dass  $D\hat{V}(r)$  die Ableitung  $d\hat{V}(r)/dr$  bezeichnet. Die Masse des Massenpunktes symbolisiert  $m$ . Aufgrund der äquivalenten Strukturen der Jacobimatrizen des Einkörperproblems und der Elastodynamik, sind die Beweise für die Energie- und Drehimpulserhaltung beim Einkörperproblem analog zur Elastodynamik.

Der Spezialfall eines quadratischen Potentials muss hier nicht betrachtet werden. Denn ein maximal quadratisches Potential, wie das von Hooke, wird mit der cG( $k$ )-Methode ohne Modifikation mit  $k$  Gaußpunkten  $\xi_l$  und den assoziierten Gewichten  $w_l$  exakt integriert, und erfüllt deshalb auch die Energieerhaltung. Es soll somit gleich ein beliebiges Potential  $\hat{V}$  betrachtet werden. Mit den Matrizen (89) hat die cG( $k$ )-Methode folgende Form:

$$\sum_{J=1}^k \int_0^1 \tilde{M}_I \tilde{M}_J \, d\alpha \, \tilde{\mathbf{q}}_J - \frac{h_n}{m} \int_0^1 \tilde{M}_I \mathbf{p}^h \, d\alpha = \mathbf{0}, \quad (90)$$

$$\sum_{J=1}^k \int_0^1 \tilde{M}_I \tilde{M}_J \, d\alpha \, \tilde{\mathbf{p}}_J + h_n \int_0^1 \tilde{M}_I \left[ D\hat{V}(r^h) \frac{\mathbf{q}^h}{r^h} - \mathbf{F}_{ext} \right] d\alpha = \mathbf{0}. \quad (91)$$

### 6.1 Modifikation der Quadraturgewichte

Zuerst beschäftigen wir uns mit der *dynamic integration rule*. Für die cG( $k$ )-Methode mit einer Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^{2k})$  benötigen wir  $k$  Gaußpunkte, und somit auch  $k$  Gewichte  $\tilde{w}_l$  deren Abweichung zu den Gaußschen Gewichten wieder minimiert werden soll. Die Gewichte können in Form der Vektoren  $\mathbf{w} = (w_i)_{i=1}^k$  und  $\tilde{\mathbf{w}} = (\tilde{w}_i)_{i=1}^k$  dargestellt werden. Wie üblich definieren wir die Differenz der beiden Vektoren als die Euklidische Norm  $\|\tilde{\mathbf{w}} - \mathbf{w}\|$ . Zu minimieren ist folglich die Lagrangesche Funktion

$$\mathcal{L}(\tilde{\mathbf{w}}, \lambda) = \frac{1}{2} \|\tilde{\mathbf{w}} - \mathbf{w}\|^2 + \lambda \mathcal{G}(\tilde{\mathbf{w}}) \quad (92)$$

mit der Nebenbedingung

$$\mathcal{G}(\tilde{\mathbf{w}}) = \hat{V}(r^h(1)) - \hat{V}(r^h(0)) - \mathbf{h} \cdot \tilde{\mathbf{w}} = 0. \quad (93)$$

wobei der Vektor  $\mathbf{h}$  gegeben ist durch

$$\mathbf{h} = (h_i)_{i=1}^k = \left( \frac{d\hat{V}(r^h(\xi_i))}{d\alpha} \right)_{i=1}^k. \quad (94)$$

Das Minimum der Lagrangeschen Funktion  $\mathcal{L}(\tilde{\mathbf{w}}, \lambda)$  ist gekennzeichnet durch ein verschwindendes Differential  $d\mathcal{L}$ . Das heißt die Bestimmungsgleichungen sind gegeben durch

$$\nabla_{\tilde{\mathbf{w}}} \mathcal{L}(\tilde{\mathbf{w}}, \lambda) = \mathbf{0}, \quad (95)$$

$$\partial_\lambda \mathcal{L}(\tilde{\mathbf{w}}, \lambda) = 0. \quad (96)$$

Unter Berücksichtigung von (92) ergibt sich aus Gleichung (96) die Nebenbedingung (93), und aus Gleichung (95) die Beziehung

$$\tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{w} + \lambda \mathbf{h}. \quad (97)$$

Durch Eliminieren des Lagrangeschen Multiplikators  $\lambda$  ergeben sich die Gewichte der *dynamic integration rule* zu

$$\tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{w} + \frac{\hat{V}(r^h(1)) - \hat{V}(r^h(0)) - \mathbf{h} \cdot \mathbf{w}}{\mathbf{h} \cdot \mathbf{h}} \mathbf{h}. \quad (98)$$

Durch die Gaußsche Quadratur mit einem Restglied der Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^{2k+1})$  im Zähler, gilt für die Differenz der Gewichte

$$\tilde{\mathbf{w}} - \mathbf{w} = \mathcal{O}(h_n^{2k}) \implies \lim_{h_n \rightarrow 0} \tilde{\mathbf{w}} - \mathbf{w} = \mathbf{0}. \quad (99)$$

Die Konsistenz zur Gaußquadratur ist offensichtlich gewahrt. Wir können somit das betreffende Integral in Gleichung (91) wie folgt approximieren:

$$\int_0^1 \tilde{M}_I D\hat{V}(r^h) \frac{\mathbf{q}^h}{r^h} d\alpha \approx \sum_{l=1}^k \tilde{M}_I D\hat{V}(r^h) \frac{\mathbf{q}^h}{r^h} \tilde{w}_l \quad (100)$$

Im Hinblick auf Gleichung (98) wird also die Approximation des Zentralkraftgesetzes multiplikativ erweitert.

Der Spezialfall linearer finiter Elemente ( $k = 1$ ) resultiert in dem folgenden Verfahren:

$$\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1 - \frac{h_n}{2m} [\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2] = \mathbf{0}, \quad (101)$$

$$\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1 + h_n \frac{\hat{V}(r_2) - \hat{V}(r_1)}{r_2 - r_1} \frac{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2}{r_1 + r_2} = \mathbf{0}, \quad (102)$$

wobei  $r_I$  den Radius am Knoten  $I$  des Masterelements  $I_\alpha$  bezeichnet. Vergleicht man das Verfahren (101),(102) mit der cG(1)-Methode, so sind folgende Substitutionen zu erkennen:

$$D\hat{V}(r^h(\xi_1)) \mapsto D\hat{V} = \frac{\hat{V}(r_2) - \hat{V}(r_1)}{r_2 - r_1} \quad (103)$$

$$r^h(\xi_1) \mapsto \mathbf{r} = \sum_{I=1}^{k+1} M_I(\xi_1) r_I = (1 - \xi_1) r_1 + \xi_1 r_2 \quad (104)$$

Das komplette Verfahren (101),(102) ist schon aus [10] bekannt. Der diskrete Gradient (103) der Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^2)$  wird ebenfalls in [14] verwendet. Die Approximation  $\mathbf{r}$  des Radius wird in [2] als *assumed distance interpolation* bezeichnet. Analog zur *assumed strain modification* gilt nach einer Taylorreihenentwicklung:

$$r(\xi_1) = \mathbf{r} + \mathcal{O}(h_n^2). \quad (105)$$

Im Gegensatz zu  $k = 1$  ist den Autoren für  $k > 1$  kein entsprechender mechanischer Integrator aus der Literatur bekannt.

## 6.2 Modifikation der Ableitung

Wir haben in Kapitel 5 gesehen, dass bei linearen finiten Elementen eine geeignete additive bzw. multiplikative Erweiterung des Spannungstensors zu Energieerhaltung führte. Eine multiplikative Erweiterung ergab sich durch die *dynamic integration rule*, die wir schon oben verallgemeinert haben. Die Rolle der Ableitung der Verzerrungsenergie-dichte  $W(\mathbf{C})$  (Spannungstensor) übernahm dabei die Ableitung des Potentials  $\hat{V}(r)$  (Betrag der Zentralkraft).

Additiv erweitert wurde der Spannungstensor innerhalb des diskreten Gradienten (83). Wir suchen somit eine additive Erweiterungsfunktion  $\Delta$  der Ableitung  $D\hat{V}$ , die zur Erfüllung der Energieerhaltung führt. Der Ansatz ist somit

$$\Delta = D\hat{V} - D\hat{V}. \quad (106)$$



Solch eine Aufgabe lässt sich mit der Variationsrechnung lösen, wenn ein zu minimierendes Funktional bezüglich  $\Delta$  gefunden wird. Wir sind nach der *least-squares*-Methode vorgegangen und haben die  $L_2$ -Norm der Differenz  $\Delta$  auf dem Masterelement  $I_\alpha = [0, 1]$  mit dem Designkriterium als Nebenbedingung minimiert. Denn für  $h_n \rightarrow 0$  muss  $\Delta$  der Nullfunktion entsprechen, da dann Energieerhaltung schon mit der Ableitung  $D\hat{V}$  erfüllt ist. Das vorliegende isoperimetrische Problem ist somit wie folgt: Das Lagrangesche Funktional

$$\mathcal{L}(D\hat{V}, \lambda) = \int_0^1 F(\alpha) d\alpha + \lambda \mathcal{G}(D\hat{V}) \quad (107)$$

ist zu minimieren mit der Nebenbedingung

$$\mathcal{G}(D\hat{V}) = \hat{V}(r(1)) - \hat{V}(r(0)) - \int_0^1 G(\alpha) d\alpha, \quad (108)$$

und den Funktionen

$$F(\alpha) = \frac{1}{2} [\Delta(\alpha)]^2, \quad G(\alpha) = D\hat{V}(\alpha) \frac{dr(\alpha)}{d\alpha}. \quad (109)$$

Die Lösung dieses isoperimetrischen Problems kann man [5] entnehmen. Die notwendige Bedingung für ein Minimum des Lagrangeschen Funktionals (107) ist die Eulersche Gleichung

$$\frac{\partial (F + \lambda G)}{\partial \Delta} = 0, \quad (110)$$

wobei der konstante Lagrangesche Multiplikator  $\lambda$  wieder aus der Nebenbedingung  $\mathcal{G}$  (hier Gl. (108)) bestimmt wird. Nach der Eliminierung von  $\lambda$  mittels der Nebenbedingung folgt:

$$D\hat{V}(\alpha) = D\hat{V}(\alpha) + \frac{\hat{V}(r(1)) - \hat{V}(r(0)) - \int_0^1 D\hat{V}(r) \frac{dr}{d\alpha} d\alpha}{\int_0^1 \left[ \frac{dr}{d\alpha} \right]^2 d\alpha} \frac{dr(\alpha)}{d\alpha}. \quad (111)$$

Wir haben somit eine analytische Funktion in der normierten Zeit  $\alpha$ , die in der cG( $k$ )-Methode an den  $k$  Gaußpunkten ausgewertet wird. Im folgenden nennen wir diese Modifikation die *Gradientenerweiterung*.

Da die Integrale in (111) nicht exakt gelöst werden können, muss eine Quadraturregel angewendet werden. Wendet man die Gaußsche Quadratur mit  $N_q^\alpha$  Gaußpunkten an, so ergibt eine anschließende Taylorreihenentwicklung dass die Funktion  $\Delta$  der Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^{2N_q^\alpha})$  ist. Durch den Einsatz in der cG( $k$ )-Methode mit der Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^{2k})$  reichen also  $N_q^\alpha = k$  Gaußpunkte aus. Unbestimmt ist jetzt noch die Approximation des Radius  $r$  als Funktion von  $\alpha$ .

Wir betrachten nun den Spezialfall  $k = 1$ . Wählt man die cG-Approximation  $r^h$  des Radius, so erhält man als Funktionswert am Gaußpunkt  $\xi_1 = 1/2$  den diskreten Gradienten

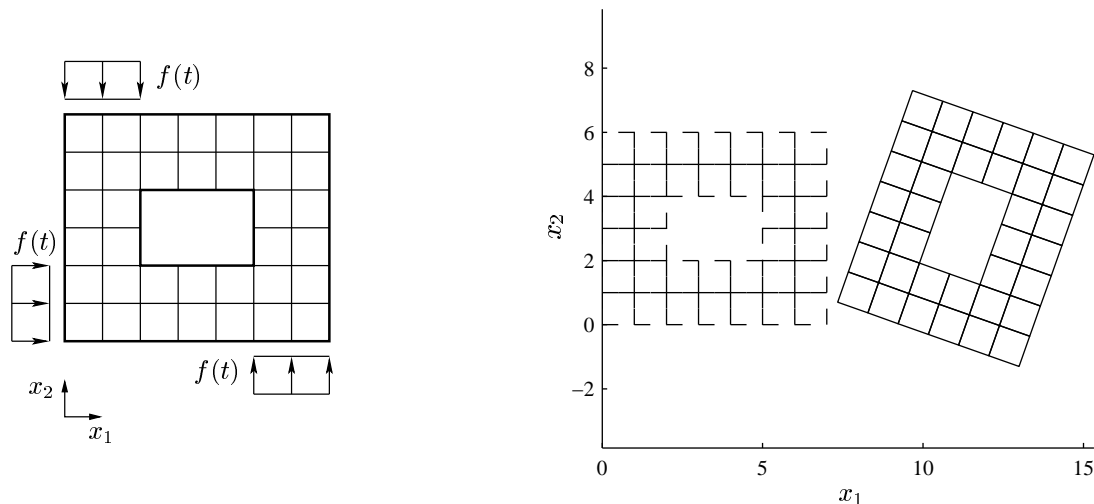
$$D\hat{V}\left(\frac{1}{2}\right) = 2 \frac{\hat{V}(r_2) - \hat{V}(r_1)}{r_2^2 - r_1^2} r^h\left(\frac{1}{2}\right). \quad (112)$$

Setzt man nun diesen Funktionswert in die cG(1)-Methode ein, so erhält man das Verfahren (101),(102), welches auch von der *dynamic integration rule* generiert wurde.

Wählt man die *assumed distance interpolation* (104) des Radius  $r$ , so erhält man den Gradienten (103). Für  $k = 1$  ergeben somit beide Approximationen das Verfahren (101),(102). Für  $k > 1$  liefern die beiden betrachteten Vorgehensweisen jedoch unterschiedliche mechanische Integratoren. Vergleichbare Finite-Differenzen-Verfahren sind den Autoren nicht bekannt.

## 7 Numerische Untersuchungen

In den vorherigen Kapiteln haben wir konsistente Modifikationen der cG-Methode für die Elastodynamik ( $k = 1$ ) und das Einkörperproblem ( $k \geq 1$ ) vorgestellt, die die cG-Methode zu einem mechanischen Integrator macht. In diesem Kapitel werden wir die mechanischen Integratoren auf Beispiele anwenden und die Erhaltungseigenschaften überprüfen. Gleichzeitig wird die Konsistenz der Verfahren durch eine Prüfung der Konvergenz und Genauigkeitsordnung untersucht. Die numerischen Untersuchungen der *dynamic integration rule* sowie der *Gradientenerweiterung* begannen wir am Einkörperproblem und betrachteten sofort den Fall  $k = 2$  (siehe Kapitel 7.2).



**Abbildung 1** Links ist die Diskretisierung und Eingangsbelastung des Rahmenprofils dargestellt. Die Abbildung rechts zeigt den Zeitpunkt  $T = 1$  der resultierenden ebenen Bewegung des quasi-starren Rahmenprofils. Das Material des Rahmenprofils ist als St. Venant-Kirchhoff Material im ebenen Spannungszustand modelliert ( $E = 10^6$ ,  $\nu = 0.3$  und  $\rho = 0.1$ ). Beschleunigt wurde mit  $F = 50$  und  $T_L = 0.2$ . Die Zeitschrittweite betrug  $h_n = 0.01$  bzw.  $h_n = 0.025$ .

## 7.1 Lineare zeitliche finite Elemente in der Elastodynamik

Zuerst werden wir die *assumed strain modification* untersuchen, die für St. Venant-Kirchhoff Material aus der cG(1)-Methode einen mechanischen Integrator machen. Wir wählen die Materialparameter ( $E, \nu$ ) so, dass der wichtige Grenzfall eines quasi-starren Körpers vorliegt.

Der quasi-starre Körper spielt in Untersuchungen von Zeitintegratoren für die Elastodynamik eine wichtige Rolle, da er ein sogenanntes *steifes Problem* darstellt. Ein steifes Problem ist dadurch gekennzeichnet, dass es Lösungen auf stark unterschiedlichen Zeitskalen hat. Es existieren Lösungen, die sich auf einer Zeitskala ändern die sehr kurz ist im Vergleich zum Integrationsintervall und Lösungen die sich auf einer weitaus längeren Zeitskala ändern [29]. Da meistens nur letztere Lösungen von Interesse sind, sollen die numerischen Methoden auch nur diese Lösungen finden, für die eine entsprechend große Zeitschrittweite genügt.

Hier ist die interessante Lösung auf der langen Zeitskala die eigentliche Starrkörperbewegung. Die überlagerten hochfrequenten Bewegungen der Knoten, die aus der endlichen Steifigkeit herrühren, sind die uninteressanten Lösungen auf der kurzen Zeitskala. Durch die Wahl einer entsprechen großen Zeitschrittweite soll der mechanische Zeitintegrator deshalb im wesentlichen die Starrkörperbewegung entsprechend seiner Genauigkeit auflösen. Die überlagerten Bewegungen können ungenau wiedergegeben werden.

Wir betrachten ein durch Vier-Knotenelemente diskretisiertes Rahmenprofil, und beschleunigen es durch Einzelkräfte. Die normierten Krafrichtungen an den belasteten Knoten sind zeitunabhängig und Abbildung 1 zu entnehmen. Der Betrag  $f(t)$  jeder Einzelkraft ist zeitabhängig und berechnet sich aus der folgenden stetigen Dreiecksfunktion:

$$f(t) = \begin{cases} \frac{2F}{T_L} t & 0 \leq t \leq \frac{T_L}{2} \\ -\frac{2F}{T_L} t + 2F & \frac{T_L}{2} < t \leq T_L \\ 0 & t > T_L \end{cases} \quad (113)$$

In Abbildung 1 ist auf der rechten Seite eine Momentaufnahme der resultierenden ebenen Bewegung des quasi-starren Körpers wiedergegeben. In Abbildung 5 sind die Ergebnisse der *assumed strain modification* der cG(1)-Methode mit der einfachen cG(1)-Methode zusammen dargestellt. Oben wird der Zeitverlauf der Gesamtenergie und des Drehimpulses wiedergegeben. Bis zur gestrichelten Linie  $t = T_L$  wird das Rahmenprofil durch die Einzelkräfte beschleunigt. Daher nehmen Energie und Drehimpuls stetig zu. Ab dem Zeitpunkt  $t = T_L$  wird mit einer größeren

Zeitschrittweite gerechnet. Daher zeigt sich bei der cG(1)-Methode ein schlagartiges Blow-Up-Verhalten. Die Energie der *assumed strain modification* bleibt dagegen konstant. Der Drehimpuls wird auch wirklich für beide Methoden im Rahmen der Maschinengenauigkeit ( $mascheps = 10^{-15}$ ) exakt erhalten. Die Schriebe in der Mitte geben einen Einblick auf die Erfüllung der globalen Energieerhaltungsbedingung. Die linke Abbildung zeigt die exakte Energieerhaltung der *assumed strain modification* im Rahmen der Maschinengenauigkeit. Mit dargestellt ist die Toleranz des Newton-Raphson-Verfahrens  $\epsilon = 10^{-8}$ . Im Vergleich dazu erfüllt die cG(1)-Methode die Energieerhaltung nur im Mittel; genauer: die  $L_2$ -Norm der Energie bezüglich der Zeit verschwindet durch die Lösung der Hamiltonschen Gleichungen mit dem Galerkin-Verfahren.

Folglich konnten die theoretischen Betrachtungen auch numerisch bestätigt werden. Übrig bleibt noch die Verifizierung der Konsistenz der *assumed strain modification*. Diese sollen die unteren beiden Abbildungen zeigen. Links wird die Konvergenz des Newton-Raphson-Verfahrens wiedergegeben und rechts ist der relative Fehler

$$e_q = \frac{\|\mathbf{q}(T) - \mathbf{q}_*(T)\|}{\|\mathbf{q}_*(T)\|} \quad (114)$$

des Koordinatenvektors  $\mathbf{q}$  zum Zeitpunkt  $T$  über der Zeitschrittweite  $h_n$  doppelt-logarithmisch aufgetragen. Dabei ist  $\mathbf{q}_*$  eine Referenzlösung mit einer Zeitschrittweite von  $h_n = 10^{-4}$ . Für das untersuchte steife System ist Konvergenz der *assumed strain modification* besser als die der einfachen cG(1)-Methode. Dagegen ist die Genauigkeitsordnung beider Verfahren identisch. Somit ist erwiesen, dass die *assumed strain modification* eine konsistente Modifikation der cG(1)-Methode ist.

Wir betrachten jetzt den diskreten Gradienten, der aus der cG(1)-Methode für beliebige Verzerrungsenergiedichten  $W(\mathbf{C})$  einen mechanischen Integrator macht. Als Beispiel wählen wir das Rahmenprofil aus Abbildung 1 mit kompressiblem Neo-Hooke Material. Die entsprechende Verzerrungsenergiedichte ist gegeben mit

$$W(\mathbf{C}) = \frac{\mu}{2} [\text{spr } \mathbf{C} - 3] + \frac{\lambda}{2} \left( \ln \sqrt{\det \mathbf{C}} \right)^2 - \mu \ln \sqrt{\det \mathbf{C}}. \quad (115)$$

Wir wählen die Materialparameter  $\mu$  und  $\lambda$  so, dass eine Bewegung unter großen Verzerrungen stattfindet. In Abbildung 2 ist ein Zustand der ebenen Bewegung dargestellt. Die Ergebnisse der Untersuchungen bezüglich Erhaltungseigenschaften und Konsistenz zur cG(1)-Methode sind in Abbildung 6 wiedergegeben. Die numerische Untersuchung bestätigte die analytische Betrachtung. Energie und Drehimpuls werden im Rahmen der Maschinengenauigkeit durch den diskreten Gradienten erhalten. In der Abbildung links oben ist der Drift der Energie der einfachen cG(1)-Methode nach der Belastungsphase zu erkennen. Dieses Verhalten wurde wieder durch eine Vergrößerung der Zeitschritte nach der Belastungsphase hervorgerufen. Aus dem Vergleich von Konvergenzeigenschaft und Genauigkeitsordnung ist die Wahrung der Konsistenz zur cG(1)-Methode ersichtlich.

## 7.2 Quadratische zeitliche finite Elemente beim Einkörperproblem

In diesem Kapitel wenden wir uns den Modifikationen aus Kapitel 6 der cG( $k$ )-Methode für das Einkörperproblem zu. Wie in Kapitel 2 beschrieben, werden hier die numerischen Untersuchungen für quadratische Formfunktionen ( $k = 2$ ) dargelegt.

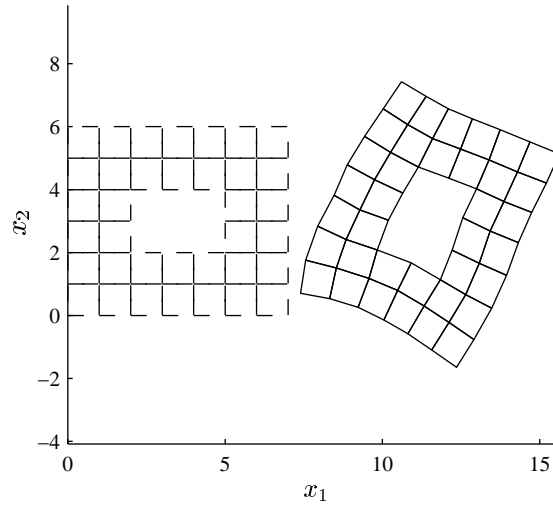
Ein konkretes Potential  $\hat{V}$  der Zentralkraft motivieren wir aus der Verzerrungsenergie  $V_{int}$  eines Stabpendels aus einem homogenen, elastischen Stab der Länge  $L$  und der Masse  $M$ . Der Stab wird dabei als eindimensionales Kontinuum aus St. Venant-Kirchhoff Material angesehen. Auf ein Einkörperproblem führt dann die Betrachtung des Stabpendels als ein mathematisches Pendel mit einer reduzierten Masse  $m$  am freien Ende eines masselosen elastischen Stabes (siehe Abbildung 3). Durch den Verzicht auf ein umgebendes Gravitationsfeld wirkt nur eine Zentralkraft entlang des Stabes.

Entsprechend der Definition kann ein Stab nur Normalkräfte aufnehmen und sich somit nur in Normalenrichtung verformen. Wir können dabei eine Veränderung des Stabquerschnittes  $A$  vernachlässigen, da wir wieder den numerisch kritischen Fall eines quasi-starren Kontinuums untersuchen wollen. Die Stabverformung kann deshalb durch die zwei Endpunkte  $I$  und  $II$  sowie zwei lineare Lagrange-Formfunktionen

$$N_1(\xi) = \frac{1}{2} (1 - \xi) \quad \text{und} \quad N_2(\xi) = \frac{1}{2} (1 + \xi) \quad (116)$$

eindeutig bezüglich eines räumlichen Masterelementes  $I_B = [-1, +1]$  parametrisiert werden [1]. Die Position eines infinitesimalen Stabelementes bei  $\xi \in I_B$  in der Referenz- bzw. Momentankonfiguration ist dann

$$X(\xi) = N_1(\xi) X_1 + N_2(\xi) X_2 \quad \text{bzw.} \quad x(\xi) = N_1(\xi) x_1 + N_2(\xi) x_2. \quad (117)$$



**Abbildung 2** Zustand bei  $T = 1$  der ebenen Bewegung des Rahmenprofils aus Neo-Hooke Material ( $\lambda = 10^3$ ,  $\mu = 500$  und  $\rho = 0.1$ ). Beschleunigt wurde wieder durch die Einzelkräfte mit  $F = 50$  und  $T_L = 0.2$ . Die Zeitschrittweite ist  $h_n = 0.01$  bzw.  $h_n = 0.045$ .

Der Deformationsgradient  $\mathbf{F}$  der betrachteten Stabverformung ist dann gegeben durch

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{X}} = \frac{l}{L} \mathbf{n} \otimes \mathbf{N} = \lambda \mathbf{n} \otimes \mathbf{N}, \quad (118)$$

wobei  $\lambda$  als Streckung bezeichnet wird. Aus dem Deformationsgradienten lassen sich nun die Verzerrungen durch den rechten Cauchy-Green-Tensor  $\mathbf{C}$  bzw. durch den Green-Lagrange-Verzerrungstensor  $\mathbf{E}$  angeben:

$$\mathbf{C} = \lambda^2 \mathbf{N} \otimes \mathbf{N}, \quad \mathbf{E} = \frac{1}{2} [\lambda^2 - 1] \mathbf{N} \otimes \mathbf{N}. \quad (119)$$

Folglich ergibt sich nach Gleichung (79) zusammen mit dem Elastizitätstensor

$$\mathfrak{D} = E \mathcal{I}^{sym}, \quad \text{mit} \quad \mathcal{I}_{ijkl}^{sym} = \frac{1}{2} [\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}], \quad (120)$$

die Verzerrungsenergiedichte  $W(\mathbf{C})$  des St. Venant-Kirchhoff Materials zu

$$W = \frac{E}{8} [\lambda^2 - 1]^2. \quad (121)$$

Letztendlich ist die Verzerrungsenergie  $V_{int} = \int_{B_0} W(\mathbf{C}) \, dV$  des homogenen Stabes wie folgt:

$$V_{int} = \frac{1}{2} k [\lambda^2 - 1]^2, \quad (122)$$

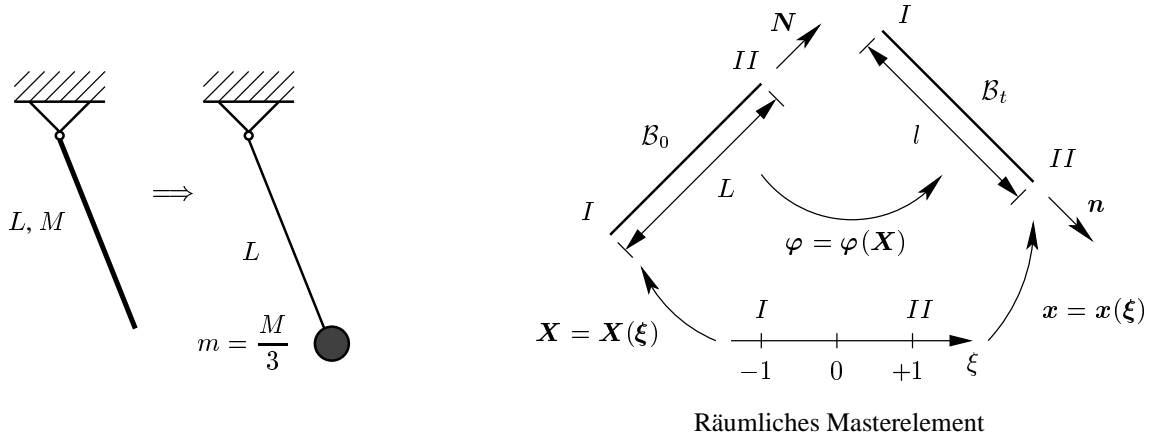
mit

$$k = \frac{E A L}{4}. \quad (123)$$

Als Potential  $\hat{V}(r)$  der Zentralkraft des Einkörperproblem erhalten wir somit

$$\hat{V}(r) = \frac{1}{2} k [r^2 - 1]^2. \quad (124)$$

Dieses Potential wurde auch schon in [12] in Verbindung mit dem diskreten Gradienten der Ordnung  $\mathcal{O}(h_n^2)$  beim Einkörperproblem untersucht.



**Abbildung 3** Links ist die physikalische Anordnung des Pendels abgebildet. Die rechte Abbildung zeigt die Kinematik einer allgemeinen Stabbewegung. Dabei sind  $B_0$  bzw.  $B_t$  die Referenz- bzw. Momentankonfiguration. Die nichtlineare Deformationsabbildung bezeichnet  $\varphi$ . Die Richtung des Stabes in der Referenz- bzw. Momentankonfiguration gibt der Normalenvektor  $N$  bzw.  $n$  an. Die Länge in der Momentankonfiguration wird mit  $l$  gekennzeichnet.

Wir wollen den Fall eines quasi-starren Kontinuums untersuchen und wählen dementsprechend eine hohe Steifigkeit  $k$  des Potentials. Die Bewegung wird mit einer Anfangsgeschwindigkeit  $v(t = 0)$  und zusätzlich wie bei den elastodynamischen Beispielrechnungen mit einer eingepprägten Kraft initiiert (siehe Abbildung 4). Der zeitabhängige Betrag  $f(t)$  der Einzelkraft berechnet sich aus der Funktion (113), wobei der maximale Betrag  $F = m g$  ( $g = 9.81$ ) gewählt wurde. Die eingepprägte Kraft soll somit eine anfängliche Gewichtskraft simulieren. Die Anfangsbedingungen wurden konsistent mit der kinetischen Grundgleichung wie folgt berechnet:

$$m a_r \equiv \frac{m v^2}{r} = \frac{dV}{dr} \equiv 2 k r [r^2 - 1]. \quad (125)$$

Nach Vorgabe einer Geschwindigkeit  $v$  ergibt die Lösung der biquadratischen Gleichung (125) die genaue Länge des Pendelstabes und somit die Position der Masse  $m$ .

Das Zeitschrittverfahren der cG(2)-Methode hat für das Einkörperproblem folgende Form:

$$-5 \mathbf{q}_1 + 4 \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 - \frac{h}{m} [\mathbf{p}_1 + 2 \mathbf{p}_2] = \mathbf{0}, \quad (126)$$

$$-\mathbf{q}_1 - 4 \mathbf{q}_2 + 5 \mathbf{q}_3 - \frac{h}{m} [2 \mathbf{p}_2 + 2 \mathbf{p}_3] = \mathbf{0}, \quad (127)$$

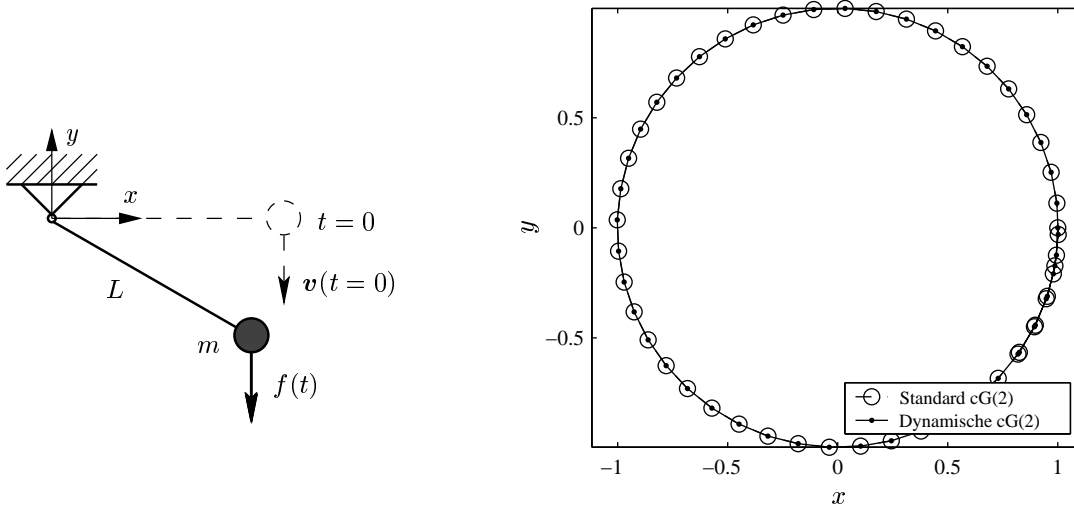
$$\frac{5}{6} \mathbf{p}_1 - \frac{2}{3} \mathbf{p}_2 - \frac{1}{6} \mathbf{p}_3 + h_n \int_0^1 \tilde{M}_1 D\hat{V}(r^h) \frac{\mathbf{q}^h}{r^h} d\alpha = \mathbf{0}, \quad (128)$$

$$\frac{1}{6} \mathbf{p}_1 + \frac{2}{3} \mathbf{p}_2 - \frac{5}{6} \mathbf{p}_3 + h_n \int_0^1 \tilde{M}_2 D\hat{V}(r^h) \frac{\mathbf{q}^h}{r^h} d\alpha = \mathbf{0}. \quad (129)$$

Wir beginnen mit der Untersuchung der *dynamic integration rule*, nach der die beiden Integrale in den Gleichungen (128), (129) nach Gleichung (100) unter Berücksichtigung von  $k = 2$  approximiert werden. Dabei sind die beiden Gewichte  $\tilde{w}_l$ ,  $l = 1, 2$ , gegeben durch:

$$\tilde{w}_l = w_l + \frac{\hat{V}(r_3) - \hat{V}(r_1) - \sum_{l=1}^2 D\hat{V}(r^h) \frac{\mathbf{q}^h}{r^h} \cdot \frac{d\mathbf{q}^h}{d\alpha} w_l}{\sum_{l=1}^2 \left( D\hat{V}(r^h) \frac{\mathbf{q}^h}{r^h} \cdot \frac{d\mathbf{q}^h}{d\alpha} \right)^2} D\hat{V}(r^h) \frac{\mathbf{q}^h}{r^h} \cdot \frac{d\mathbf{q}^h}{d\alpha}. \quad (130)$$

Die Abbildung 4 zeigt rechts die Bahn des Massenpunktes  $m$  im (x,y)-Koordinatensystem. Sie stellt eine Rotation des quasi-starren Pendels um etwas mehr als 360 Grad dar. In Abbildung 7 werden die zugehörigen Ergebnisse



**Abbildung 4** Die Abbildung links zeigt die Anfangsbedingungen des Pendels gestrichelt, sowie eine beliebige Lage im Belastungsintervall  $[0, T_L]$  mit der Richtung der Eingangsbelastung  $f(t)$  durchgezogen gezeichnet. Rechts ist die ebene Bahnkurve des Pendels ( $L = 1, m = 10, k = 10^6$ ) bis  $T \approx 3$  dargestellt. Die Berechnung erfolgte mit einer Anfangsgeschwindigkeit  $v_0 = 1$  und einer Belastungsdauer von  $T_L = 0.3$  bei einer Zeitschrittweite  $h_n = 0.06$ .

der *dynamic integration rule* mit denen der cG(2)-Methode verglichen. Oben sind die Erhaltungsgrößen Energie und Drehimpuls über der Zeit aufgetragen. Man sieht, dass nach der Einwirkung der eingepprägten Kraft die Energie der *dynamic integration rule* wie erwartet exakt nach jedem Zeitschritt konstant bleibt. Die Energie der cG(2)-Methode bleibt dagegen wieder nur im Mittel konstant. Weiter ist zu beobachten, dass die mittlere Energie der cG(2)-Methode nach der Belastungsphase über der Energie der *dynamic integration rule* liegt. Aus einem Vergleich der Energiewerte mit der Energie der Referenzlösung ( $E_{ref} \approx 29,6134$ ) erkennt man, dass die Energie der cG(2)-Methode deutlich mehr abweicht als die Energie der *dynamic integration rule*. Tatsächlich weichen die Energieverläufe schon in der Belastungsphase voneinander ab. Der Drehimpuls wird wieder von beiden Methoden erhalten. Die Schriebe in der Mitte zeigen die Verläufe der beiden dynamischen Gewichte  $\tilde{w}_1, \tilde{w}_2$ . Wie erwartet bleiben sie in der Nähe des Gaußschen Gewichtes  $w = 0.5$ . Man sieht auch, dass die Belastungsphase eine größere Abweichung verursacht, da hier keine Energieerhaltung möglich ist. Die Verläufe der dynamischen Gewichte nach der Belastungsphase sind zwar relativ unruhig aber dennoch periodisch. Da die Bewegung periodisch ist, war ein periodischer Verlauf zu erwarten. Unten werden Konvergenz und der relative Fehler dargestellt. Die Toleranz des Newton-Raphson-Verfahrens betrug bei den Berechnungen des Einkörperproblem  $\epsilon = 10^{-6}$ . Man erkennt, dass die Konvergenz der *dynamic integration rule* bei diesem steifen System etwas besser ist als die der cG(2)-Methode. Die Genauigkeitsordnungen sind wieder identisch. Somit lässt sich auch die erwartete Konsistenz der *dynamic integration rule* zu der cG(2)-Methode numerisch bestätigen.

Zum Schluss betrachten wir die cG(2)-Methode mit *Gradientenerweiterung*, wobei die cG-Approximation  $r^h$  des Radius verwendet wurde. Nach Gleichung (111) wird der Gradient  $D\hat{V}(\alpha)$  der cG(2)-Methode (126)-(129) ersetzt durch

$$D\hat{V}(\alpha) = D\hat{V}(\alpha) + \frac{\hat{V}(r_3) - \hat{V}(r_1) - \sum_{l=1}^2 D\hat{V}(r) \frac{\mathbf{q}^h}{r^h} \cdot \frac{d\mathbf{q}^h}{d\alpha} w_l}{\sum_{l=1}^2 \left[ \frac{\mathbf{q}^h}{r^h} \cdot \frac{d\mathbf{q}^h}{d\alpha} \right]^2 w_l} \frac{\mathbf{q}^h(\alpha)}{r^h(\alpha)} \cdot \frac{d\mathbf{q}^h(\alpha)}{d\alpha}. \quad (131)$$

Die berechnete Bahn ist identisch mit der in Abbildung 4. Die restlichen Ergebnisse sind in Abbildung 8 wiedergegeben. Der Vergleich der *Gradientenerweiterung* mit der cG(2)-Methode bezüglich Energie und Drehimpuls ergibt die gleichen Verhältnisse wie bei der *dynamic integration rule*, nur dass die Zeitschrittweite  $h_n$  mit der *Gradientenerweiterung* größer gewählt werden konnte und somit der Unterschied beim Energieverlauf größer ist. In der Mitte werden

die Gradienten der beiden Methoden für die beiden Gaußpunkte dargestellt. Man erkennt, dass sich für dieses steife System die Approximation des Gradienten (entspricht der Zentralkraft) durch die *Gradientenerweiterung* verbessert hat, da die Periodizität der Verläufe der erweiterten Gradienten ausgeprägter ist. Die Untersuchung von Konvergenz und Genauigkeitsordnung in der unteren Zeile von Abbildung 8 ergab ebenfalls ein Nachweis der Konsistenz der *Gradientenerweiterung*.

## 8 Zusammenfassung

Gegenstand der hier dargelegten Untersuchung waren energie- und drehimpulserhaltende (mechanische) Integratoren für die nichtlineare Elastodynamik. Diese Integratoren resultierten hier aus einer räumlichen und zeitlichen FE-Diskretisierung der nichtlinearen Elastodynamik.

Im ersten Teil des Forschungsvorhabens wurde die zeitliche FE-Formulierung entwickelt. Aus der räumlichen FE-Diskretisierung mittels isoparametrischen Verschiebungselementen resultierten die endlich-dimensionalen (semi-diskreten) Bewegungsgleichungen in Hamiltonscher Form. Diese Bewegungsgleichungen führten auf die Erhaltung von Gesamtenergie, Gesamtdrehimpuls und Gesamtimpuls der räumlichen FE-Diskretisierung. Die zeitliche FE-Diskretisierung der semidiskreten Bewegungsgleichungen durch die Petrov-Galerkin-Methode generierte ein Zeitschrittverfahren, die  $cG(k)$ -Methode. Die Vorgabe des Grades  $k$  der zeitlichen finiten Elemente sowie einer Integrationsregel zur Berechnung der Zeitintegrale ergaben spezifische Zeitschrittalgorithmen. Die zeitliche FE-Diskretisierung ermöglichte auch die Angabe eines Designkriteriums für mechanische Integratoren. Nach dem Designkriterium war die Integrationsregel zur Berechnung der Zeitintegrale für die Erhaltung von Gesamtenergie und Gesamtdrehimpuls verantwortlich. Algorithmische Drehimpulserhaltung erreichte die  $cG(k)$ -Methode nach einer Integration mit  $k$  Gaußpunkten. Dies wurde mit Hilfe der Kollokationseigenschaft der  $cG(k)$ -Methode in Verbindung mit einer Integration mit  $k$  Gaußpunkten gezeigt. Algorithmische Energieerhaltung wurde erreicht, wenn die berechnete Lösung den Hauptsatz der Integral- und Differentialrechnung bezüglich der potentiellen Energie erfüllt.

Die Anwendung des Designkriteriums zur Konstruktion von mechanischen Integratoren erfolgte im ersten Schritt an linearen finiten Elementen in der Zeit ( $k = 1$ ). Als Materialgesetz wurde zuerst der Spezialfall des St. Venant-Kirchhoff Materials betrachtet, um später den Fall eines quasi-starren Körpers numerisch zu untersuchen. Für das St. Venant-Kirchhoff Material resultierte ein mechanischer Integrator aus einem modifizierten Verzerrungstensor (*assumed strain modification*). Für beliebige hyperelastische Materialgesetze gingen mechanische Integratoren zum einen aus der Einführung eines diskreten Gradienten der Verzerrungsenergie-dichte (*Gradientenerweiterung*) und zum anderen aus der Bestimmung eines neuen konsistenten Quadraturgewichtes (*dynamic integration rule*) hervor. Jede der vorgestellten Modifikationen der  $cG(1)$ -Methode führte auf einen diskreten Spannungstensor, der an Stelle des im Rahmen der Petrov-Galerkin-Methode approximierten Spannungstensors verwendet wurde. Es wurde gezeigt, dass diese neuen Spannungstensoren die algorithmische Energieerhaltung ermöglichen, ohne die Genauigkeitsordnung der zugrundeliegenden Petrov-Galerkin-Methode zu beeinträchtigen.

Die numerischen Eigenschaften der mechanischen Integratoren wurden durch eine Berechnung einer ebenen Bewegung eines Rahmenprofils gezeigt. Zuerst mit quasi-starrem St. Venant-Kirchhoff Material, um die gute Eignung der *assumed strain modification* für steife Differentialgleichungssysteme zu präsentieren und dann mit weichem Neo-Hooke Material, um die Erhaltungseigenschaften der *Gradientenerweiterung* für beliebige Materialgesetze bei großen Verzerrungen zu zeigen. Die numerischen Untersuchungen bestätigten die Erhaltungseigenschaften und die Konsistenz der neuen Spannungstensoren.

Im zweiten Teil des Forschungsvorhabens wurden mechanische Integratoren für zeitliche finite Elemente beliebigen Grades  $k$  konstruiert. Im Sinne einer Problemreduktion wurde ein Modellproblem betrachtet, das die wesentlichen Merkmale der Elastodynamik aufweist: das Einkörperproblem. Bezüglich des Einkörperproblems wurde die *dynamic integration rule* und die *Gradientenerweiterung* auf beliebige  $k$  verallgemeinert. Bei der *Gradientenerweiterung* wurden zwei mögliche Approximationen des Radius dargelegt, deren Anwendung für  $k = 1$  beide auf das Verfahren führen, welches auch die *dynamic integration rule* erzeugt. Dagegen sind die Verfahren für  $k > 1$  verschieden.

Die numerischen Untersuchungen bezogen sich auf eine Pendelbewegung eines elastischen Stabes aus quasi-starrem St. Venant-Kirchhoff Material. Dieses elastische physikalische Pendel wurde im Sinne einer räumlichen Diskretisierung durch ein mathematisches Pendel ersetzt, welches aus einem masselosen elastischen Stab besteht an dessen freien Ende sich ein Massenpunkt befindet. Die Bewegungsgleichungen dieses Einkörperproblems wurden mit quadratischen finiten Elementen in der Zeit ( $k = 2$ ) diskretisiert. Die Berechnungen der einfachen  $cG(2)$ -Methode

wurden mit den Berechnungen der *dynamic integration rule* und der *Gradientenerweiterung* verglichen. Für beide Modifikationen wurden die Erhaltungseigenschaften und die Konsistenz zur cG(2)-Methode bestätigt. Bei den Berechnungen im steifen Fall führte die *Gradientenerweiterung* auch auf eine sichtlich verbesserte Approximation des Stabkraftverlaufes über der Zeit.

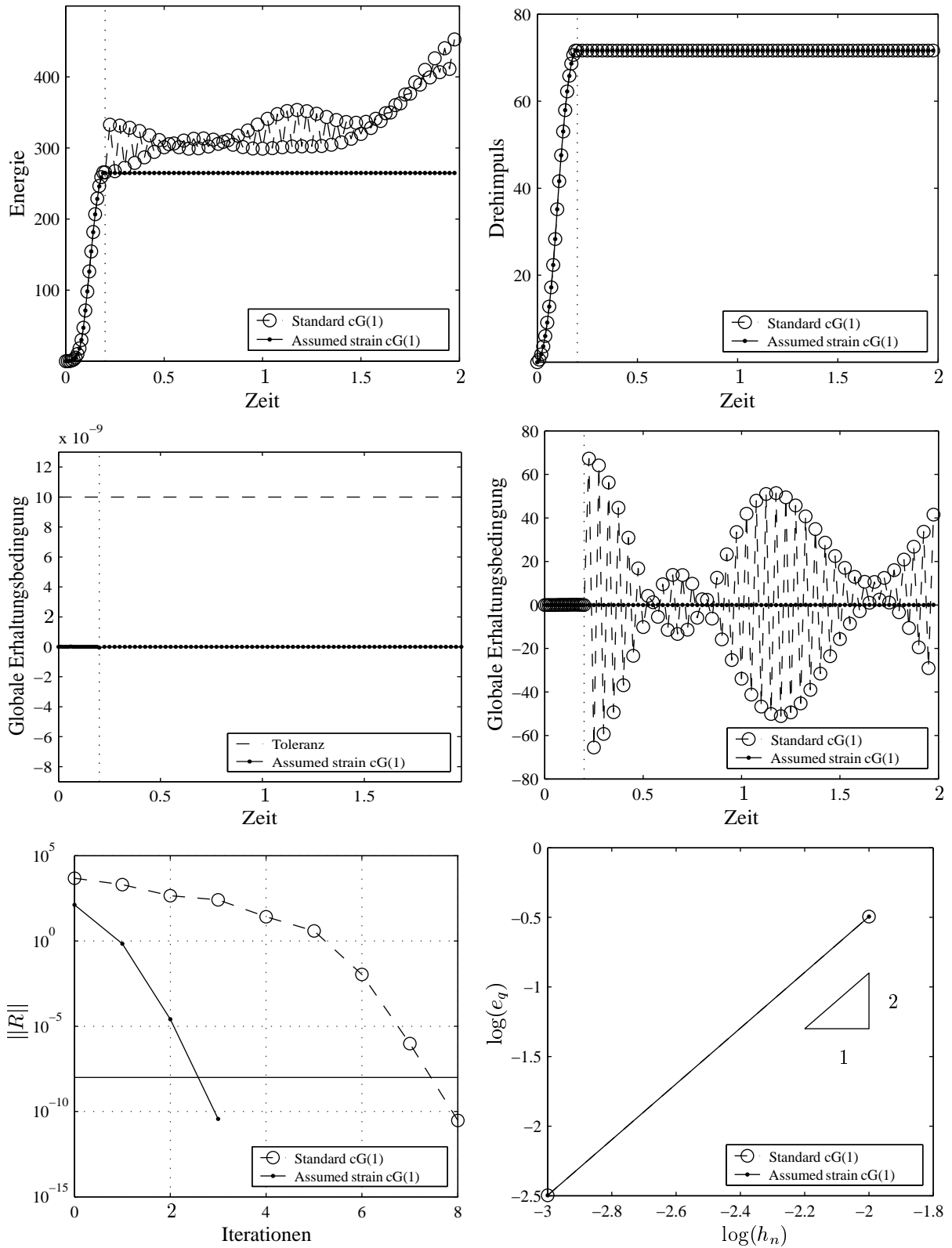
## 9 Ausblick

In der Fortsetzung des Forschungsvorhabens sollen im Wesentlichen mechanische Integratoren höherer Ansatzordnung ( $k > 1$ ) untersucht werden. Hierzu sollen die bereits beim Einkörperproblem (siehe Abschnitt 7.2) erfolgreich verwendeten Ansätze *dynamic integration rule* und *Gradientenerweiterung* auf die nichtlineare Elastodynamik erweitert werden.

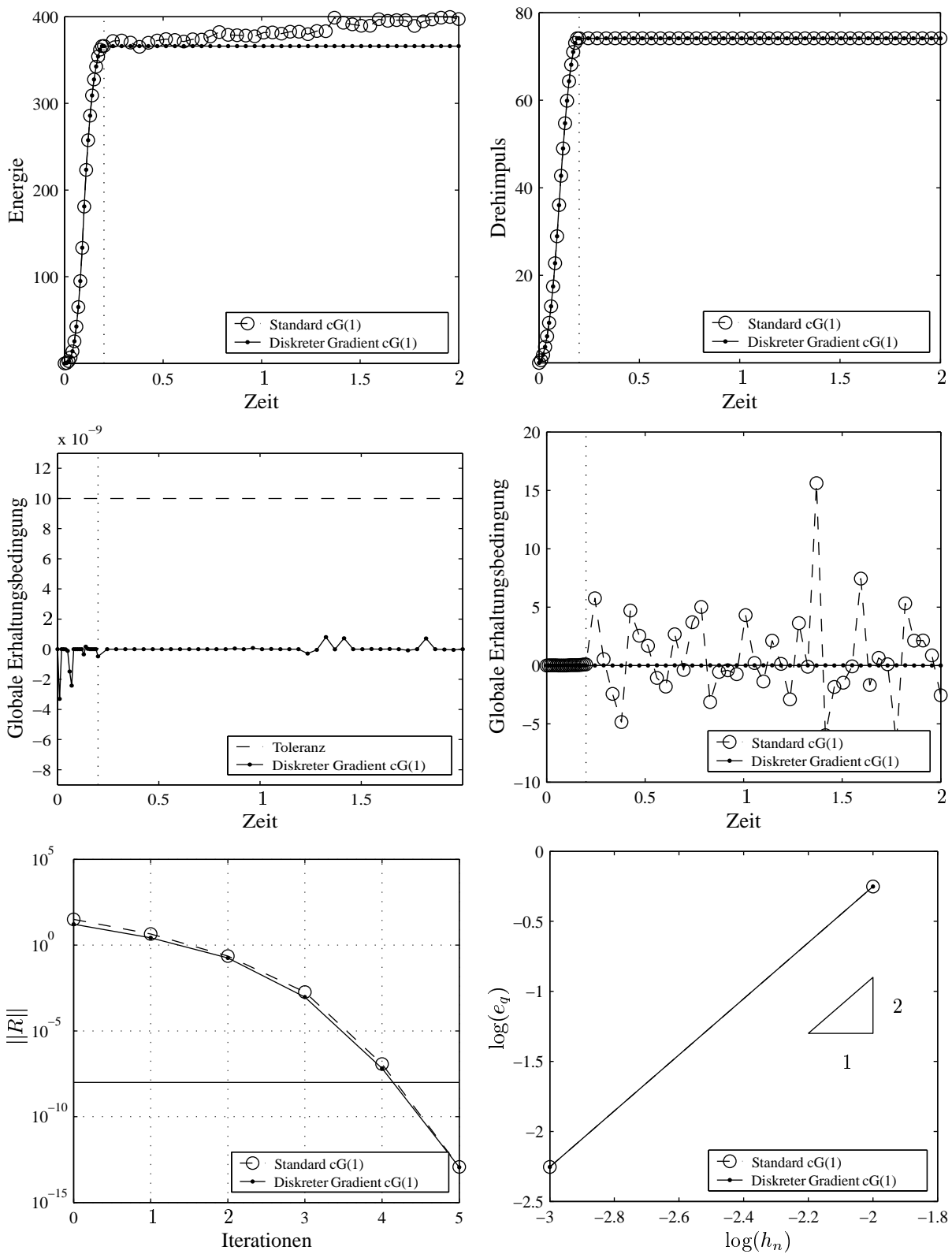
Zunächst sollen in einem Zwischenschritt Massenpunktsysteme untersucht werden. Die Problemstruktur bei Massenpunktsystemen und bei der semidiskreten nichtlinearen Elastodynamik ist vergleichbar: Man betrachtet Bewegungen von Punkten im Euklidischen Raum auf die ohne äußere Kräfte nur gegenseitige innere Kräfte wirken. Der wesentliche Vorteil der Betrachtung von Massenpunktsystemen gegenüber der semidiskreten Elastodynamik besteht in dem reduzierten Programmieraufwand. In diesem Zusammenhang kann auf die Vorarbeit [2] zurückgegriffen werden. Die unterschiedlichen Ansätze sollen für Massenpunktsysteme formuliert und getestet werden, bevor im Anschluss die Erweiterung auf die nichtlineare Elastodynamik erfolgt. In erster Linie sollen quadratische Zeitelemente ( $k = 2$ ) und eventuell auch kubische Zeitelemente ( $k = 3$ ) implementiert werden.

Des Weiteren wird eine zusätzliche Steigerung der Effizienz der entwickelten mechanischen Integratoren angestrebt, um die Berechnung mit Verfahren höherer Genauigkeitsordnung für die Anwendung attraktiver zu machen.

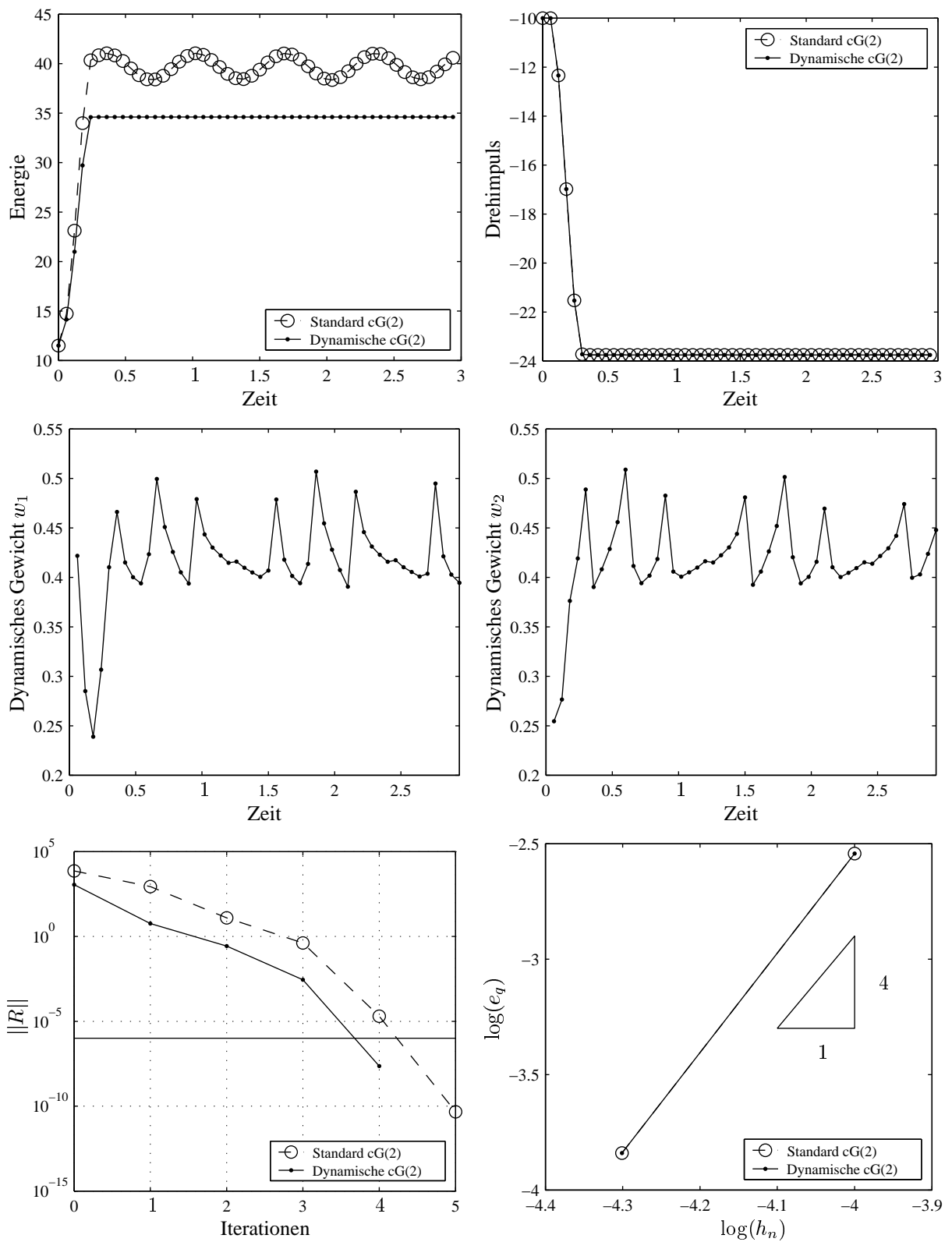




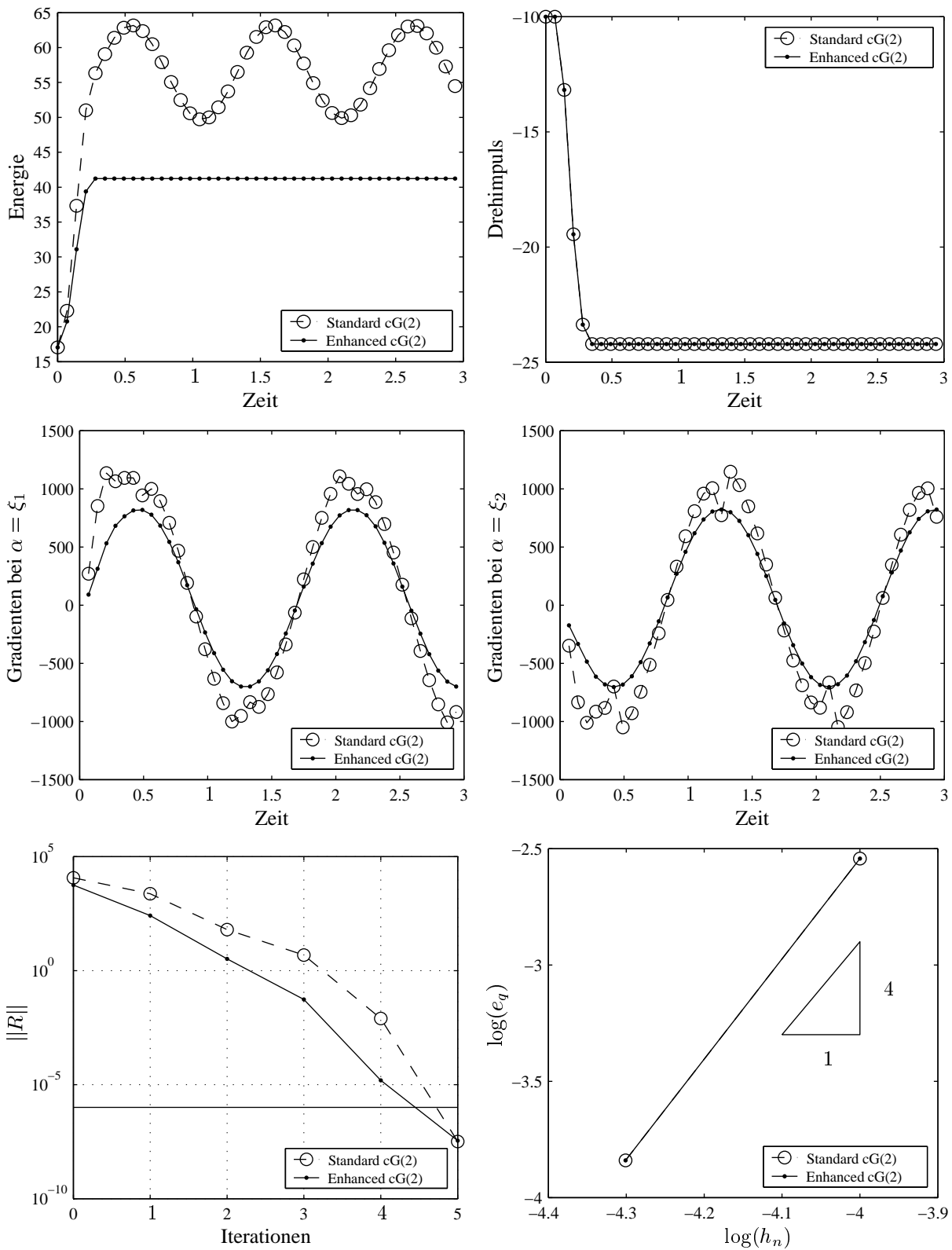
**Abbildung 5** Bewegung des Rahmenprofils aus St. Venant-Kirchhoff Material ( $E = 10^6$ ,  $\nu = 0.3$  und  $\rho = 0.1$ ) im ebenen Spannungszustand. Berechnet mit der *assumed strain modification* für  $k = 1$  ( $F = 50$ ,  $T_L = 0.2$ ,  $h_n = 0.01$  bzw.  $h_n = 0.025$ ).



**Abbildung 6** Ebene Bewegung des Rahmenprofils aus Neo-Hooke Material ( $\lambda = 10^3$ ,  $\mu = 500$  und  $\rho = 0.1$ ). Berechnet mit dem diskreten Gradienten für  $k = 1$  ( $F = 50$ ,  $T_L = 0.2$ ,  $h_n = 0.01$  bzw.  $h_n = 0.045$ ).



**Abbildung 7** Ebene Bewegung des Stabpendels aus St. Venant-Kirchhoff Material ( $E = 10^6$ ). Berechnet mit der *dynamic integration rule* für  $k = 2$  ( $T_L = 0.3$ ,  $h_n = 0.06$ ).



**Abbildung 8** Ebene Bewegung des Stabpendels aus St. Venant-Kirchhoff Material ( $E = 10^6$ ). Berechnet mit der Gradientenerweiterung für  $k = 2$  ( $T_L = 0.3$ ,  $h_n = 0.07$ ).

## Vorträge zur Thematik des Forschungsvorhabens

1. Groß M. Time-Stepping Schemes for Nonlinear Hamiltonian Systems Based on the Discontinuous Galerkin Method. *Kolloquium 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. *EURO-MECH 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.

## Veröffentlichungen zur Thematik des Forschungsvorhabens

1. Betsch P. and Steinmann P. Inherently Energy Conserving Time Finite Elements for Classical Mechanics. *Journal of Computational Physics*, 160:88-116, 2000.
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. Groß M. Time-Stepping Schemes for Nonlinear Hamiltonian Systems Based on the Discontinuous Galerkin Method. UKL/LTM Report, U00-02, Universität Kaiserslautern, 2000.
4. Groß M., Betsch P. and Steinmann P. Comparison of Galerkin Methods Applied to Classical Mechanics. UKL/LTM Report, J00-07, Universität Kaiserslautern, 2000.
5. 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.
6. Betsch P. and Steinmann P. Constrained Integration of Rigid Body Dynamics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 191:467-488, 2001.
7. 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.
8. 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.
9. 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.
10. 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.
11. Betsch P. and Steinmann P. Frame-indifferent Beam Finite Elements based upon the Geometrically Exact Beam Theory. To appear in *Int. J. Numer. Methods Eng.*
12. Betsch P. and Steinmann P. A DAE Approach to Flexible Multibody Dynamics. UKL/LTM Report, J02-01, Universität Kaiserslautern, 2002, (also submitted to Multibody System Dynamics).

## Literatur

- [1] Betsch P. *Finite Elemente II*. Vorlesungsmitschrift, 1998.
- [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. Inherently Energy Conserving Time Finite Elements for Classical Mechanics. *Journal of Computational Physics*, 160:88–116, 2000.
- [4] 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.
- [5] Courant R. and Hilbert D. *Methoden der mathematischen Physik*. Springer, 4th edition, 1993.
- [6] Eriksson K. and Estep D., Hansbo P., and Johnson C. *Computational Differential Equations*. Cambridge University Press, 1996.
- [7] 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.
- [8] Goldstein H. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 2nd edition, 1980.
- [9] Gonzalez O. *Design and Analysis of Conserving Integrators for Nonlinear Hamiltonian Systems With Symmetry*. Dissertation, 1996.
- [10] Gonzalez O. Time Integration and Discrete Hamiltonian Systems. *Journal of Nonlinear Science*, 6:449–467, 1996.
- [11] Gonzalez O. Exact Energy and Momentum Conserving Algorithms for General Models in Nonlinear Elasticity. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, (190):1763–1783, 2000.
- [12] 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.
- [13] Greenspan D. *Discrete Models*. Addison-Wesley, 1973.
- [14] Greenspan D. Conservative Numerical Methods for  $\ddot{x} = f(x)$ . *Journal of Computational Physics*, 56:28–41, 1984.
- [15] Greenspan D. Completely Conservative, Covariant Numerical Methodology. *Computers and Mathematics with Applications*, 29(4):37–43, 1995.
- [16] Hairer E. *Numerical Geometric Integration*. Lecture notes, 1999.
- [17] Hairer E. and Wanner G. *Solving Ordinary Differential Equations*, volume 2. Springer, 1991.
- [18] Hamming R. W. *Numerical Methods for Scientists and Engineers*. McGraw-Hill, 2nd edition, 1973.
- [19] Hoffman K. and Kunze R. *Linear Algebra*. Prentice-Hall, 2th edition, 1971.
- [20] Hughes T. J. R. *The Finite Element Method*. Dover, Mineola, New York, 2000.
- [21] Hulme B. L. One-Step Piecewise Polynomial Galerkin Methods for Initial Value Problems. *Mathematics of Computation*, 26(118):415–426, 1972.
- [22] Kuypers F. *Klassische Mechanik*. VCH-Verlag, 2nd edition, 1988.
- [23] LaBudde R. A. and Greenspan D. Discrete Mechanics - A General Treatment. *Journal of Computational Physics*, 15:134–167, 1974.
- [24] 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.

- [25] 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.
- [26] Simo J. C. and Tarnow N. The Discrete Energy-Momentum Method. Conserving Algorithms for Nonlinear Elastodynamics. *Z. angew. Math. Phys.*, (43):757–792, 1992.
- [27] Simo J. C., Tarnow N., and Wong K. K. Exact Energy-Momentum Conserving Algorithms and Symplectic Schemes for Nonlinear Dynamics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, (100):63–116, 1992.
- [28] 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.
- [29] Stuart A. M. and Humphries A. R. *Dynamical Systems and Numerical Analysis*. Cambridge University Press, 1998.
- [30] Zurmühl R. and Falk S. *Matrizen I*. Springer, 6th edition, 1992.