



TU Clausthal

Eine iterationsfreie Finite-Elemente Methode im Rahmen der finiten Thermoviskoelastizität

D i s s e r t a t i o n

zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Ahmad-Wahadj Hamkar

aus Kabul
(Geburtsort)

genehmigt von der Fakultät für
Mathematik/Informatik und Maschinenbau,
der Technischen Universität Clausthal,

Tag der mündlichen Prüfung
25.06.2013

Vorsitzender der Promotionskommission
Prof. Dr. Ing. Alfons Esderts

Hauptberichterstatter
Prof. Dr.-Ing. habil. Stefan Hartmann

Berichterstatter
Prof. Dr.-Ing. habil. Peter Wriggers
Leibniz Universität Hannover

für

N.-J. Hamkar

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Mechanik der Universität Kassel von 2006 bis 2008 und am Institut für Technische Mechanik der Technischen Universität Clausthal von 2008 bis 2010 im Rahmen des von der Deutschen Forschungsgemeinschaft geförderten Forschungsprojekts: “Konsistente Raum-Zeitdiskretisierung thermomechanisch gekoppelter elastomerer Strukturen mit Hilfe von Rosenbrock-Verfahren”.

Mein besonderer Dank gilt meinem akademischen Lehrer Herrn Prof. Dr.-Ing. Stefan Hartmann für die Anregung zu dieser Arbeit, für die Förderung und Motivation während der gesamten Zeit meiner Forschungstätigkeit sowie für die Übernahme des Hauptreferats. Im Besonderen bedanke ich mich bei ihm für seine hervorragende Betreuung sowie für das stets angenehme Arbeitsklima. Ohne sein ungebrochenes Interesse am Fortgang der Arbeit, hätte sie nicht beendet werden können.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Peter Wriggers danke ich recht herzlich für das Interesse an meiner Arbeit und für die bereitwillige Übernahme des Korreferats. Für das Mitwirken in der Prüfungskommission möchte ich Herrn Prof. Dr.-Ing. Alfons Esderts ebenfalls herzlich danken.

Meinem langjährigen Zimmerkollegen Herrn Dr. Karsten J. Quint spreche ich meinen Dank für die zahlreichen fachlichen und nichtfachlichen Diskussionen aus, von denen ich stets profitieren konnte. Sie haben einen großen Beitrag zum Gelingen meiner Arbeit beigetragen.

Für die gute Zusammenarbeit innerhalb der Arbeitsgruppe Festkörpermechanik am Institut für Technische Mechanik der TU Clausthal bedanke ich mich insbesondere bei meinen ehemaligen Kollegen Dipl.-Ing. Steffen Rothe, Dipl.-Ing. Torben Netz und Dipl.-Phys. Stephan Krämer. Vor allem möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Gunther Brenner und Herrn Prof.(em.) Dr.-Ing. Michael F. Jischa sowie allen Angestellten des Instituts für die herzliche Aufnahme in Clausthal bedanken. Die angenehme Arbeitsatmosphäre erleichterte meinen Umzug nach Clausthal.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Detlef Kuhl und seinen ehemaligen Mitarbeitern Herrn Dr. Sönke Carstens und Frau Dr. Sandra Carstens danke ich für die offene und angenehme Arbeitsatmosphäre im Laufe meiner Zeit in Kassel.

Weiterhin möchte ich nicht versäumen, mich bei allen ehemaligen Kollegen, die hier namentlich nicht genannt sind, für die vielen Gespräche der Aufmunterung, den unzähligen Diskussionen und zahlreichen Anregungen während meiner wissenschaftlichen Arbeitsperiode zu bedanken.

Herrn Dr. Thomas Fehn und Herrn Dennis John bin ich für ihr sorgfältiges Korrekturlesen, das maßgeblich zur Reduktion der Fehler in der Dissertation beigetragen haben, zur Dank verpflichtet.

Nicht zuletzt gilt mein Dank meiner Familie für ihren starken Rückhalt und ihre Unterstützung. Insbesondere bedanke ich mich bei meiner Frau Farkhonda und meiner liebevollen Tochter Szara. Ohne ihr Verständnis, ihr Rückhalt und die Hinnahme der zahlreichen Entbehrungen wäre die vorliegende Arbeit nicht möglich gewesen.

Vielen Dank!

Erlangen, im Februar 2013

Ahmad-Wahadj Hamkar

Abstract

In the industrial environment in many instances the question of cost reduction, which may arise in one way or another with the redevelopment or enhancement of products and processes, occupies center stage. In this context, numerical simulation techniques have become established as a widely self-contained engineering discipline providing a major value to master the economical requirements in the development process of products. With increasing computing power, as an important prerequisite for the successful use of numerical simulation techniques, a significantly rising tendency towards complex physical modeling becomes apparent. This means that the demand for simulations of more and more complex tasks rises which in turn increases the complexity of numerical methods.

In this sense, this thesis contributes to further development on numerical procedures for the solution of thermomechanical coupled processes.

First, a material model of finite thermo-viscoelasticity is provided that considers main thermomechanical behavior of an elastomeric material including nonlinear rate-dependent viscous response associated to large deformation as well as nonlinear temperature dependence. The numerical treatment of the resulting thermomechanical coupled problem is realized in the context of a modern approach by means of a consistent space-time discretization. The application of mixed finite elements for the spatial discretization leads to a nonlinear (semi-discretized) differential-algebraic equation system, where the differential part results from the evolution of the internal variables (describing inelastic effects) and the time-dependent temperature field. The algebraic part of the system comes from the quasi-static balance of linear momentum. Integration over time is performed employing so-called Rosenbrock-type methods. Rosenbrock-type methods have the enormous advantage of a totally iteration-free scheme and of being a high-order approach with the possibility of applying a numerical reasonable time-adaptive procedure.

It is shown that for the problem of consideration more efficient finite element computations result in comparison to standard finite element approaches since the time integration on the basis of Rosenbrock-type methods does not lead to a system of non-linear equations. In other words, all aspects of implicit finite elements as local iterations on Gauss-point level and global equilibrium iterations do not occur, which yields to a drastic reduction of the computational time.

The performance and applicability of the developed iteration-free solution procedure is investigated by the simulation of several thermomechanical coupled examples.

Inhaltsverzeichnis

Glossar	vii
1. Einleitung	1
1.1. Motivation der Arbeit	1
1.2. Literaturüberblick	3
1.3. Zielsetzung	8
1.4. Gliederung der Arbeit	8
2. Kontinuumsmechanische Grundlagen	11
2.1. Kinematik	11
2.1.1. Konfiguration, Bewegung, Deformation	11
2.1.2. Verzerrungstensoren	15
2.1.3. Deformationsgeschwindigkeiten	16
2.2. Spannungstensoren und Wärmeflussvektoren	17
2.3. Bilanzgleichungen der Thermomechanik	19
2.3.1. Massenbilanz	20
2.3.2. Impulsbilanz	21
2.3.3. Drehimpulsbilanz	21
2.3.4. Energiebilanz – Erster Hauptsatz der Thermodynamik	22
2.3.5. Entropiebilanz – Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik	24
2.4. Konzept der Dualen Variablen	26
3. Modellierung der Materialeigenschaften von Elastomeren	29
3.1. Charakteristische Eigenschaften von Elastomeren	29
3.2. Grundlegende Prinzipien der Materialmodellierung	32
3.3. Thermodynamisch konsistente Materialmodellierung	34
3.3.1. Motivation an einem rheologischen Modell	34
3.3.2. Multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten	36
3.3.3. Struktur der freien Energie	42
3.3.4. Auswertung der Dissipationsungleichung	43
3.4. Ein Modell der finiten Thermoviskoelastizität	46
3.4.1. Herleitung der Spannungsrelationen	49
3.4.2. Formulierung der Evolutionsgleichungen	53
3.4.3. Isotherme Betrachtung des Materialmodells	56

3.5.	Herleitung der Wärmeleitungsgleichung	57
4.	Formulierung des Anfangs-Randwertproblems	61
4.1.	Das Anfangs-Randwertproblem in der lokalen Form	61
4.2.	Schwache Form – Variationsformulierung	63
4.2.1.	Schwache Formulierung der Impulsbilanz	64
4.2.2.	Gemischte Variationsformulierung – Dreifeldfunktional	66
4.2.3.	Schwache Formulierung der Wärmeleitungsgleichung	68
4.3.	Schwache Form des thermomechanisch gekoppelten Problems	69
5.	Konsistente Raum- Zeitdiskretisierung	73
5.1.	Globale iterationsfreie Lösungsprozedur	73
5.2.	Raumdiskretisierung mittels der Finite-Elemente-Methode	76
5.2.1.	Isoparametrisches Konzept	78
5.2.2.	Verschiebungs- und Temperatursteuerung	88
5.2.3.	Gemischte Elementformulierung	90
5.3.	Zeitdiskretisierung mittels Rosenbrock Verfahren	92
5.3.1.	Herleitung der Verfahrensvorschrift	95
5.3.2.	Umsetzung auf thermomechanisch gekoppelte Probleme	102
5.3.3.	Formulierung auf Elementebene	111
5.3.4.	Adaptive Schrittweitenkontrolle	123
6.	Numerische Beispiele	127
6.1.	Untersuchung der numerischen Effizienz	127
6.2.	Veranschaulichung spezieller thermomechanischer Effekte	138
6.3.	Untersuchung des Materialverhaltens	144
6.4.	Untersuchung einer praxisrelevanten Anwendung	151
7.	Zusammenfassung und Ausblick	161
A.	Anhang	165
A.1.	Methode der Lagrange-Multiplikatoren	165
A.2.	Der DIRK/MLNA Lösungsansatz	166
A.3.	Tangentenoperatoren	169
A.3.1.	Tangentenoperator des mechanischen Anteils	170
A.3.2.	Tangentenoperator des thermischen Anteils	171
A.3.3.	Tangentenoperatoren der Evolutionsgleichung	176
A.4.	Auflistung der Rosenbrock-Verfahren	177
A.5.	Zusammenstellung der Materialparameter	178

Glossar

Symbol	Beschreibung	Seite
Γ_e	Rand des diskreten Volumenelements	78
Ω_e	Diskretes Volumenelement, Subgebiet von \mathcal{B}^h	78
Ω_\square	Normiertes Referenzelement	79
\mathcal{R}	Referenzkonfiguration des materiellen Körpers	12
$\partial\mathcal{R}$	Rand des materiellen Körpers \mathcal{B} in der Referenzkonfiguration	62
$\partial_\theta\mathcal{R}$	Dirichlet-Rand von \mathcal{B} mit vorgegebenen Temperaturen	62
$\partial_u\mathcal{R}$	Dirichlet-Rand von \mathcal{B} mit vorgegebenen Verschiebungen	62
$\partial_q\mathcal{R}$	Neumann-Rand von \mathcal{B} mit vorgegebenem Wärmefluss	62
$\partial_s\mathcal{R}$	Neumann-Rand von \mathcal{B} mit vorgegebenen Spannungen	62
χ	Beliebige Konfiguration eines materiellen Körpers	11
χ_t	Momentankonfiguration des materiellen Körpers	12
$\tilde{\chi}_t$	Inelastische Zwischenkonfiguration des materiellen Körpers	39
$\hat{\chi}_t$	Mechanische Zwischenkonfiguration des materiellen Körpers	36
χ_R	Bewegung des materiellen Körpers	12
\mathcal{B}	Materieller Körper	11
\mathcal{B}^h	Diskretes Gebiet des materiellen Körpers	78
$\partial\mathcal{B}^h$	Rand von des diskreten Gebiets \mathcal{B}^h	78
\mathbf{g}_i	Allgemeine Basisvektoren des Vektorraums \mathbb{V}^3	22
\mathcal{P}	Materieller Punkt	11
Div	Divergenzoperator bezüglich materieller Koordinaten	20
div	Divergenzoperator bezüglich räumlicher Koordinaten	20

Symbol	Beschreibung	Seite
\mathbb{E}^3	Dreidimensionaler Euklidischer Raum der physikalischen Anschauung	12
Grad	Gradient bezüglich materieller Koordinaten	14
grad	Gradient bezüglich räumlicher Koordinaten	16
\mathbb{V}^3	Dreidimensionaler Vektorraum	12
Γ	Entropieproduktion durch irreversible Prozesse	24
Γ	Ansatz für die Volumendehnung	66
α_{ij}	Wichtungsfaktoren der Rosenbrock-Verfahren	99
α	Materialparameter des Gleichgewichtsanteils der Elastizitätsbeziehung	48
α_{Θ}	Thermischer Ausdehnungskoeffizient	37
δ	Innere Dissipation	25
η	Viskositätsfunktion	45
η_0	Temperaturabhängige Materialfunktion von η	54
γ_{ij}	Wichtungsfaktoren der Rosenbrock-Verfahren	99
a_{ij}	Wichtungsfaktoren der Runge-Kutta Verfahren	95
κ	Materialfunktion der Wärmeleitung nach dem Fourier'schen Wärmeleitgesetz	45
\varkappa	Materialparameter der Viskositätsfunktion	54
λ_p	Lagrange-Multiplikator des Dreifeldfunctionals	66
μ	Materialparameter des Maxwell Elements	48
ω_s	Materialparameter der Viskositätsfunktion	54
φ	Materialfunktion der thermischen Ausdehnung	37
ψ	Freie Energie (Helmholtz'sche Energie)	25
ψ_M	Mechanischer Anteil der freien Energie	42
$\bar{\psi}_M^{\text{eq}}$	Gleichgewichtsanteil der mechanischen freien Energie ψ_M	43
$\bar{\psi}_M^{\text{ov}}$	Überspannungsanteil der mechanischen freien Energie ψ_M	43
ψ_{Θ}	Deformationsunabhängiger Anteil der freien Energie	42
ϱ_R	Massendichte in materieller Darstellung	20
ϱ	Massendichte in räumlicher Darstellung	20
θ	Absolute Temperatur	25
$\bar{\theta}$	Dirichlet-Randbedingung des Temperaturfeldes	62
$\delta\theta$	Virtuelle Temperaturen	68
\bar{v}	Isochorer Anteil der freien Energie $\bar{\psi}_M^{\text{eq}}$	46

Symbol	Beschreibung	Seite
b_i	Wichtungsfaktoren de Runge-Kutta Verfahren	95
c_{10}	Materialparameter des Gleichgewichtsanteils der Elastizitätsbeziehung	48
c_{01}	Materialparameter des Gleichgewichtsanteils der Elastizitätsbeziehung	48
c_i	Stützstellen der Runge-Kutta Verfahren	95
c_p	Spezifische Wärmekapazität	58
c_{p0}	Materialparameter der spezifischen Wärmekapazität	59
c_{pk}	Materialparameter der spezifischen Wärmekapazität	59
dV	Materielles Volumenelement in \mathcal{R}	15
dv	Materielles Volumenelement in χ_t	15
E	Innere Energie	23
$\bar{\eta}_0$	Materialparameter der Viskositätsfunktion	54
H	Entropieproduktion aufgrund des Wärmeaustausch	24
J	Determinante des Deformationsgradienten \mathbf{F}	48
J_M	Determinante des Deformationsgradienten \mathbf{F}_M	42
K	Kompressionsmodul	48
K	Kinetische Energie	23
L_a	Äußere Spannungsleistung	23
L_i	Innere Spannungsleistung	23
m_i	Stützstellen der Rosenbrock-Verfahren	100
m	Masse eines materiellen Körpers	20
p	Wärmeproduktion infolge thermoelastischer Kopp- lung	58
Q	Wärmefluss	23
q	Wärmeflussdichte	19
r_0	Materialparameter der Viskositätsfunktion	54
S	Entropie des materiellen Körpers	24
e	Spezifische innere Energie pro Masseneinheit	23
s	Spezifische Entropie	24
s_0	Temperaturabhängige Materialfunktion von η	54
\bar{s}_0	Materialparameter der Viskositätsfunktion	54
s_∞	Materialparameter der Viskositätsfunktion	54
t	Zeit	12
U	Volumetrischer Anteil der freien Energie $\bar{\psi}_M^{\text{eq}}$	46
\bar{w}_{ov}	Formänderungsenergie des Maxwell Elements	48
W_k	Wichtungsfaktoren der Gauss-Quadratur	84

Symbol	Beschreibung	Seite
ξ	Koordinaten des Referenzelement Ω_{\square}	79
ξ_k	Gauss-Punkt Koordinaten	84
dA	Materielles Flächenelement in \mathcal{R}	15
da	Materielles Flächenelement in χ_t	15
D_c	Drehimpulsvektor des materiellen Körpers bezogen auf den Ortsvektor c	21
dX	Materielles Linienelement in \mathcal{R}	14
dx	Materielles Linienelement in χ_t	14
I	Impulsvektor des materiellen Körpers	21
k	Volumenkraftdichte	21
n_R	Normaleneinheitsvektor in \mathcal{R}	18
n	Normaleneinheitsvektor in χ_t	17
q	Cauchy'scher Wärmeflussvektor	19
q_R	Piola-Kirchhoff'scher Wärmeflussvektor	19
t	Cauchy'scher Spannungsvektor	17
t_R	Piola-Kirchhoff'scher Spannungsvektor	18
u	Verschiebungsfeld	12
\bar{u}	Dirichlet-Randbedingung des Verschiebungsfeldes	62
δu	Virtuelle Verschiebungen	64
v	Geschwindigkeitsfeld in räumlicher Darstellung	16
\dot{v}	Beschleunigungsfeld in räumlicher Darstellung	21
x	Geometrischer Vektor (Ortsvektor)	12
\check{I}	Verzerrungstensor bezüglich der Zwischenkonfiguration $\check{\chi}_t$	39
A	Almansi'scher Verzerrungstensor	16
B	Linker Cauchy-Green Tensor	16
C	Rechter Cauchy-Green Tensor	16
\check{C}_e	Rechter Cauchy-Green Tensor der Zwischenkonfiguration $\hat{\chi}_t$	39
C_M	Rechter Cauchy-Green Tensor der mechanischen Zwischenkonfiguration	39
\bar{C}_v	Rechter Cauchy-Green Tensor der Zwischenkonfiguration $\check{\chi}_t$	39
D	Verzerrungsgeschwindigkeitstensor	17
E	Green'scher Verzerrungstensor	16
δE	Variation des Green'schen Verzerrungstensors	65

Symbol	Beschreibung	Seite
$\check{\mathbf{F}}_e$	Elastischer Anteil des Deformationsgradienten	37
\mathbf{F}	Deformationsgradient	14
\mathbf{F}_M	Mechanischer Anteil des Deformationsgradienten	36
\mathbf{F}_Θ	Thermischer Anteil des Deformationsgradienten	36
$\bar{\mathbf{F}}_v$	Inelastischer, viskoser Anteil des Deformationsgradienten	37
\mathbf{L}	Räumlicher Geschwindigkeitsgradient	16
\mathbf{R}	Orthogonaler Rotationstensor der polaren Zerlegung	15
\mathbf{S}_M	gew. Cauchy Spannungstensor der Zwischenkonfiguration $\hat{\chi}_t$	41
$\check{\mathbf{S}}_v$	gew. Cauchy Spannungstensor der Zwischenkonfiguration $\check{\chi}_t$	41
\mathbf{T}	Cauchy Spannungstensor	17
\mathbf{T}_R	Erster Piola-Kirchhoff'scher Spannungstensor	18
$\tilde{\mathbf{T}}$	Zweiter Piola-Kirchhoff'scher Spannungstensor	18
\mathbf{U}	Rechter Strecktensor	15
\mathbf{V}	Linker Strecktensor	15
\mathbf{W}	Drehgeschwindigkeitstensor	17
λ_Θ	Lagrange-Multiplikatoren der Knotentemperaturen	89
λ_u	Lagrange-Multiplikatoren der Knotenverschiebungen	89
Θ	Unbekannte Knotentemperaturen	81
Θ_a	Gesamtvektor der Knotentemperaturen	81
$\bar{\Theta}$	Vorgegebene Knotentemperaturen	81
Θ_j	Knotentemperaturen am Knoten j	81
$\delta\Theta$	Virtuelle Knotentemperaturen	81
$\delta\Theta_j$	Knotentemperaturen am Knoten j	81
\mathbf{c}_u	Vektor der Zwangsbedingungen für die Knotenverschiebungen	88
\mathbf{c}_Θ	Vektor der Zwangsbedingungen für die Knotentemperaturen	89
\mathbf{C}_κ	Matrix der Konduktivität	87
\mathbf{C}_p	Wärmekapazitätsmatrix	87
\mathbf{e}	Spaltenvektor des Einheitstensors 2. Stufe	92
$\check{\mathbf{K}}_n^{\check{w}}$	Globale Steifigkeitsmatrix	109
$\mathbf{K}_n^{\Theta\Theta}$	Anteil der Steifigkeitsmatrix $\check{\mathbf{K}}_n^{\check{w}}$	109

Symbol	Beschreibung	Seite
$\mathbf{K}_n^{\Theta u}$	Anteil der Steifigkeitsmatrix $\check{\mathbf{K}}_n^{\check{w}}$	109
$\mathbf{K}_n^{u\Theta}$	Anteil der Steifigkeitsmatrix $\check{\mathbf{K}}_n^{\check{w}}$	109
\mathbf{K}_n^{uu}	Anteil der Steifigkeitsmatrix $\check{\mathbf{K}}_n^{\check{w}}$	109
\mathbf{N}_a	Matrix der Ansatzfunktionen aller Verschiebungsfreiheitsgrade, $\mathbf{N}_a = [\mathbf{N} \quad \bar{\mathbf{N}}]$	80
$\check{\mathbf{N}}$	Matrix der Ansatzfunktionen für die Volumendehnung der gemischten Elementformulierung	91
\mathbf{q}	Vektor aller inneren Variablen von Ω	85
\mathbf{S}_{ni}	Startvektor der Runge-Kutta Verfahren	96
$\mathbf{N}_{\Theta a}$	Matrix der Ansatzfunktionen aller Temperaturfreiheitsgrade, $\mathbf{N}_{\Theta a} = [\mathbf{N}_{\Theta} \quad \bar{\mathbf{N}}_{\Theta}]$	81
\mathbf{u}	Unbekannte Knotenverschiebungen	80
\mathbf{u}_a	Gesamtvektor der Knotenverschiebungen	80
$\bar{\mathbf{u}}$	Vorgegebene Knotenverschiebungen	80
\mathbf{u}_j	Knotenverschiebung am Knoten j	79
$\delta \mathbf{u}_j$	Virtuelle Knotenverschiebung am Knoten j	79
$\delta \mathbf{u}$	Virtuelle Knotenverschiebungen	80
\mathbf{V}_{ni}	Stufenableitung der Rosenbrock-Verfahren	99
\mathbf{w}	Vektor der Knotenverschiebungen und -temperaturen	102
\mathbf{y}	Vektor einer allgemeinen Zustandsgröße	95
\mathbf{y}_n	Näherung zum Zeitpunkt t_n einer allgemeinen Zustandsgröße	95
\mathbf{Y}_{ni}	Stufenwerte der Runge-Kutta Verfahren	96
$\dot{\mathbf{Y}}_{ni}$	Stufenableitung der Runge-Kutta Verfahren	96
\mathbf{y}_{n+1}	Näherung zum Zeitpunkt t_{n+1} einer allgemeinen Zustandsgröße	97
$\dot{\mathbf{y}}$	Vektor der Zeitableitung einer allgemeinen Zustandsgröße	95
θ^e	Knotentemperaturen des Elements e	81
$\delta \theta^e$	Virtuelle Knotentemperaturen des Elements e	81
\mathbf{B}_a^e	Ableitung der Ansatzfunktionen für die Knotenverschiebungen nach den räumlichen Koordinaten	82
$\mathbf{B}_{\Theta a}^e$	Ableitung der Ansatzfunktionen für die Knotentemperaturen nach den räumlichen Koordinaten	86
\mathbf{F}_{23}^e	Push-Forward Operator in diskreter Form	82
$\bar{\mathbf{p}}$	Vektor der vorgegebenen Knotenlasten	83

Symbol	Beschreibung	Seite
\mathbf{q}	Vektor der inneren Variablen am Gauss-Punkt	61
\mathbf{S}	Spaltenvektor der gewichteten Cauchy Spannungen	82
$\tilde{\mathbf{T}}$	Spaltenvektor der 2. Piola-Kirchhoff Spannungen	82
\mathbf{u}^e	Knotenverschiebungen des Elements e	80
$\delta \mathbf{u}^e$	Virtuelle Knotenverschiebungen des Elements e	80
\mathbf{Z}_{qk}^e	Koinzidenzmatrix der inneren Variablen ausgewertet am Gauss-Punkt ξ_k	85
\mathbf{Z}_a^e	Koinzidenzmatrix	80
ARWP	Anfangs-Randwertproblem	9
BE	Implizite-Euler Verfahren	133
BLAS	<i>Basic Linear Algebra Subprograms</i>	127
CDU	Clausius-Duhem Ungleichung	8
CPU	Hauptprozessor (<i>central processing unit</i>)	127
CSR	<i>Compressed sparse row storage format</i>	127
DAE	Algebro-Differentialgleichungssystem	6
DIRK	Diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren	6
EAS	<i>Enhanced Assumed Strain Elemente</i>	77
FEM	Finite-Elemente Methode	1
LAPACK	<i>Linear Algebra PACKage</i>	127
LIE	Linear-Implizite Euler Verfahren	132
MLNA	Multi-Level Newton Verfahren	6
MPI	<i>Message-Passing-Interface</i>	2
NURBS	<i>Non-Uniform Rational B-Splines</i>	77

1. Einleitung

1.1. Motivation der Arbeit

Seit dem Beginn des 20. Jahrhunderts haben Ingenieure Berechnungsmethoden entwickelt, um das mechanische Verhalten technischer Bauteile zu beschreiben. Bauteile, die im Ingenieurwesen zum Einsatz kommen, haben üblicherweise tragende oder verbindende Funktionen. Damit auftretende Lasten sicher abgeleitet werden können, ist die Frage nach der zulässigen Beanspruchung von ausschlaggebender Bedeutung. Werden spezifizierte Grenzwerte überschritten, so führt es zwangsläufig zu einer Beeinträchtigung der Funktionalität, was unweigerlich ein Versagensmechanismus des Bauteils zur Folge hat. Um die Auslegung von Bauteilen zu gewährleisten, werden unter anderem Näherungsverfahren, die zum Teil in Regelwerke festgehalten sind, herangezogen. Im Allgemeinen sind die Näherungsverfahren auf bestimmte Beanspruchungsfälle zugeschnitten, die einen expliziten Versagensmechanismus bezüglich einer Belastungsrichtung vorgeben. Der maßgebende Grenzfall wird in der Regel dann aus einer Variation weniger Parameter ermittelt. Aufgrund der umfangreichen Annahmen und der vereinfachten Betrachtung des Bauteils stellen die Ergebnisse allerdings mehr eine Abschätzung der realen Beanspruchung und weniger eine exakte Berechnung dar. Komplexe dreidimensionale, zeitabhängige Belastungsprozesse, bei denen nicht selten Koppelungsphänomene von physikalischen Feldgrößen eine besondere Rolle spielen, können mit solchen Verfahren nicht ausreichend erfasst werden.

Parallel zu den klassischen Lösungsmöglichkeiten hat sich durch die progressive Entwicklung im Bereich der Computertechnologie die numerische Simulation im Rahmen der optimalen Auslegung von technischen Prozessen und Bauteilen als leistungsfähige Alternative etabliert. Diesbezüglich sind Berechnungsverfahren und Materialmodelle entwickelt worden, die es erlauben, das mechanische Verhalten komplexer Strukturen zu analysieren. Die Finite-Element Methode (FEM) nimmt dabei aufgrund ihrer Flexibilität in vielen Anwendungsbereichen eine zentrale Rolle ein. Numerische Verfahren dieser Art basieren auf einer Abbildung der Realität mittels eines Ingenieurmodells und liefern die näherungsweise Lösung der zugehörigen Rand- und Anfangswertaufgaben. Der Vorteil gegenüber den klassischen Auslegungsmethoden liegt vor allem darin, dass das Deformationsverhalten der gesamten Struktur aber auch der Verlauf von Spannungen über die Zeit erfasst werden können. Darüber hinaus sind Aussagen über die Wechselwirkung und Interaktion von verschiedenen physikalischen Feldern möglich. Voraussetzung für den Erfolg numerischer Simulation ist jedoch zum einen die Formulierung

eines Materialmodells, welches in der Lage ist, das Werkstoffverhalten für den jeweiligen Anwendungsfall möglichst realistisch zu beschreiben, und zum anderen der Einsatz eines effizienten und robusten Lösungsalgorithmus, der Aussagen über die Genauigkeit der erhaltenen Näherungslösung treffen kann.

Zur Formulierung von Materialmodellen liefert die Kontinuumsmechanik geeignete Methoden. Ein thermomechanisches Materialmodell im Sinne der phänomenologischen Feldtheorie ist durch funktionale Relationen zwischen Deformations-, Temperatur- und Spannungsprozessen gekennzeichnet und stellt eine mathematische Beschreibung der in Experimenten beobachteten Materialeigenschaften dar. Diese Modellvorstellungen können bei realen Werkstoffen einen derart hohen Komplexitätsgrad erreichen, dass deren Einsatz in numerischen Simulationen aufgrund des erheblichen Aufwands uninteressant werden. Auf der anderen Seite besteht im Bereich der Entwicklung ein immer stärkeres Interesse an einer möglichst realistischen Modellierung der Materialeigenschaften unter realen Betriebsbedingungen, was eine hohe physikalische Auflösung der Modellbildung impliziert. Damit die numerischen Verfahren den geforderten Anforderungen unter realen Betriebsbedingungen nach ökonomischen Gesichtspunkten¹ gerecht werden, können prinzipiell folgende Maßnahmen durchgeführt werden:

Optimierung der Hardware

Die Anschaffung von Hochleistungsrechner ist eine relativ einfache durchsetzbare Maßnahme, die eine unmittelbare Steigerung der Performance initiiert. Die Entwicklung von immer leistungsfähigeren zentralen Recheneinheiten (CPUs) erzielt stetig steigende Recheninstruktionen pro Taktperiode, was eine Laufzeitreduktion der Berechnungsprogramme zur Folge hat. Die kontinuierliche Erhöhung der Taktfrequenz, als die gängige Variante zur Steigerung der Leistungsfähigkeit der CPUs, stagnierte jedoch aufgrund physikalischer Randbedingungen.² Die natürliche Konsequenz in der Entwicklung moderner Prozessoren ist hieraus die Einführung von Mehrkernprozessoren (Multicore-Processors) bei denen mehrere Recheneinheiten auf einem Chip angebracht sind. Mit Mehrkernprozessoren kann theoretisch eine vervielfachte Rechenleistung erzielt werden (das n-fache bei n-Kernen), die an die Bedingung einer Parallelisierung der Anwendungen auf mehrere Prozessoren geknüpft ist.³ Die real erzielbare Leistungssteigerung schwankt mit der Güte der parallelisierten Software. D.h. die optimale Ausnutzung moderner Hardware bedarf einen hohen Programmieraufwand, um die verwendete Software an die parallele Architektur anzupassen. In vielen Fällen, wie z.B. bei FEM

¹d.h. das Bestreben nach einer Verkürzung von Entwicklungszeiten, Herstellungsprozesse und Kostenminimierung.

²Bei Taktfrequenzen um 4 GHz ist die Abfuhr der Wärme nicht mehr sinnvoll zu realisieren.

³Im Rahmen einer parallelen Programmierung werden Anwendungen so modifiziert, dass sie komplett oder auch nur Fragmente davon gleichzeitig auf mehreren Prozessoren als Threads ausgeführt werden. Dazu gibt es grundsätzlich zwei Parallelisierungsstrategien: SMP (Shared-Memory-Programmierung) und MPI (Message-Passing-Interface-Programmierung), siehe hierzu z.B. [Gropp et al., 2007] oder [Rauber and Rüniger, 2010]

Softwarepaketen, die historisch gewachsen sind, ist die Umsetzung einer Parallelisierung gleich dem Aufwand einer Neuprogrammierung zu setzen.

Entwicklung effizienter Lösungsstrategien

In Fällen, in denen eine Neuprogrammierung sinnvoll ist, erscheint die Überlegung durchaus angebracht, eine effiziente Berechnungsstrategie zu entwickeln. Eine solche Entwicklung kann nur umgesetzt werden, wenn im Rahmen der FEM – ausgehend von der mathematischen Formulierung – die Anwendung von effizienten Lösungsprozeduren, z.B. adaptive Prozeduren, parallelisierte lineare Gleichungslöser (direkte oder iterative), Multigrid Löser, effiziente Zeitintegratoren, etc. ersichtlich werden. Im Vergleich zur der konventionellen Optimierung im Rahmen der FEM, nämlich der Entwicklung effizienter Elemente oder auch Materialmodelle, erzielt diese Vorgehensweise eine weitaus höhere Leistungssteigerung bezüglich der numerischen Performance. Eine numerische Simulation für komplexe Materialmodelle wäre hinsichtlich der ökonomischen Anforderungen durchführbar.

Die hier vorliegende Arbeit versteht sich als ein Ausschnitt der Entwicklung effizienter Lösungsstrategien. Sie liefert einen Beitrag zur der Entwicklung einer iterationsfreien Lösungsstrategie, die im Rahmen der nichtlinearen FEM ein Konzept zur Analyse thermomechanischen Verhaltens elastomerer Strukturen bei finiten Deformationsprozessen darstellt.

1.2. Literaturüberblick

Das Verhalten von Bauteilen wird maßgeblich durch den Konstruktionswerkstoff bestimmt. Polymere Werkstoffe als Konstruktionswerkstoffe nehmen in der industriellen Anwendung einen sehr hohen Stellenwert ein. Das allgemeine Interesse am physikalischen Verständnis der Materialeigenschaften von Polymer- und Elastomerwerkstoffen nimmt daher ständig zu, was an der Vielzahl von Aufsätzen ersichtlich wird. Stellvertretend auf dem Gebiet seien die Arbeiten von Simo [1987], Boyce et al. [1989], Arruda and Boyce [1993], Johnson et al. [1995], Holzapfel [1995], Miehe [1995], Lion [1996], Holzapfel and Simo [1996a,b], Reese and Wriggers [1997], Lion [1997a,b], Reese and Govindjee [1998a,b], Kaliske and Rothert [1998], Lion [2000a], Miehe and Keck [2000] und Besdo and Ihlemann [2003] erwähnt.⁴ Eine umfangreiche, chronologische Übersicht von Aufsätzen bezüglich der Modellierung von Kunststoffen im Rahmen der FEM ist in [Mackerle, 2004] zusammengetragen.

Zur kontinuumsmechanischen Beschreibung elastischer und inelastischer Effekte von Elastomeren gibt es in der Fachliteratur eine Reihe von verschiedenen Ansätzen. Im Be-

⁴Es wird hier keinesfalls der Anspruch auf Vollständigkeit erhoben, sondern eine chronologische Aufzählung dem Autor bekannten Literatur gegeben.

reich finiter viskoelastischer Deformationen⁵ wurden beispielsweise zur Beschreibung der inelastischen Effekte Modellansätze vorgeschlagen, die mit inneren Variablen vom Spannungstyp⁶ oder mit inneren Variablen von Deformationstyp⁷ formuliert sind. Modelle der finiten Viskoelastizität, die nicht auf inneren Variablen, sondern auf allgemeinen Gedächtnisfunktionalen basieren, finden sich in den Arbeit von Haupt [1971]. Vom rein mechanischen Standpunkt aus sind alle drei Zugänge äquivalent. Eine Erweiterung zu einer thermomechanisch konsistenten Materialformulierung kann erfahrungsgemäß von den Ansätzen, die mit inneren Variablen vom Deformationstyp arbeiten, einfacher umgesetzt werden, siehe [Lion, 2000b]. Mit der Formulierung eines thermodynamischen Potentials, was in vielen Fällen die freie Energie ist, werden Modelle zur Beschreibung thermomechanischer Prozesse hergeleitet.⁸ Demnach ist ein thermomechanisches Material durch funktionale Relationen zwischen Temperatur-, Deformations-, und Spannungsprozessen gekennzeichnet, die im wesentlichen durch Kopplungseffekte zwischen mechanischen und nicht mechanischen Feldgrößen verändert werden. So sind insbesondere Deformationen infolge thermischer Expansion oder Änderung des mechanischen Verhaltens als Wirkung des thermischen Feldes zu beobachten. Zyklische Prozesse resultieren in thermoelastischen und dissipativen Aufheizeffekten als Wirkung des mechanischen Feldes auf das thermische Feld. Abbildung 1.1 veranschaulicht diesen komplexen Zusammenhang. Die thermische Expansion und das thermoelastische Aufheizen werden demnach als explizite und die temperaturabhängigen Materialfunktionen sowie die Dissipation als implizite Kopplung betrachtet.

Die Berücksichtigung der vollständigen thermoviskoelastischen Kopplung ist für einige Problemstellungen nicht zwingend erforderlich, sie können einseitig entkoppelt behandelt werden. Beispielsweise löst Taylor et al. [1970] in einer Pionierarbeit das Wärmeleitungsproblem separat vom mechanischen Problem und berücksichtigt nur die Rückkopplung über die thermische Expansion. Eine einseitige Kopplung stellt allerdings für viele Fragestellung eine starke Idealisierung des Mehrfeldproblems dar. Die Umsetzung eines vollständig gekoppelten thermoviskoelastischen Anfangsrandwertproblems wurde bereits von Oden and Armstrong [1971] vorgestellt, jedoch nur teilweise numerisch umgesetzt. Für die numerische Behandlung von Mehrfeldproblemen haben sich Eingangs partitionierte Lösungsverfahren durchgesetzt, die eine effiziente Möglichkeit für schwach gekoppelte Probleme bereitstellen. Um einige zu nennen, die diese Vorgehensweise detailliert untersucht haben, sei auf Arbeiten von Park [1980], Park and Felippa [1980] und Felippa et al. [2001] hingewiesen. Neben den partitionierten Verfahren haben sich heutzutage gestaffelte Lösungsverfahren etabliert. Bei gestaffelten Berechnungen werden, im Gegensatz zur partitionierten, die Teilfelder sequentiell bearbeitet und innerhalb eines Zeitinkrements solange iteriert, bis sich die Teilfelder ausrei-

⁵Eine umfassende Darstellung der Theorie kleiner Deformationen findet man in den Lehrbüchern von Tobolsky [1967], Ferry [1980] oder Tschoegl [1989].

⁶siehe [Simo, 1987], [Holzapfel and Simo, 1996b], [Lion, 1996]

⁷siehe [Boyce et al., 1989], [Le Tallec et al., 1993], [Reese and Govindjee, 1998a,b], [Lion, 1997a,b]

⁸siehe [Lion, 1997a,b], [Reese, 2001], [Haupt, 2002] und [Heimes, 2005]

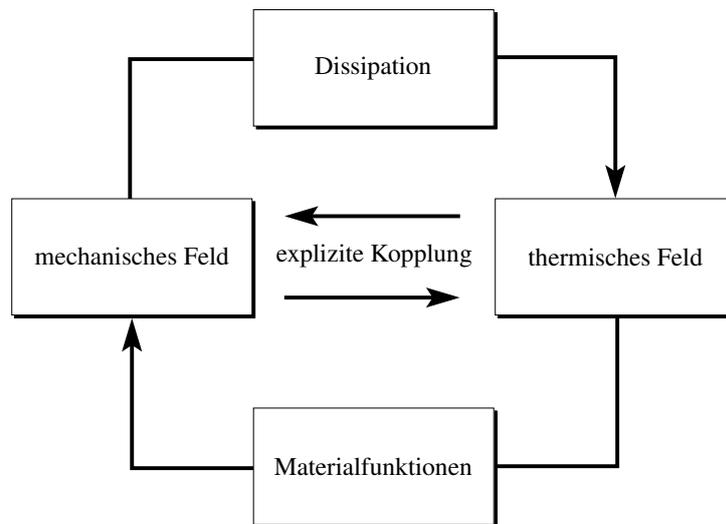


Abbildung 1.1.: Schematische Darstellung der thermomechanischen Kopplung gemäß [Ilias, 1994]

chend nahe dem Gleichgewicht befinden. Anfängliche Anwendungen finden sich z.B. in [Felippa and Park, 1980] oder [Argyris et al., 1981]. Als weiterführende Arbeiten, in denen gestaffelte Lösungsverfahren in Verbindung mit thermomechanischen Fragestellungen umgesetzt wurden, sind beispielhaft die Arbeiten von Lewis and Schrefler [1987], Simo and Miehe [1992] zu erwähnen und in Verbindung mit thermomechanisch gekoppelten Kontaktproblemen die von Rieger [2002] und Rieger and Wriggers [2004]. Eine Konvergenz der gestaffelten Verfahren ist a priori allerdings nicht gewährleistet. Sie wird maßgeblich von der Art und Wahl der Partitionierung der Felder (dem *Operator Split*) beeinflusst. Eine unbedingte Stabilität wird nur, wie in [Armero and Simo, 1992] bzw. [Armero and Simo, 1993] gezeigt, mit einem isentropen Operatorsplit erreicht. Für eine mäßige Kopplung beider Teilfelder könnte auch mit einem einfachen isothermen Operatorsplit eine robuste Lösung erzielt werden. Lübbing [1997] stellt hierzu im Zusammenhang mit der Thermoelastizität Konzepte zur Analyse vom Kopplungsgrad der Felder vor. Die monolithischen bzw. simultanen Lösungsverfahren stellen eine weitere Möglichkeit zur numerischen Behandlung von Mehrfeldproblemen dar. In [Glaser, 1991], [Parisch, 2003] und [Fritsch, 2004] wird dieser Ansatz in Verbindung mit einem impliziten Euler Verfahren in Kombination mit dem klassischen Prädiktor-Korrektor Verfahren⁹ für die Problemstellung der finiten Plastizität gekoppelt mit einer linearen Wärmeleitung angewandt. Reese and Govindjee [1998b] wenden das Verfahren zur thermomechanischen Beschreibung gummiartiger Polymerwerkstoffe an. Vergleichende Untersuchungen der verschiedenen Ansätze finden sich für die finite Thermo-

⁹Mit der von Mises Fließbedingung führt dies auf die sogenannte *radial return* Methode. Im allgemeinen Fall einer anderen assoziierten Fließregel wird nach Simo and Hughes [1987] der Algorithmus *general closest point projection* genannt.

elastizität in [Miehe, 1988] und für die finite Thermoviskoelastizität in [Reese, 2001].

Neben den Entwicklungen von Lösungsansätzen für Mehrfeldprobleme im Rahmen der numerischen Behandlung der gekoppelten Thermomechanik hat sich im Verhältnis zu den ersten Formulierungen der siebziger Jahre die nichtlineare FEM¹⁰ rasant entwickelt und besitzt gegenwärtig bei den eingebetteten numerischen Methoden einen hohen Stand. Anfänglich wurden Verfahren im Sinne der phänomenologischen Modellbildung ausgeweitet und die Weiterentwicklung der Elementformulierung unter dem Aspekt komplexerer konstitutiver Beziehungen und der Einbeziehung von Mehrfeld Phänomenen vorangetrieben.

Dies änderte sich durch die Arbeiten von Wittekindt [1991], Fritzen [1997], Ellsiepen [1999] und Ellsiepen and Hartmann [2001], die die Vorgehensweise als eine Anwendung der vertikalen Linienmethode zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen in Ort und Zeit interpretierten. Die Ortsdiskretisierung führt zunächst unter Verwendung der Methode der finiten Elemente auf ein nichtlineares Gleichungssystem in Abhängigkeit der unbekanntenen Knotenverschiebungen und den inneren Variablen, die durch Evolutionsgleichungen, d.h. gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung, definiert sind. Werden diese Gleichungen formal zu einem System von gewöhnlichen Differentialgleichungen assembliert, so bezeichnet man die Kopplung dieser beiden Gleichungen als explizites System von Algebra-Differentialgleichungen (DAE-System). Der algebraische Anteil beschreibt die sogenannten Gleichgewichtsbedingungen und der differentielle Anteil die Entwicklungsgleichungen der inneren Variablen an allen räumlichen Integrationspunkten und somit das Verfestigungsverhalten der Struktur.

In einem ersten Schritt war es das Ziel zunächst die klassische Vorgehensweise mit Verfahren der Numerischen Mathematik zu interpretieren, siehe [Ellsiepen and Hartmann, 2001]. Die Anwendung des klassischen impliziten Euler-Verfahrens zur Lösung des DAE-Systems führt zu jedem Zeitpunkt auf ein gekoppeltes nichtlineares Gleichungssystem, dessen Lösung die unbekanntenen Knotenverschiebungen sowie die unbekanntenen inneren Variablen liefert. Die Anwendung des Newton-Raphson Verfahrens führt jedoch nicht auf die häufig propagierte iterative Lösung (Spannungsalgorithmus) auf Gauss-Punkt Ebene. Erst nach genauer Betrachtung des ursprünglichen Artikels zur konsistenten Linearisierung, siehe [Simo and Taylor, 1985], wird offensichtlich, dass der Satz über implizite Funktionen angewendet wird. Das zugehörige Verfahren des gekoppelten nichtlinearen Gleichungssystems stellt der sogenannte Multilevel-Newton Algorithmus (MLNA) dar (siehe [Rabbat et al., 1979] und [Hoyer and Schmidt, 1984]). Mit der Betrachtung als DAE-System besteht nunmehr die Möglichkeit andere Vorgehensweisen anzuwenden und zu entwickeln. Zunächst sind steif-genaue diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren (DIRK)¹¹ in Verbindung mit dem MLNA untersucht

¹⁰Insbesondere ist hier die nichtlineare FEM unter Berücksichtigung von Materialmodellen vom Evolutionsgleichungstyp d.h. Modellen der Viskoelastizität, Plastizität und Viskoplastizität und ihrer Erweiterung zu einer thermomechanisch konsistenten Formulierung im Rahmen quasi-statischer Festkörperberechnungen gemeint.

¹¹siehe hierzu [Hairer and Wanner, 1996]

worden, siehe [Ellsiepen and Hartmann, 2001], bzw. BDF Verfahren z.B. in der Arbeit von [Eckert et al., 2004] und [Scherf, 2000]. Die Übertragung des DIRK/MLNA Ansatzes¹² auf große Deformationen, gemischte Elemente und unterschiedliche Materialeigenschaften sind in den Arbeiten [Hartmann, 2002], [Hartmann, 2006a], [Hartmann and Bier, 2008] und [Hartmann et al., 2008a] angewendet worden. Die Erweiterung des DIRK/MLNA Ansatzes auf thermomechanisch gekoppelte Problemstellungen im Zusammenhang mit Umformprozessen funktional gradierter Materialien wurde von Quint [2012] in Form einer simultanen Lösungsmethode umgesetzt.

Ein neuer Gesichtspunkt hingegen ist verbunden mit der Suche nach möglicherweise effizienteren Verfahren. In diesem Zusammenhang stellen die linear-impliziten Runge Kutta Verfahren (LIRK) eine interessante Möglichkeit dar. Innerhalb dieser Verfahrensklasse zeichnen sich die, nach Rosenbrock [1963] benannten, Rosenbrock-Verfahren als aussichtsreich aus. In der Fachliteratur existiert eine Vielzahl von Aufsätzen über die numerischen Eigenschaften der Verfahren und den verschiedenen Anwendungsmöglichkeiten. Exemplarisch seien die Arbeiten von Kaps and Wanner [1981], Shampine [1982], Roche [1988], Hairer et al. [1989a], Rentrop et al. [1989], Lubich and Roche [1990], Sandu et al. [1997] und Lang and Verwer [2001] erwähnt. Diese Verfahren haben den wesentlichen Vorteil, dass keine gekoppelten nichtlinearen, sondern nur lineare Gleichungssysteme auftreten. D.h. man erhält eine vollständig iterationsfreie Vorgehensweise und muss weder global noch auf Gauss-Punkt Ebene nichtlineare Gleichungssysteme iterativ lösen. In einer ersten Untersuchung wurden die Rosenbrock-Verfahren von Hartmann and Wensch [2006] für die Viskoelastizität bei kleinen Verzerrungen in einer vereinfachten Implementation angewendet. Eine FE-spezifische Struktur von globalen und elementbezogenen Größen wurde hier nicht direkt ausgenutzt. Die Umsetzung der Verfahren im Kontext einer typischen geschachtelten FE-Struktur ist in [Hamkar and Hartmann, 2007] vollzogen und die Implementation basierend auf eine Formulierung der finiten Viskoelastizität in [Hamkar and Hartmann, 2008] und [Hartmann and Hamkar, 2010]. Eine Entwicklung der Rosenbrock-Verfahren in Kombination mit einem FE-Ansatz basierend auf eine Elementformulierung hoher Ordnung wurde von Netz et al. [2013b] umgesetzt. Abgesehen von den beschriebenen Anwendungen für rein mechanische Problemstellungen wurden die Rosenbrock-Verfahren zudem zur Untersuchung von thermischen Fragestellungen herangezogen. Lang and Verwer [2001] entwickelten ein Rosenbrock-Verfahren, das speziell zur Behandlung nichtlinearer parabolischer partieller Differentialgleichungen entwickelt wurde, um damit das instationäre Wärmeleitungsproblem zu lösen. In [Lang, 2001] wurde dieses Verfahren in einer adaptiven FE-Implementierung realisiert und umfangreich untersucht. Rosenbrock-Verfahren in Verbindung mit einer nichtlinearen FE-Formulierung werden erstmals in dieser Arbeit für das monolithisch thermomechanisch gekoppelte Problem der finiten Thermoviskoelastizität entwickelt.

¹²DIRK/MLNA ist ein Lösungsansatz basierend auf die Diagonal-Impliziten Runge-Kutta (DIRK) Verfahren in Kombination mit dem Multi-Level Newton Algorithmus (MLNA).

1.3. Zielsetzung

Die Zielsetzung der vorliegenden Arbeit besteht in der numerischen Umsetzung thermomechanisch gekoppelter Problemstellungen elastomerer Strukturen im Kontext der Entwicklung einer effizienten globalen Lösungsstrategie. Zweckmäßigerweise ist die Lösungsprozedur in eine typische geschachtelte Methodik der Finiten-Elemente Methode zu integrieren.

Zur phänomenologischen Beschreibung der Materialeigenschaften sind Modelle vom Evolutionsgleichungstyp heranzuziehen. Hierzu ist das Materialmodell der finiten Viskoelastizität aus [Hartmann, 2003] im Sinne einer thermodynamisch konsistenten Materialtheorie für thermomechanische Prozesse bei großen Deformationen zu erweitern. Das Modell soll eine vollständige thermomechanische Kopplung enthalten.

Zentraler Arbeitspunkt ist die effiziente Umsetzung von Rosenbrock-Verfahren auf das im Rahmen einer modernen Betrachtungsweise einer konsistenten Raum- Zeitdiskretisierung zugrunde liegende DAE-System. Das Verfahren soll sowohl für isotherme als auch für thermomechanisch gekoppelte Prozesse geeignet sein. Dies ist bezüglich der Formulierung der Algorithmen und der Implementierung umzusetzen. Hinsichtlich der räumlichen Diskretisierung sind geeignete gemischte Elementformulierungen herzuleiten.

1.4. Gliederung der Arbeit

Die Unterteilung der vorliegenden Arbeit in den verschiedenen Kapiteln ergibt sich nahezu auf natürliche Weise aus der Zielsetzung. Das folgende **Kapitel 2** vermittelt die kontinuumsmechanischen Grundlagen zur Beschreibung der Kinematik deformierbarer Körper. Im Rahmen einer geometrisch nichtlinearen Theorie werden die Bilanzgleichungen für die Masse, für den Impuls, den Drehimpuls, und für die Energie sowie für die Entropie auf Basis der klassischen Kontinuumsmechanik und Thermodynamik dargestellt. Außerdem werden nach dem Konzept der Dualen Variablen die zueinander assoziierten Spannungs- und Verzerrungstensoren motiviert.

Nach einem kurzen Überblick über die charakteristischen Materialeigenschaften polymerer und elastomerer Stoffe werden in **Kapitel 3** grundlegende Prinzipien der Materialmodellierung im Sinne der thermomechanisch konsistenten Materialtheorie diskutiert. Ausgehend von einem rheologischen Modell wird die allgemeine Struktur der Materialgleichungen herausgearbeitet. Es werden verschiedene physikalisch begründbare Zerlegungen der Deformation eingeführt und mathematisch präzisiert. In Analogie zur Theorie der linearen Viskoelastizität wird die freie Energie, die in dieser Arbeit als thermodynamisches Potential verwendet wird, additiv in mehrere voneinander unabhängige Anteile zerlegt. Zur Aufstellung der konstitutiven Beziehungen für Spannung, Entropie, innere Variablen und Wärmestrom wird der zweite Hauptsatz der Thermodynamik in Form der Clausius-Duhem Ungleichung (CDU), als sogenannte Dissipa-

tionsungleichung, ausgewertet. Zur Konkretisierung der Materialgleichungen, d.h. der Formulierung der entsprechenden Spannungs- und Verzerrungsmaße und Materialfunktionen wird in dieser Arbeit auf die Vorschläge von Lion [2000b] und Heimes [2005] eingegangen. Im Anschluss daran wird die Herleitung der verallgemeinerten Wärmeleitungsgleichung, die aus der lokalen Energiebilanz abgeleitet wird, beschrieben.

In **Kapitel 4** erfolgt nach einer Definition der lokalen Form des Anfangsrandwertproblems (ARWP) der Übergang zur numerischen Formulierung im Rahmen der Finite-Elemente Methode auf der Grundlage schwacher Formulierungen. Die Kontinuität wird mittels geeignet gewählter variationeller Aussagen im integralen Sinn erfüllt. In Bezug auf eine geeignete Elementformulierung werden gemischte Variationsformulierungen herangezogen. Die hier verwendeten Elementformulierungen liegen dem Extremalprinzip eines Dreifeldfunctionals zugrunde, dass für thermomechanisch gekoppelte Fragestellung hergeleitet wird.

Kapitel 5 befasst sich mit den wesentlichen Schritten für die Entwicklung einer globalen iterationsfreien Prozedur im Kontext einer konsistenten Raum-Zeitdiskretisierung zur Lösung des aufgestellten thermomechanischen ARWP. Nach der Einführung der räumlichen Diskretisierung basierend auf dem isoparametrischen Elementkonzept unter Berücksichtigung einer Verschiebungssteuerung und den resultierenden gemischten Elementen wird nachfolgend im Sinne der vertikalen Linienmethode die Zeitdiskretisierung erläutert. Die Verfahrensvorschrift, der in dieser Arbeit eingesetzten Zeitintegratoren, den sogenannten Rosenbrock-Verfahren, wird zunächst anhand eines Anfangswertproblems motiviert und auf das DAE-System des thermomechanischen Problems übertragen. Im Hinblick auf eine Implementierung werden die resultierenden Elementmatrizen einer konsistenten Linearisierung abgeleitet und die Struktur der entstehenden Gleichungssysteme im Detail diskutiert. Algorithmen zur effizienten Berechnung der Systeme werden vorgestellt und umgesetzt. Um die Genauigkeit und Verlässlichkeit der Ergebnisse sicherzustellen, wird eine adaptive Schrittweitenkontrolle verwendet.

Um das numerische Verhalten und die Leistungsfähigkeit der hier entwickelten Lösungsprozedur zu untersuchen, werden im **Kapitel 6** Beispielrechnungen vorgestellt. In einem ersten Beispiel werden Konvergenzuntersuchungen und Aufwands-Genauigkeitsuntersuchungen für isotherme Belastungsprozesse durchgeführt. Anhand dieses Beispiels wird die Leistungsfähigkeit der entwickelten Lösungsprozedur gegenüber der klassischen FE-Formulierung demonstriert. Ein weiteres Beispiel dient vor allem dem Zweck, grundlegende Mechanismen der thermomechanischen Kopplung aufzuzeigen und das Verhalten hinsichtlich des implementierten Materialmodells und der Lösungsprozedur zu kontrollieren. Das Verständnis der hierbei untersuchten Effekte ist für die Interpretation der Ergebnisse komplexer Strukturen hilfreich. Weiterhin werden dissipative Aufheizeffekte am Beispiel einer periodisch beanspruchten elastomeren Zugprobe untersucht. Im abschließenden Beispiel wird die Robustheit und Effektivität der Verfahren in Bezug auf eine praxisrelevante Anwendung untersucht.

In **Kapitel 7** werden die grundlegenden Erkenntnisse der Arbeit zusammengefasst und Möglichkeiten zur weiteren Forschungsarbeit aufgezeigt.

2. Kontinuumsmechanische Grundlagen

Die Kontinuumsmechanik ist eine allgemeingültige Theorie zur Beschreibung der Bewegung materieller Körper unter dem Einfluss von Kräften. Das mathematische Fundament der Kontinuumsmechanik ermöglicht es, ein spezielles mechanisches Problem in einer allgemeingültigen Form zu erfassen und somit einem deduktiven Lösungsverfahren zugänglich zu machen. In diesem Zusammenhang umfasst die Kontinuumsmechanik die drei Bereiche:

Kinematik, welche zur Beschreibung der Bewegung und der Deformation eines Körpers, ohne Berücksichtigung der Ursachen, dient,

Bilanzgleichungen, in denen allgemeingültige Erfahrungssätze der Thermomechanik zusammengefasst werden, und

Materialgleichungen, konstitutive Beziehungen, die die kinematischen Größen mit den dynamischen Größen der Bilanzrelationen für das betrachtete Material verknüpfen.

Das vorangehende Kapitel diskutiert die mathematische Erfassung des Begriffs materieller Körper ebenso wie die Zusammenstellung der Bilanzgleichungen, die die physikalischen Gesetzmäßigkeiten reflektieren, denen alle materiellen Körper unterliegen.¹

2.1. Kinematik

2.1.1. Konfiguration, Bewegung, Deformation

Im Sinne der Kontinuumsmechanik ist ein materieller Körper \mathcal{B} ein Teilbereich des Raumes, in dem Materie kontinuierlich verteilt ist. Bezüglich dieser Vorstellung besteht ein materieller Körper aus einer Menge materieller Punkte, $\mathcal{B} = \{\mathcal{P}\}$. Jeder materielle Punkt \mathcal{P} ist durch eine eindeutige Abbildung in Form eines Zahlentripels

$$(x^1, x^2, x^3) = \chi(\mathcal{P}) \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{P} = \chi^{-1}(x^1, x^2, x^3), \quad (2.1)$$

¹Die Ausführungen in diesem Kapitel basieren auf der Grundlage des Lehrbuches von Haupt [2002].

die als Konfigurationen bezeichnet werden, identifiziert. Die Hintereinanderschaltung von zwei Konfigurationen muss dabei stetig differenzierbar sein.² Das Zahlentripel (2.1) kann interpretiert werden, als die Koordinaten eines Punktes im dreidimensionalen euklidischen Punktraum \mathbb{E}^3 . Die eindeutige Abbildung eines geometrischen Vektors $\boldsymbol{x} \in \mathbb{V}^3$ zu den Punkten im euklidischen Punktraum erfordert die Wahl eines beliebigen, aber festen Bezugspunktes $\mathcal{O} \in \mathbb{E}^3$. Diese Verknüpfung der Abbildung $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\chi}(\mathcal{P})$ mit dem Bezugspunkt \mathcal{O} verleiht dem Vektor \boldsymbol{x} die Bedeutung eines Ortsvektors.

Die Beschreibung der Bewegung eines materiellen Punktes wird durch die kontinuierliche Folge von Konfigurationen $\boldsymbol{\chi}_t$ dargestellt, die zu jedem Zeitpunkt t jedem materiellen Punkt $\mathcal{P} \in \mathcal{B}$ einen Ortsvektor $\boldsymbol{x} \in \mathbb{V}^3$

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\chi}_t(\mathcal{P}) \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{R} = \boldsymbol{\chi}_t^{-1}(\boldsymbol{x}) \quad (2.2)$$

zuordnet, welcher die momentane Lage des Körpers \mathcal{B} beschreibt. Die Konfigurationen $\boldsymbol{\chi}_t(\mathcal{P})$ werden naheliegenderweise Momentankonfigurationen bezeichnet. Um eine Abbildungsvorschrift zu erhalten, die nicht dem materiellen Punkt $\mathcal{P} \in \mathcal{B}$ sondern einer geeigneten Größe einen Ortsvektor zuordnet, wird die Referenz- bzw. Bezugskonfiguration

$$(X^1, X^2, X^3) = \mathcal{R}(\mathcal{P}) \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{P} = \mathcal{R}^{-1}(X^1, X^2, X^3) \quad (2.3)$$

eingeführt. Das Zahlentripel kann in gewohnter Weise als Koordinaten des Vektors $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}(X^1, X^2, X^3)$ aufgefasst werden.³

Aufgrund der Definition der Referenzkonfiguration $\mathcal{R}(\mathcal{P})$, als beliebige, aber feste Konfiguration, kann die Bewegung eines materiellen Punktes folgend dargestellt werden, siehe Abbildung 2.1:

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\chi}_t(\mathcal{R}^{-1}(\boldsymbol{X})) = \boldsymbol{\chi}_{\mathcal{R}}(\boldsymbol{X}, t). \quad (2.4)$$

Als Sonderfall der allgemeinen Definition der Referenzkonfiguration, kann die Konfiguration als Referenzkonfiguration $\mathcal{R}(\mathcal{P}) = \boldsymbol{\chi}_{t_0}(\mathcal{P}) = \boldsymbol{X}$ gewählt werden, die der Körper zu einem Zeitpunkt $t_0 \leq t$ einnimmt.⁴ In diesem Fall lässt sich die Bewegung eines materiellen Punktes in der Form

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\chi}_t(\boldsymbol{\chi}_{t_0}^{-1}(\boldsymbol{X})) = \boldsymbol{\Phi}_{t_0}(\boldsymbol{X}, t), \quad (2.5)$$

darstellen. Diese spezielle Wahl der Referenzkonfiguration ermöglicht die Definition des Verschiebungsfelds

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t) = \boldsymbol{\Phi}_{t_0}(\boldsymbol{X}, t) - \boldsymbol{X}, \quad (2.6)$$

als Differenz der beiden Ortsvektoren \boldsymbol{x} , \boldsymbol{X} , siehe Abbildung 2.2

²Diese Eigenschaften, d.h. die Eindeutigkeit und die stetige Differenzierbarkeit, implizieren zum einen, dass benachbarte materielle Punkte stets benachbart bleiben, und zum anderen, dass ein materieller Punkt sich nur an einem Punkt befinden kann.

³Der Vektor $\boldsymbol{X} = (X^1, X^2, X^3)$ stellt im allgemeinen keinen Ortsvektor dar, da der materielle Körper im allgemeinen Fall zu keinem Zeitpunkt die Referenzkonfiguration einnehmen muss.

⁴Hierbei sind die Vektoren $\boldsymbol{X} \in \mathbb{V}^3$ als Ortsvektoren zu interpretieren.

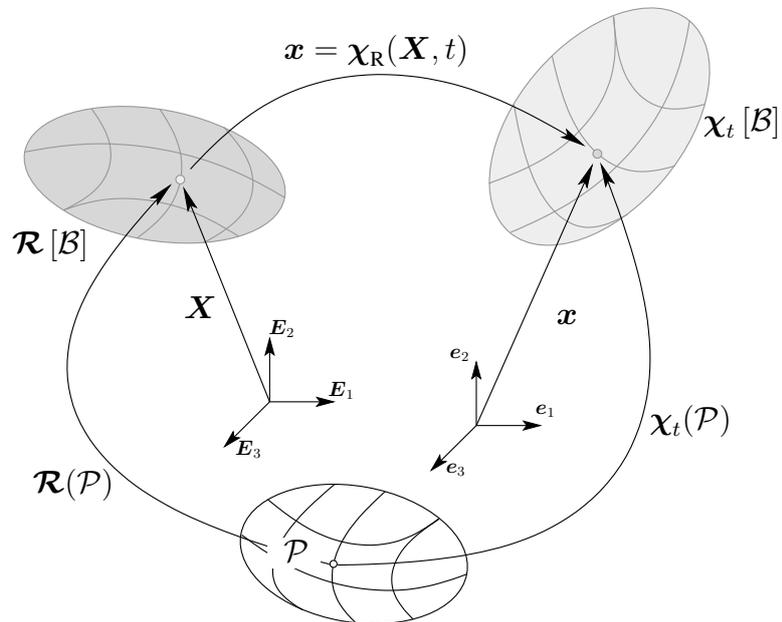


Abbildung 2.1.: Darstellung der Referenz- und Momentankonfiguration

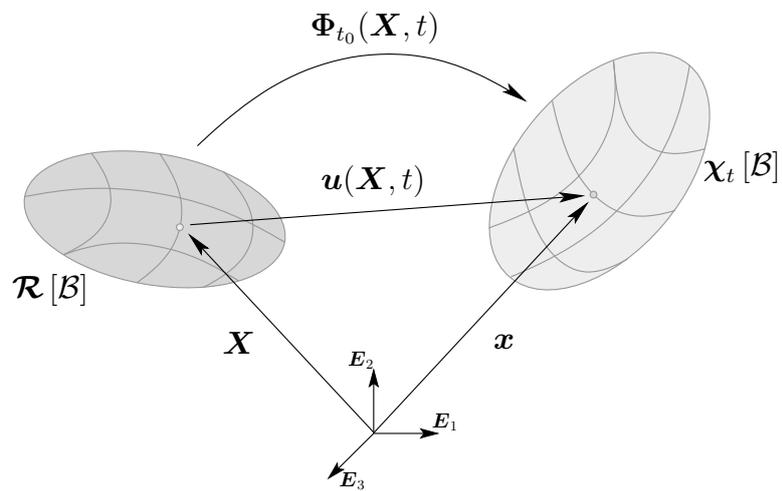


Abbildung 2.2.: Abbildung des Verschiebungsvektors

2. Kontinuumsmechanische Grundlagen

Die lineare Approximation der Bewegung in der Umgebung eines materiellen Punktes wird durch den Deformationsgradienten

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \chi_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} = \text{Grad } \chi_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}, t), \quad (2.7)$$

abgebildet, der sich aus der Fréchet-Ableitung⁵

$$\chi_{\mathbf{R}}(\mathbf{X} + d\mathbf{X}, t) - \chi_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \chi_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} d\mathbf{X} + \mathbf{r}(\mathbf{X}, t, d\mathbf{X}), \quad (2.9)$$

mit

$$\lim_{\|d\mathbf{X} \rightarrow 0\|} \frac{\mathbf{r}(\mathbf{X}, t, d\mathbf{X})}{\|d\mathbf{X}\|} = 0, \quad (2.10)$$

der Bewegungsdarstellung $\mathbf{x} = \chi_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}, t)$ bezüglich der Referenzkonfiguration ergibt. Die zentrale Bedeutung des Deformationsgradienten soll im Folgenden veranschaulicht werden.

Eine aus materiellen Punkten bestehende stetig differenzierbare Kurve kann in der Referenzkonfiguration durch die Angabe einer Raumkurve

$$\alpha \mapsto \mathbf{X} = \mathbf{C}(\alpha) \quad (2.11)$$

mit dem Kurvenparameter α festgelegt werden. Aufgrund der stattfindenden Bewegung $\chi_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}, t)$ befindet sich die materielle Linie in der Momentankonfiguration zum Zeitpunkt t an dem Ort

$$\alpha \mapsto \mathbf{x} = \boldsymbol{\alpha} = \chi_{\mathbf{R}}(\mathbf{C}(\alpha), t). \quad (2.12)$$

Die Fréchet-Differenzierbarkeit führt unter Verwendung der Kettenregel auf das Fréchet-Differenzial

$$d\mathbf{x} = \mathbf{c}'(\alpha) d\alpha = \text{Grad } \chi_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}, t)|_{\mathbf{X}=\mathbf{C}(\alpha)} \mathbf{C}'(\alpha) d\alpha. \quad (2.13)$$

Hieraus wird ersichtlich, dass die Differentiale $d\mathbf{x} = \mathbf{c}'(\alpha) d\alpha$ und $d\mathbf{X} = \mathbf{C}'(\alpha) d\alpha$ als die Tangentenvektoren an materielle Linien in der Momentankonfiguration und der Referenzkonfiguration angesehen werden. Infolgedessen transformiert der Deformationsgradient gemäß

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} d\mathbf{X}, \quad (2.14)$$

Tangentenvektoren an materiellen Linien von der Referenzkonfiguration in die Momentankonfiguration, vgl. Abbildung 2.3

⁵Da die Fréchet-Ableitung keine explizite Berechnungsvorschrift für das Differential einer Ableitung impliziert, bietet, unter der Berücksichtigung hinreichender Stetigkeitsanforderungen, die hier a priori gelten sollen, die Anwendung des Gateaux-Differentials

$$D\chi_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}, t)[d\mathbf{X}] = \left. \frac{d}{ds} \chi_{\mathbf{R}}(\mathbf{X} + s d\mathbf{X}, t) \right|_{s=0} \quad (2.8)$$

eine einfache Berechnungsmöglichkeit des Fréchet-Differentials.

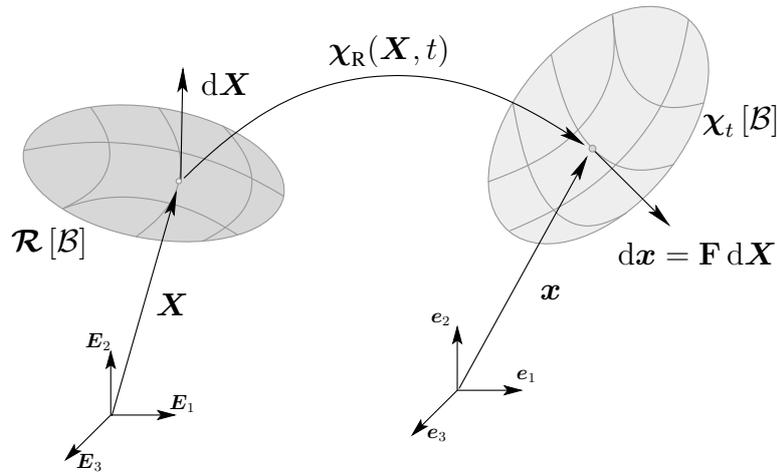


Abbildung 2.3.: Tangentenvektoren an materiellen Linien von der Referenz- in die Momentankonfiguration.

Mit dieser Aussage ergeben sich zwei weitere essentielle Transformationsbeziehungen für materielle Flächen- und Volumenelemente gemäß

$$d\mathbf{a} = (\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} d\mathbf{A} \quad (2.15)$$

und

$$dv = (\det \mathbf{F}) dV. \quad (2.16)$$

Eine weitere fundamentale Eigenschaft des Deformationsgradienten ist die eindeutige polare Zerlegung

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R}, \quad (2.17)$$

in einen orthogonalen Tensor⁶ \mathbf{R} sowie die Tensoren \mathbf{U} und \mathbf{V} , welche symmetrisch und positiv definit sind.⁷ (2.17) hat die anschauliche Interpretation, dass sich die lokale Deformation aus einer reinen Starrkörperdrehung von materiellen Linien, infolge des orthogonalen Tensors \mathbf{R} , sowie aus einer reinen Streckung der materiellen Linienelemente infolge der Wirkung der sogenannten linken und rechten Strecktensoren \mathbf{U} bzw. \mathbf{V} zusammensetzt, vgl. Haupt [2002].

2.1.2. Verzerrungstensoren

Der Deformationsgradient repräsentiert alle lokalen Eigenschaften der durch die Bewegung $\chi_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}, t)$ gegebenen Deformation. Wenn die Bewegung eines materiellen Körpers

⁶Ein Tensor zweiter Stufe \mathbf{R} der die Eigenschaft $\mathbf{R}\mathbf{u} \cdot \mathbf{R}\mathbf{v} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$ für alle $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{V}$ aufweist heißt orthogonaler Tensor.

⁷Ein symmetrischer Tensor $\mathbf{U} = \mathbf{U}^T$ ist positiv definit, wenn er der Eigenschaft $\mathbf{v} \cdot \mathbf{U}\mathbf{v} > 0, \forall \mathbf{v} \neq 0$ genügt.

von einer Starrkörperbewegung abweicht, so liegt eine Formänderung oder Verzerrung vor. Aufgrund der im Deformationsgradienten enthaltenen Starrkörperdrehung \mathbf{R} ist der Deformationsgradient nur bedingt für die direkte Beschreibung der Formänderung eines materiellen Körpers geeignet. Es lassen sich allerdings Tensoren angeben, die bei einer Starrkörperbewegung identisch verschwinden und somit ein geeignetes Maß für die Formänderung darstellen. Ein Beispiel hierfür ist der, auf der Referenzkonfiguration operierende Green'sche Verzerrungstensor

$$\mathbf{E}(\mathbf{X}, t) = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I}), \quad (2.18)$$

worin $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \mathbf{U}^2$ der rechte Cauchy-Green Tensor und \mathbf{I} der Einheitstensor ist. Der Green'sche Verzerrungstensor besitzt die anschauliche Interpretation, dass für zwei materielle Linienelemente $d\mathbf{X}_1$ und $d\mathbf{X}_2$ der Referenzkonfiguration und den zugehörigen materiellen Linienelementen in der Momentankonfiguration $d\mathbf{x}_1 = \mathbf{F} d\mathbf{X}_1$ sowie $d\mathbf{x}_2 = \mathbf{F} d\mathbf{X}_2$ stets die Identität

$$d\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{E} d\mathbf{X}_2 = \frac{1}{2}(d\mathbf{x}_1 \cdot d\mathbf{x}_2 - d\mathbf{X}_1 \cdot d\mathbf{X}_2), \quad (2.19)$$

gilt. Aufgrund der Identität (2.19) und der Transformation (2.14) lässt sich ein weiterer, der sogenannte Almansi'sche Verzerrungstensor

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{F}^{-T} \mathbf{E} \mathbf{F}^{-1} = \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \mathbf{B}^{-1}), \quad (2.20)$$

der auf der Momentankonfiguration operiert, motivieren. Hierin ist $\mathbf{B} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T = \mathbf{V}^2$ der linke Cauchy-Green Tensor.

2.1.3. Deformationsgeschwindigkeiten

Neben den Transformationsverhalten materieller Linien-, Flächen- und Volumenelemente sind vor allem bei zeitlichen Vorgängen ebenso deren Änderungsgeschwindigkeiten von Interesse. Durch die materielle Zeitableitung eines Linienelements (2.14)

$$(d\mathbf{x})^\cdot = \dot{\mathbf{F}} d\mathbf{X} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} d\mathbf{x}, \quad (2.21)$$

kann der räumliche Geschwindigkeitsgradient

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} = \text{grad } \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) \quad (2.22)$$

als der Gradient des Geschwindigkeitsfeldes in räumlicher Darstellung $\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t)$ ⁸ definiert werden. Durch den räumlichen Geschwindigkeitsgradient können die Ände-

⁸Für eine beliebige physikalische Größe $w = f(\mathcal{P}, t)$, liegt die räumliche oder Euler'sche Darstellung vor, wenn der materielle Punkt \mathcal{P} durch den Ortsvektor der Momentankonfiguration substituiert wird: $\bar{f} : (\mathbf{x}, t) \mapsto w = \bar{f}(\mathbf{x}, t) = f(\chi_t^{-1}(\mathbf{x}), t)$. Wird hingegen der materielle Punkt durch den Vektor \mathbf{X} der Referenzkonfiguration $\mathcal{R}(\mathcal{P})$ angegeben, so heißt die Funktion $\hat{f} : (\mathbf{X}, t) \mapsto w = \hat{f}(\mathbf{X}, t) = f(\mathcal{R}^{-1}(\mathbf{X}), t)$ materielle oder Lagrange'sche Darstellung. Dementsprechend besteht die materielle Zeitableitung in räumlicher Darstellung aus einer lokalen Ableitung $\frac{\partial}{\partial t} \bar{f}(\mathbf{x}, t)$ und einer konvektiven Ableitung $[\text{grad } \bar{f}(\mathbf{x}, t)] \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t)$.

rungsgeschwindigkeiten materieller Linien-, Flächen- und Volumenelemente

$$(\mathbf{d}\mathbf{x})' = \mathbf{L} \mathbf{d}\mathbf{x}, \quad (2.23)$$

$$(\mathbf{d}\mathbf{a})' = [(\text{Sp } \mathbf{L})\mathbf{I} - \mathbf{L}^T] \mathbf{d}\mathbf{a}, \quad (2.24)$$

$$(\mathbf{d}v)' = (\text{Sp } \mathbf{L}) \mathbf{d}v = (\text{div } \mathbf{v}) \mathbf{d}v \quad (2.25)$$

in der Momentankonfiguration definiert werden. Insbesondere besitzt die additive Zerlegung des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) + \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) \quad (2.26)$$

in einen symmetrischen \mathbf{D} und einen antisymmetrischen \mathbf{W} Anteil eine wesentliche geometrische Bedeutung. In diesem Sinne beschreibt der Tensor \mathbf{D} die Geschwindigkeit, mit der materielle Linienelemente ihre Längen und relative Winkel ändern, und heißt infolgedessen Verzerrungsgeschwindigkeitstensor. Im Gegensatz dazu gibt der Tensor \mathbf{W} die Richtungsänderungsgeschwindigkeit der materiellen Linienelemente an. Er wird daher als Drehgeschwindigkeitstensor oder Wirbeltensor bezeichnet. Aus der Definition des Verzerrungsgeschwindigkeitstensors ergibt sich offensichtlich der Zusammenhang

$$\mathbf{D} = \mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}^{-1}, \quad (2.27)$$

bzw. wegen $\mathbf{A} = \mathbf{F}^{-T} \mathbf{E} \mathbf{F}^{-1}$

$$\mathbf{D} = \mathbf{F}^{-T} \frac{d}{dt} (\mathbf{F}^T \mathbf{A} \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-1} = \dot{\mathbf{A}} + \mathbf{L}^T \mathbf{A} + \mathbf{A} \mathbf{L} =: \hat{\mathbf{A}}, \quad (2.28)$$

dass die kovariante Oldroyd-Ableitung des Almansi'sche Tensors $\hat{\mathbf{A}}$ mit dem räumlichen Verzerrungsgeschwindigkeitstensor übereinstimmt.

2.2. Spannungstensoren und Wärmeflussvektoren

Die Spannung ist der zentrale Begriff der phänomenologischen thermomechanischen Kontinuumstheorie. Ausgehend von einem Spannungsvektors \mathbf{t} auf der Oberfläche der Momentankonfiguration $\partial\chi_t[\mathcal{B}]$ entsprechend Abbildung 2.4 und einer so postulierten infinitesimalen Oberflächenkraft $\mathbf{t} \mathbf{d}\mathbf{a}$ ist der Cauchy'sche Spannungstensor \mathbf{T} im materiellen Punkt $\mathbf{x} \in \partial\chi_t[\mathcal{B}]$ durch das Cauchy-Theorem definiert

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, t, \mathbf{n}) = \mathbf{T}(\mathbf{x}, t) \mathbf{n}. \quad (2.29)$$

Dabei ist \mathbf{n} der nach außen zeigende Normaleneinheitsvektor der Oberfläche im Punkt

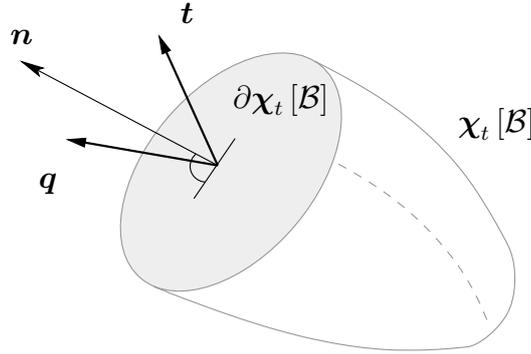


Abbildung 2.4.: Spannungs- und Wärmeflussvektor.

$\mathbf{x} \in \partial\chi_t[\mathcal{B}]$.⁹ Man bezeichnet den Cauchy'schen Spannungstensor als wahren Spannungstensor, da er die in der Momentankonfiguration wirkenden Spannungen auf das Flächenelement derselben Konfiguration bezieht

$$d\mathbf{f}_\circ = \mathbf{t} da = \mathbf{T} d\mathbf{a}, \quad d\mathbf{a} = \mathbf{n} da \quad (2.30)$$

Ein Bezug der aktuellen Spannungen auf das Flächenelement der Ausgangskonfiguration $\partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ führt zu dem ersten Piola-Kirchhoff Spannungstensor \mathbf{T}_R

$$\mathbf{t}_R = \mathbf{T}_R \mathbf{n}_R \quad \leftrightarrow \quad d\mathbf{f}_\circ = \mathbf{t}_R dA = \mathbf{T}_R d\mathbf{A}, \quad (2.31)$$

worin \mathbf{t}_R als der Piola-Kirchhoff'sche Spannungsvektor und \mathbf{n}_R als der Normaleneinheitsvektor der Referenzkonfiguration definiert wird und die Beziehung $d\mathbf{A} = \mathbf{n}_R dA$ gilt. Offensichtlich sind die beiden Spannungsvektoren \mathbf{t} und \mathbf{t}_R parallel, wodurch mit der Darstellung der infinitesimalen Oberflächkraft (2.30) und der Transformationsvorschrift für das infinitesimale materielle Flächenelement aus (2.15) direkt die Beziehung

$$\mathbf{T}_R = (\det \mathbf{F}) \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T} \quad (2.32)$$

der beiden Spannungstensoren resultiert. Der Wunsch nach einem rein materiellen Spannungstensor führt zur Definition des zweiten Piola-Kirchhoff'schen Tensor

$$\tilde{\mathbf{T}} = (\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T}. \quad (2.33)$$

Die zur Spannung duale Größe ist der Wärmefluss oder verallgemeinernd der Energiefluss. Ausgehend von dem aus dem Körper herausströmenden Wärmefluss q durch

⁹Dem Euler'schen Schnittprinzip folgend kann die Konfiguration χ_t ein beliebig aus dem realen Körper herausgeschnittenes Teilgebiet sein. Damit ist der Spannungstensor \mathbf{T} für jeden materiellen Punkt $\mathbf{x} \in \chi_t[\mathcal{B}]$ definiert. Der Spannungsvektor, siehe (2.29), lässt sich aus einer Kräftegleichgewichtsbeachtung an einem infinitesimalen Tetraederelement ableiten, vgl. Haupt [2002]

die Oberfläche $\partial\chi_t[\mathcal{B}]$ der Momentankonfiguration und dem so postulierten infinitesimalen Energietransport q da je Zeiteinheit durch die Oberfläche ist der Wärmeflussvektor für den materiellen Punkt $\mathbf{x} \in \partial\chi_t[\mathcal{B}]$ definiert durch¹⁰

$$q(\mathbf{x}, t, \mathbf{n}) = -\mathbf{q}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}. \quad (2.34)$$

In Analogie zum Cauchy'schen Spannungstensor bezeichnet man \mathbf{q} , mit der Eigenschaft $-\mathbf{q} \cdot d\mathbf{a} = -\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} da = q da$, als den Cauchy'schen Wärmeflussvektor oder auch der wahre Wärmefluss, da er den Energiefluss der Momentankonfiguration auf das Flächenelement derselben Konfiguration bezieht. Einen Bezug des aktuellen Wärmeflusses auf die Ausgangskonfiguration führt zur Definition des materiellen Wärmeflussvektors, den sogenannten Piola-Kirchhoff'schen Wärmeflussvektor

$$\mathbf{q}_R = (\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-1} \mathbf{q}. \quad (2.35)$$

2.3. Bilanzgleichungen der Thermomechanik

Die Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik bzw. (Kontinuums)-Thermomechanik haben universelle Gültigkeit. Sie beschreiben die Zustandsänderungen eines materiellen Körpers \mathcal{B} , die im Fall der Kontinuumsmechanik durch die Änderung der Masse, des Impulses und des Drehimpulses beschrieben werden und zwar unter Berücksichtigung der Einwirkung der Umgebung auf den materiellen Körper. Durch die Thermomechanik werden zwei weitere Relationen für die Energie und Entropie mit einbezogen.

Bei der Betrachtung der Bilanzgleichungen wird vom sogenannten Schnittprinzip Gebrauch gemacht, indem die äußeren Einwirkungen durch physikalische Größen, wie z.B. die Kraft und das Moment, repräsentiert werden. Dies sind in der Regel sowohl volumen- als auch oberflächenverteilte Größen. Mit der Definition der beliebigen physikalischen Größe

$$G(\mathcal{B}, t) = \int \bar{f}(\mathbf{x}, t) \varrho dv = \int \hat{f}(\mathbf{X}, t) \varrho_R dV, \quad (2.36)$$

worin $f(\mathcal{P}, t)$ die Dichtefunktion repräsentiert, lässt sich die Bilanzgleichung ganz allgemein sowohl in räumlicher Darstellung,

$$\dot{G}(\mathcal{B}, t) = \frac{d}{dt} \int \bar{f}(\mathbf{x}, t) \varrho dv = \int \boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{n} da + \int (\varphi + p) \varrho dv, \quad (2.37)$$

als auch in materieller Darstellung

$$\dot{G}(\mathcal{B}, t) = \frac{d}{dt} \int \hat{f}(\mathbf{X}, t) \varrho_R dV = \int \boldsymbol{\phi}_R \cdot \mathbf{n}_R dA + \int (\varphi_R + p_R) \varrho_R dV, \quad (2.38)$$

¹⁰Wegen dem Schnittprinzip ist \mathbf{q} in jedem materiellen Punkt des Körpers erklärt, womit die Gleichung $q = -\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$ als Energiegleichgewicht an einem infinitesimalen Tetraederelement aufgefasst werden kann.

formulieren (vgl. [Altenbach and Altenbach, 1994] bzw. [Haupt, 2002]).¹¹ Darin stellen $\phi(\mathbf{x}, t)$ bzw. $\phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}, t)$ den Transport über die Randfläche, $\varphi(\mathbf{x}, t)$ bzw. $\varphi_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}, t)$ eine volumenverteilte Zufuhr pro Masseneinheit sowie $p(\mathbf{x}, t)$ bzw. $p_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}, t)$ die Produktionsterme dar.

Unter Berücksichtigung entsprechender Stetigkeitsanforderungen sowie der Anwendung des Gauss'schen Integralsatzes ergeben sich die allgemeine lokale Form der Bilanzgleichung

$$\frac{d(\bar{f}\varrho)}{dt} + \varrho \bar{f} \operatorname{div} \mathbf{v} - \operatorname{div} \phi - \varphi = p, \quad \text{bzw.} \quad \varrho_{\mathbf{R}} \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} - \operatorname{Div} \phi_{\mathbf{R}} - \varphi_{\mathbf{R}} = p_{\mathbf{R}}. \quad (2.39)$$

2.3.1. Massenbilanz

Eine Grundannahme in der Kontinuumsmechanik ist, dass jedem materiellen Körper \mathcal{B} ein positives skalares Maß $m(\mathcal{B}, t) > 0$ zugeordnet wird, das die Masse repräsentiert. Darüber hinaus wird jedem materiellen Punkt \mathcal{P} eine Massendichte $\varrho(\mathcal{P}, t) > 0$ zugeordnet. Die Masse des materiellen Körpers entspricht dem Volumenintegral

$$m(\mathcal{B}, t) = \int \varrho(\mathbf{x}, t) dv = \int \varrho_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}) dV, \quad (2.40)$$

über die Massendichten ϱ und $\varrho_{\mathbf{R}}$. Die Massenbilanz besagt, dass die Masse $m(\mathcal{B}, t)$ eines materiellen Körpers zeitlich konstant ist

$$\frac{d}{dt} m(\mathcal{B}, t) = 0. \quad (2.41)$$

Damit lässt sich bei hinreichenden Stetigkeitsanforderungen unmittelbar die lokale Form in materieller Darstellung angeben,

$$\varrho_{\mathbf{R}} = \varrho_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}), \quad (2.42)$$

die besagt, dass die Massendichte in der Bezugskonfiguration zeitlich konstant ist. Im Gegensatz zur materiellen Darstellung ist in der räumlichen Form beim Differentiationsprozess zu berücksichtigen, dass der Integrationsbereich zeitabhängig ist. Folglich ergibt sich die lokale Form der Massenbilanz in räumlicher Darstellung

$$\frac{d}{dt} \varrho + \varrho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \operatorname{div} (\varrho \mathbf{v}) = 0. \quad (2.43)$$

¹¹Die vorkommenden Funktionen $f(\mathcal{P}, t)$, ϕ , φ und p stellen Elemente eines Vektorraumes im Sinne der Funktionalanalysis dar. D.h. es können sich hierbei um skalare, vektorielle oder tensorielle Feldgrößen handeln.

2.3.2. Impulsbilanz

Der Impulsvektor beschreibt den momentanen Bewegungszustand des materiellen Körpers und ist in der räumlichen Darstellung durch das Volumenintegral

$$\mathbf{I}(\mathcal{B}, t) = \int \varrho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) dv, \quad (2.44)$$

gegeben. Die Impulsbilanz besteht in der Aussage, dass die zeitliche Änderung des Bewegungszustandes, charakterisiert durch den Impulsvektor, durch die von außen angreifenden Kräfte herbeigeführt wird, welche sich aus oberflächen- und volumenverteilten Kräften zusammensetzen

$$\frac{d}{dt} \int \varrho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) dv = \int \mathbf{T}(\mathbf{x}, t) \mathbf{n} da + \int \varrho(\mathbf{x}, t) \mathbf{k}(\mathbf{x}, t) dv. \quad (2.45)$$

Dabei ist \mathbf{k} der Vektor der Volumenkraftdichte und \mathbf{T} der Cauchy'sche Spannungstensor. Die Anwendung des Gauss'schen Integralsatzes, durch den das Oberflächenintegral in ein Volumenintegral umgerechnet wird, sowie die Verwendung der Massenbilanz führt auf die lokale Form der Impulsbilanz in räumlicher Darstellung¹²

$$\rho \dot{\mathbf{v}} = \operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \mathbf{k}. \quad (2.46)$$

Eine äquivalente Form für die globale Impulsbilanz in materieller Darstellung erhält man nach einer entsprechenden Transformation der Flächen- und Volumenelemente in Gleichung (2.45),

$$\frac{d}{dt} \int \varrho_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}) \mathbf{v}(\mathbf{X}, t) dV = \int \mathbf{T}_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}, t) \mathbf{n}_{\mathbf{R}} dA + \int \varrho_{\mathbf{R}}(\mathbf{X}) \mathbf{k}(\mathbf{X}, t) dV \quad (2.47)$$

und der dazugehörigen lokalen Form

$$\varrho_{\mathbf{R}} \dot{\mathbf{v}} = \operatorname{Div} \mathbf{T}_{\mathbf{R}} + \varrho_{\mathbf{R}} \mathbf{k}. \quad (2.48)$$

Hierin ist $\mathbf{T}_{\mathbf{R}} = (\det \mathbf{F}) \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T}$ der erste Piola-Kirchhoff'sche Spannungstensor.

2.3.3. Drehimpulsbilanz

Der Drehimpulsvektor $D_{\mathbf{c}}$ des materiellen Körpers \mathcal{B} , bezogen auf einen raumfesten Punkt, dem der Ortsvektor \mathbf{c} zugeordnet ist, ist durch die Gleichung

$$D_{\mathbf{c}} = \int (\mathbf{x} - \mathbf{c}) \times \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \varrho(\mathbf{x}, t) dv \quad (2.49)$$

¹²Die globale Form der Impulsbilanz erhält man aus der allgemeinen Bilanzgleichung (2.37), bzw. (2.38) indem man für $f = \mathbf{v}$, $\phi = \mathbf{T}$, $\varphi = \mathbf{k}$ und $p = 0$ einsetzt.

definiert. Die Aussage der Drehimpulsbilanz besteht darin, dass sich die zeitliche Änderung des Drehimpulses aus dem von außen angreifenden resultierenden Moment \mathbf{M}_c ergibt, welches sich aus oberflächen- und volumenverteilten Momenten zusammensetzt. Berücksichtigt man in der zeitlichen Änderung des Drehimpulsvektors die Massenbilanz, so erhält man unter Anwendung der Produktregel die globale Form in räumlicher Darstellung¹³

$$\int (\mathbf{x} - \mathbf{c}) \times \dot{\mathbf{v}} \rho \, dv = \int (\mathbf{x} - \mathbf{c}) \times \mathbf{T} \mathbf{n} \, da + \int (\mathbf{x} - \mathbf{c}) \times \rho \mathbf{k} \, dv. \quad (2.50)$$

Mit Hilfe des Gauss'schen Integralsatzes kann zunächst wieder das Oberflächenintegral in ein Volumenintegral umgerechnet werden. Anschließend erfolgt die Anwendung des Divergenzoperators auf das Tensorfeld $(\mathbf{x} - \mathbf{c}) \times \mathbf{T}$, so dass die Drehimpulsbilanz die folgende Gestalt erhält.¹⁴

$$\int (\mathbf{x} - \mathbf{c}) \times (\rho \dot{\mathbf{v}} - \operatorname{div} \mathbf{T} - \rho \mathbf{k}) \, dv = \int T^{ij} \mathbf{g}_i \times \mathbf{g}_j \, dv. \quad (2.51)$$

Offenbar steht auf der linken Seite in der zweiten runden Klammer die Impulsbilanz, weshalb sich letztendlich die Drehimpulsbilanz auf die Gleichung

$$\int T^{ij} \mathbf{g}_i \times \mathbf{g}_j \, dv = 0 \quad \rightarrow \quad T^{ij} \mathbf{g}_i \times \mathbf{g}_j = 0, \quad (2.52)$$

reduziert.¹⁵ Das Auswerten dieser Beziehung führt auf die Symmetrie des Cauchy'schen Spannungstensors

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T, \quad (2.53)$$

die die lokale räumliche Form der Drehimpulsbilanz darstellt.

2.3.4. Energiebilanz – Erster Hauptsatz der Thermodynamik

Die Bilanz der mechanischen Energie ist keine eigenständige Bilanzgleichung, sondern folgt aus der Kombination der bereits dargestellten Bilanzgleichungen für die Masse, den Impuls und den Drehimpuls. Ausgehend von der lokalen Impulsbilanz nach (2.46), die mit dem Geschwindigkeitsfeld \mathbf{v} skalar zu multiplizieren ist, gelangt man unter der Anwendung des Divergenztheorems $\operatorname{div} (\mathbf{T}^T \mathbf{v}) = \operatorname{div} \mathbf{T} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{T} \cdot \operatorname{grad} \mathbf{v}$ und der Massenbilanz bei hinreichenden Stetigkeitsanforderungen zu der globalen Form

$$\frac{d}{dt} \int \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \, dv = \int (\mathbf{T} \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} \, da + \int \rho \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} \, dv - \int \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} \, dv. \quad (2.54)$$

¹³Die globale Form der Drehimpulsbilanz erhält man aus der allgemeinen Bilanzgleichung (2.37), bzw. (2.38) indem man für $f = (\mathbf{x} - \mathbf{c}) \times \mathbf{v}$, $\phi = (\mathbf{x} - \mathbf{c}) \times \mathbf{T}$, $\varphi = (\mathbf{x} - \mathbf{c}) \times \mathbf{k}$ und $p = 0$ einsetzt.

¹⁴vgl. Haupt [2002]

¹⁵Der Tensor $\mathbf{T} = T^{ij} \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j$ wird durch die Komponenten T^{ij} und den allgemeinen Basisvektoren \mathbf{g}_i und \mathbf{g}_j repräsentiert.

Dabei wurde noch die additive Zerlegung (2.26) des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten ausgenutzt sowie die Eigenschaft, dass das Skalarprodukt aus einem symmetrischen und einem schiefsymmetrischen Tensor verschwindet, $\mathbf{T} \cdot \mathbf{W} = 0$. Auf der linken Seite steht die zeitliche Änderung der kinetischen Energie K

$$\dot{K} = \frac{d}{dt} \int \frac{1}{2} \varrho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) dv, \quad (2.55)$$

welche zusammen mit der Spannungsleistung

$$L_i = \int \mathbf{T}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{x}, t) dv \quad (2.56)$$

auf der rechten Seite gleich jener Leistung auf der rechten Seite der Gleichung (2.54) ist, die durch die äußeren Kräfte verrichtet wird

$$L_a = \int \mathbf{T}(\mathbf{x}, t) \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) da + \int \varrho(\mathbf{x}, t) \mathbf{k}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) dv \quad (2.57)$$

und somit folgend dargestellt werden kann

$$\dot{K} + L_i = L_a. \quad (2.58)$$

Die Erfahrung hat gezeigt, dass nicht die komplette Spannungsleistung in Form einer Formänderungsenergie im materiellen Körper gespeichert wird. Vielmehr geht ein Teil als nichtmechanischer Anteil verloren oder er fließt als Wärme in die Umgebung ab (Dissipation). Die Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik müssen deshalb durch die Bilanzgleichungen der Thermodynamik, welche Aussagen über den Energieaustausch eines materiellen Körpers mit seiner Umgebung enthalten, ergänzt werden. In der Darstellungsweise der thermomechanischen Bilanzgleichungen wird die Argumentationsweise der Kontinuumsmechanik beibehalten.¹⁶ Die Energiebilanz bzw. erster Hauptsatz der Thermodynamik macht eine Aussage über die Äquivalenz von mechanischer und nichtmechanischer Arbeit. Dazu werden zunächst die Begriffe *innere Energie* und *Wärme* definiert. Die innere Energie wird als Volumenintegral definiert und lautet in räumlicher Darstellung

$$E = \int \varrho(\mathbf{x}, t) e(\mathbf{x}, t) dv, \quad (2.59)$$

mit e als die spezifische innere Energie pro Masseneinheit. Der von außen eingebrachte Anteil an nichtmechanischer Energie heißt Wärmefluss und setzt sich in analoger Vorstellung zu der Arbeit der äußeren Kräfte aus einem oberflächenverteilten und einem volumenverteilten Anteil zusammen:

$$Q = \int q(\mathbf{x}, t) da + \int \varrho(\mathbf{x}, t) r(\mathbf{x}, t) dv. \quad (2.60)$$

¹⁶Diese Vorgehensweise, welche auf Truesdell and Noll [1965] zurückgeht, wird der sogenannten rationalen Thermodynamik zugeschrieben.

Die Energiebilanz liefert die Aussage, dass die zeitliche Änderung der Gesamtenergie des Körpers, bestehend aus kinetischer Energie und innerer Energie, durch die Leistung der äußeren Kräfte (mechanischer Anteil) und durch den Wärmeaustausch (nichtmechanischer Anteil) bewirkt wird:

$$\dot{E} + \dot{K} = L_a + Q \quad (2.61)$$

Dies führt unter Ausnutzung des Zusammenhangs $q = -\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$ zwischen der Wärmeflussdichte q und dem Cauchy'schen Wärmeflussvektor \mathbf{q} in räumlicher Darstellung auf die globale Form¹⁷

$$\int \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + e \right) \rho \, dv = \int (\mathbf{T}^T \mathbf{v} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{n} \, da + \int (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + r) \rho \, dv. \quad (2.62)$$

Die lokale Form der Energiebilanz in räumlicher Darstellung

$$\dot{e}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\rho} \operatorname{div} \mathbf{q} + \frac{1}{\rho} \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} + r, \quad (2.63)$$

resultiert unmittelbar, unter Berücksichtigung der Impuls- und Drehimpulsbilanz sowie des Gauss'schen Integralsatzes.

2.3.5. Entropiebilanz – Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik

Für einen materiellen Körper kann die Entropie S als physikalische Zustandsgröße zunächst entsprechend den Begriffsdefinitionen der Kontinuumsmechanik ganz formal als Volumenintegral über die spezifische Entropie s und der Massendichte eingeführt werden

$$S(\mathcal{B}, t) = \int s(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}, t) \, dv. \quad (2.64)$$

Darüber hinaus wird die durch den Wärmeaustausch eingebrachte Entropie H definiert, welche aus einem oberflächen- und einem volumenverteilten Anteil besteht,

$$H = \int \Sigma \, da + \int \sigma \rho \, dv, \quad (2.65)$$

sowie die durch irreversible Prozesse produzierte Entropie

$$\Gamma = \int \gamma \rho \, dv. \quad (2.66)$$

Die Entropiebilanz sagt aus, dass die zeitliche Änderung der Entropie S aus der von außen zugeführten Entropie und der Entropieproduktion infolge irreversibler Prozesse besteht:

$$\dot{S} = H + \Gamma. \quad (2.67)$$

¹⁷Die globale Form der Energiebilanz erhält man aus der allgemeinen Bilanzgleichung indem man für $f = \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + e$, $\phi = (\mathbf{T}^T \mathbf{v} - \mathbf{q})$, $\varphi = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + r$ und $p = 0$ einsetzt.

Die Erfahrung zeigt, dass gewisse natürliche Prozesse nicht ohne weiteres umkehrbar sind, das heißt sie sind irreversibel. Dabei wird der Grad der Irreversibilität eines thermomechanischen Prozesses durch die Entropieproduktion dargestellt. Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik sagt dann aus, dass die Entropieproduktion eines materiellen Körpers nie negativ sein darf,

$$\Gamma = \dot{S} - H \geq 0. \quad (2.68)$$

Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik als Prinzip der Irreversibilität besitzt keine allgemeingültige Formulierung,¹⁸ die überall akzeptiert ist. Im Rahmen der Kontinuumsthermomechanik wird eine spezielle Formulierung für die Entropieungleichung gewählt, die sich nach den bisherigen Erfahrungen bewährt hat.¹⁹ Die Spezifikation der Entropiezufuhr erfolgt dabei in Anlehnung an die Gleichgewichtsthermodynamik, in der die Entropiezufuhr als Quotient aus zugeführter Wärme und absoluter Temperatur θ definiert wird. In der Kontinuumsthermomechanik sind zwar in erster Linie Nichtgleichgewichtszustände von Interesse, jedoch ist die Annahme des Entropieflusses bei Prozessen in der Nähe des Gleichgewichtes eine gute Approximation. Für den oberflächen- und volumenverteilten Entropiefluss gilt dann

$$\Sigma = \frac{\mathbf{q}}{\theta}, \quad \text{sowie} \quad \sigma = \frac{r}{\theta}, \quad (2.69)$$

wobei die oberflächenverteilte Entropiezufuhr analog zum Spannungsvektor bzw. Wärmeflussvektor als $\Sigma = \Sigma \cdot \mathbf{n}$ definiert wurde. Daraus erhält man eine globale Formulierung des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik in der Form der Clausius-Duhem Ungleichung²⁰

$$\frac{d}{dt} \int s \varrho \, dv + \int \frac{1}{\theta} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, da - \int \frac{1}{\theta} r \varrho \, dv \geq 0, \quad (2.70)$$

welche in die lokale Form

$$\gamma = \dot{s} + \frac{1}{\varrho \theta} (\text{div } \mathbf{q} - \varrho r) - \frac{1}{\varrho \theta^2} \mathbf{q} \cdot \text{grad } \theta \geq 0, \quad (2.71)$$

überführt werden kann. Die Berücksichtigung der Energiebilanz (2.63) ermöglicht die Elimination der lokalen Wärmezufuhr, so dass man aus (2.71) die folgende Ungleichung

$$\theta \gamma = -\dot{e} + \theta \dot{s} + \frac{1}{\varrho} \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \frac{1}{\varrho \theta} \mathbf{q} \cdot \text{grad } \theta \geq 0 \quad (2.72)$$

erhält. Hierbei wird $\delta = \theta \gamma$ als innere Dissipation bezeichnet. Im Hinblick auf die Formulierung eines thermodynamisch konsistenten Materialmodells stellt die Clausius-Duhem Ungleichung eine einfache Restriktion zur Erfüllung des Prinzips der Irreversibilität dar. Dabei wird bei der Modellierung häufig die freie Helmholtz'sche Energie

$$\psi = e - s\theta \quad (2.73)$$

¹⁸Siehe dazu [Haupt, 2002]

¹⁹Die spezielle Form der Entropieungleichung wird in der rationalen Thermodynamik als die Clausius-Duhem Ungleichung bezeichnet.

²⁰Die globale Form der Clausius-Duhem Ungleichung erhält man aus der allgemeinen Bilanzgleichung indem man für $f = s$, $\phi = -\frac{\mathbf{q}}{\theta}$, $\varphi = \frac{r}{\theta}$ und $p = \gamma$ einsetzt.

verwendet, mit der die Clausius-Duhem Ungleichung schließlich die folgende Gestalt annimmt,

$$\delta = -\dot{\psi} - s\dot{\theta} + \frac{1}{\rho} \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \frac{1}{\rho\theta} \mathbf{q} \cdot \text{grad } \theta \geq 0. \quad (2.74)$$

2.4. Konzept der Dualen Variablen

Zur Formulierung von Materialmodellen wurde von Haupt and Tsakmakis [1989], siehe auch [Haupt and Tsakmakis, 1996] und [Haupt, 2002], das Konzept der dualen Variablen entwickelt. Es ermöglicht in Analogie zur geometrischen linearen Theorie die getrennte konstitutive Modellierung elastischer und inelastischer Stoffeigenschaften und definiert die entsprechenden oder dualen Spannungs- und Verzerrungsvariablen und deren Raten so, dass die Endwertarbeit, die Spannungsleistung, die komplementäre Spannungsleistung und die inkrementelle Spannungsleistung invariant gegenüber einem Konfigurationswechsel bleiben.

Zur Verdeutlichung wird durch das Tensorfeld Ψ eine beliebige Transformation in eine andere Konfiguration durchgeführt, so dass es notwendig ist, den Spannungs- und Verzerrungstensor ebenfalls in das neue Bezugssystem zu transformieren.²¹ In der neuen Konfiguration wird Σ als neuer Spannungstensor und Π als neuer Verzerrungstensor definiert. Die Vortransformation der Verzerrungs- und Spannungsgrößen führt auf das Ergebnis

$$\Pi = \Psi^{-T} \mathbf{E} \Psi^{-1}, \quad \overset{\Delta}{\Pi} = \Psi^{-T} \overset{\Delta}{\mathbf{E}} \Psi^{-1} = \overset{\Delta}{\Pi} + \Lambda^T \Pi + \Pi \Lambda, \quad (2.77)$$

$$\Sigma = \Psi \tilde{\mathbf{T}} \Psi^T, \quad \overset{\nabla}{\Sigma} = \Psi \overset{\nabla}{\tilde{\mathbf{T}}} \Psi^T = \overset{\nabla}{\Sigma} - \Lambda \Sigma - \Sigma \Lambda^T, \quad (2.78)$$

wobei $\overset{\Delta}{\Pi}$ die kovariante Oldroyd Ableitung des Verzerrungstensors und $\overset{\nabla}{\Sigma}$ die kontravariante Oldroyd Ableitung des Spannungstensors relativ zur neu eingeführten Konfiguration darstellt. Die Verwendung der Transformationsvorschriften (2.77) und (2.78) führt

²¹Sei $\Psi = \Psi(\mathbf{X}, t)$ ein Tensorfeld welches einen beliebigen Konfigurationswechsel beschreibt, so werden die materiellen Linienelemente der Referenzkonfiguration $d\mathbf{X}$ in die materiellen Linienelementen $d\xi$ durch die Gleichung

$$d\xi = \Psi d\mathbf{X} \quad (2.75)$$

abgebildet. Für die Änderungsgeschwindigkeiten gilt dann analog zur Definition des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten der Zusammenhang

$$(\dot{d\xi}) = \dot{\Psi} \Psi^{-1} d\xi = \Lambda d\xi. \quad (2.76)$$

auf die geforderte Invarianz der physikalisch bedeutsamen Skalarprodukte

$$\tilde{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{E} = \boldsymbol{\Sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi} \quad \text{Endwertarbeit} \quad (2.79)$$

$$\tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \boldsymbol{\Sigma} \cdot \overset{\Delta}{\dot{\boldsymbol{\Pi}}} \quad \text{Spannungsleistung} \quad (2.80)$$

$$\overset{\Delta}{\dot{\mathbf{T}}} \cdot \mathbf{E} = \overset{\nabla}{\dot{\boldsymbol{\Sigma}}} \cdot \boldsymbol{\Pi} \quad \text{komplementäre Spannungsleistung} \quad (2.81)$$

$$\overset{\Delta}{\dot{\mathbf{T}}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \overset{\nabla}{\dot{\boldsymbol{\Sigma}}} \cdot \overset{\Delta}{\dot{\boldsymbol{\Pi}}} \quad \text{inkrementelle Spannungsleistung} \quad (2.82)$$

Die Identifikation des Tensorfeldes Ψ mit dem Deformationsgradienten (2.7) für eine Transformation von der Referenz- auf die Momentankonfiguration führt auf die dual zugeordneten Spannungs- und Verzerrungstensoren der jeweiligen Konfigurationen. Die duale Verzerrungsvariable $\boldsymbol{\Pi}$ in der Momentankonfiguration ist der Almansi'sche Verzerrungstensor \mathbf{A} und durch die kovariante Oldroyd Ableitung $\overset{\Delta}{\dot{\mathbf{A}}}$ als Verzerrungsgeschwindigkeit. Die duale Spannungsvariable $\boldsymbol{\Sigma}$ ist der Kirchhoff'sche Spannungstensor \mathbf{S} und seine kontravariante Oldroyd Ableitung ist die konjugierte Spannungsgeschwindigkeit $\overset{\nabla}{\dot{\mathbf{S}}}$.

3. Modellierung der Materialeigenschaften von Elastomeren

Der Satz von Bilanzgleichungen der klassischen Kontinuumsmechanik und Thermodynamik dient als Ausgangspunkt zur Beschreibung von thermomechanischen Prozessen.¹ Schließt man elektrodynamische und chemische Prozesse aus, so bilanzieren diese Relationen die Masse, den Impuls, den Drehimpuls, die Energie und die Entropie. Sie stellen allgemeine Naturgesetze dar, die für jeden beliebigen materiellen Körper gelten, unabhängig von spezifischen Materialeigenschaften, [Haupt, 2002].

Die Bilanzgleichungen stellen mathematisch gesehen partielle Differentialgleichungen dar. Das Lösen der Differentialgleichungen ist unmittelbar nicht möglich, da konstitutive Beziehungen für die Spannungen, den Wärmestrom und der inneren Energie fehlen. Erschwerend kommt hinzu, dass in den Gleichungen keine explizite Temperaturabhängigkeit auftritt und das die Entropiebilanz aus physikalischen Gründen noch um eine Ungleichung, die das Prinzip der Irreversibilität zum Ausdruck bringt, ergänzt werden muss. Das Grundproblem besteht nun darin, dass die Materialgleichungen für die genannten Größen im allgemeinen nicht a priori bekannt sind. Dies gilt insbesondere für die innere Energie und die Entropie. Daher ist es das Ziel der thermomechanischen Materialtheorie, die fehlenden Materialgleichungen zu modellieren und damit die Allgemeinheit der Bilanzrelationen einzuschränken.

3.1. Charakteristische Eigenschaften von Elastomeren

Im Sinne der Materialtheorie werden Materialgleichungen abgeleitet, indem aus Versuchen das Materialverhalten bestimmt und charakterisiert wird. Eine wesentliche Grundlage der experimentellen Untersuchung ist, dem zu erwartendem thermomechanischen Verhalten angepasste Versuchsreihen zu definieren. Zur Festlegung der erforderlichen Versuchsreihen ist es zweckmäßig, allgemeine Eigenschaften des zu modellierenden Materials herauszuarbeiten. Zum Verständnis einiger Eigenschaften ist es hilfreich, die

¹Verbunden mit geeigneten Anfangs- und Randbedingungen.

3. Modellierung der Materialeigenschaften von Elastomeren

Besonderheiten des molekularen Aufbaus der Elastomere zu kennen. Die Werkstoffgruppe der Elastomere² ist der Gruppe der Polymere³ untergeordnet. Wie keine andere Materialgruppe zeigen Polymere in Abhängigkeit von der Temperatur und der Belastungsform eine große Bandbreite unterschiedlichen Materialverhaltens. Dieses Phänomen kann durch den molekularen Aufbau, der sich aus einer Vielzahl miteinander verbundenen chemischen Einheiten, den Monomeren, zusammensetzt, erklärt werden. Dabei wird häufig eine Unterteilung der Polymere in Bezug auf ihre molekulare Struktur, in amorphe und (teil)kristalline Polymere eingeführt. Detaillierte Erläuterungen zur molekularen Struktur finden sich in vielen Standardwerken, wie z.B. [Houwink and De Decker, 1971], [Treloar, 1975], [Tobolsky and Mark, 1980], [Schwarzl, 1990] und [Painter and Coleman, 1998].

Elastomere sind durch verschlauft angeordnete Makromoleküle, die an den sogenannten Vernetzungspunkten über chemische Bindungen fest miteinander verbunden sind, gekennzeichnet. Die Anzahl und damit der Abstand der Vernetzungspunkte, was in der Werkstofftechnik über die Kenngröße Vulkanisationsgrad beschrieben wird, beeinflussen wesentlich das Materialverhalten. Die Belegung von allen möglichen Verknüpfungsstellen in den Molekülketten entspricht einem Vulkanisationsgrad von 100%, siehe [Houwink and De Decker, 1971]. Über eine geeignete Vulkanisationstemperatur- und zeit liegt ein bestimmter Vernetzungsgrad vor, womit die gewünschten Materialeigenschaften erzielt werden. Zur Einstellung weiterer Eigenschaften werden dem Elastomer Füllstoffe, wie z.B. Ruß oder Kieselsäure hinzugefügt. Das Einbringen der Füllstoffe wirkt zum einen verfestigend und zum anderen werden einige mechanische Effekte, z.B. der Mullins-Effekt, siehe [Mullins and Tobin, 1965], deutlich verstärkt, wodurch das Schädigungsverhalten ausgeprägter wird. Diese Wirkungsweise kommt durch irreversible, chemische Reaktionen in den Bindungen zwischen den Füllpartikeln und den Elastomermolekülen zustande und wird in [Mendelsohn et al., 1985], [Strauss, 1992], [Kaliske, 1995] und [Huber, 1997] näher untersucht.

Interessanterweise zeigen Elastomere mit nahezu identischen, chemischen Bestandteilen⁴ in Abhängigkeit der Temperatur und/oder Belastungsgeschwindigkeit völlig unterschiedliche Materialeigenschaften. Diese Besonderheiten des mechanischen Verhaltens und der Temperaturabhängigkeit, die zur Festlegung von Versuchsreihen herangezogen werden, werden im Folgenden kurz aufgegriffen. Für eine detaillierte Erläuterung sei auf die oben erwähnte umfangreiche Literatur verwiesen.

Temperaturabhängigkeit des Materialverhaltens von Elastomeren Als wesentliche Bezugstemperatur bei Elastomeren tritt die Glasübergangstemperatur θ_G auf. Unterhalb der Glasübergangstemperatur ist ein glasartiges und sprödes Verhalten zu beobachten. Oberhalb der Glasübergangstemperatur zeigen Elastomere entropieelastisches

²Elastomere werden auch als Gummi oder *rubber like solids* bezeichnet.

³griech.: *poly*: viele, *méros*: (An)Teil

⁴z.B. Gummi und Glas.

Verhalten, womit große reversible Deformationen ermöglicht werden, die in Form einer Entropieänderung identifiziert werden, siehe [Middendorf, 2002]. Zudem tritt ein spezieller Zusammenhang zwischen Spannung, Dehnung und der Glasübergangstemperatur auf. Die Gleichgewichtsspannung ist oberhalb der Glasübergangstemperatur näherungsweise linear von der Temperatur abhängig, gleichzeitig nichtlinear von der Dehnung, siehe Abbildung 3.1. Dieser Zusammenhang ist für unterschiedliche Temperaturen bei

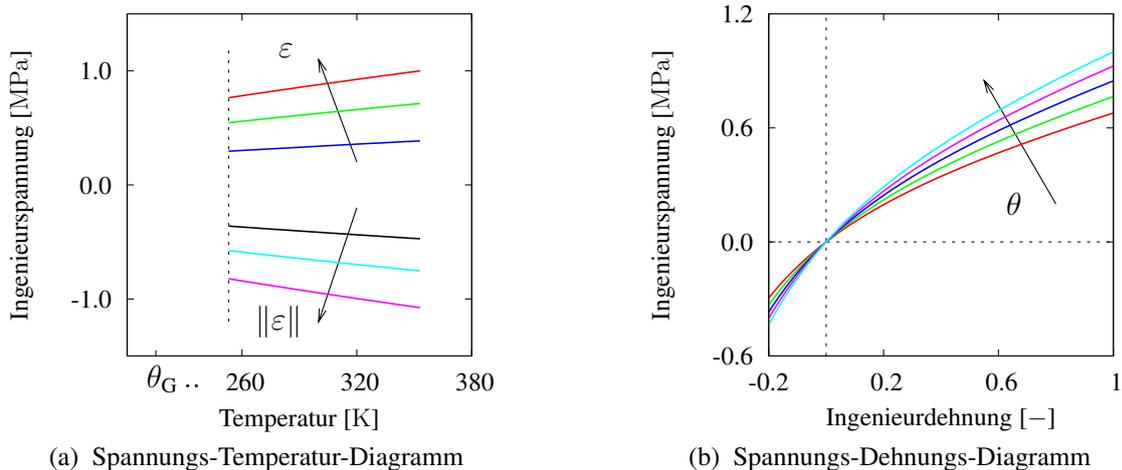


Abbildung 3.1.: Schematische Darstellung des Zusammenhangs von Spannung, Dehnung und Temperatur der Entropieelastizität

variabler Dehnung gültig. Allerdings findet sich ein Dehnungsbereich, in dem bei einer Temperaturerhöhung ein Abfall der Ingenieurspannung zu beobachten ist. Dieser Effekt wird in der Literatur allgemein als thermoelastische Inversion bezeichnet und ist in der Arbeit von Treloar [1975] anhand von Versuchsdaten dokumentiert und in Abbildung 3.2a schematisiert. Die Temperaturentwicklung bei adiabaten dehnungsgesteuerten Zugversuchen ist unter dem Namen Joule-Gough Effekt bekannt. Im Gegensatz zu dem Verhalten von Metallen erwärmen sich Elastomere bei einer reversiblen Zugdeformation unter adiabaten Bedingungen und bei kleinen Zugdeformation⁵ erfährt das Material eine Abkühlung, siehe Abbildung 3.2b.

Mechanische Eigenschaften von Elastomeren Im Gegensatz zu der großen Deformierbarkeit steht die geringe Steifigkeit, die durch die Anfangsschubmoduli von etwa 1MPa gekennzeichnet ist. Auch bei großen Deformation zeigen Elastomere keine bzw. kaum Volumendehnung. Dies entspricht einem (nahezu) inkompressiblen Materialverhalten, welches in vielen Untersuchungen wie z.B. in [Sedlan, 2000], [Hartmann et al., 2001] und [Hartmann et al., 2003] aufgeführt ist.

⁵Je nach Material bis zu 10%.

3. Modellierung der Materialeigenschaften von Elastomeren

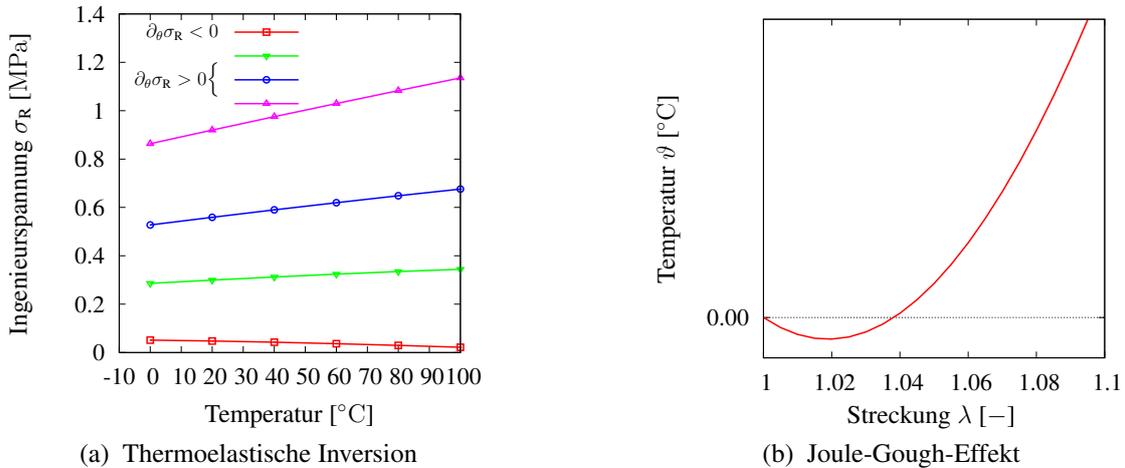


Abbildung 3.2.: Thermomechanische Effekte der Entropieelastizität

Die Spannungs-Dehnungskennlinie von Elastomeren zeigt eine deutliche Abhängigkeit von der Dehnungsgeschwindigkeit und der Belastungsgeschichte. Vergleichende Untersuchungen mit unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten sind unter anderem bei Lion [1997a] und Ihlemann [2004] aufgeführt. Diese beobachteten Ratenabhängigkeiten sind proportional zu der Temperaturabhängigkeit, was am Verlauf der Dämpfung über der Temperatur verdeutlicht wird. D.h. der Anteil der viskosen Effekte nimmt mit steigender Temperatur ab. In der Literatur wird der gegenseitige Einfluss von Temperatur und Belastungsgeschwindigkeit als Zeit-Temperatur Superpositionsprinzip bezeichnet und erlaubt in diesem Zusammenhang die Theorie der thermorheologisch einfachen Stoffe in der Materialmodellierung einzuführen, siehe [Lion, 2000b].

Elastomere weisen keine bzw. eine sehr geringe statische Hysterese auf. Aufgrund der Vernetzungspunkte können die Molekülketten nicht einander abgleiten, was eine Plastifizierung verhindert. Statische Hysteresen, die bei hohen Temperaturen und großen Deformationen wie z.B. in [Sedlan and Haupt, 1999] beobachtet wurden, sind auf chemische Relaxationen zurückzuführen, siehe [Tobolsky and Mark, 1980].

3.2. Grundlegende Prinzipien der Materialmodellierung

Das Ziel der Materialtheorie ist, allgemeine Grundsätze und systematische Methoden für den Aufbau geeigneter mathematischer Modelle zu liefern, die die individuellen Eigenschaften des materiellen Körpers beschreiben. Die im folgenden beschriebene Vorgehensweise bei der Herleitung von konstitutiven Gleichungen folgt den Prinzipien der rationalen Thermomechanik und ist charakterisiert durch ihren deduktiven, axiomatischen Aufbau im Rahmen einer um thermodynamische Größen erweiterten Feldtheorie

der Kontinuumsmechanik. Von besonderer Bedeutung dieser Herangehensweise sind die grundlegenden Arbeiten von Coleman and Noll [1963], Truesdell and Noll [1965] und Coleman and Gurtin [1967]. Hierin sind zwei fundamentale Aspekte der Materialmodellierung enthalten. Zum einen wird besagt, dass der zweite Hauptsatz der Thermodynamik nicht direkt als Restriktion auf den Prozess wirkt, sondern indirekt als Restriktion auf die konstitutiven Gleichungen. Dies erlaubt die Herleitung von thermodynamisch konsistenten Materialgleichungen auf der Basis einer a priori Erfüllung des zweiten Hauptsatzes in Form der lokalen Clausius-Duhem Ungleichung. Zum anderen werden zur Beschreibung dissipativer Prozesse innere Variablen eingeführt, für die dann Evolutionsgleichungen formuliert werden. Durch dieses spezielle Vorgehen zur Entwicklung von Materialgleichungen können zunächst die verschiedenen Partialeinflüsse mit Hilfe der multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten getrennt und anschließend Restriktionen für die Entwicklungsgleichungen der inneren Variablen abgeleitet werden.

Die a priori Erfüllung des Dissipationspostulats stellt die Beschreibung thermodynamischer Prozesse sicher. Die Herleitung thermodynamisch konsistenter Materialgleichungen ist zusätzlich an eine Reihe axiomatischer Bedingungen geknüpft. Diese Bedingungen wurden vor allem durch die Arbeiten von Truesdell and Toupin [1960] und Truesdell and Noll [1965] in die wissenschaftliche Diskussion eingeführt und sind in zahlreichen Büchern, wie z.B. [Krawietz, 1986], [Altenbach and Altenbach, 1994] und [Haupt, 2002] zu finden. Zu den wesentlichen Prinzipien gehören:

- Das Prinzip des **Determinismus**.
Es besagt, dass der aktuelle Zustand des Kontinuums durch die aktuelle Belastung und die gesamte Vorgeschichte bestimmt ist. Rückwirkungen der Zukunft und stochastische Unbestimmtheiten werden ausgeschlossen.
- Das Prinzip der **lokalen Wirkung**.
Es besagt, dass der Zustand eines materiellen Punktes lediglich durch seine unmittelbare Umgebung beeinflusst wird. Die Relativbewegung bzw. Temperaturänderung der Umgebung des materiellen Punktes wird durch eine Approximation 1. Ordnung, dem Deformationsgradienten, bestimmt.
- Das Prinzip der **Äquipräsenz**.
Es besagt, dass alle konstitutiven Gleichungen im Ansatz vom gleichen Variablensatz abhängen müssen.
- Das Prinzip der **materiellen Objektivität**.
Es besagt, dass die mathematische Struktur der Materialgleichungen unabhängig von der Wahl des Bezugssystems sein muss. Die Variablen müssen invariant gegenüber der Bewegung des Beobachtersystems sein.

Mit Einhaltung dieser axiomatischen Bedingungen lassen sich Schlussfolgerungen bezüglich der Wahl geeigneter Variablen ziehen.

Die freie Energie ψ ist eine geeignete Energiefunktion bei der Modellierung von Materialeigenschaften in einem thermomechanischen Kontext. Natürlich kann auch jedes weitere thermodynamische Potential herangezogen werden. In [Kamlah, 1994] sowie in [Lehmann, 1984] wird beispielsweise die freie Enthalpie herangezogen. Bei der freien Energie handelt es sich jedoch um eine physikalisch gut interpretierbare Energiefunktion. Sie ist auf natürliche Weise eine Funktion der Temperatur und der Verzerrung.

Bei der Entwicklung eines Modells für ein konkretes Material stellt sich die Frage, welche der verschiedenen thermomechanischen Variablen Bestandteil der freien Energie, und in welcher Form sie in die freie Energie eingehen. Vor allem zur adäquaten Beschreibung der inelastischen Materialeigenschaften sind innere Variablen zu definieren, die jedes einzelne Phänomen berücksichtigen. Zur Klärung dieser Frage sind neben dem physikalischen Verständnis der einzelnen Deformationsmechanismen die Bilanzrelationen der Thermomechanik für die Energie und die Entropie sowie das Prinzip der Irreversibilität hilfreich.

3.3. Thermodynamisch konsistente Materialmodellierung

3.3.1. Motivation an einem rheologischen Modell

Das im Folgenden hergeleitete Materialmodell lässt sich auf Grundlage von Modellen der klassischen linearen Viskoelastizitätstheorie motivieren. In der Literatur sind eine Vielzahl von verschiedenen Darstellungsmethoden der linearen Viskoelastizität vorgeschlagen, z.B. werden von Rabotnov and Iljushin [1970] Modelle in Form von linearen Faltungsintegralen mit Gedächtnis-termen vorgeschlagen, oder Modelle aus Systemen von linearen Differentialgleichungen erster Ordnung, oder wie in [Tschögl, 1989] auch in Form von rheologischen Feder-Dämpfer-Modellen. Rheologische Modelle vereinigen den Vorteil der besonderen Veranschaulichung mit der thermomechanischen Konsistenz, die im isothermen Fall nach Krawietz [1986] auch als Passivität bezeichnet wird. Sie sind verträglich mit dem Dissipationsprinzip der Thermodynamik und erlauben eine einfache Formulierung der Formänderungsenergie sowie eine physikalische Interpretierbarkeit der inneren Variablen als inelastische Dehnungen der Maxwell-Elemente.⁶ Außerdem lassen sie sich vergleichsweise einfach für dreidimensionale Prozesse und für geometrische und physikalische Nichtlinearitäten verallgemeinern, ohne dass die thermomechanische Konsistenz verloren geht. Die Übertragung rheologischer Modelle auf finite Deformation ermöglicht somit eine zutreffende Materialbeschreibung und nutzt dabei die Kenntnisse aus, die aus der linearen Viskoelastizität bekannt sind.

⁶Das klassische Maxwell Element ergibt sich aus einer Hintereinanderschaltung einer linearen Feder, charakterisiert durch den Elastizitätsmodul und einem geschwindigkeitsproportionalen Dämpfer mit einer konstanten Viskosität. Eine Übersicht über einzelne Elemente und Modelle ist z.B. bei Williams [1964], Flügge [1975] und Pah et al. [1995] aufgeführt.

Basierend auf der Arbeit von Lion [2000b] wird das in Abbildung 3.3 dargestellte rheologische Modell, wie es in ähnlicher Form auch bei Heimes [2005], bzw. für isotherme Materialbeschreibung bei Sedlan [2000] und Haupt and Sedlan [2001] vorgeschlagen wird, für die Motivation des Materialmodells eingeführt. Aus der Vorstellung, dass

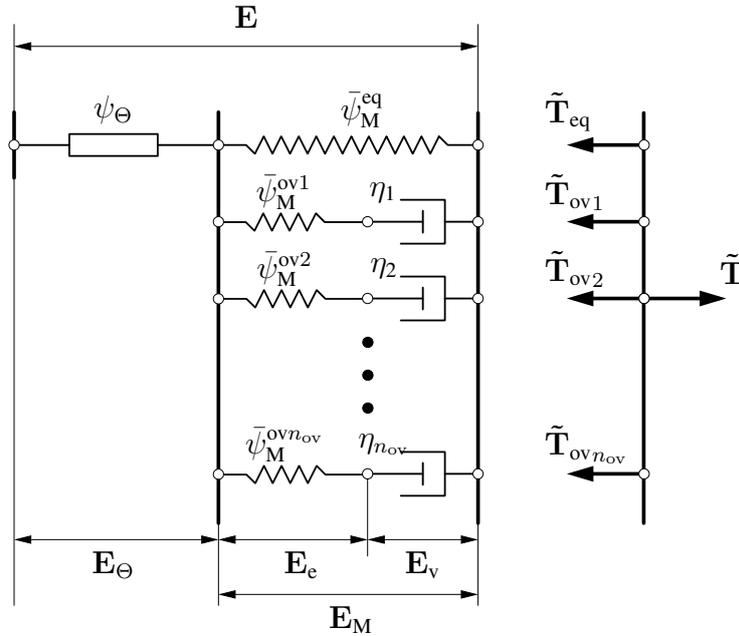


Abbildung 3.3.: Nichtlineares rheologisches Modell der Thermoviskoelastizität.

die gesamte in den Federn gespeicherte Energie durch die freie Energie ψ repräsentiert wird, lässt sich eine additive Aufspaltung der freien Energie formulieren, die den Federn jeweils zugeordnet ist. Die nichtlineare Feder des Modells, der die freie Energie $\bar{\psi}_M^{eq}$ zugeordnet ist, repräsentiert den Gleichgewichtsanteil der Spannung, womit die Elastizität des Materials abgebildet ist. Die Anteile der Überspannungen werden durch die nichtlinearen Federn der Maxwell Elemente, denen die freie Energien $\bar{\psi}_M^{ovk}$, $k = 1, \dots, n_{ov}$, zugeordnet sind, modelliert. Die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Dämpferelemente wird durch die nichtlinearen Viskositätsfunktionen η_k für $k = 1, \dots, n_{ov}$, formuliert. Durch diese entkoppelte Darstellung werden die Gleichgewichtseigenschaften und Geschwindigkeitsabhängigkeiten der Spannung in die ratenunabhängige Gleichgewichtsspannung \tilde{T}_{eq} und ratenabhängige Überspannungen \tilde{T}_{ovk} für $k = 1, \dots, n_{ov}$, zerlegt. Die Modellstruktur impliziert eine Trennung der thermischen Deformation von den mechanischen spannungserzeugenden Deformationen. Sie bewirkt, dass die Spannungen durch ein Funktional der mechanischen Verzerrungen E_M und der Temperatur θ repräsentiert werden. Für die Beschreibungen der Konstitutivgleichungen der dissipativen Elemente werden innere Variablen eingeführt, indem die mechanischen Verzerrungen in einen elastischen Anteil E_e und einen inelastischen, viskosen Anteil E_v aufgeteilt werden. Für die inneren Variablen E_v werden dem Modell entsprechend Evolutionsglei-

chungen formuliert, die im Sinne der thermodynamischen Konsistenz die Positivität der Spannungsleistung der Dämpfungselemente gewährleisten muss, was durch die Wahl $\eta_k > 0$, $k = 1, \dots, n_{ov}$, sichergestellt ist. Der rein temperaturabhängige Anteil der freien Energie wird durch ψ_Θ repräsentiert.

Im Zusammenhang der molekularen Theorie beruht nach Tobolsky [1967] die Inelastizität von Elastomeren auf komplizierte, molekulare Platzwechselfvorgänge. Um ausreichend die ganze Bandbreite von unterschiedlichen Aktivierungsenergien, die für die Platzwechselfvorgänge im amorphen Polymer verantwortlich sind, zu modellieren, bedarf es einer Vielzahl von parallel angeordneten Maxwell Elementen, siehe [Lion, 2000b]. Zur Darstellung einer phänomenologischen, grundlegenden Modellierung ist jedoch ein einzelnes Maxwell Element ausreichend, was in den folgenden Betrachtungen eingehalten wird.

3.3.2. Multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten

Konzepte zur Zerlegung der finiten Deformation sind im Hinblick auf die physikalische Identifikation unterschiedlicher Einflüsse der Deformation von zentraler Bedeutung. So besteht der Wunsch, beispielsweise die Gesamtdeformation in einen rein elastischen und einen rein inelastischen Anteil oder in einen rein thermischen Expansionsanteil und einen spannungserzeugenden mechanischen Anteil aufzuteilen. Die Zerlegung ist dabei unabhängig vom jeweiligen konstitutiven Modell und stellt insofern eine rein kinematische Hypothese dar. Während bei der geometrisch linearen Theorie eine additive Zerlegung der Partialeinflüsse möglich ist, hat sich in der Beschreibung finiter Deformationen das Konzept der multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten etabliert. Dieses Vorgehen ist verbreitet im Bereich der Elastoplastizitätstheorie und basiert auf Arbeiten von Lee and Liu [1967] und Lee [1969]. Darüber hinaus finden sich in der Literatur weitere Anwendungen etwa auf viskoelastische Probleme [Lubliner, 1985] oder thermoelastische Probleme [Lu and Pister, 1975].

Bei der hier betrachteten Problemstellung wird konsequent die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten auf die aus verschiedenen Partialeinflüssen zusammengesetzte thermomechanische Deformation angewandt. Die Reihenfolge der Zerlegung des Deformationsgradienten in Bezug auf die Partialeinflüsse lässt sich allerdings unterschiedlich umsetzen. Eine Untersuchung diesbezüglich findet sich in [Hartmann, 2012]. In Anlehnung an Miehe [1988] wird hier die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten in eine isotherme, mechanische, spannungserzeugende Deformation \mathbf{F}_M und eine ihr folgend thermische spannungsfreie Expansion, beschrieben durch den Tensor \mathbf{F}_Θ , mit

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_\Theta \mathbf{F}_M, \quad (3.1)$$

eingeführt. Die multiplikative Zerlegung postuliert eine fiktive Zwischenkonfiguration,⁷ die im allgemeinen als die mechanische Zwischenkonfiguration $\hat{\chi}_t$ bezeichnet wird.

⁷Siehe hierzu z.B. [Krawietz, 1986], bzw. [Miehe, 1988] oder [Miehe, 1993]

Bei rein volumetrischen Temperaturdehnungen, wie sie bei Polykristallen und Polymeren zu beobachten sind, kann für \mathbf{F}_Θ der Ansatz nach Lion [2000b]

$$\mathbf{F}_\Theta = \varphi^{1/3} \mathbf{I}, \quad \varphi := \hat{\varphi}(\theta - \theta_0) = 1 + \alpha_\Theta(\theta - \theta_0), \quad (3.2)$$

postuliert werden. Die skalare Materialfunktion $\hat{\varphi}$ beschreibt das isotrope, thermische Ausdehnungsverhalten aufgrund der Temperaturdifferenz $\vartheta := \theta - \theta_0$ durch

$$\det \mathbf{F}_\Theta = \hat{\varphi}(\theta - \theta_0) = \hat{\varphi}(\vartheta) \quad (3.3)$$

und ist dem spezifischen Materialverhalten angepasst. Für den mechanischen Teildeformationsgradient \mathbf{F}_M wird zunächst nach Flory [1961] die volumetrisch-isochore Zerlegung

$$\mathbf{F}_M = \hat{\mathbf{F}}_M \bar{\mathbf{F}}_M, \quad (3.4)$$

eingeführt. Dabei beschreibt der Tensor $\hat{\mathbf{F}}_M$ die volumenändernde Deformation und der unimodulare Tensor $\bar{\mathbf{F}}_M$ die volumenerhaltende, gestaltsändernde Deformation, mit den folgenden Eigenschaften:

$$\hat{\mathbf{F}}_M = (\det \mathbf{F}_M)^{1/3} \mathbf{I}, \quad \det \hat{\mathbf{F}}_M = \det \mathbf{F}_M \quad (3.5)$$

$$\bar{\mathbf{F}}_M = (\det \mathbf{F}_M)^{-1/3} \mathbf{F}_M, \quad \det \bar{\mathbf{F}}_M = 1. \quad (3.6)$$

Für eine physikalisch zutreffende Darstellung thermoinelastischer Materialeigenschaften ist es sinnvoll, bei der Formulierung des Materialmodells der Thermoviskoelastizität eine weitere Zerlegung einzuführen. Die elastisch-viskose Zerlegung des mechanischen, gestaltändernden Deformationsgradienten

$$\bar{\mathbf{F}}_M = \bar{\mathbf{F}}_e \bar{\mathbf{F}}_v, \quad (3.7)$$

führt auf einen elastischen $\bar{\mathbf{F}}_e$ und einen geschwindigkeitsabhängigen oder viskosen Anteil $\bar{\mathbf{F}}_v$. In Bezug auf die gesamte Deformation postuliert multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten mehrere fiktive, inkompatible Zwischenkonfigurationen [Miehe, 1988]. Sie sind mit der Annahme eines lokalen Zustandes verknüpft und basieren auf einer lokalen Entlastung des Kontinuums.⁸ Damit handelt es sich bei der multiplikativen Zerlegung um ein lokales Konzept, das unmittelbar mit dem Prinzip der lokalen Wirkung zusammen hängt.⁹ Das Vorgehen der multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten hinsichtlich der gesamten thermomechanischen Deformation ist in Abbildung 3.4 illustriert und durch

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_\Theta \mathbf{F}_M = \mathbf{F}_\Theta \hat{\mathbf{F}}_M \bar{\mathbf{F}}_M = \mathbf{F}_\Theta \hat{\mathbf{F}}_M \bar{\mathbf{F}}_e \bar{\mathbf{F}}_v = \mathbf{F}_\Theta \check{\mathbf{F}}_e \bar{\mathbf{F}}_v, \quad (3.8)$$

beschrieben, worin die reversible, rein elastische Deformation durch

$$\check{\mathbf{F}}_e = \hat{\mathbf{F}}_M \bar{\mathbf{F}}_e, \quad (3.9)$$

⁸Es wird nur die unmittelbare Umgebung eines materiellen Punktes betrachtet.

⁹Siehe hierzu Abschnitt 3.2.

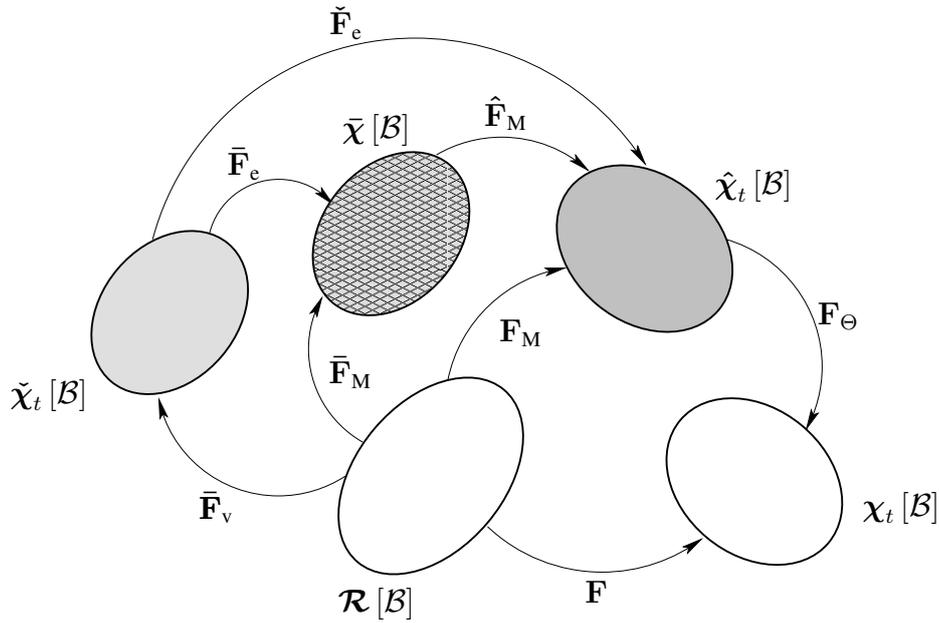


Abbildung 3.4.: Multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten

beschrieben ist.

Aus der Zerlegung des Deformationsgradienten (3.8) leiten sich die Verzerrungsmaße für die Teildeformationen her. Ausgehend von der quadratischen Differenz der materiellen Linienelemente (2.14) lässt sich die additive Zerlegung der absoluten materiellen Verzerrungsmaße als Addition Green'scher Verzerrungstensoren

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_\Theta + \mathbf{E}_M, \quad (3.10)$$

postulieren. Der mechanische Green'sche Verzerrungstensor \mathbf{E}_M ergibt sich aus der Vorstellung einer fiktiven thermischen Entlastung zu

$$\mathbf{E}_M := \lim_{\vartheta \rightarrow 0} \mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_M^T \mathbf{F}_M - \mathbf{I}), \quad (3.11)$$

und der thermische Green'sche Verzerrungstensor aus der Differenz von (3.10)

$$\mathbf{E}_\Theta = \mathbf{E} - \mathbf{E}_M = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{F}_M^T \mathbf{F}_M). \quad (3.12)$$

Mit der in (3.8) vorgestellten Zerlegung lässt sich der mechanische Teildeformationsgradient auch durch $\mathbf{F}_M = \check{\mathbf{F}}_e \bar{\mathbf{F}}_v$ angeben. Aus der Voraussetzung, dass der volumenändernde Anteil $\hat{\mathbf{F}}_M$ der mechanischen Deformation keine viskosen Einflüsse bewirken, können die mechanischen Verzerrungsmaße additiv in $\mathbf{E}_M = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}_v$ zerlegt werden, worauf die Zerlegung

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}_v + \mathbf{E}_\Theta, \quad (3.13)$$

mit

$$\mathbf{E}_e = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_M^T \mathbf{F}_M - \bar{\mathbf{F}}_v^T \bar{\mathbf{F}}_v), \quad \mathbf{E}_v = \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{F}}_v^T \bar{\mathbf{F}}_v - \mathbf{I}), \quad (3.14)$$

folgt. Hierin werden die rechten Cauchy-Green Tensoren der Zwischenkonfiguration durch $\mathbf{C}_M = \mathbf{F}_M^T \mathbf{F}_M$ und $\bar{\mathbf{C}}_v = \bar{\mathbf{F}}_v^T \bar{\mathbf{F}}_v$ definiert. Der elastische Anteil des Green'schen Verzerrungstensors \mathbf{E}_e beinhaltet neben der elastischen Deformation $\check{\mathbf{F}}_e$ auch den inelastischen Anteil $\bar{\mathbf{F}}_v$. Dies führt auf die Aussage, dass die additive Aufteilung (3.13) des Green'schen Verzerrungstensors relativ zur Referenzkonfiguration nicht einen rein elastischen und inelastischen Anteil der Deformation beschreibt. Dies gelingt durch die Transformation des Green'schen Verzerrungstensors auf die Zwischenkonfiguration $\check{\chi}_t$. Die Transformation

$$\check{\mathbf{\Gamma}} = \bar{\mathbf{F}}_v^{-T} \mathbf{E} \bar{\mathbf{F}}_v^{-1} = \check{\mathbf{\Gamma}}_{\Theta_e} + \bar{\mathbf{\Gamma}}_v, \quad (3.15)$$

führt auf den Verzerrungstensor $\check{\mathbf{\Gamma}}$, der sich additiv aus einem rein thermisch-elastischen Anteil $\check{\mathbf{\Gamma}}_{\Theta_e} = \check{\mathbf{\Gamma}}_{\Theta} + \check{\mathbf{\Gamma}}_e$ und einem rein inelastischen Anteil $\bar{\mathbf{\Gamma}}_v$ zusammensetzt. Die Verzerrungstensoren

$$\check{\mathbf{\Gamma}}_e = \frac{1}{2}(\check{\mathbf{C}}_e - \mathbf{I}), \quad \check{\mathbf{\Gamma}}_{\Theta} = \frac{1}{2}(\varphi^{\frac{2}{3}} - 1)\check{\mathbf{C}}_e, \quad \text{mit } \check{\mathbf{C}}_e := \check{\mathbf{F}}_e^T \check{\mathbf{F}}_e, \quad (3.16)$$

entsprechen dem elastischen Anteil der Gesamtverzerrungen auf der Zwischenkonfiguration und

$$\bar{\mathbf{\Gamma}}_v = \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \bar{\mathbf{B}}_v^{-T}), \quad \bar{\mathbf{B}}_v := \bar{\mathbf{F}}_v \bar{\mathbf{F}}_v^T, \quad (3.17)$$

dem zugehörigen inelastischen Anteil. Vollkommen analoge Aussagen sind in Bezug auf die weitere eingeführte multiplikative Zerlegung durch die Transformation $\mathbf{F}_M^{-T}(\cdot)\mathbf{F}_M^{-1}$ auf die Zwischenkonfiguration $\hat{\chi}_t$ möglich. Die dabei resultierenden Verzerrungstensoren sind in Abbildung 3.5 veranschaulicht. Die materiellen Verzerrungsraten werden ausgehend von (3.10) als Addition von materiellen Zeitableitungen Green'scher Verzerrungstensoren

$$\dot{\mathbf{E}} = \dot{\mathbf{E}}_{\Theta} + \dot{\mathbf{E}}_M \quad (3.18)$$

gebildet. Sie können mit Hilfe der aufgeführten Operatoren $\mathbf{F}_M^{-T}(\cdot)\mathbf{F}_M^{-1}$ bzw. $\bar{\mathbf{F}}_v^{-T}(\cdot)\bar{\mathbf{F}}_v^{-1}$ in die jeweiligen Zwischenkonfiguration transformiert werden. Im Sinne des Konzepts der dualen Variablen, siehe Abschnitt 2.4, führt die Vortransformation der Green'schen Verzerrungstensoren auf objektive Zeitableitungen in Form von kovarianten Oldroyd Ableitungen für die Zwischenkonfiguration $\check{\chi}_t$

$$\overset{\Delta}{(\dot{\cdot})} = (\overset{\Delta}{\dot{\cdot}}) + \mathbf{L}_v^T(\cdot) + (\cdot)\mathbf{L}_v, \quad \mathbf{L}_v := \dot{\bar{\mathbf{F}}}_v \bar{\mathbf{F}}_v^{-1}. \quad (3.19)$$

Die Zerlegung der Verzerrungen in (3.15) impliziert die Additivität der Verzerrungsgeschwindigkeiten:

$$\overset{\Delta}{\check{\mathbf{\Gamma}}} = \overset{\Delta}{\check{\mathbf{\Gamma}}}_{\Theta_e} + \overset{\Delta}{\bar{\mathbf{\Gamma}}}_v = \overset{\Delta}{\check{\mathbf{\Gamma}}}_{\Theta} + \overset{\Delta}{\check{\mathbf{\Gamma}}}_e + \overset{\Delta}{\bar{\mathbf{\Gamma}}}_v, \quad (3.20)$$

3. Modellierung der Materialeigenschaften von Elastomeren

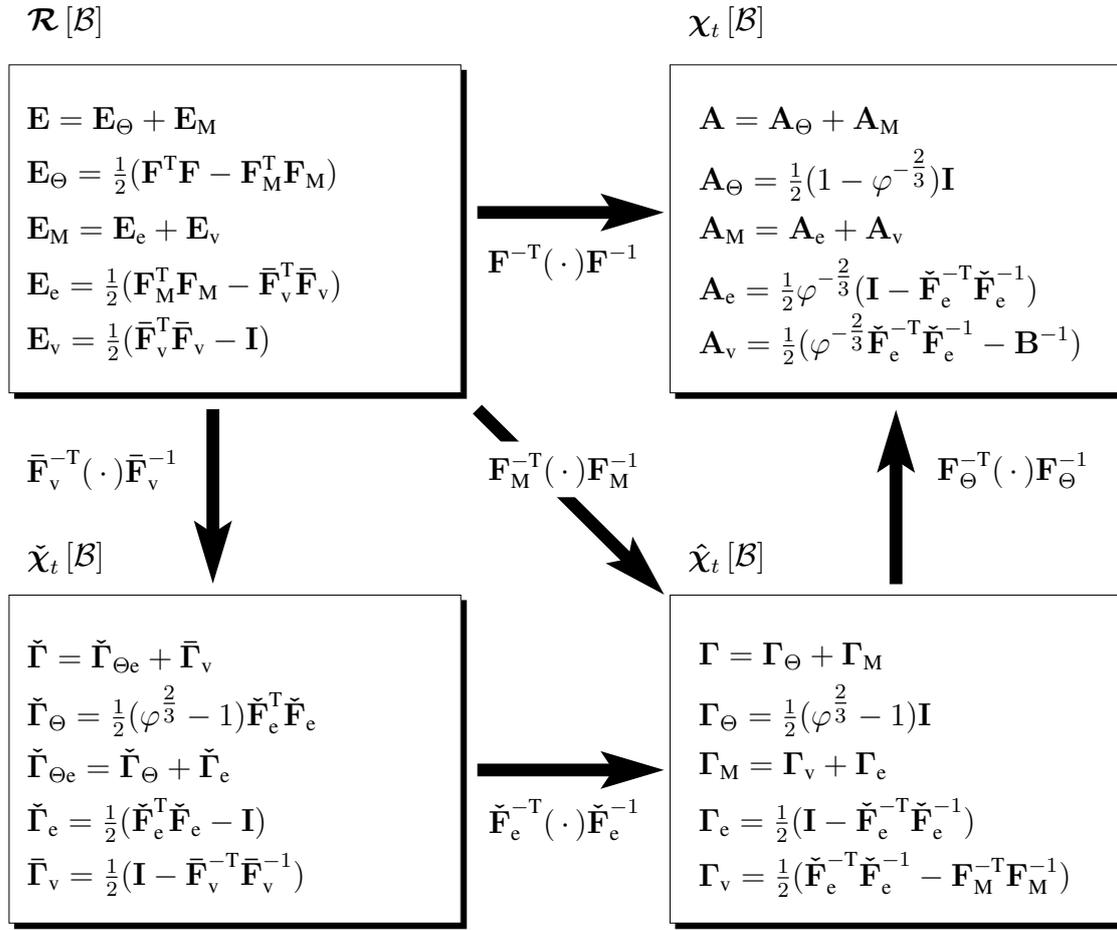


Abbildung 3.5.: Transformationseigenschaften der Verzerrungstensoren

hierin sind aufgrund von (3.19),

$$\hat{\Delta} \tilde{\Gamma} = \dot{\tilde{\Gamma}} + \mathbf{L}_v^T \tilde{\Gamma} + \check{\Gamma} \mathbf{L}_v, \quad \hat{\Delta} \tilde{\Gamma}_\Theta = \dot{\tilde{\Gamma}}_\Theta + \mathbf{L}_v^T \tilde{\Gamma}_\Theta + \check{\Gamma}_\Theta \mathbf{L}_v, \quad (3.21)$$

$$\hat{\Delta} \tilde{\Gamma}_e = \dot{\tilde{\Gamma}}_e + \mathbf{L}_v^T \tilde{\Gamma}_e + \check{\Gamma}_e \mathbf{L}_v, \quad \hat{\Delta} \bar{\Gamma}_v = \dot{\bar{\Gamma}}_v + \mathbf{L}_v^T \bar{\Gamma}_v + \bar{\Gamma}_v \mathbf{L}_v. \quad (3.22)$$

Die kovariante Oldroyd Ableitung des inelastischen Verzerrungstensors $\bar{\Gamma}_v$ führt auf den symmetrischen Anteil der inelastischen Deformationsgeschwindigkeit

$$\hat{\Delta} \bar{\Gamma}_v = \frac{1}{2} (\mathbf{L}_v^T + \mathbf{L}_v) \quad (3.23)$$

In Analogie zu den Verzerrungen lassen sich die Verzerrungsraten der mechanischen Zwischenkonfiguration durch die Transformation $\mathbf{F}_M^{-T}(\cdot)\mathbf{F}_M^{-1}$ herleiten. Es ergeben sich die in Abbildung 3.6 zusammengestellten Beziehungen.

In Anlehnung an das Konzept der dualen Variablen, vgl. Abschnitt 2.4 kann das Tensorfeld Ψ mit den Teildeformationsgradienten der Zwischenkonfigurationen identifiziert

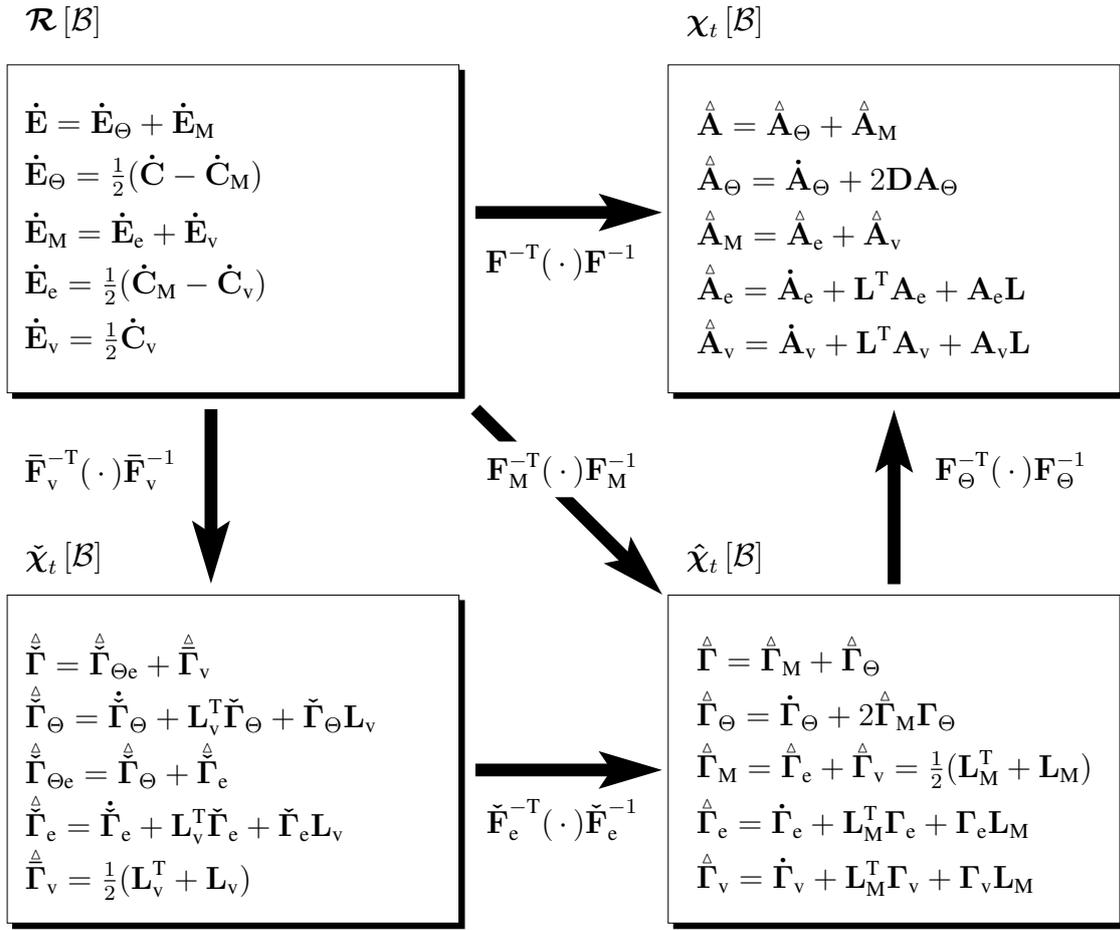


Abbildung 3.6.: Transformationseigenschaften der Verzerrungsgeschwindigkeitstensen

werden, wodurch die dualen Spannungstensen der jeweiligen Konfigurationen hergeleitet werden können. Aus der Invarianz der Spannungsleistung gegenüber der Transformation auf die Zwischenkonfiguration $\tilde{\chi}_t$ bzw. $\hat{\chi}_t$

$$\tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \tilde{\mathbf{T}} \cdot \bar{\mathbf{F}}_v^T \hat{\tilde{\Gamma}} \bar{\mathbf{F}}_v = \bar{\mathbf{F}}_v \tilde{\mathbf{T}} \bar{\mathbf{F}}_v^T \cdot \hat{\tilde{\Gamma}} = \check{\mathbf{S}}_v \cdot \hat{\tilde{\Gamma}}, \quad (3.24)$$

resultiert der konjugierte Spannungstensor $\check{\mathbf{S}}_v := \bar{\mathbf{F}}_v \tilde{\mathbf{T}} \bar{\mathbf{F}}_v^T$ des Verzerrungstensors $\tilde{\Gamma}$ und analog hierzu

$$\tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \tilde{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{F}_M^T \hat{\Gamma} \mathbf{F}_M = \mathbf{F}_M \tilde{\mathbf{T}} \mathbf{F}_M^T \cdot \hat{\Gamma} = \mathbf{S}_M \cdot \hat{\Gamma}, \quad (3.25)$$

der konjugierter Spannungstensor $\mathbf{S}_M := \mathbf{F}_M \tilde{\mathbf{T}} \mathbf{F}_M^T$ des Verzerrungstensors Γ .

Die hier gewählte Modellstruktur nach Abbildung 3.3 assoziiert auf natürliche Weise eine additive Zerlegung der Spannung der Form

$$\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{T}}_{eq} + \tilde{\mathbf{T}}_{ov} = \mathbf{F}_M^{-1} \mathbf{S}_M^{eq} \mathbf{F}_M^{-T} + \bar{\mathbf{F}}_v^{-1} \check{\mathbf{S}}_{ov} \bar{\mathbf{F}}_v^{-T}, \quad (3.26)$$

Durch diese Aufspaltung lässt sich die Aufteilung der Spannungsleistung in die dualen Größen der Zwischenkonfigurationen

$$\tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \mathbf{S}_M^{\text{eq}} \cdot \mathbf{F}_M^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}_M^{-1} + \check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} \cdot \bar{\mathbf{F}}_v^{-T} \dot{\mathbf{E}} \bar{\mathbf{F}}_v^{-1} = \mathbf{S}_M^{\text{eq}} \cdot \hat{\mathbf{\Gamma}} + \check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} \cdot \hat{\mathbf{\Gamma}} \quad (3.27)$$

folgen. Mittels der Relation

$$\hat{\mathbf{\Gamma}}_{\Theta} = \dot{\mathbf{\Gamma}}_{\Theta} + 2\hat{\mathbf{\Gamma}}_M \mathbf{\Gamma}_{\Theta} = \frac{1}{3} \frac{\varphi'}{\varphi^{1/3}} \dot{\theta} \mathbf{I} + (\varphi^{2/3} - 1) \hat{\mathbf{\Gamma}}_M, \quad (3.28)$$

die sich aufgrund der Symmetrie von $\hat{\mathbf{\Gamma}}_M = \frac{1}{2}(\mathbf{L}_M^T + \mathbf{L}_M)$, der Identität des Verzerrungstensors $\mathbf{\Gamma}_{\Theta} = \frac{1}{2}(\varphi^{2/3} - 1)\mathbf{I}$ sowie dessen materielle Zeitableitung $\dot{\mathbf{\Gamma}}_{\Theta} = (\varphi'/3\varphi^{1/3})\dot{\theta}\mathbf{I}$ ergibt, der Relation

$$\hat{\mathbf{\Gamma}}_{\Theta} = \check{\mathbf{F}}_e^T \hat{\mathbf{\Gamma}}_{\Theta} \check{\mathbf{F}}_e = \frac{1}{3} \frac{\varphi'}{\varphi^{1/3}} \dot{\theta} \check{\mathbf{C}}_e + (\varphi^{2/3} - 1)(\hat{\mathbf{\Gamma}}_e + \hat{\mathbf{\Gamma}}_v) \quad (3.29)$$

sowie durch die Berücksichtigung der additiven Zerlegung der Verzerrungsgeschwindigkeiten $\hat{\mathbf{\Gamma}}$ und $\hat{\mathbf{\Gamma}}$ aus Abbildung 3.6 lässt sich die Spannungsleistung in die Form

$$\tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \varphi^{2/3} \mathbf{S}_M^{\text{eq}} \cdot \hat{\mathbf{\Gamma}}_M + \frac{\varphi'}{3\varphi^{1/3}} (\text{Sp } \mathbf{S}_M) \dot{\theta} + \varphi^{2/3} \check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} \cdot (\hat{\mathbf{\Gamma}}_e + \hat{\mathbf{\Gamma}}_v) \quad (3.30)$$

überführen.

Die Transformationseigenschaften der Spannungstensoren und Spannungsraten der zugehörigen Konfigurationen sind in Abbildung 3.7 zusammengefasst.

3.3.3. Struktur der freien Energie

Ausgangspunkt für die Formulierung thermodynamisch konsistenter Materialmodelle ist eine geeignete Wahl der freien Energie. Basierend auf dem rheologischen Modell in Abbildung 3.3 und der Kinematik der Deformation in Abbildung 3.4 wird für die freie Energie ψ der Ansatz, ähnlich wie bei Lion [2000b] bzw. Heimes [2005],

$$\psi(\mathbf{E}_M, \check{\mathbf{\Gamma}}_e, \theta) = \psi_M(\mathbf{E}_M, \check{\mathbf{\Gamma}}_e, \theta) + \psi_{\Theta}(\theta), \quad (3.31)$$

in Abhängigkeit der oben eingeführten Variablensatz, gewählt. In Analogie zu dem rheologischen Modell wird die Zerlegung des mechanischen Anteils der freien Energie ψ_M in einen dem Gleichgewichts- und einen den Überspannungen zugeordneten Anteil eingeführt

$$\psi_M(\mathbf{E}_M, \check{\mathbf{\Gamma}}_e, \theta) = \frac{\theta}{\theta_0} \bar{\psi}_M^{\text{eq}}(J_M, \mathbf{C}_M) + \bar{\psi}_M^{\text{ov}}(\check{\mathbf{\Gamma}}_e, \theta). \quad (3.32)$$

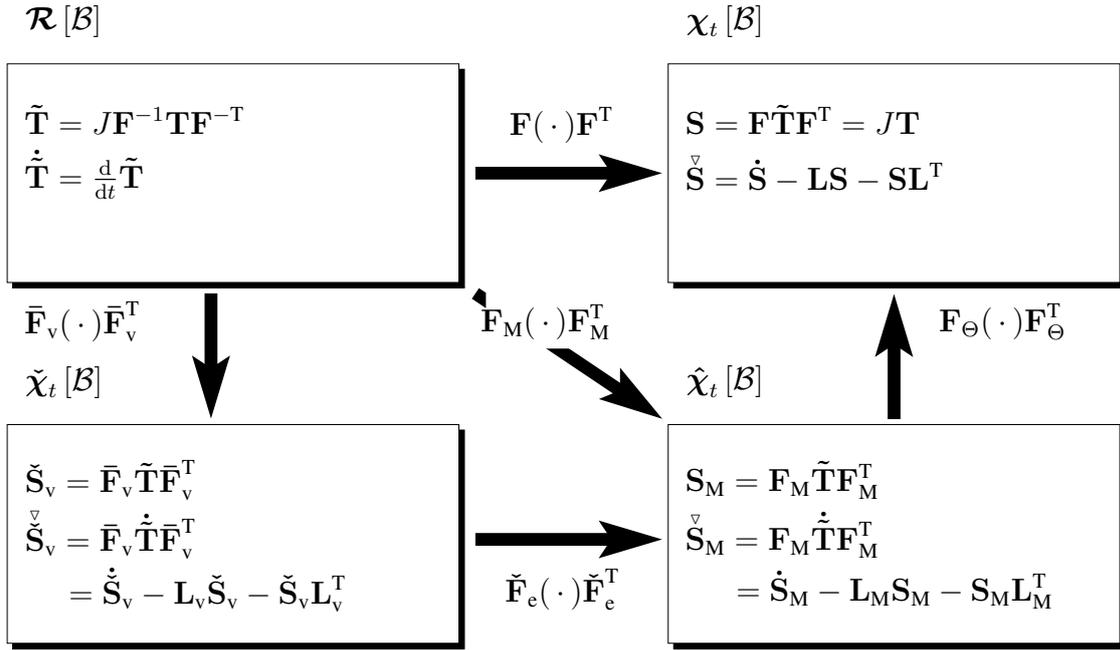


Abbildung 3.7.: Transformationseigenschaften der Spannungstensoren und Spannungsgeschwindigkeitstensoren

Die Energiefunktionen $\bar{\psi}_M^{ov}(\check{\mathbf{T}}_e, \theta) = \sum_{k=1}^{n_{ov}} \bar{\psi}_M^{ovk}(\check{\mathbf{T}}_{ek}, \theta)$ können als elastische Energieanteile in den Federn nichtlinearer Maxwell-Elemente interpretiert werden. Entsprechend repräsentiert die von den mechanischen Verzerrungen abhängige Energiefunktion $\bar{\psi}_M^{eq}$ den elastischen Energiebeitrag der Gleichgewichtsspannung, wobei eine lineare Temperaturabhängigkeit zur Beschreibung der Entropieelastizität eingeführt wurde, vgl. [Treloar, 1975]. Die Materialfunktion $\psi_\Theta(\theta)$ ist der deformationsunabhängige Anteil der freien Energie und steht in Relation mit der spezifischen Wärmekapazität, siehe Abschnitt 3.5 bzw. [Haupt, 2002].

3.3.4. Auswertung der Dissipationsungleichung

Auf Basis der zuvor definierten Spannungs- und Verzerrungstensoren lässt sich eine Modellstruktur, die im Einklang mit dem 2. Hauptsatz der Thermodynamik in Form der Clausius-Duhem Ungleichung steht, erarbeiten. Die Auswertung der Dissipationsungleichung (2.74) in materieller Darstellung

$$\delta = -\dot{\psi} - s\dot{\theta} + \frac{1}{\rho_R}\tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} - \frac{1}{\theta\rho_R}\mathbf{q}_R \cdot \mathbf{g}_R \geq 0, \quad (3.33)$$

und der eingeführten Abkürzung des Temperaturgradienten $\mathbf{g}_R := \text{Grad } \theta$, soll die thermodynamische Konsistenz der gewählten Konstitutivgleichungen gewährleisten. Zur

3. Modellierung der Materialeigenschaften von Elastomeren

Formulierung der konstitutiven Beziehungen wird zunächst die materielle Zeitableitung der freien Energie aus (3.31)

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}_M} \cdot \dot{\mathbf{E}}_M + \frac{\partial \psi}{\partial \check{\mathbf{\Gamma}}_e} \cdot \dot{\check{\mathbf{\Gamma}}}_e + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \dot{\theta}, \quad (3.34)$$

gebildet. Anschließend wird dieser Ausdruck zusammen mit der Spannungszерlegung (3.26) und der Beziehung (3.30) für die Spannungsleistung in die Dissipationsgleichung (3.33) eingesetzt, womit sich die Ungleichung

$$\begin{aligned} \delta = & \left(\frac{1}{\varrho_R} \varphi^{\frac{2}{3}} \mathbf{S}_M^{\text{eq}} - \mathbf{F}_M \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}_M} \mathbf{F}_M^T \right) \cdot \dot{\mathbf{\Gamma}}_M + \left(-s - \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{1}{3\varrho_R} \frac{\varphi'}{\varphi^{1/3}} (\text{Sp } \mathbf{S}_M) \right) \dot{\theta} - \\ & - \frac{\partial \psi}{\partial \check{\mathbf{\Gamma}}_e} \cdot \dot{\check{\mathbf{\Gamma}}}_e + \frac{1}{\varrho_R} \varphi^{\frac{2}{3}} \check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} \cdot (\dot{\mathbf{\Gamma}}_e + \dot{\mathbf{\Gamma}}_v) - \frac{1}{\varrho_R \theta} \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{g}_R \geq 0, \end{aligned} \quad (3.35)$$

ergibt. Diese Ungleichung muss nun im Sinne von Coleman and Noll [1963] oder Truesdell and Noll [1965] für beliebige thermodynamisch zulässige Prozesse erfüllt sein. Für beliebige Prozesse, die der Annahme $\dot{\mathbf{\Gamma}}_e = \dot{\mathbf{\Gamma}}_v = \dot{\check{\mathbf{\Gamma}}}_e = \mathbf{0}$, $\mathbf{g}_R = \mathbf{0}$ und $\dot{\mathbf{\Gamma}}_M \neq \mathbf{0} \wedge \dot{\theta} \neq 0$ genügen, wird diese Forderung erfüllt wenn die Klammerausdrücke identisch null sind. Hierdurch resultieren die Potentialbeziehungen für die Gleichgewichtsspannungen \mathbf{S}_M^{eq} und der spezifischen Entropie s :

$$\mathbf{S}_M^{\text{eq}} = \varrho_R \varphi^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F}_M \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}_M} \mathbf{F}_M^T, \quad s = -\frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{1}{\varrho_R} \frac{\varphi'}{3\varphi^{1/3}} (\text{Sp } \mathbf{S}_M). \quad (3.36)$$

Die verbleibende Restungleichung

$$-\frac{\partial \psi}{\partial \check{\mathbf{\Gamma}}_e} \cdot \dot{\check{\mathbf{\Gamma}}}_e + \frac{1}{\varrho_R} \varphi^{\frac{2}{3}} \check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} \cdot (\dot{\mathbf{\Gamma}}_e + \dot{\mathbf{\Gamma}}_v) - \frac{1}{\varrho_R \theta} \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{g}_R \geq 0, \quad (3.37)$$

nimmt mit Hilfe der Beziehungen für die Zeitableitung des Verzerrungstensors $\check{\mathbf{\Gamma}}_e$ durch $\dot{\check{\mathbf{\Gamma}}}_e = \dot{\mathbf{\Gamma}}_e - (\mathbf{L}_v^T \check{\mathbf{\Gamma}}_e + \check{\mathbf{\Gamma}}_e \mathbf{L}_v)$ die Gestalt

$$\left(\frac{1}{\varrho_R} \varphi^{\frac{2}{3}} \check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} - \frac{\partial \psi}{\partial \check{\mathbf{\Gamma}}_e} \right) \cdot \dot{\mathbf{\Gamma}}_e + \frac{1}{\varrho_R} \varphi^{\frac{2}{3}} \check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} \cdot \dot{\mathbf{\Gamma}}_v + \frac{\partial \psi}{\partial \check{\mathbf{\Gamma}}_e} \cdot (\mathbf{L}_v^T \check{\mathbf{\Gamma}}_e + \check{\mathbf{\Gamma}}_e \mathbf{L}_v) - \frac{1}{\varrho_R \theta} \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{g}_R \geq 0, \quad (3.38)$$

an. Auf dieser Grundlage wird die Potentialbeziehung für den inelastischen Überspannungsanteil formuliert, indem das Verschwinden des Klammerausdruckes gefordert und der auf der inelastischen Zwischenkonfiguration operierende Spannungstensor über ein Hyperelastizitätsmodell mit seinem dualen Verzerrungstensor in Beziehung gesetzt wird:

$$\check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} = \varrho_R \varphi^{-\frac{2}{3}} \frac{\partial \psi}{\partial \check{\mathbf{\Gamma}}_e}. \quad (3.39)$$

Die Ausnutzung dieser Beziehung führt auf das Zwischenergebnis

$$\frac{\partial \psi}{\partial \check{\Gamma}_e} \cdot (\mathbf{L}_v^T \check{\Gamma}_e + \check{\Gamma}_e \mathbf{L}_v) + \frac{\partial \psi}{\partial \check{\Gamma}_e} \cdot \overset{\Delta}{\check{\Gamma}}_v - \frac{1}{\varrho_R \theta} \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{g}_R \geq 0, \quad (3.40)$$

welches weiter vereinfacht werden kann, wenn unter Beachtung der Eigenschaft des Skalarproduktes,¹⁰ der Ausnutzung der Symmetrie des Verzerrungstensors $\check{\Gamma}_e = \frac{1}{2}(\check{\mathbf{C}}_e - \mathbf{I})$, der Beziehung des symmetrischen Anteils der inelastischen Deformationsgeschwindigkeit (3.23) und der Isotropie von $\partial \psi / \partial \check{\Gamma}_e$ die ersten beiden Terme in (3.40) durch

$$\frac{\partial \psi}{\partial \check{\Gamma}_e} \cdot (\mathbf{L}_v^T \check{\Gamma}_e + \check{\Gamma}_e \mathbf{L}_v) + \frac{\partial \psi}{\partial \check{\Gamma}_e} \cdot \overset{\Delta}{\check{\Gamma}}_v = \check{\mathbf{C}}_e \frac{\partial \psi}{\partial \check{\Gamma}_e} \cdot \overset{\Delta}{\check{\Gamma}}_v, \quad (3.42)$$

ersetzt werden. Es ergibt sich für die Restungleichung der Dissipation der Ausdruck

$$\check{\mathbf{C}}_e \frac{\partial \psi}{\partial \check{\Gamma}_e} \cdot \overset{\Delta}{\check{\Gamma}}_v - \frac{1}{\varrho_R \theta} \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{g}_R \geq 0, \quad (3.43)$$

auf dessen Basis dann Evolutionsgleichungen formuliert werden können, die die thermodynamische Konsistenz erfüllen. Mit der Potentialbeziehung für die Überspannungen (3.39) lässt sich der erste Term aus (3.43) in die Form

$$\frac{1}{\varrho_R} \varphi^{\frac{2}{3}} \check{\mathbf{C}}_e \check{\mathbf{S}}_{ov} \cdot \overset{\Delta}{\check{\Gamma}}_v \geq 0, \quad (3.44)$$

überführen. Damit diese Ungleichung erfüllt werden kann, muss die Proportionalität $\overset{\Delta}{\check{\Gamma}}_v \sim \check{\mathbf{C}}_e \check{\mathbf{S}}_{ov}$ als hinreichende Bedingung gelten, womit eine Evolutionsgleichung

$$\overset{\Delta}{\check{\Gamma}}_v = \frac{1}{\eta} \check{\mathbf{C}}_e \check{\mathbf{S}}_{ov}, \quad \eta > 0, \quad (3.45)$$

angegeben werden kann. Hierin entspricht der Proportionalitätsfaktor η der Viskositätsfunktion. Die Ungleichung der Dissipation infolge des Wärmeflusses,

$$- \frac{1}{\varrho_R \theta} \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{g}_R \geq 0 \quad (3.46)$$

kann prinzipiell durch Formulierung einer quadratischen Form immer erfüllt werden,

$$\mathbf{q}_R = -\kappa_R \text{Grad } \theta, \quad \kappa_R = \kappa(\theta)(\det \mathbf{F}) \mathbf{C}^{-1}, \quad (3.47)$$

was als Fourier'sche Wärmeleitgesetz bezeichnet wird. Der Wärmefluss ist somit immer dissipativ und damit irreversibel. In (3.47) beschreibt κ_R die Wärmeleitfähigkeit des Materials und ist ein positiv definiten Tensor zweiter Stufe für $\kappa(\theta) > 0$.

¹⁰Es gelten Beziehungen für das Skalarprodukt:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{B}^T \cdot \mathbf{A} \quad \text{und} \quad \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}_{\text{sym}}, \quad \text{für} \quad \mathbf{A} = \mathbf{A}^T \quad (3.41)$$

Zusammenfassung der allgemeinen Materialgleichungen Zu einer besseren Übersichtlichkeit werden die allgemeinen konstitutiven Gleichungen in Tabelle 3.1 zusammengefasst. Die allgemeinen Gleichungen des Materialmodells werden in den folgenden Abschnitten konkretisiert, um das in Experimenten beobachtete Verhalten zu beschreiben. Die spezielle Wahl der Materialfunktionen in der freien Energie und die daraus resultierenden Spannungsbeziehungen werden spezifiziert. Zudem steht noch offen, wie die nichtlineare Geschwindigkeitsabhängigkeit der Überspannung und die Prozessabhängigkeit der Viskosität zu modellieren sind. Dabei sind insbesondere die Wahl einer geeigneten Fließregel, siehe (3.45), und die damit verbundene Viskositätsfunktion zu beachten.

3.4. Ein Modell der finiten Thermoviskoelastizität

Das allgemeine, in Abschnitt 3.3.4 zusammengefasste Materialmodell wird im Folgenden auf eine spezielle Problemklasse von Elastomeren eingeschränkt. Die in [Lion, 2000b], bzw. in [Heimes, 2005] ausgeführten Experimente haben gezeigt, dass der wesentliche Beitrag zur Materialantwort einer Elastomerprobe durch die finite nichtlineare Elastizität und eine nichtlineare Ratenabhängigkeit gegeben ist.¹¹ Die dort stets angenommene mechanische Inkompressibilität stellt eine Idealisierung des volumetrischen Verhaltens von Elastomeren dar, welche in weiten Bereichen der Deformation als gerecht erscheint. In [Sedlan, 2000] und [Hartmann et al., 2003] bzw. auch in [Penn, 1970] wurde allerdings an Zugversuchen festgestellt, dass bei bestimmten Deformationen eine nicht zu vernachlässigende Volumendehnung vorliegt. Bei Strukturen können lokal solche Deformationsbereiche überschritten werden, so dass die Annahme der Inkompressibilität nicht adäquat ist.¹² Zur Formulierung des Modells der Gleichgewichtselastizität muss die Energiefunktion $\bar{\psi}_M^{\text{eq}}(\mathbf{E}_M)$ spezifiziert werden. Aufbauend auf den Arbeiten von Hartmann and Neff [2003] und Hartmann [2003] wird für den Gleichgewichtsanteil der Formänderungsenergie der Ansatz

$$\bar{\psi}_M^{\text{eq}}(\mathbf{E}_M) = \bar{\psi}_M^{\text{eq}}(J_M, \mathbf{C}_M) = U(J_M) + \bar{v}(\bar{\mathbf{C}}_M) \quad (3.48)$$

gewählt, indem die freie Energie in einen volumetrischen und einen isochoren Anteil zerlegt wird. Dieser Ansatz wird üblicherweise bei schwach kompressiblen Elastomeren verwendet. In der Literatur gibt es eine Vielzahl von Vorschlägen für den volumetrischen Anteil U , die nicht alle physikalisch sinnvoll sind. Siehe hierzu die Diskussionen in [Eipper, 1998] bzw. [Ehlers and Eipper, 1998] und [Hartmann, 2003] sowie für thermomechanische Prozesse mit Berücksichtigung des thermischen Ausdehnungsverhaltens [Hamkar and Hartmann, 2012]. Daher wird nach Hartmann and Neff [2003] der

¹¹Im Sinne einer Klassifizierung des Materialverhaltens entspricht dies einem Verhalten der finiten (Thermo)-Viskoelastizität, siehe [Haupt, 2002].

¹²Zum anderen führt die Annahme der Inkompressibilität bei der numerischen Umsetzung mittels der finiten Element Methode zu Schwierigkeiten, siehe [Lion, 2000b, S. 25] und die dort zitierte Literatur.

Tabelle 3.1.: Zusammenstellung der allgemeinen Materialgleichungen

Kinematik	
$\mathbf{F} = \mathbf{F}_\Theta \mathbf{F}_M = \mathbf{F}_\Theta \hat{\mathbf{F}}_M \bar{\mathbf{F}}_M = \mathbf{F}_\Theta \hat{\mathbf{F}}_M \bar{\mathbf{F}}_e \bar{\mathbf{F}}_v = \mathbf{F}_\Theta \check{\mathbf{F}}_e \bar{\mathbf{F}}_v$	(3.8)
$\mathbf{F}_\Theta = \varphi^{\frac{1}{3}} \mathbf{I}, \quad \varphi = \hat{\varphi}(\theta - \theta_0),$	(3.2)
$\hat{\mathbf{F}}_M = (\det \mathbf{F}_M)^{\frac{1}{3}} \mathbf{I}, \quad \bar{\mathbf{F}}_M = (\det \mathbf{F}_M)^{-\frac{1}{3}} \mathbf{F}_M$	(3.5)
$\mathbf{E} = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}_v + \mathbf{E}_\Theta,$	(3.13)
$\mathbf{E}_e = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_M^T \mathbf{F}_M - \bar{\mathbf{F}}_v^T \bar{\mathbf{F}}_v), \quad \mathbf{E}_v = \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{F}}_v^T \bar{\mathbf{F}}_v - \mathbf{I})$	(3.14)
Freie Energie	
$\psi(\mathbf{E}_M, \check{\mathbf{I}}_e, \theta) = \psi_M(\mathbf{E}_M, \check{\mathbf{I}}_e, \theta) + \psi_\Theta(\theta),$	(3.31)
$\psi_M(\mathbf{E}_M, \check{\mathbf{I}}_e, \theta) = \frac{\theta}{\theta_0} \bar{\psi}_M^{\text{eq}}(J_M, \mathbf{C}_M) + \bar{\psi}_M^{\text{ov}}(\check{\mathbf{I}}_e, \theta)$	(3.32)
Entropie	
$s = -\frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{1}{\varrho_R} \frac{\varphi'}{3\varphi^{1/3}} (\text{Sp } \mathbf{S}_M)$	(3.36)
Spannungen	
$\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}} + \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}}, \quad \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}} = \mathbf{F}_M^{-1} \mathbf{S}_M^{\text{eq}} \mathbf{F}_M^{-T}, \quad \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}} = \bar{\mathbf{F}}_v^{-1} \check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} \bar{\mathbf{F}}_v^{-T}$	(3.26)
$\mathbf{S}_M^{\text{eq}} = \varrho_R \varphi^{\frac{2}{3}} \mathbf{F}_M \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}_M} \mathbf{F}_M^T,$	(3.36)
$\check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} = \varrho_R \varphi^{\frac{2}{3}} \frac{\partial \psi}{\partial \check{\mathbf{I}}_e}$	(3.39)
Fließregel	
$\dot{\check{\mathbf{I}}}_v = \frac{1}{\eta} \check{\mathbf{C}}_e \check{\mathbf{S}}_{\text{ov}}$	(3.45)

3. Modellierung der Materialeigenschaften von Elastomeren

Ansatz

$$U(J_M) = \frac{K}{50}(J_M^5 + J_M^{-5} - 2), \quad (3.49)$$

vorgeschlagen. Da bei rußgefüllten Elastomeren ein S-förmiger Verlauf im einaxialen Zugbereich zu beobachten ist, besteht die Möglichkeit verschiedene Ansätze (z.B. [Ogden, 1972], [Arruda and Boyce, 1993], [Rivlin and Saunders, 1951]), bei der die ursprünglich inkompressible Formulierung durch den isochoren Anteil ersetzt wird. Der Ansatz von Ogden [1972] und von Arruda and Boyce [1993] führt für den obigen Ansatz (3.48) auf den Nachweis der Existenz einer Lösung (siehe [Dacorogna, 1989] und [Hartmann and Neff, 2003]) und ist verbunden mit dem Begriff der Polykonvexität [Ball, 1977]. Der modifizierte Ansatz von Rivlin and Saunders [1951],

$$w(I_{\bar{C}_M}, II_{\bar{C}_M}) = \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n c_{ij} (I_{\bar{C}_M} - 3)^i (II_{\bar{C}_M} - 3)^j, \quad (3.50)$$

ist hingegen nicht polykonvex, so dass man keine Existenzaussagen machen kann. Daher wird in [Hartmann and Neff, 2003] der Vorschlag

$$w(I_{\bar{C}_M}, II_{\bar{C}_M}) = \alpha(I_{\bar{C}_M}^3 - 3^3) + \sum_{i=1}^m c_{i0} (I_{\bar{C}_M} - 3)^i + \sum_{j=0}^n c_{0j} (II_{\bar{C}_M}^{2/3} - 3\sqrt{3})^j \quad (3.51)$$

gemacht. Der erste Summand $\alpha(I_{\bar{C}_M}^3 - 3^3)$ dient dabei zur Erfüllung einer weiteren Bedingung, der Koerzivität, siehe [Ciarlet, 1988]. Aus dieser Klasse von Modellen wird für $\bar{v}(\bar{C}_M)$

$$w(I_{\bar{C}}, II_{\bar{C}}) = c_{10}(I_{\bar{C}} - 3) + c_{01}(II_{\bar{C}}^{3/2} - 3\sqrt{3}) + \alpha(I_{\bar{C}}^3 - 27). \quad (3.52)$$

gewählt. Wobei aufgrund der Beziehung des Deformationsgradienten

$$\bar{\mathbf{F}}_M = J_M^{1/3} \mathbf{F}_M = (J/\varphi)^{1/3} \varphi^{-1/3} \mathbf{F} = J^{1/3} \mathbf{F} = \bar{\mathbf{F}}, \quad (3.53)$$

sich direkt die Identität $\bar{C}_M = \bar{C}$ ergibt und dadurch auch gleichzeitig die Beziehung

$$\bar{v}(\bar{C}_M) = w(I_{\bar{C}_M}, II_{\bar{C}_M}) = w(I_{\bar{C}}, II_{\bar{C}}) = \bar{v}(\bar{C}). \quad (3.54)$$

Um das Verhalten von Elastomeren bei relativ langsamen Prozessen darzustellen, die in nicht allzu großen Geschwindigkeitsbereichen stattfinden, muss die Ratenabhängigkeit als wesentlicher Anteil der Inelastizität berücksichtigt werden. Infolge dessen wird nach Lion [2000b] für die Formänderungsenergie des Maxwell Elements eine Relation postuliert,

$$\bar{\psi}_M^{\text{ov}}(\check{\mathbf{T}}_{ek}, \theta) := \bar{w}_{\text{ov}}(\bar{C}_e(\check{C}_e)), \quad (3.55)$$

die auf deviatorische Überspannungen sowie eine deviatorische Fließregel führt. In Analogie zu (3.52) wird eine Abhängigkeit von dem unimodularen elastischen Cauchy-Green Tensor $\bar{C}_e = (\det \check{C}_e)^{-1/3} \check{C}_e$ angenommen,

$$\bar{w}_{\text{ov}}(\bar{C}_e(\check{C}_e)) = \bar{w}_{\text{ov}}(I_{\bar{C}_e}) = \mu(I_{\bar{C}_e} - 3), \quad (3.56)$$

das einem Ansatz vom Neo-Hooke Typ entspricht.

3.4.1. Herleitung der Spannungsrelationen

Mit Hilfe der in Abschnitt 3.3.4 hergeleiteten allgemeinen Potentialbeziehungen der Spannungen und der oben formulierten Energiefunktionen werden im Folgenden die Spannungsbeziehungen näher spezifiziert. Der Gleichgewichtsanteil der Spannungen berechnet sich gemäß der Beziehung (3.36)₁

$$\mathbf{S}_M^{\text{eq}} = \varrho_R \varphi^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F}_M \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}_M} \mathbf{F}_M^T = \varrho_R \varphi^{-\frac{2}{3}} \frac{\theta}{\theta_0} \mathbf{F}_M \frac{d\bar{\psi}_M^{\text{eq}}}{d\mathbf{E}_M} \mathbf{F}_M^T. \quad (3.57)$$

Über die Definition der freien Energie (3.48) kann die Ableitung

$$\frac{d\bar{\psi}_M^{\text{eq}}}{d\mathbf{E}_M} = 2 \left(\frac{dU(J_M)}{d\mathbf{C}_M} + \frac{d\bar{v}(\bar{\mathbf{C}}_M(\mathbf{C}_M))}{d\mathbf{C}_M} \right), \quad (3.58a)$$

durch Anwendung der Kettenregel zu

$$\frac{d\bar{\psi}_M^{\text{eq}}}{d\mathbf{E}_M} = J_M U'(J_M) \mathbf{C}_M^{-1} + 2(\det \mathbf{C}_M)^{-\frac{1}{3}} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C}_M^{-1} \otimes \mathbf{C}_M \right] \frac{d\bar{v}}{d\bar{\mathbf{C}}_M}, \quad (3.58b)$$

ermittelt werden,¹³ womit (3.57) in

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_M^{\text{eq}} = & \varrho_R \varphi^{-\frac{2}{3}} \frac{\theta}{\theta_0} J_M U'(J_M) \mathbf{I} + \\ & + 2 \varrho_R \varphi^{-\frac{2}{3}} \frac{\theta}{\theta_0} (\det \mathbf{C}_M)^{-\frac{1}{3}} [\mathbf{F}_M \otimes \mathbf{F}_M]^{\text{T}_{23}} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C}_M^{-1} \otimes \mathbf{C}_M \right] \frac{d\bar{v}}{d\bar{\mathbf{C}}_M} \end{aligned} \quad (3.59)$$

überführt wird. Mit $J_M^{-2/3} = (\det \mathbf{C}_M)^{-1/3}$ und den Beziehungen $\mathbf{C}_M = J_M^{2/3} \bar{\mathbf{C}}_M$ und $[\mathbf{F}_M \otimes \mathbf{F}_M]^{\text{T}_{23}} = J_M^{2/3} [\bar{\mathbf{F}}_M \otimes \bar{\mathbf{F}}_M]^{\text{T}_{23}}$ sowie der Transformationseigenschaft

$$[\bar{\mathbf{F}}_M \otimes \bar{\mathbf{F}}_M]^{\text{T}_{23}} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C}_M^{-1} \otimes \mathbf{C}_M \right] = \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \right] [\bar{\mathbf{F}}_M \otimes \bar{\mathbf{F}}_M]^{\text{T}_{23}}, \quad (3.60)$$

worin der Tensor $\mathcal{D} := \mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}$ dem Deviatoroperator¹⁴ und $\mathcal{I} := [\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}]^{\text{T}_{23}}$ dem Einheitstensor 4. Stufe entspricht, gelangt man durch eine Transpositionsvorschrift von Tensoren 4. Stufe¹⁵ auf die Gleichgewichtsspannungen der mechanischen Zwischenkon-

¹³Die Ableitung $d\bar{v}(\bar{\mathbf{C}}_M(\mathbf{C}_M))/d\mathbf{C}_M$ wird über die Kettenregel folgend berechnet

$$\frac{d\bar{v}(\bar{\mathbf{C}}_M(\mathbf{C}_M))}{d\mathbf{C}_M} = \left[\frac{d\bar{\mathbf{C}}_M}{d\mathbf{C}} \right]^T \frac{d\bar{v}}{d\bar{\mathbf{C}}_M} \quad \text{mit} \quad \left[\frac{d\bar{\mathbf{C}}_M}{d\mathbf{C}} \right]^T = (\det \mathbf{C}_M)^{-1/3} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C}_M^{-1} \otimes \mathbf{C}_M \right]$$

¹⁴Der Deviator eines Tensors 2. Stufe ist durch die Eigenschaft $\mathcal{D}\mathbf{A} = \mathbf{A}^D = \mathbf{A} - \frac{1}{3}(\text{Sp } \mathbf{A})\mathbf{I}$ identifiziert.

¹⁵Es gelten die folgenden Beziehungen für die Transposition von Tensoren 4. Stufe, siehe [Hartmann, 2003] und [De Boer, 1982]:

$$\begin{aligned} [\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}]^{\text{T}_{23}} \mathbf{C} &= \mathbf{A} \mathbf{C} \mathbf{B}^T \\ [\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}]^{\text{T}_{23}} [\mathbf{C} \otimes \mathbf{D}] &= [[\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}]^{\text{T}_{23}} \mathbf{C} \otimes \mathbf{D}] = [\mathbf{A} \mathbf{C} \mathbf{B}^T \otimes \mathbf{D}] \end{aligned}$$

3. Modellierung der Materialeigenschaften von Elastomeren

figuration

$$\mathbf{S}_M^{\text{eq}} = \varphi^{-\frac{2}{3}} \frac{\theta}{\theta_0} \left[\varrho_R J_M U'(J_M) \mathbf{I} + 2\varrho_R \left(\bar{\mathbf{F}}_M \frac{d\bar{v}}{d\bar{\mathbf{C}}_M} \bar{\mathbf{F}}_M^T \right)^D \right]. \quad (3.61)$$

Dies führt auf eine additive Aufteilung der Gleichgewichtsspannung in einen Kugel- und einen spurfreien Deviator Anteil mit

$$\hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}} := \varphi^{-\frac{2}{3}} \frac{\theta}{\theta_0} \varrho_R J_M U'(J_M) \mathbf{I}, \quad \bar{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}} := 2\varrho_R \varphi^{-\frac{2}{3}} \frac{\theta}{\theta_0} \left(\bar{\mathbf{F}}_M \frac{d\bar{v}}{d\bar{\mathbf{C}}_M} \bar{\mathbf{F}}_M^T \right)^D, \quad (3.62)$$

welche eine natürliche Konsequenz der speziellen Aufteilung der freien Energie (3.48) ist. Eine Abbildung der Gleichgewichtsspannungen auf die Momentankonfiguration gelingt über die Kirchhoff-Spannungen

$$\mathbf{S}_{\text{eq}} = \mathbf{F}_\Theta \mathbf{S}_M^{\text{eq}} \mathbf{F}_\Theta^T = \varphi^{\frac{2}{3}} \mathbf{S}_M^{\text{eq}}, \quad (3.63)$$

bzw. mit der Beziehung $\mathbf{T}_{\text{eq}} = J^{-1} \mathbf{S}_{\text{eq}}$ über die Cauchy-Spannungen. Unter Ausnutzung der Isotropie der freien Energie

$$\left(\bar{\mathbf{F}}_M \frac{d\bar{v}}{d\bar{\mathbf{C}}_M} \bar{\mathbf{F}}_M^T \right)^D = \left(\bar{\mathbf{B}}_M \frac{d\bar{v}}{d\bar{\mathbf{B}}_M} \right)^D = \left(\frac{d\bar{v}}{d\bar{\mathbf{B}}_M} \bar{\mathbf{B}}_M \right)^D, \quad (3.64)$$

sowie der kinematischen Transformation

$$\bar{\mathbf{B}}_M = J_M^{-\frac{2}{3}} \mathbf{B}_M = (\varphi/J)^{-\frac{2}{3}} \varphi^{-\frac{2}{3}} \mathbf{B} = J^{-\frac{2}{3}} \mathbf{B} = \bar{\mathbf{B}}, \quad (3.65)$$

werden die Gleichgewichtsspannungen, als Cauchy-Spannungen, auf die Momentankonfiguration überführt

$$\mathbf{T}_{\text{eq}} = \varrho_R \frac{\theta}{\theta_0} \varphi^{-1} U' \left(\frac{J}{\varphi} \right) \mathbf{I} + 2\varrho_R \frac{\theta}{\theta_0} J^{-1} \left(\frac{d\bar{v}}{d\bar{\mathbf{B}}} \bar{\mathbf{B}} \right)^D. \quad (3.66)$$

Mit dem Pullbackoperator der Spannungen $\mathbf{F}^{-1}(\cdot)\mathbf{F}^{-T}$ erfolgt die Rücktransformation auf die Referenzkonfiguration und die 2. Piola-Kirchhoff Spannungen berechnen sich zu

$$\tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T}_{\text{eq}} \mathbf{F}^{-T} \quad (3.67)$$

$$= \varrho_R \frac{\theta}{\theta_0} J_M U'(J_M) \mathbf{C}^{-1} + 2\varrho_R \frac{\theta}{\theta_0} J^{-\frac{2}{3}} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \right] \frac{d\bar{v}}{d\bar{\mathbf{C}}}. \quad (3.68)$$

Aufgrund der speziellen Abhängigkeit von den Invarianten des unimodularen Rechten Cauchy-Green Tensors berechnet sich die Ableitung $d\bar{v}/d\bar{\mathbf{C}}$ über die Kettenregel

$$\frac{d\bar{v}}{d\bar{\mathbf{C}}} = \frac{\partial w}{\partial \mathcal{I}_{\bar{\mathbf{C}}}} \frac{\partial \mathcal{I}_{\bar{\mathbf{C}}}}{\partial \bar{\mathbf{C}}} + \frac{\partial w}{\partial \mathcal{II}_{\bar{\mathbf{C}}}} \frac{\partial \mathcal{II}_{\bar{\mathbf{C}}}}{\partial \bar{\mathbf{C}}} = (w_1 + w_2 \mathcal{I}_{\bar{\mathbf{C}}}) \mathbf{I} - w_2 \bar{\mathbf{C}} \quad (3.69)$$

mit

$$w_1(I_{\bar{\mathbf{C}}}, II_{\bar{\mathbf{C}}}) = \frac{\partial w}{\partial I_{\bar{\mathbf{C}}}} \quad \text{und} \quad w_2(I_{\bar{\mathbf{C}}}, II_{\bar{\mathbf{C}}}) = \frac{\partial w}{\partial II_{\bar{\mathbf{C}}}}, \quad (3.70)$$

siehe (3.52).

Über die Auswertung der Potentialbeziehung (3.39) und der gewählten Formänderungsenergie (3.55) können die Überspannungen durch

$$\check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} = \varrho_{\text{R}} \varphi^{-\frac{2}{3}} \frac{\partial \psi}{\partial \check{\mathbf{I}}_{\text{e}}} = \varrho_{\text{R}} \varphi^{-\frac{2}{3}} \frac{d\bar{\psi}_{\text{M}}^{\text{ov}}}{d\check{\mathbf{I}}_{\text{e}}}, \quad (3.71)$$

konkretisiert werden. Mit Hilfe der Kettenregel und der Beziehung $\check{\mathbf{C}}_{\text{e}} = J_{\text{M}}^{2/3} \bar{\mathbf{C}}_{\text{e}}$ wird die Ableitung durch

$$\frac{d\bar{\psi}_{\text{M}}^{\text{ov}}}{d\check{\mathbf{I}}_{\text{e}}} = 2 \frac{d\bar{\psi}_{\text{M}}^{\text{ov}}}{d\check{\mathbf{C}}_{\text{e}}} = 2 \left[\frac{d\bar{\mathbf{C}}_{\text{e}}}{d\check{\mathbf{C}}_{\text{e}}} \right]^{\text{T}} \frac{d\bar{w}_{\text{ov}}}{d\bar{\mathbf{C}}_{\text{e}}} = 2(\det \check{\mathbf{C}}_{\text{e}})^{-\frac{1}{3}} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \check{\mathbf{C}}_{\text{e}}^{-1} \otimes \check{\mathbf{C}}_{\text{e}} \right] \frac{d\bar{w}_{\text{ov}}}{d\bar{\mathbf{C}}_{\text{e}}}, \quad (3.72)$$

ermittelt. Dadurch findet man die Überspannungen auf der Zwischenkonfiguration $\check{\chi}_t$

$$\check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} = 2\varrho_{\text{R}} \frac{(\det \check{\mathbf{C}}_{\text{e}})^{-\frac{1}{3}}}{\varphi^{2/3}} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \check{\mathbf{C}}_{\text{e}}^{-1} \otimes \check{\mathbf{C}}_{\text{e}} \right] \frac{d\bar{w}_{\text{ov}}}{d\bar{\mathbf{C}}_{\text{e}}}, \quad (3.73)$$

die über eine einfache algebraische Umformung und über die Beziehung $(\det \check{\mathbf{C}}_{\text{e}})^{-1/3} = J_{\text{M}}^{-2/3}$, aufgrund von $\det \bar{\mathbf{F}}_{\text{e}} = 1$ folgt $\det \check{\mathbf{F}}_{\text{e}} = J_{\text{M}}$, die Form

$$\check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} = 2\varrho_{\text{R}} J^{-\frac{2}{3}} \bar{\mathbf{C}}_{\text{e}}^{-1} \left(\bar{\mathbf{C}}_{\text{e}} \frac{d\bar{w}_{\text{ov}}}{d\bar{\mathbf{C}}_{\text{e}}} \right)^{\text{D}} \quad (3.74)$$

annimmt. Zwecks einer allgemeinen Darstellung werden die Überspannungen (3.73) mittels des Pullbackoperators $\bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-1}(\cdot)\bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-\text{T}}$ auf die Referenzkonfiguration zurücktransformiert

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}} &= \bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-1} \check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} \bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-\text{T}} \\ &= 2\varrho_{\text{R}} J^{-\frac{2}{3}} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \right] \left[\bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-1} \otimes \bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-1} \right]^{\text{T}_{23}} \frac{d\bar{w}_{\text{ov}}}{d\bar{\mathbf{C}}_{\text{e}}}. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Hierbei ist die Eigenschaft

$$\left[\bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-1} \otimes \bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-1} \right]^{\text{T}_{23}} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \check{\mathbf{C}}_{\text{e}}^{-1} \otimes \check{\mathbf{C}}_{\text{e}} \right] = \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \bar{\mathbf{C}}^{-1} \otimes \bar{\mathbf{C}} \right] \left[\bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-1} \otimes \bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-1} \right]^{\text{T}_{23}}, \quad (3.76)$$

sowie $[\bar{\mathbf{C}}^{-1} \otimes \bar{\mathbf{C}}] = [\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}]$ ausgenutzt worden. Durch die Isotropie der Formänderungsenergie \bar{w}_{ov} gilt

$$\left[\bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-1} \otimes \bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-1} \right]^{\text{T}_{23}} \frac{d\bar{w}_{\text{ov}}}{d\bar{\mathbf{C}}_{\text{e}}} = \frac{d\bar{w}_{\text{ov}}}{d(\mathbf{C}_{\text{v}}^{-1} \bar{\mathbf{C}})} \mathbf{C}_{\text{v}}^{-1}. \quad (3.77)$$

3. Modellierung der Materialeigenschaften von Elastomeren

Diese Eigenschaft lässt sich erklären, indem $d\bar{w}_{ov}/d\bar{\mathbf{C}}_e$ als isotrope Tensorfunktion dargestellt wird. Durch Anwendung der Beziehung $\bar{\mathbf{C}}_e = \bar{\mathbf{F}}_v^{-T} \bar{\mathbf{C}} \bar{\mathbf{F}}_v^{-1}$ und der anschließenden Ausklammerung von \mathbf{C}_v^{-1} wird die isotrope Eigenschaft ersichtlich:

$$\begin{aligned} \left[\bar{\mathbf{F}}_v^{-1} \otimes \bar{\mathbf{F}}_v^{-1} \right]^{T23} \frac{d\bar{w}_{ov}}{d\bar{\mathbf{C}}_e} &= \bar{\mathbf{F}}_v^{-1} \frac{d\bar{w}_{ov}}{d\bar{\mathbf{C}}_e} \bar{\mathbf{F}}_v^{-T}, \\ &= \bar{\mathbf{F}}_v^{-1} (\alpha_1 \mathbf{I} + \alpha_2 \bar{\mathbf{C}}_e + \alpha_2 \bar{\mathbf{C}}_e \bar{\mathbf{C}}_e) \bar{\mathbf{F}}_v^{-T}, \\ &= (\alpha_1 \mathbf{I} + \alpha_2 \mathbf{C}_v^{-1} \bar{\mathbf{C}} + \alpha_3 (\mathbf{C}_v^{-1} \bar{\mathbf{C}})^2) \mathbf{C}_v^{-1}. \end{aligned} \quad (3.78)$$

Die Koeffizienten $\alpha_i = \alpha_i(I_{\bar{\mathbf{C}}_e}, II_{\bar{\mathbf{C}}_e}, III_{\bar{\mathbf{C}}_e})$ stellen Funktionen der Hauptinvarianten von $\bar{\mathbf{C}}_e$ dar, die es ermöglichen $\bar{\mathbf{C}}_e$ durch $(\mathbf{C}_v^{-1} \bar{\mathbf{C}})$ zu ersetzen. Die Transformationsbeziehung aus (3.77) wird mittels der Relation (3.78) ersichtlich. Für die Überspannungen (3.75) resultiert schließlich

$$\tilde{\mathbf{T}}_{ov} = 2\varrho_R J^{-\frac{2}{3}} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \right] \frac{d\bar{w}_{ov}}{d(\mathbf{C}_v^{-1} \bar{\mathbf{C}})} \mathbf{C}_v^{-1}, \quad (3.79)$$

bzw. aufgrund der Wahl der Formänderungsenergie aus (3.56)

$$\tilde{\mathbf{T}}_{ov} = 2\varrho_R \mu J^{-\frac{2}{3}} \left(\mathbf{C}_v^{-1} - \frac{1}{3} (\mathbf{C} \cdot \mathbf{C}_v^{-1}) \mathbf{C}_v^{-1} \right). \quad (3.80)$$

Die Überführung der Überspannungen auf die Momentankonfiguration gelingt über die Vortransformation der Überspannungen der inelastischen Zwischenkonfiguration (3.74)

$$\mathbf{S}_{ov} = \mathbf{F}_\Theta \mathbf{S}_M^{ov} \mathbf{F}_\Theta^T = \mathbf{F}_\Theta \check{\mathbf{F}}_e \check{\mathbf{S}}_{ov} \check{\mathbf{F}}_e^T \mathbf{F}_\Theta^T = \varphi^{2/3} \check{\mathbf{F}}_e \check{\mathbf{S}}_{ov} \check{\mathbf{F}}_e^T. \quad (3.81)$$

Mit der Berücksichtigung der Isotropie der Formänderungsenergie können die Überspannungen vom Kirchhoff-Typ durch die Auswertung der Transformation (3.81) in die allgemeine Form

$$\mathbf{S}_{ov} = 2\varrho_R \left(\bar{\mathbf{B}}_e \frac{d\bar{w}_{ov}}{d\bar{\mathbf{B}}_e} \right)^D, \quad (3.82)$$

überführt werden und mit der speziellen Wahl der Formänderungsenergie (3.56) und der Identität $\mathbf{T}_{ov} = J^{-1} \mathbf{S}_{ov}$ zu

$$\mathbf{T}_{ov} = 2\varrho_R \mu J^{-1} \bar{\mathbf{B}}_e^D. \quad (3.83)$$

Aus der Summe $\mathbf{T} = \mathbf{T}_{eq} + \mathbf{T}_{ov}$ gemäß (3.66) und (3.83) resultiert der Cauchy'sche Spannungstensor bezogen auf die Größen der Momentankonfiguration

$$\mathbf{T} = \varrho_R \frac{\theta}{\theta_0} \left(\varphi^{-1} U'(J/\varphi) \mathbf{I} + 2J^{-1} \left((\hat{w}_1 + \hat{w}_2 I_{\bar{\mathbf{B}}}) \bar{\mathbf{B}}^D - \hat{w}_2 (\bar{\mathbf{B}} \bar{\mathbf{B}})^D \right) \right) + 2\varrho_R \mu J^{-1} \bar{\mathbf{B}}_e^D, \quad (3.84)$$

mit $\hat{w}_1 = \partial w / \partial I_{\bar{\mathbf{B}}}$ und $\hat{w}_2 = \partial w / \partial II_{\bar{\mathbf{B}}}$ der nach Formänderungsenergie (3.52).

3.4.2. Formulierung der Evolutionsgleichungen

Der Satz an Konstitutivgleichungen zur Beschreibung des Materialverhaltens benötigt noch die Formulierung von Evolutionsgleichungen für die inneren Variablen. Anhand der Auswertung der Dissipationsungleichung konnte die Fließregel

$$\overset{\Delta}{\bar{\Gamma}}_v = \frac{1}{\eta} \check{C}_e \check{S}_{ov}, \quad \eta > 0, \quad (3.85)$$

herausgearbeitet werden, mit denen im Fall einer positiven Viskositätsfunktion die thermodynamische Konsistenz im Sinne einer hinreichenden Bedingung erfüllt wird. Über die Überspannungen aus (3.74) und der Ausnutzung der kinematischen Beziehung $\check{C}_e = J_M^{2/3} \bar{C}_e$ wird (3.85) in

$$\overset{\Delta}{\bar{\Gamma}}_v = \frac{2\varrho_R}{\eta} \varphi^{-2/3} \check{C}_e \check{C}_e^{-1} \left(\bar{C}_e \frac{d\bar{w}_{ov}}{d\bar{C}_e} \right)^D, \quad (3.86)$$

überführt. Die Transformation auf die Referenzkonfiguration erfolgt wiederum durch den Pullbackoperator, indem zunächst die Oldroyd'sche Ableitung des viskosen Verzerrungstensors durch $\overset{\Delta}{\bar{\Gamma}}_v = \frac{1}{2} \bar{F}_v^{-1} \dot{C}_v \bar{F}_v^{-T}$ ersetzt wird. Zudem wird die Isotropieeigenschaft (3.77) und die Identität $C_v = \bar{C}_v$ ausgenutzt, womit schließlich die Evolutionsgleichung

$$\dot{C}_v = 4\varrho_R \frac{\mu}{\eta} \varphi^{-2/3} \bar{F}_v^T \left(\bar{C}_e \frac{d\bar{w}_{ov}}{d\bar{C}_e} \right)^D \bar{F}_v, \quad (3.87)$$

$$= 4\varrho_R \frac{\mu}{\eta} (J\varphi)^{-2/3} \left[C - \frac{1}{3} (C_v \otimes C_v^{-1} C) \right] \frac{d\bar{w}_{ov}}{d(C_v^{-1} \bar{C})} \quad (3.88)$$

für die viskosen Verzerrungen der Referenzkonfiguration resultiert. In Analogie zu den Überspannungen lässt sich die Ableitung der Formänderungsenergie (3.56) unmittelbar angeben, wodurch die Evolutionsgleichung durch die vereinfachte Form

$$\dot{C}_v = 4\varrho_R \frac{\mu}{\eta} \frac{\varphi^{-2/3}}{(\det C)^{1/3}} \left(C - \frac{1}{3} (C_v^{-1} \cdot C) C_v \right), \quad (3.89)$$

angegeben wird. Gemäß dem Prinzip der Äquipräsenz wird nach einem Ansatz von Lion [2000b] eine Viskositätsfunktion postuliert, die in ihrer allgemeinen Form

$$\eta = \eta \left(S_M^{ov}, \bar{\Gamma}_v, \theta \right) \quad (3.90)$$

als Funktion der Überspannungen, der inelastischen Deformation und der Temperatur gegeben ist. In [Haupt and Sedlan, 2001] wie auch in [Heimes, 2005] werden zudem eine Abhängigkeit von der Deformationsgeschwindigkeit vorgeschlagen, was eher für dynamische Prozesse von Interesse ist. Um den geschwindigkeitsabhängigen Grenzwert

3. Modellierung der Materialeigenschaften von Elastomeren

der Überspannungen zu beschreiben, wird für die Modellierung der geschichtsabhängigen Viskosität eine nach Haupt and Lion [1995] exponentielle Abhängigkeit angenommen. Als geeignetes Spannungsmaß, motiviert durch die Fließregel (3.45), erweist sich der Tensor $\check{\mathbf{C}}_e \check{\mathbf{S}}_{ov}$, womit zunächst ein Ansatz für eine nichtlineare Viskositätsfunktion durch

$$\eta = \eta_0 \exp \left(- \frac{\|\check{\mathbf{C}}_e \check{\mathbf{S}}_{ov}\|}{s_0} \right), \quad (3.91)$$

formuliert werden kann. Hierin lässt sich aufgrund der Isotropieeigenschaft $\check{\mathbf{C}}_e \check{\mathbf{S}}_{ov} = \check{\mathbf{S}}_{ov} \check{\mathbf{C}}_e$ zeigen, dass für die benötigte Norm die Identität $\|\check{\mathbf{C}}_e \check{\mathbf{S}}_{ov}\| = \|\mathbf{S}_M^{ov}\|$ gilt.¹⁶ Zur Berücksichtigung der Deformationsabhängigkeit der Viskosität wird die inelastische Deformation $\bar{\mathbf{\Gamma}}_v = \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \bar{\mathbf{B}}_v^{-1})$ als Argument von η zugelassen. Als Maß für diese inelastische Deformation wird wiederum die Norm $\|\mathbf{B}_v^{-1}\| = \|\mathbf{C}_v^{-1}\|$ verwendet, wodurch sich (3.91) auf

$$\eta = \eta_0 \exp \left(- \frac{\|\mathbf{S}_M^{ov}\|}{s_0 \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \|\mathbf{C}_v^{-1}\| \right)^{r_0}} \right), \quad (3.92)$$

erweitert. Die Ergänzung auf die Temperaturabhängigkeit erfolgt durch Ausdrücke obiger Materialparameter η_0 und s_0 als Funktion der Temperatur

$$\eta_0(\theta) = \bar{\eta}_0 \exp \left(\frac{\varkappa}{\theta} - \frac{\varkappa}{\theta_0} \right), \quad (3.93)$$

$$\bar{s}_0(\theta) = s_\infty + (\bar{s}_0 - s_\infty) \exp(-\omega_s(\theta - \theta_0)). \quad (3.94)$$

Zweckmäßigerweise sind die konstitutiven Gleichungen des Materialmodells für die finite Thermo-Viskoelastizität in Tabelle 3.2 zusammengefasst. Zur numerischen Auswertung des Materialmodells ist es notwendig die Materialparameter zu identifizieren. Diese werden über das Materialverhalten in mechanischen und thermischen Versuchen charakterisiert und bestimmt. Mit der Durchführung von sehr langsamen monotonen Belastungsprozessen mit Haltezeiten können die Materialparameter der Gleichgewichtsspannungen identifiziert werden, siehe hierzu z.B. [Haupt and Sedlan, 2001] oder [Hartmann, 2001]. Versuche mit unterschiedlichen Prozessgeschwindigkeiten ermöglichen das Kriech- und Relaxationsverhalten zu beschreiben und die damit verbundenen Materialparameter zu bestimmen, [Sedlan, 2000]. Zur Beschreibung des thermomechanischen Verhaltens, müssen die Materialeigenschaften anhand thermomechanischer Versuche bestimmt werden. Adäquate Versuche mit abgeleiteten Methoden zur Parameteridentifikation sind in [Heimes, 2005] und der dort referierten Literatur, ausführlich beschrieben.

¹⁶Die Norm eines Tensors 2. Stufe \mathbf{A} wird zu $\|\mathbf{A}\| = \sqrt{\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}$ definiert.

Tabelle 3.2.: Zusammenfassung der konstitutiven Gleichungen der finiten Thermo-Viskoelastizität

Materialfunktionen der freien Energie	
$U(J_M) = K(J_M^5 + J_M^{-5} - 2)/50, \quad J_M = J/\varphi,$	(3.49)
$w(I_{\bar{C}}, \Pi_{\bar{C}}) = c_{10}(I_{\bar{C}} - 3) + c_{01}(\Pi_{\bar{C}}^{3/2} - 3\sqrt{3}) + \alpha(I_{\bar{C}}^3 - 27),$	(3.52)
$\bar{w}_{\text{ov}}(I_{\bar{C}_e}) = \mu(I_{\bar{C}_e} - 3),$	(3.56)
Spannungsrelationen der Referenzkonfiguration	
$\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}} + \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}} = \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{vol}} + \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} + \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}},$	
$\tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{vol}} = \varrho_R \frac{\theta}{\theta_0} \frac{J}{\varphi} U'(J/\varphi) \mathbf{C}^{-1}, \quad U'(J/\varphi) = K((J/\varphi)^4 - (J/\varphi)^{-6})/10$	(3.68)
$\tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} = 2\varrho_R \frac{\theta}{\theta_0} J^{-2/3} \left((w_1 + w_2 \Pi_{\bar{C}}) \mathbf{I} - w_2 \bar{\mathbf{C}} - \frac{1}{3} (w_1 I_{\bar{C}} + 2w_2 \Pi_{\bar{C}}) \bar{\mathbf{C}}^{-1} \right)$	(3.69)
$\tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}} = 2\varrho_R \mu J^{-\frac{2}{3}} \left(\mathbf{C}_v^{-1} - \frac{1}{3} (\mathbf{C} \cdot \mathbf{C}_v^{-1}) \mathbf{C}_v^{-1} \right)$	(3.80)
Spannungsrelationen der Momentankonfiguration	
$\mathbf{T} = \mathbf{T}_{\text{eq}} + \mathbf{T}_{\text{ov}} = \mathbf{T}_{\text{eq}}^{\text{vol}} + J^{-1} \mathbf{S}_{\text{eq}}^{\text{iso}} + J^{-1} \mathbf{S}_{\text{ov}},$	
$\mathbf{T}_{\text{eq}}^{\text{vol}} = \varrho_R \frac{\theta}{\theta_0} \varphi^{-1} U' \left(\frac{J}{\varphi} \right) \mathbf{I}, \quad \mathbf{S}_{\text{eq}}^{\text{iso}} = 2\varrho_R \frac{\theta}{\theta_0} \left((\hat{w}_1 + \hat{w}_2 I_{\bar{\mathbf{B}}}) \bar{\mathbf{B}}^{\text{D}} - \hat{w}_2 (\bar{\mathbf{B}} \bar{\mathbf{B}})^{\text{D}} \right)$	(3.66)
$\mathbf{S}_{\text{ov}} = 2\varrho_R \mu \bar{\mathbf{B}}_e^{\text{D}}$	(3.83)
Fließregel in Größen der Referenzkonfiguration	
$\dot{\mathbf{C}}_v = 4\varrho_R \frac{\mu}{\eta} \frac{\varphi^{-2/3}}{(\det \mathbf{C})^{1/3}} \left(\mathbf{C} - \frac{1}{3} (\mathbf{C}_v^{-1} \cdot \mathbf{C}) \mathbf{C}_v \right),$	(3.89)
$\eta = \eta_0 \exp \left(- \frac{\ \mathbf{S}_M^{\text{ov}}\ }{s_0 (\frac{1}{\sqrt{3}} \ \mathbf{C}_v^{-1}\)_{r_0}} \right), \quad \eta_0(\theta) = \bar{\eta}_0 \exp \left(\frac{\varkappa}{\theta} - \frac{\varkappa}{\theta_0} \right),$	(3.92, 3.93)
$s_0(\theta) = s_\infty + (\bar{s}_0 - s_\infty) \exp(-\omega_s(\theta - \theta_0))$	(3.94)

3.4.3. Isotherme Betrachtung des Materialmodells

Eine rein isotherme Formulierung des Materialmodells gelingt durch die Vernachlässigung einer Temperaturänderung mittels der Annahme $\theta/\theta_0 = 1$, wodurch die Materialfunktion für das thermische Ausdehnungsverhalten mit

$$\varphi = 1 + \alpha_\Theta(\theta - \theta_0) = 1, \quad (3.95)$$

den konstanten Wert eins annimmt. Die zuvor eingeführte thermisch-mechanische Zerlegung (3.1) reduziert sich auf

$$\mathbf{F}_\Theta = \mathbf{I} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{F} = \mathbf{F}_M \quad (3.96)$$

und die gesamte Deformation wird durch den spannungserzeugenden, rein mechanischen Anteil der Deformation repräsentiert, der anhand der multiplikativen Zerlegung

$$\mathbf{F} = \hat{\mathbf{F}}_M \bar{\mathbf{F}}_e \bar{\mathbf{F}}_v = \check{\mathbf{F}}_e \bar{\mathbf{F}}_v, \quad (3.97)$$

in einen elastischen Anteil $\check{\mathbf{F}}_e$ und einen gestaltändernden, viskosen Anteil $\bar{\mathbf{F}}_v$ aufgeteilt wird. Auf Basis dieser Zerlegung und einer Temperatur unabhängigen Struktur der freien Energie

$$\psi(\mathbf{E}_M, \check{\mathbf{I}}_e) := \psi_M(\mathbf{E}_M, \check{\mathbf{I}}_e) = \bar{\psi}_M^{\text{eq}}(J_M, \mathbf{C}_M) + \bar{\psi}_M^{\text{ov}}(\check{\mathbf{I}}_e) \quad (3.98)$$

wird in Analogie zum Abschnitt 3.3.4 durch das Einsetzen von (3.98) in die vereinfachte Dissipationsungleichung¹⁷ die Potentialbeziehung der Spannungen hergeleitet. Mit den in Abschnitt 3.4.1 definierten Formänderungsenergien (3.48), (3.49) und (3.51) für den Gleichgewichtsanteil sowie (3.55) und (3.56) für den Überspannungsanteil werden die konstitutiven Gleichungen für die Gleichgewichtsspannungen

$$\tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}} = \varrho_R J U'(J) \mathbf{C}^{-1} + 2\varrho_R J^{-2/3} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \right] \frac{d\bar{v}}{d\bar{\mathbf{C}}}, \quad (3.99)$$

mit $d\bar{v}/d\bar{\mathbf{C}} = (w_1 + w_2 \mathbf{I}) - w_2 \bar{\mathbf{C}}$ und für die Überspannungen

$$\tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}} = 2\varrho_R \mu J^{-2/3} \left(\mathbf{C}_v^{-1} - \frac{1}{3} (\mathbf{C} \cdot \mathbf{C}_v^{-1}) \mathbf{C}^{-1} \right), \quad (3.100)$$

als Anteile des zweiten Piola-Kirchhoff Spannungstensors, die auf der Referenzkonfiguration agieren, spezifiziert. Die Vortransformation auf die Momentankonfiguration erfolgt mit dem *push-forward* Operator $\mathbf{F}(\cdot)\mathbf{F}^T$. Die aus der Auswertung der Dissipationsungleichung verbleibende Restungleichung motiviert analog zu Abschnitt 3.3.4

¹⁷Aufgrund der isothermen Betrachtung wird die Wärmeleitungsungleichung der Dissipationsungleichung vernachlässigt. Sie erhält die Form

$$\delta = \dot{\psi} + \frac{1}{\varrho_R} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} \geq 0.$$

die positive Proportionalität der Überspannungen bezüglich der viskosen Verzerrungsraten der inelastischen Zwischenkonfiguration. Aus dieser Überlegung heraus wird die Fließregel (3.89) auch für das isotherme Materialmodell formuliert, in der jedoch die Materialfunktion φ den Wert eins annimmt. Die Ratenabhängigkeit des Modells wird durch die prozessabhängige Viskositätsfunktion

$$\eta = \eta_0 \exp \left(-s_0 \sqrt{\mathbf{C} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}} \cdot \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}} \mathbf{C}} \right), \quad (3.101)$$

nach dem Vorschlag von Hartmann [2002] abgebildet.

3.5. Herleitung der Wärmeleitungsgleichung

Die Entwicklung der Temperatur eines materiellen Körpers während eines thermomechanischen Prozess wird durch die verallgemeinerte Wärmeleitungsgleichung beschrieben, die aus der lokalen Bilanzgleichung (2.63) abgeleitet wird. Unter Berücksichtigung der Legendre-Transformation $e = \psi + s\theta$ gelingt es die materielle Zeitableitung der spezifischen inneren Energie in Abhängigkeit der spezifischen freien Energie und der spezifischen Entropie zu formulieren, womit die lokale Energiebilanz

$$\dot{\psi} + s\dot{\theta} + \theta\dot{s} = -\frac{1}{\varrho_{\text{R}}} \text{Div} \mathbf{q}_{\text{R}} + \frac{1}{\varrho_{\text{R}}} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} + r, \quad (3.102)$$

durch die eingeführten thermodynamischen Potentiale beschrieben wird. Mit der Definition der freien Energie (3.31) und (3.32), der Beziehung für die Spannungsleistung aus (3.30), den aus der Clausius-Duhem Ungleichung hergeleiteten Potentialbeziehungen für die Gleichgewichtsspannungen, der spezifischen Entropie (3.36) und den Überspannungen (3.39) gelangt man nach einigen Umformungen auf die sogenannte Gibbs'sche Gleichung der Wärmeleitung¹⁸

$$\theta\dot{s} = -\frac{1}{\varrho_{\text{R}}} \text{Div} \mathbf{q}_{\text{R}} + r + \delta, \quad (3.103)$$

worin die Wärmeproduktion infolge der inneren inelastischen Dissipation durch

$$\delta = \frac{1}{\varrho_{\text{R}}} \varphi^{\frac{2}{3}} \check{\mathbf{C}}_e \check{\mathbf{S}}_{\text{ov}} \cdot \overset{\Delta}{\mathbf{\Gamma}}_{\text{v}}, \quad (3.104)$$

beschrieben wird und über die Beziehung (3.42) und (3.44) eingeführt ist. Um eine Evolutionsgleichung für das Temperaturfeld zu erhalten, muss die materielle Zeitableitung der spezifischen Entropie gebildet werden. Diese lässt sich über die Potentialbeziehung

¹⁸vgl. [Haupt, 2002]

3. Modellierung der Materialeigenschaften von Elastomeren

für die Entropie (3.36) und mit der Definition der freien Energie (3.32) zunächst durch die Form

$$\dot{s} = - \left(\frac{1}{\varrho_0} \frac{d\bar{\psi}_M^{\text{eq}}}{d\mathbf{E}_M} \cdot \dot{\mathbf{E}}_M + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \dot{\theta} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta \partial \check{\mathbf{T}}_e} \cdot \dot{\check{\mathbf{T}}}_e \right) + \frac{1}{\varrho_R} \frac{d}{dt} (\tilde{\varphi}(\text{Sp } \mathbf{S}_M)), \quad (3.105)$$

angeben. Die ersten drei Terme innerhalb des Klammersausdruckes resultieren aufgrund der Abhängigkeit der freien Energie von den mechanischen Verzerrungen, den elastischen Verzerrungen der Zwischenkonfiguration $\check{\chi}_t$ und der Temperatur. Hierin ist der dritte Term $(\partial^2 \psi / \partial \theta \partial \check{\mathbf{T}}_e) \cdot \dot{\check{\mathbf{T}}}_e$ aufgrund der gewählten Formänderungsenergie (3.55) identisch null und bleibt unberücksichtigt.

Mit der Überlegung, dass aufgrund der deviatorischen Eigenschaft der Überspannungen nur der (volumetrische) Gleichgewichtsanteil der Spannungen $\hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}} = \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}}(\theta, J)$ in das Skalarprodukt eingeht, kann die materielle Zeitableitung des letzten Terms, in der die Abkürzung $\tilde{\varphi} = (\varphi' / 3\varphi^{1/3})$ eingefügt ist, mit der Beziehung $\dot{J} = \frac{1}{2} J \mathbf{C}^{-1} \cdot \dot{\mathbf{C}}$, durch

$$\frac{d}{dt} (\tilde{\varphi} \mathbf{S}_M \cdot \mathbf{I}) = \frac{d}{dt} (\tilde{\varphi} \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}} \cdot \mathbf{I}) = \left(\tilde{\varphi}'(\text{Sp } \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}}) + \tilde{\varphi} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}}}{\partial \theta} \cdot \mathbf{I} \right) \right) \dot{\theta} + \tilde{\varphi} J \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}}}{\partial J} \cdot \mathbf{I} \right) \mathbf{C}^{-1} \cdot \dot{\mathbf{E}} \quad (3.106)$$

näher spezifiziert werden. Mit der obigen Gleichung (3.106) und der Substitution des Ausdruckes $d\bar{\psi}_M^{\text{eq}}/d\mathbf{E}_M$ in (3.105) durch die Gleichgewichtsspannungen (3.57) sowie der Rücktransformation auf die Referenzkonfiguration durch $\tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}} = \mathbf{F}_M^{-T} \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}} \mathbf{F}_M^{-1}$ und den kinematischen Relationen

$$\dot{\mathbf{E}}_M = -\frac{1}{3} \frac{\varphi'}{\varphi} \mathbf{C}_M \dot{\theta} + \varphi^{-2/3} \dot{\mathbf{E}}, \quad \mathbf{E}_M = \frac{1}{2} (\mathbf{C}_M - \mathbf{I}), \quad \mathbf{C}_M = \varphi^{-2/3} \mathbf{C}, \quad (3.107)$$

resultiert nach einigen algebraischen Umformungen als Ergebnis die materielle Zeitableitung der spezifischen Entropie

$$\begin{aligned} \dot{s} = \frac{1}{\varrho_R} \left(\left(\frac{\tilde{\varphi}}{\theta} + \tilde{\varphi}' \right) (\text{Sp } \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}}) + \tilde{\varphi} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}}}{\partial \theta} \cdot \mathbf{I} \right) - \varrho_R \frac{\partial^2 \psi_\Theta}{\partial \theta^2} \right) \dot{\theta} \\ + \frac{1}{\varrho_R} \left(\left(\tilde{\varphi} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}}}{\partial J} \cdot \mathbf{I} \right) J - \frac{\varphi^{2/3}}{3\theta} (\text{Sp } \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}}) \right) \mathbf{C}^{-1} - \frac{1}{\theta} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}. \quad (3.108) \end{aligned}$$

Mit diesem Ausdruck wird die Gibbs'sche Gleichung (3.103) in die verallgemeinerte Wärmeleitungsgleichung

$$c_p \dot{\theta} = -\frac{1}{\varrho_R} \text{Div } \mathbf{q}_R + p + r + \delta \quad (3.109)$$

überführt. Die linke Seite der Gleichung drückt die physikalische Eigenschaft aus, dass in einem materiellen Körper aufgrund der Temperaturänderung Energie gespeichert bzw.

freigesetzt werden kann. Diese Eigenschaft wird durch die spezifische Wärmekapazität

$$c_p(\theta, J) := \frac{\theta}{\varrho_R} \left(\left(\frac{\tilde{\varphi}}{\theta} + \tilde{\varphi}' \right) (\text{Sp} \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}}) + \tilde{\varphi} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}}}{\partial \theta} \cdot \mathbf{I} \right) - \varrho_R \frac{\partial^2 \psi_\Theta}{\partial \theta^2} \right), \quad (3.110)$$

repräsentiert, die neben der Temperatur zusätzlich von der Deformation abhängt, siehe auch die Diskussion in [Reese, 2001, S. 116]. Der deformationsabhängige Anteil der spezifischen Wärmekapazität,¹⁹ siehe Abbildung 3.8, zeigt eine schwache nichtlineare Abhängigkeit von der Temperatur und eine lineare Beziehung für $J \approx 1$. Zudem ist aus

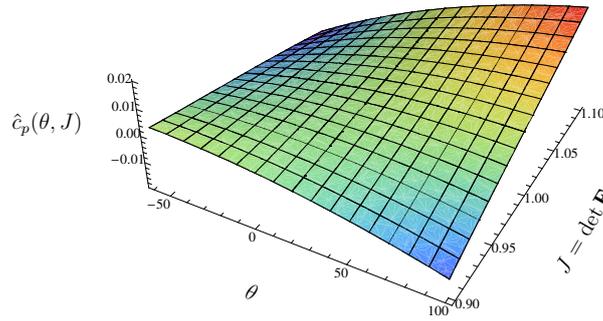


Abbildung 3.8.: Konturplot der spezifischen Wärmekapazität aus (3.110) ohne den rein temperaturabhängigen Anteil $\theta \frac{\partial^2 \psi_\Theta}{\partial \theta^2}$.

dynamischen Differenzkalorimetrie Messungen, wie z.B. bei Heimes [2005] bekannt, dass die Wärmekapazität von Elastomeren oberhalb der Glasübergangstemperatur in guter Näherung einen linearen Zusammenhang über der Temperatur zeigt. Aus dieser Betrachtung heraus kann die im allgemeinen deformationsabhängige Wärmekapazität (3.110), durch die in der Literatur übliche Approximation

$$c_p \approx \theta \frac{\partial^2 \psi_\Theta}{\partial \theta^2}, \quad (3.111)$$

für einen thermomechanischen Prozess angegeben werden, siehe auch [Jansohn, 1997, S. 33]. In Anlehnung an die Arbeit von Heimes [2005] wird der lineare Ansatz

$$c_p(\theta) = c_{p0} (1 + c_{pk}(\theta - \theta_0)), \quad (3.112)$$

gewählt, womit durch zweifache Integration bei homogenen Randbedingungen der thermische Anteil der freien Energie

$$\psi_\Theta = \varrho_R c_p \left(\left((\theta - \theta_0) - \theta \ln \frac{\theta}{\theta_0} \right) (1 - c_{pk} \theta_0) - \frac{1}{2} c_{pk} (\theta^2 - \theta_0^2) \right), \quad (3.113)$$

¹⁹Der rein temperaturabhängige Anteil der spezifischen Wärmekapazität aus (3.110) wird durch $\bar{c}_p := \theta \left(\frac{\partial^2 \psi_\Theta}{\partial \theta^2} \right)$ beschrieben.

3. Modellierung der Materialeigenschaften von Elastomeren

berechnet wird. Der Term der rechten Seite der Wärmeleitungsgleichung (3.109),

$$p(\theta, J, \dot{\mathbf{E}}) := \frac{\theta}{\varrho_{\text{R}}} \left(\left(\frac{\varphi^{2/3}}{3\theta} (\text{Sp } \mathbf{S}_{\text{M}}^{\text{eq}}) - \frac{J\varphi'}{3\varphi^{1/3}} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{S}}_{\text{M}}^{\text{eq}}}{\partial J} \cdot \mathbf{I} \right) \right) \mathbf{C}^{-1} + \frac{1}{\theta} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}, \quad (3.114)$$

beschreibt den Effekt der thermoelastischen Kopplung und ist aufgrund der konstitutiven Relationen äquivalent zu

$$p = \theta \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta \partial \mathbf{E}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \theta \frac{1}{\varrho_{\text{R}}} \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}}{\partial \theta} \cdot \dot{\mathbf{E}}, \quad (3.115)$$

siehe [Haupt, 2002]. Die anderen beiden Terme beschreiben den Energieaustausch durch die Wärmestrahlung r und durch die Wärmeleitung, worin der Wärmefluss durch die Fourier'sche Wärmeleitung (3.47) modelliert ist. Die Wärmeproduktion infolge der inelastischen Spannungsleistung (3.104) kann über die Beziehung (3.71) und durch die Ausnutzung der Identität $\overset{\Delta}{\tilde{\Gamma}}_{\text{v}} = \bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-\text{T}} \dot{\mathbf{E}}_{\text{v}} \bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-1}$, mit $\dot{\mathbf{E}}_{\text{v}} = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}_{\text{v}}$ und der kinematischen Transformation $\check{\mathbf{C}}_{\text{e}} = \bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-\text{T}} \mathbf{C}_{\text{M}} \bar{\mathbf{F}}_{\text{v}}^{-1}$, mit $\mathbf{C}_{\text{M}} = J_{\text{M}}^{2/3} \bar{\mathbf{C}}_{\text{M}}$ sowie $\bar{\mathbf{C}}_{\text{M}} = \bar{\mathbf{C}}$ und $\bar{\mathbf{C}}_{\text{v}} = \mathbf{C}_{\text{v}}$ durch Größen der Referenzkonfiguration repräsentiert werden

$$\delta = J_{\text{M}}^{2/3} \mathbf{C}_{\text{v}}^{-1} \bar{\mathbf{C}} \frac{d\bar{w}_{\text{ov}}}{d(\mathbf{C}_{\text{v}}^{-1} \bar{\mathbf{C}})} \mathbf{C}_{\text{v}}^{-1} \cdot \dot{\mathbf{C}}_{\text{v}}, \quad (3.116)$$

und aufgrund der gewählten Formänderungsenergie (3.56) und des unimodularen rechten Cauchy-Green Tensors $\bar{\mathbf{C}} = J^{-2/3} \mathbf{C}$ in

$$\delta = \mu J^{-2/3} \left((\mathbf{C}_{\text{v}}^{-1} \otimes \mathbf{C}_{\text{v}}^{-1})^{\text{T}_{23}} \mathbf{C} - \frac{1}{3} (\mathbf{C}_{\text{v}}^{-1} \cdot \mathbf{C}) \mathbf{C}_{\text{v}}^{-1} \right) \cdot \dot{\mathbf{C}}_{\text{v}}, \quad (3.117)$$

überführt werden.

4. Formulierung des Anfangs-Randwertproblems

4.1. Das Anfangs-Randwertproblem in der lokalen Form

Die in Kapitel 2 aufgestellten Bilanzgleichungen definieren allgemeine Feldgleichungen zur Bestimmung der Dichte ϱ_R , des Verschiebungsfelds $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \chi_R(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X}$ und der Temperatur $\theta = \theta(\mathbf{X}, t)$. Ihre Vervollständigung erfolgt durch die in Kapitel 3 hergeleiteten Konstitutivgleichungen, die aus einer phänomenologischen Betrachtungsweise den speziellen Materialeigenschaften angepasst sind. Dieser Formulierung folgend ergibt sich für den Spannungszustand die Elastizitätsbeziehung

$$\tilde{\mathbf{T}}(\mathbf{X}, t) = \tilde{\Phi}(\mathbf{C}(\mathbf{X}, t), \theta(\mathbf{X}, t), \mathbf{q}(\mathbf{X}, t)), \quad (4.1)$$

worin offensichtlich der 2. Piola-Kirchhoff'sche Spannungstensor von dem Verschiebungsfeld, dem Temperaturfeld und den inneren Variablen abhängt. Die inneren Variablen, welche die Evolution der viskosen Verzerrungen beschreiben (3.89), sind mittels der Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung bestimmt,¹

$$\dot{\mathbf{q}}(\mathbf{X}, t) = \tilde{\mathbf{r}}(\mathbf{C}(\mathbf{X}, t), \theta(\mathbf{X}, t), \mathbf{q}(\mathbf{X}, t)). \quad (4.4)$$

Zur eindeutigen Festlegung des Anfangs-Randwertproblems bedarf es noch der Angabe geeigneter Anfangs- und Randbedingungen für die unabhängigen Größen des materiellen Körpers.

Die vorliegende Arbeit unterliegt der einschränkenden Annahme quasi-statischer Prozesse, was bei vielen technischen Anwendungen durchaus angemessen ist. Infolge dieser Annahme werden die Trägheitsterme der Impulsbilanz ((2.48)) vernachlässigt. Sie

¹In einer allgemeinen Form liegen zur Bestimmung der inneren Variablen nicht gewöhnliche Differentialgleichungen vor, sondern Algebro-Differentialgleichungen der Form

$$\mathbf{A}\dot{\mathbf{q}} = \hat{\mathbf{r}}(\mathbf{C}, \theta, \mathbf{q}), \quad (4.2)$$

worin beispielsweise die Matrix \mathbf{A} im Fall der Thermo-Elastoplastizität eine singuläre Matrix entspricht, die durch die Struktur

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \\ & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.3)$$

gegeben ist, siehe [Ellsiepen and Hartmann, 2001]. Im Fall der Thermo-Viskoelastizität ist $\mathbf{A} = \mathbf{I}$.

4. Formulierung des Anfangs-Randwertproblems

stellt jedoch weiterhin über die Spannungen und den äußeren Lasten ein System von zeitabhängigen, partiellen Differentialgleichungen dar, [Fritzen, 1997]. Allerdings führt das Vernachlässigen der Trägheitsterme dazu, dass die Anfangsbedingungen der Bewegung und des Geschwindigkeitsfeldes entfallen, [Marsden and Hughes, 1994]. Lediglich Anfangsbedingungen für das Temperaturfeld und für die inneren Variablen

$$\theta(\mathbf{X}, t_0) = \theta_0(\mathbf{X}), \quad \forall \mathbf{X} \in \mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad (4.5)$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{X}, t_0) = \mathbf{q}_0(\mathbf{X}), \quad \forall \mathbf{X} \in \mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad (4.6)$$

hier in materieller Darstellung, sind zu fordern.

Die allgemeine Angabe von Randbedingungen bedarf einer disjunktiven Aufteilung der Berandung des materiellen Körpers. Der Rand $\partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ lässt sich unterteilen in einen Teilrand $\partial_u\mathcal{R}[\mathcal{B}] \subset \partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ mit vorgegebenen Randverschiebungen und in einen Teilrand $\partial_s\mathcal{R}[\mathcal{B}] \subset \partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$, auf dem Spannungsrandbedingungen vorliegen. Weiterhin liegen auf der Teilfläche $\partial_\theta\mathcal{R}[\mathcal{B}] \subset \partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ Temperaturrandbedingungen vor und auf der Teilfläche $\partial_q\mathcal{R}[\mathcal{B}] \subset \partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ ist der normal zur Außenberandung gerichtete Wärmefluss vorgegeben. Teilränder, auf denen die primären Variablen \mathbf{u} bzw. θ festgelegt sind, werden als Dirichlet-Ränder und Teilränder mit vorgegebenen Spannungen bzw. Wärmeflüssen werden als Neumann-Ränder bezeichnet. Zusammenfassend gelten für die Teilränder folgende Bedingungen

$$\partial\mathcal{R}[\mathcal{B}] = \partial_u\mathcal{R}[\mathcal{B}] \cup \partial_s\mathcal{R}[\mathcal{B}] = \partial_\theta\mathcal{R}[\mathcal{B}] \cup \partial_q\mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad (4.7)$$

mit

$$\partial_u\mathcal{R}[\mathcal{B}] \cap \partial_s\mathcal{R}[\mathcal{B}] = \emptyset, \quad \partial_\theta\mathcal{R}[\mathcal{B}] \cap \partial_q\mathcal{R}[\mathcal{B}] = \emptyset. \quad (4.8)$$

Es sei angemerkt, dass auf den Teilrändern durchaus eine Kombination aus Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen definiert werden kann. Solche gemischten Randbedingungen liegen z.B. bei konvektivem Heizen oder Kühlen über die Oberfläche vor [Incropera et al., 2007], womit die Berandung durch die Teilränder

$$\partial\mathcal{R}[\mathcal{B}] = \partial_\theta\mathcal{R}[\mathcal{B}] \cup \partial_q\mathcal{R}[\mathcal{B}] \cup \partial_{\theta q}\mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad \partial_\theta\mathcal{R}[\mathcal{B}] \cap \partial_q\mathcal{R}[\mathcal{B}] \cap \partial_{\theta q}\mathcal{R}[\mathcal{B}] = \emptyset, \quad (4.9)$$

festgelegt wird.² Den Teilrändern zugeordnete Dirichlet-Randbedingungen über einen bestimmten Zeitintervall mit $t \in \mathbb{R}^+$ bzw. $t \in]t_0, t_e[$ können mittels

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, t), \quad \forall \mathbf{X} \in \partial_u\mathcal{R}[\mathcal{B}] \quad (4.10)$$

$$\theta(\mathbf{X}, t) = \bar{\theta}(\mathbf{X}, t), \quad \forall \mathbf{X} \in \partial_\theta\mathcal{R}[\mathcal{B}] \quad (4.11)$$

²Die disjunktive Aufteilung der Berandung $\partial\mathcal{X}_t[\mathcal{B}]$ ist entsprechend auch in einer räumlichen Darstellung möglich.

definiert werden. Die Neumann-Randbedingungen werden an den Teilrändern durch die Gleichungen

$$\mathbf{t}_R = \mathbf{T}_R \mathbf{n}_R = \mathbf{s}(\mathbf{X}, t), \quad \forall \mathbf{X} \in \partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}] \quad (4.12)$$

$$q_R = \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{n}_R = f_q(\mathbf{X}, t), \quad \forall \mathbf{X} \in \partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}] \quad (4.13)$$

bzw. im Fall von gemischten Teilrändern, an denen die Bedingung zusätzlich noch von der Oberflächentemperatur abhängt, durch

$$q_R = \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{n}_R = f_c(\mathbf{X}, \theta, t), \quad \forall \theta, \mathbf{X} \in \partial_{\theta q} \mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad (4.14)$$

festgelegt. Die in (4.12) und (4.13) formulierten Randbedingungen sind formal deformationsabhängig, welche über den Piola-Kirchhoff'schen Spannungsvektor (2.31) bzw. Wärmeflussvektor (2.35) aus der Transformation

$$\mathbf{T}_R \mathbf{n}_R dA = \mathbf{T} \mathbf{n} da, \quad \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{n}_R dA = \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} da, \quad (4.15)$$

mit Einbeziehung der Eigenschaft $da = \sqrt{d\mathbf{a} \cdot d\mathbf{a}}$ und (2.15) durch

$$da = (\det \mathbf{F}) \sqrt{\mathbf{n}_R \cdot (\mathbf{F}^{-1} \mathbf{F}^{-T} \mathbf{n}_R)} dA, \quad (4.16)$$

ersichtlich wird, [Haupt, 2002]. Mit den oben formulierten Anfangs- und Randbedingungen ist der Satz an Gleichungen für die Festlegung eines Anfang-Randwertproblems vollständig. Das in dieser Arbeit behandelte thermomechanisch gekoppelte Problem ist in der starken Form in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Eine analytische Lösung dieser Systeme von Feldgleichungen der Kontinuumsmechanik ist in den allermeisten Fällen praktisch nicht möglich. Eine näherungsweise Berechnung auf Basis von Variationsverfahren, beispielsweise der Finite-Elemente Methode, eröffnet jedoch eine Ausdehnung auf ein breites Problemfeld.

4.2. Schwache Form – Variationsformulierung

Im Rahmen der Methode der finiten Elemente wird die Herleitung der Variationsgleichungen auf verschiedene Arten motiviert. Bei der einen Möglichkeit geht man von den partiellen Differentialgleichungen der lokalen Impulsbilanz aus, die skalar mit vektorwertigen Testfunktionen multipliziert wird. Die anschließende Integration über das Volumen und die Anwendung des Gauss'schen Integralsatzes führen auf die äquivalente schwache Form. Bei der anderen Vorgehensweise wird ein Funktional formuliert, dass stationär werden soll. Die Bildung des totalen Differentials, das im Fall der Stationarität verschwinden muss, liefert dann die schwache Form. Hierauf aufbauend knüpft die Motivation einer speziellen Elementformulierung an.

Tabelle 4.1.: Lokale Form des Anfangs-Randwertproblems

Gesucht sind auf dem Gebiet $\mathcal{R} [\mathcal{B}] \times]t_0, t_e[$ das Verschiebungsfeld $\mathbf{u} (\mathbf{X}, t)$ und das Temperaturfeld $\theta (\mathbf{X}, t)$ für das, durch	
$\mathbf{0} = \text{Div } \mathbf{T}_R + \varrho_R \mathbf{k},$	(2.48)
$c_p \dot{\theta} = -\frac{1}{\varrho_R} \text{Div } \mathbf{q}_R + r + p + \delta,$	(3.109)
$\dot{\mathbf{q}} = \tilde{\mathbf{r}} (\mathbf{C}, \theta, \mathbf{q})$	(4.4)
und den zugehörigen konstitutiven Beziehungen	
$\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\Phi} (\mathbf{C}, \theta, \mathbf{q}),$	mit $\tilde{\mathbf{T}} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T}_R$ (4.1)
$\mathbf{q}_R = -\kappa_R \text{Grad } \theta,$	$\kappa_R = \hat{\kappa}_R (\theta, \mathbf{C})$ (3.47)
sowie den Anfangs- und Randbedingungen	
$\theta (\mathbf{X}, t_0) = \theta_0 (\mathbf{X}),$	(4.5)
$\mathbf{q} (\mathbf{X}, t_0) = \mathbf{q}_0 (\mathbf{X}),$	(4.6)
$\mathbf{u} (\mathbf{X}, t) = \bar{\mathbf{u}} (\mathbf{X}, t),$	$\mathbf{T}_R \mathbf{n}_R = \mathbf{s} (\mathbf{X}, t),$ (4.10, 4.12)
$\theta (\mathbf{X}, t) = \bar{\theta} (\mathbf{X}, t),$	$\mathbf{q}_R \cdot \mathbf{n}_R = f_q (\mathbf{X}, t),$ (4.11, 4.13)
definierte Problem.	

4.2.1. Schwache Formulierung der Impulsbilanz

Das Prinzip der virtuellen Verschiebungen ist eine der lokalen Impulsbilanz äquivalente³ Formulierung, die als schwache Form oder als Variationsformulierung der Gleichgewichtsbedingungen bezeichnet wird. Ausgehend von der lokalen Impulsbilanz wird das Verschiebungsfeld $\mathbf{u} (\mathbf{X}, t)$ gesucht, welches das Gleichgewicht befriedigt. Zur Lösung wird aus der Menge stetig differenzierbarer Funktionen \mathcal{T}_u , eine Testfunktion $\delta \mathbf{u} (\mathbf{X}) \in \mathcal{T}_u$

$$\mathcal{T}_u := \{ \delta \mathbf{u}: \mathcal{R} [\mathcal{B}] \rightarrow \mathbb{R}^3 \mid \delta \mathbf{u} (\mathbf{X}) = 0 \text{ für } \mathbf{X} \in \partial_u \mathcal{R} [\mathcal{B}] \} \quad (4.17)$$

³Die Variationsformulierung ist unter der Voraussetzung von geeigneten Stetigkeitseigenschaften äquivalent zur differentiellen Form, siehe [Jeltsch-Fricker, 2007].

definiert, die als Ausdruck für die virtuellen Verschiebungen verstanden werden kann. Die skalare Multiplikation der Differentialgleichung (2.48) mit den Testfunktionen $\delta \mathbf{u}$ und die anschließende Integration über das Volumen des materiellen Körpers liefert

$$\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \text{Div } \mathbf{T}_R(\mathbf{X}, t) \cdot \delta \mathbf{u}(\mathbf{X}) \, dV + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_R(\mathbf{X}) \mathbf{k}(\mathbf{X}, t) \cdot \delta \mathbf{u}(\mathbf{X}) \, dV = 0. \quad (4.18)$$

Durch die partielle Integration des ersten Summanden mit nachfolgender Ausnutzung des Divergenztheorems

$$\text{Div } \mathbf{T}_R \cdot \delta \mathbf{u} = \text{Div}(\mathbf{T}_R^T \delta \mathbf{u}) - \mathbf{T}_R \cdot \text{Grad } \delta \mathbf{u}, \quad (4.19)$$

und der Einarbeitung der Neumann'schen Randbedingungen $\mathbf{t}_R = \mathbf{T}_R \mathbf{n}_R$ erhält man die schwache Form des Gleichgewichts, [Wriggers, 2008]

$$\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \delta \mathbf{E} \, dV = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_R \mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \mathbf{t}_R \cdot \delta \mathbf{u} \, dA. \quad (4.20)$$

Hierin entspricht der Integrand

$$\tilde{\mathbf{T}} \cdot \delta \mathbf{E} = \tilde{\mathbf{T}} \cdot \frac{1}{2} \left[\mathbf{F}^T \text{Grad } \delta \mathbf{u} + (\text{Grad } \delta \mathbf{u})^T \mathbf{F} \right] = \tilde{\mathbf{T}} \cdot (\mathbf{F}^T \text{Grad } \delta \mathbf{u}) \quad (4.21)$$

der virtuellen Spannungsarbeit, in der die Variation des Green'schen Verzerrungstensors $\delta \mathbf{E}$ durch das Gateaux Differential des Green'schen Verzerrungstensors $\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I})$ des Vektorfelds $\delta \mathbf{u}$ definiert ist:

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{E} &:= D_{\mathbf{u}} \mathbf{E}(\mathbf{u})[\delta \mathbf{u}] = \frac{d}{d\lambda} \frac{1}{2} \left[(\mathbf{F} + \lambda \text{Grad } \delta \mathbf{u})^T (\mathbf{F} + \lambda \text{Grad } \delta \mathbf{u}) - \mathbf{1} \right] \Big|_{\lambda=0} \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \text{Grad } \delta \mathbf{u} + (\text{Grad } \delta \mathbf{u})^T \mathbf{F}). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Selbstverständlich lässt sich die virtuelle Spannungsarbeit auch durch Größen ausdrücken, die auf der Momentankonfiguration operieren. Mit dem Cauchy'schen Spannungstensor $\mathbf{T} = (\det \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F} \tilde{\mathbf{T}} \mathbf{F}^T$ sowie der Kettenregel $\text{Grad } \delta \mathbf{u} = (\text{grad } \delta \mathbf{u}) \mathbf{F}$ und der Ausnutzung von (2.16) folgt aus (4.20) das Prinzip der virtuellen Verschiebungen in der Form, [Wriggers, 2008]

$$\int_{\mathcal{X}_t[\mathcal{B}]} \mathbf{T}(\mathbf{x}, t) \cdot \text{grad } \delta \mathbf{u} \, dv = \int_{\mathcal{X}_t[\mathcal{B}]} \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{k}(\mathbf{x}, t) \cdot \delta \mathbf{u} \, dv + \int_{\partial_s \mathcal{X}_t[\mathcal{B}]} \mathbf{t}(\mathbf{x}, t) \cdot \delta \mathbf{u} \, da. \quad (4.23)$$

4.2.2. Gemischte Variationsformulierung – Dreifeldfunktional

Für den Fall das ein Gesamtpotential, bestehend aus der Differenz der Formänderungsenergie und der potentiellen Energie der äußern Lasten, siehe (A.1), existiert, kann die Herleitung der Finite-Elemente Methode auf Grundlage von Energiefunktionalen erfolgen. Im einfachsten Fall und dem am häufigsten verbreiteten Typ, nämlich der reinen Verschiebungselemente, wird das Gateaux-Differential des Gesamtpotentials berechnet, das im Falle eines Extremalwertes verschwinden muss. Das Gateaux-Differential, d.h. die Variation, stellt das Prinzip der virtuellen Verschiebungen dar. Die daraus resultierenden Verschiebungselemente zeigen jedoch bei Problemen, in denen das Materialverhalten nahezu inkompressibel ist, ein zu steifes Verhalten⁴. Eine Konsequenz wäre die Verwendung einer derart hohen Anzahl von Elementen, dass eine vollkommen unzureichende Effizienz vorliegt. Selbst bei vielen Elementen liegen die Ergebnisse weitab von der exakten Lösung, siehe hierzu auch die Diskussion in [Heisserer et al., 2008]. Aufgrund dieses Zusammenhanges werden effizientere Elementformulierungen herangezogen, die anderen Extremalprinzipien zugrunde liegen.

Die Behandlung von nahezu inkompressiblem Materialverhalten wird hier aufbauend auf dem Prinzip vom Minimum des Gesamtpotentials berücksichtigt, in der der kinematische Zwang der Volumendehnung mit Hilfe eines Lagrange-Multiplikators in das Funktional eingebracht wird. In [Simo et al., 1985] und [Simo and Taylor, 1991] wird hierzu ein Funktional für rein hyperelastisches Materialverhalten vorgestellt, das für die folgende Darstellung als Basis dient. Aufbauend auf deren Ausarbeitungen kann für den Fall, dass ein thermo-hyperelastisches Materialverhalten vorliegt, das Funktional

$$\pi(\mathbf{u}, \theta, \Gamma, \lambda_p, t) := \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \left(\varrho_R \bar{\psi}^{\text{eq}}(\hat{\mathbf{C}}, \theta) + \lambda_p (J - \Gamma) \right) dV - \pi_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t), \quad (4.24)$$

mit der Nebenbedingung

$$\Gamma = J = \det \mathbf{F}, \quad (4.25)$$

motiviert werden. Es sei hier darauf hingewiesen, daß diese Formulierung nicht den Zwang $J = 1$ bei inkompressiblem Materialverhalten erfüllt, sondern lediglich in der numerischen Umsetzung die Volumendehnung durch eine eigene Variable vom Deformationsverhalten entkoppelt und damit einen weiteren Freiheitsgrad impliziert. $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ stellt das Verschiebungsfeld und $\bar{\psi}^{\text{eq}}(\hat{\mathbf{C}}_M, \theta)$ die Formänderungsenergie in Abhängigkeit des modifizierten Rechten Cauchy-Green Tensors

$$\hat{\mathbf{C}} = \hat{\mathbf{F}}^T \hat{\mathbf{F}} = \Gamma^{\frac{2}{3}} \bar{\mathbf{C}}, \quad \text{mit} \quad \hat{\mathbf{F}} = (\Gamma/J)^{\frac{1}{3}} \mathbf{F} = \Gamma^{\frac{1}{3}} \bar{\mathbf{F}}, \quad (4.26)$$

dar. $\bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{F}}_M$ entspricht dem unimodularen Anteil des Deformationsgradienten aus der Zerlegung (3.5). λ_p repräsentiert den Lagrange-Multiplikator zur Einhaltung der Ne-

⁴Siehe zum Begriff des *volumetric locking* in z.B. [Bathe, 1982], [Zienkiewicz and Taylor, 2005b] bzw. [Wriggers, 2008].

benbedingung (4.25). Unter der Verwendung der Zerlegung der spezifischen Formänderungsenergie in einen Anteil, der die spezifische Formänderungsenergie der Volumendeformation widerspiegelt, sowie einen Anteil, der den isochoren, d.h. den volumenerhaltenden Anteil beschreibt, führt das Einsetzen des gewichteten rechten Cauchy-Green Tensors (4.26) auf

$$\bar{\psi}^{\text{eq}}(\widehat{\mathbf{C}}, \theta) = \frac{\theta}{\theta_0} \left(U \left(\frac{(\det \widehat{\mathbf{C}})^{\frac{1}{2}}}{\varphi} \right) + \bar{v}(\bar{\mathbf{C}}) \right). \quad (4.27)$$

Wegen $(\det \widehat{\mathbf{C}}) = \Gamma^2$, (4.26)₁ sowie

$$\bar{v}(\bar{\mathbf{C}}) = \bar{v} \left((\det \widehat{\mathbf{C}})^{-\frac{1}{3}} \widehat{\mathbf{C}} \right) = \bar{v} \left(\Gamma^{-\frac{2}{3}} (\Gamma^{\frac{2}{3}} \bar{\mathbf{C}}) \right) = \bar{v}(\bar{\mathbf{C}}) \quad (4.28)$$

resultiert die Aufteilung⁵

$$\bar{\psi}^{\text{eq}}(\widehat{\mathbf{C}}, \Gamma, \theta) = \frac{\theta}{\theta_0} \left(U(\Gamma/\varphi) + \bar{v}(\bar{\mathbf{C}}) \right), \quad (4.29)$$

d.h. die neue Variable Γ geht nur in den volumetrischen Term ein und das Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ beeinflusst lediglich den Energiebeitrag der Volumenerhaltung. Die totale Variation der Funktionalgleichung (4.24) liefert

$$\underbrace{D_{\mathbf{u}} \pi(\mathbf{u}, \Gamma, \lambda_p, t)[\delta \mathbf{u}]}_{\pi_1} + \underbrace{D_{\Gamma} \pi(\mathbf{u}, \Gamma, \lambda_p, t)[\delta \Gamma]}_{\pi_2} + \underbrace{D_{\lambda_p} \pi(\mathbf{u}, \Gamma, \lambda_p, t)[\delta \lambda_p]}_{\pi_3} = 0 \quad (4.30)$$

unter Verwendung der Formänderungsenergie (4.29) und führt auf die drei Gleichungen

$$\pi_1(\mathbf{u}, \lambda_p, \delta \mathbf{u}, t) = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (\tilde{\mathbf{T}}^{\text{iso}} + \lambda_p J \mathbf{C}^{-1}) \cdot \delta \mathbf{E} \, dV - \pi_{\text{ext}}(\delta \mathbf{u}, t) = 0, \quad (4.31)$$

$$\pi_2(\Gamma, \lambda_p, \delta \Gamma) = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \left(\varrho_{\text{R}} \frac{\theta}{\theta_0} \varphi^{-1} U' \left(\frac{\Gamma}{\varphi} \right) - \lambda_p \right) \delta \Gamma \, dV = 0, \quad (4.32)$$

$$\pi_3(\mathbf{u}, \Gamma, \delta \lambda_p) = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (J - \Gamma) \delta \lambda_p \, dV = 0, \quad (4.33)$$

für beliebige Variationen $\delta \mathbf{u}(\mathbf{X})$, $\delta \Gamma(\mathbf{X})$ und $\delta \lambda_p(\mathbf{X})$. Die Herleitung der obigen Gleichungen für die gemischte Variationsformulierung bei isothermer Betrachtung wird in [Hartmann, 2003] dargestellt.

Mit der Beziehung $\text{Grad } \delta \mathbf{u} = (\text{grad } \delta \mathbf{u}) \mathbf{F}$ kann die Variation des Green'schen Verzerrungstensors (4.22) in

$$\delta \mathbf{E} = \mathbf{F}^{\text{T}} \frac{1}{2} (\text{grad } \delta \mathbf{u} + (\text{grad } \delta \mathbf{u})^{\text{T}}) \mathbf{F} = \mathbf{F}^{\text{T}} (\text{grad } \delta \mathbf{u})^{\text{sym}} \mathbf{F} \quad (4.34)$$

⁵Siehe auch [Bonet and Wood, 2000], [Holzapfel, 2000], [Liu et al., 1994] und [Wriggers, 2008].

überführt werden, das sich aus der Rücktransformation des symmetrischen Anteils des Gradienten der virtuellen Verschiebungen $(\text{grad } \delta \mathbf{u})^{\text{sym}}$ ergibt. Das Einsetzen dieser Beziehung in (4.31) und die Hinzunahme der Transformation der deviatorischen Spannungsanteile

$$\mathbf{S}^D = \mathbf{F} \tilde{\mathbf{T}}^{\text{iso}} \mathbf{F}^T, \quad \mathbf{S}^D = J \mathbf{T}^D, \quad (4.35)$$

führt auf die gemischte Variationsformulierung, in dem der Gleichgewichtsanteil in Größen der Momentankonfiguration formuliert ist

$$\pi_1(\mathbf{u}, \lambda_p, \delta \mathbf{u}, t) = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} (\mathbf{T}^D + \lambda_p \mathbf{I}) \cdot (\text{grad } \delta \mathbf{u})^{\text{sym}} dv - \pi_{\text{ext}}(\delta \mathbf{u}, t) = 0. \quad (4.36)$$

4.2.3. Schwache Formulierung der Wärmeleitungsgleichung

Durch die konstitutive Annahme (3.47) wird die lokale Energiebilanz in die Wärmeleitungsgleichung überführt.⁶ Sie dient der Bestimmung des Temperaturfeldes, da im Vergleich zu der schwachen Form der Energiebilanz, siehe die Darstellung in [Dhatt and Touzot, 1985] oder [Miehe, 1988], in dieser Form die Evolution des Temperaturfeldes explizit enthalten ist. Ihre Überführung auf die schwache Form erfolgt analog zur schwachen Formulierung der Impulsbilanz. In diesem Sinne werden wiederum Wichtungsfunktionen bzw. Testfunktionen eingeführt. Für die zeitlich konstanten Testfunktionen $\delta \theta(\mathbf{X}) \in \mathcal{T}_\theta$, welche als virtuelle Temperaturen zu interpretieren sind, gelten die üblichen Restriktionen virtueller Größen auf der Dirichlet-Oberfläche mit vorgegebenen Primärgrößen mit

$$\mathcal{T}_\theta := \{ \delta \theta: \mathcal{R}[\mathcal{B}] \rightarrow \mathbb{R} \mid \delta \theta(\mathbf{X}) = 0 \text{ für } \mathbf{X} \in \partial_\theta \mathcal{R}[\mathcal{B}] \}. \quad (4.37)$$

Die Multiplikation der virtuellen Temperaturen mit der lokalen Form der Wärmeleitungsgleichung und der anschließenden Integration über den Körper liefert

$$\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathcal{R}C_p} \dot{\theta} \delta \theta dV = - \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \text{Div } \mathbf{q}_{\mathcal{R}} \delta \theta dV + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathcal{R}} (p + r + \delta) \delta \theta dV. \quad (4.38)$$

Durch Ausnutzung des Cauchy'schen Divergenztheorems kann der erste Term der rechten Seite in

$$\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \text{Div } \mathbf{q}_{\mathcal{R}} \delta \theta dV = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \text{Div}(\delta \theta \mathbf{q}_{\mathcal{R}}) dV - \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \mathbf{q}_{\mathcal{R}} \cdot \text{Grad } \delta \theta dV, \quad (4.39)$$

überführt werden und die Anwendung des Gauss'schen Integralsatzes erlaubt die Transformation

$$\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \text{Div}(\delta \theta \mathbf{q}_{\mathcal{R}}) dV = \int_{\partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \mathbf{q}_{\mathcal{R}} \cdot \mathbf{n}_{\mathcal{R}} \delta \theta dA. \quad (4.40)$$

⁶Die Überführung wurde in Abschnitt 3.5 gezeigt.

Mit den Resultaten aus (4.39) und (4.40) sowie der konstitutiven Gleichung (3.47) wird der Ausdruck (4.38) in die schwache Form der Wärmeleitungsgleichung überführt

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathbf{R}} c_p \dot{\theta} \delta \theta \, dV + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{R}} \text{Grad } \theta \cdot \text{Grad } \delta \theta \, dV = \\ - \int_{\partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \mathbf{q}_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{n}_{\mathbf{R}} \delta \theta \, dA + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathbf{R}} (p + r + \delta) \delta \theta \, dV. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Hierin sind im Allgemeinen sowohl die spezifische Wärmekapazität c_p sowie der thermoelastische Kopplungsterm p als auch der innere Dissipationsterm δ abhängig von der Temperatur und der Deformation.⁷ Die Formulierung der schwachen Form in Größen der Momentankonfiguration erfolgt durch die Berücksichtigung der Transformationseigenschaften für materielle Flächen- und Volumenelemente gemäß (2.15) und (2.16). Zudem sind die Beziehungen des Piola-Kirchhoff'schen Wärmeflussvektors nach (2.35) und der Fourier'schen konstitutiven Annahme nach (3.47) mit dem materiellen Temperaturgradienten, der durch $\text{Grad } \theta = \mathbf{F}^T \text{grad } \theta$ in den räumlichen Gradienten transformiert werden kann, einzubeziehen. Es folgt dann

$$\begin{aligned} \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho c_p \dot{\theta} \delta \theta \, dv + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \kappa \text{grad } \theta \cdot \text{grad } \delta \theta \, dv = \\ - \int_{\partial_q \chi_t[\mathcal{B}]} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \delta \theta \, da + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho (r + p + \delta) \delta \theta \, dv. \end{aligned} \quad (4.42)$$

4.3. Schwache Form des thermomechanisch gekoppelten Problems

Das mechanische Gleichgewicht und die Wärmeleitung, die durch die Funktionale nach (4.20) und (4.41) repräsentiert werden, sind für das thermomechanisch gekoppelte Problem gleichzeitig zu erfüllen. Die Multiplikation mit beliebigen skalaren Wichtungsfaktoren und die anschließende Bildung der Summe beider Funktionale definieren die

⁷Die innere Dissipation ist zusätzlich noch von der Deformationsrate abhängig, siehe (3.116).

Variationsgleichung für das gekoppelte Problem

$$\begin{aligned}
 & w_M \left\{ \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (\tilde{\mathbf{T}} \cdot \delta \mathbf{E} - \varrho_R \mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{u}) dV - \int_{\partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \mathbf{t}_R \cdot \delta \mathbf{u} dA \right\} + \\
 & + w_\Theta \left\{ \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (\varrho_R (c_p \dot{\theta} - p - r - \delta) \delta \theta + \kappa_R \text{Grad } \theta \cdot \text{Grad } \delta \theta) dV + \right. \\
 & \left. + \int_{\partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{n}_R \delta \theta dA \right\} = 0. \quad (4.43)
 \end{aligned}$$

Die skalaren Wichtungsfaktoren w_M und w_Θ für das kinetische bzw. energetische Gleichgewicht dienen einer besseren Konditionierung der im Rahmen der Finite-Elemente Methode entstehenden Gleichungssysteme, [Miehe, 1988]. Die Überführung in eine einzige Variationsgleichung für das gekoppelte Problem ist, wie häufig in Literatur angegeben wird, z.B. [Heimes, 2005], nicht nötig. Die Aussage einer einzelnen Gleichung ist schwächer als die zweier separater Gleichungen. Die Beliebigkeit der virtuellen Funktionen führt schließlich auf das gleiche Ergebnis, welches durch zwei getrennte Gleichungen erhalten wird. Auch die beiden Wichtungsfaktoren fallen formal bei dem Übergang zur Lösung mit der Finite-Elemente Methode heraus. Dies kann auch der Grund dafür sein, weshalb Miehe [1988] keinen Einfluss auf die Kondition, bzw. Lösbarkeit der Gleichungssysteme feststellen konnte.

Die Herleitung der Variationsgleichung des gekoppelten thermomechanischen Problems unter Berücksichtigung des Dreifeldfunktionals aus Abschnitt 4.2.2 gelingt, indem das mechanische Gleichgewicht aus (4.43) durch das Funktional (4.31) ersetzt wird. Die hieraus resultierende gemischte Variationsformulierung für das thermomechanisch gekoppelte Problem ist in Tabelle 4.2 zusammengefasst.

Tabelle 4.2.: Zusammenfassung der schwachen Form des thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems in einer gemischten Variationsformulierung

Gesucht sind auf dem Gebiet $\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ das Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ und das Temperaturfeld $\theta(\mathbf{X}, t)$, die für beliebige $t \in]t_0, t_e[$ die Gleichungen

$$\begin{aligned} \pi_{M_1}(\mathbf{u}, \theta, \mathbf{q}, \lambda_p, \delta \mathbf{u}) &= \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (\tilde{\mathbf{T}}^{\text{iso}} + \lambda_p J \mathbf{C}^{-1}) \cdot \delta \mathbf{E} \, dV - \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_R \mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{u} \, dV \\ &\quad - \int_{\partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \mathbf{t}_R \cdot \delta \mathbf{u} \, dA = 0 \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$\pi_{M_2}(\theta, \Gamma, \lambda_p, \delta \Gamma) = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \left(\varrho_R \frac{\theta}{\theta_0} \varphi^{-1} U' \left(\frac{\Gamma}{\varphi} \right) - \lambda_p \right) \delta \Gamma \, dV = 0, \quad (4.32)$$

$$\pi_{M_3}(\mathbf{u}, \Gamma, \delta \lambda_p) = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (J - \Gamma) \delta \lambda_p \, dV = 0, \quad (4.33)$$

$$\begin{aligned} \pi_{\Theta}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \theta, \mathbf{q}, \delta \theta) &= \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_R (c_p \dot{\theta} - p - r - \delta) \delta \theta \, dV \\ &\quad - \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \mathbf{q}_R \cdot \text{Grad} \delta \theta \, dV + \int_{\partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{n}_R \delta \theta \, dA = 0, \end{aligned} \quad (4.41)$$

mit vorgegebenen Anfangs- und Randbedingungen

$$\theta(\mathbf{X}, t_0) = \theta_0(\mathbf{X}), \quad \mathbf{q}(\mathbf{X}, t_0) = \mathbf{q}_0(\mathbf{X}), \quad (4.5, 4.6)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, t), \quad \mathbf{t}_R = \mathbf{T}_R \mathbf{n}_R = \mathbf{s}(\mathbf{X}, t), \quad (4.10, 4.12)$$

$$\theta(\mathbf{X}, t) = \bar{\theta}(\mathbf{X}, t), \quad q_R = \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{n}_R = f_q(\mathbf{X}, t), \quad (4.11, 4.13)$$

und den konstitutiven Beziehungen

$$\mathbf{q}_R = -\boldsymbol{\kappa}_R \text{Grad} \theta, \quad \tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\Phi}(\mathbf{C}, \theta, \mathbf{q}), \quad \dot{\mathbf{q}} = \tilde{\mathbf{r}}(\mathbf{C}, \theta, \mathbf{q}), \quad (3.47, 4.1, 4.4)$$

erfüllen.

5. Konsistente Raum-Zeitdiskretisierung

5.1. Globale iterationsfreie Lösungsprozedur

Das thermomechanische, inelastische Anfangsrandwertproblem ist aufgrund der komplexen Struktur der resultierenden Gleichungen nur näherungsweise mit Hilfe numerischer Verfahren lösbar. Für die Konstruktion solcher Verfahren ist zunächst die Berücksichtigung der unterschiedlichen Eigenarten der auftretenden orts- und zeitabhängigen Phänomene erforderlich. Dies kann beispielsweise dadurch erreicht werden, dass zunächst ein Teil der Koordinaten als kontinuierlich beibehalten und die Diskretisierung nur bezüglich der anderen Koordinaten durchgeführt wird. Dieses Vorgehen ist im Allgemeinen in der Literatur als Linienmethode bekannt und ist auf eine Vielzahl von Problemen anwendbar, [Großmann and Roos, 1994] bzw. [Schiesser, 1991]. Semidiskretisierung bezüglich der Ortsvariablen unter Beibehaltung der Zeitkontinuität wird speziell als vertikale Linienmethode bezeichnet und führt zu einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen oder zu einem Algebro-Differentialgleichungssystem (eng. differential-algebraic equations, kurz DAE). Dieses muss im allgemeinen wieder mit numerischen Methoden behandelt werden.

Zur Ortsdiskretisierung wird in dieser Arbeit die Finite-Elemente Methode (FEM) herangezogen. Die Methode ist ein gängiges Verfahren im Rahmen von Problemen der Elastizitäts- und Plastizitätstheorie und hat sich insbesondere aufgrund einer hohen Flexibilität bezüglich komplexen Geometrien in der Praxis bewährt. Eine gute Darstellung des Verfahrens für lineare Problemstellungen findet sich bei Hughes [2000], Bathe [2002] oder Zienkiewicz and Taylor [2005a] und Zienkiewicz and Taylor [2005b], nichtlineare Probleme werden beispielsweise von Oden [1972], Belytschko et al. [2000], Ciarlet [2002] und Wriggers [2008] behandelt.

Eine Besonderheit des Konzepts einer Semidiskretisierung liegt darin begründet, dass die gesamte Vielfalt an numerischen Integrationsverfahren zur Verfügung steht. Vorzugsweise werden Einschrittverfahren, aus der Klasse der Runge-Kutta Verfahren, bei Anwendungen der Elastizitäts- und Plastizitätstheorie eingesetzt. In z.B. [Ellsiepen and Hartmann, 2001], [Hartmann, 2002], [Bier and Hartmann, 2006] und [Hartmann et al., 2008a] werden diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren eingesetzt. Rothe et al. [2012] greift hingegen auf halb-explizite Runge-Kutta Verfahren zurück und vergleicht diese mit weiteren Runge-Kutta Verfahren. Im Hinblick auf den numerischen Aufwand könn-

te man schließen, dass grundsätzlich explizite Verfahren, bei denen keine Gleichungssysteme auftreten, den impliziten Verfahren vorzuziehen sind. Jedoch treten bei expliziten Verfahren für bestimmte Systeme Stabilitätsprobleme auf, die starke Restriktionen der Schrittweiten zur Folge haben. Eine Möglichkeit, die numerisch aufwendigen nichtlinearen Gleichungssysteme zu vermeiden und dennoch hervorragende Stabilitätseigenschaften zu gewährleisten, stellen sogenannte Rosenbrock-Verfahren dar. Diese werden erstmalig in dieser Arbeit zur Lösung der inelastischen, thermomechanisch gekoppelten Problemstellung angewandt.

Detaillierte Erläuterungen zu numerischen Integrationsverfahren und deren Klassifizierung in Einschritt- und Mehrschrittverfahren sowie explizite und implizite Verfahren finden sich z.B. in den Standardwerken von Hairer et al. [1993], Hairer and Wanner [1996] und von Strehmel and Weiner [1995].

Bei der Behandlung von Mehrfeldproblemen, bei denen eine physikalische, wechselseitige Kopplung der Feldgrößen vorliegt,¹ wird nach Park and Felippa [1980] zwischen vier grundlegenden Vorgehensweisen unterschieden:

- **Simultane oder monolithische Lösung aller Feldgrößen.**

Die Unbekannten aller beteiligten Felder werden simultan berechnet. Dies erfordert die Berechnung der Koppelterme in der konsistenten Tangente, die zu einem unsymmetrischen Gesamtgleichungssystem führt. Für dessen Lösung ist ein erhöhter Rechenaufwand zu gewährleisten. Für stark gekoppelte Mehrfeldprobleme, bei denen das eine Feld nicht ohne das andere betrachtet werden kann, ist die simultane Lösung unumgänglich.

- **Partitionierte Lösung der verschiedenen Felder.**

Bei einer partitionierten Vorgehensweise werden die gekoppelten Felder in jedem zeitlichen Inkrement unabhängig voneinander parallel behandelt. Die Unbekannten primären Variablen werden in einem entkoppelten Iterationsprozess berechnet, wobei für die jeweils anderen Teilfelder eine Vorschätzung aus den vorangegangenen Inkrementen herangezogen wird. Die Kopplung der Felder wird erst im nächsten Inkrement wirksam. Bei den resultierenden Teilgleichungssysteme entfallen die Kopplungsterme in den Tangentenmatrizen. Allerdings ist eine konvergente Lösung nicht immer gewährleistet und hängt von vielen Faktoren ab. In [Park, 1980] und [Felippa et al., 2001] ist diese Vorgehensweise detailliert untersucht worden.

- **Gestaffelte Lösung der verschiedenen Felder.**

Bei der gestaffelten Berechnung werden, im Gegensatz zur partitionierten, die

¹Neben den Mehrfeldproblemen, deren Feldgrößen auf dem selben Gebiet Veränderungen erfahren und deren Kopplung über Stoffgesetze erfolgt, werden nach Zienkiewicz [1984] Mehrfeldprobleme klassifiziert, die eher algorithmisch als Mehrfeldproblem anzusehen sind. Bei solchen Mehrfeldaufgaben erfolgt die Kopplung über die Berandung der Teilgebiete.

Teilfelder sequentiell bearbeitet, [Felippa and Park, 1980], [Lewis and Schrefler, 1987], [Simo and Miehe, 1992]. Die Sequenz der beiden Teilprobleme wird innerhalb eines Zeitinkrements solange durchlaufen, bis sich die Teilfelder ausreichend nahe dem Gleichgewicht befinden. Die Lösung konvergiert gegen die des simultanen Verfahrens, falls Konvergenz erreicht wird. Die Konvergenz ist jedoch nicht a priori gesichert, sondern wird u.a. von (a) den Konvergenzkriterien der Diskretisierung (Netzweite h und Polynomgrad p , (b) dem Zeitschritt Δt und dem Verhältnis der Schrittweite zur Netzweite $\Delta t/h^2$, (c) der Wahl der Partitionierung (Operatorsplit), (d) der Wahl der Vorschätzung (Prädiktor) bestimmt, siehe [Turska and Schrefler, 1993]. In [Armero and Simo, 1992] wird ein isentroper Operatorsplit eingeführt, womit die Kontraktivitätseigenschaften des gekoppelten Problems erhalten bleiben und damit eine unbedingte Stabilität des gestaffelten Lösungsverfahrens garantiert wird.

- **Elimination von Feldgrößen.**

Bei dieser Vorgehensweise wird eine Feldgleichung in die andere eingesetzt um so die Anzahl der Feldvariablen und die Problemdimension zu reduzieren. Nach Felippa and Park [1980, S. 73] lässt sich dieses Verfahren jedoch nur sehr selten umsetzen, womit es in der Praxis kaum in Betracht gezogen wird.

Bei der numerischen Behandlung von Feldproblemen wurden naheliegenderweise Berechnungsmethoden und Algorithmen zunächst für Einfeldprobleme entwickelt. Hieraus ergibt sich der wesentliche Vorteil der gestaffelten (oder partitionierten) Lösungsprozedur gegenüber der simultanen, da eine Vielzahl von Berechnungsprogrammen für Einfeldprobleme bereits existieren, die in Kombination zu Mehrfeldberechnungen herangezogen werden können. Bei diesem Ansatz müssen allerdings signifikante Einschränkungen bei der Materialmodellierung toleriert werden. Die Materialgleichungen müssen derart formuliert werden, dass eine physikalisch plausible Entkopplung der Feldgleichungen noch gewährleistet werden kann. Die Berücksichtigung der Kopplungsterme erfolgt dann über die rechte Seite, als sogenannte Lastvektorkopplung.

In Bezug auf den numerischen Aufwand können sowohl bei der gestaffelten als auch bei der simultanen Vorgehensweise Vor- und Nachteile identifiziert werden. Eine Gegenüberstellung der Eigenschaften der beiden Ansätze findet sich beispielsweise in [Lübbing, 1997]. Im Fall des simultanen Lösungsansatzes müssen unsymmetrische Matrizen² gelöst werden, die mit einem erhöhten numerischen Aufwand verbunden sind. Indessen entfallen die aufwendigen Gleichgewichtsiterationen der gestaffelten Lösung bei dem simultanen Ansatz. Hochgradig, um Größenordnung differierende Koeffizienten in den Systemgleichungen der simultanen Lösung können zu schlecht konditionierten Gleichungssystemen führen. Allerdings müssen bei der Anwendung der gestaffelten Lösung

²Die Matrizen der gekoppelten Gleichungen können zwar unsymmetrisch werden, bleiben jedoch aufgrund des FEM Ansatzes weiterhin spärlich besetzt. Die Anwendung eines Gleichungslösers für spärlich besetzte unsymmetrische Matrizen, wie es in dieser Arbeit umgesetzt wurde, reduziert den numerischen Aufwand gegenüber klassischen Bandlösern erheblich.

trotz der Integration jedes einzelnen Feldproblems mittels unbedingt stabiler Verfahren zusätzlich verstärkte Stabilitätskriterien eingehalten werden, die die Konvergenzrate erheblich beeinflussen können. Zudem ist die Konsistenzordnung der Integrationsverfahren, die für die Lösung der Teilfelder erreicht werden, nicht für das Gesamtproblem gewährleistet. Die Möglichkeit einer unabhängigen, sogenannten inhomologen Gebietsdiskretisierung, das für jedes Teilproblem ein angepasstes Netz erlaubt, siehe [Rieger, 2002], wird durch die simultane Lösung im Vergleich zur gestaffelten Lösung nicht unterstützt. Bei der Kopplung der Netze müssen jedoch die berechneten Primärvariablen des Quellnetzes auf das Zielnetz projiziert werden, was einen zusätzlichen numerischen Aufwand verursacht, siehe auch [Erbs and Düster, 2012].

Für die vorliegende Arbeit wird zur Behandlung des Mehrfeldproblems die simultane Vorgehensweise herangezogen. In Verbindung mit der Wahl von Rosenbrock Verfahren gelingt eine vollkommen iterationsfreie Prozedur zur Lösung des physikalisch und geometrisch nichtlinearen thermomechanisch gekoppelten Problems.

5.2. Raumdiskretisierung mittels der Finite-Elemente-Methode

Die Finite-Elemente Methode ist heutzutage eine etablierte Standardanwendung im Rahmen der Elastizitäts-, Plastizitäts- und Viskoelastizitätstheorie. Detaillierte Darstellung der Methoden und grundlegende mathematische Erläuterungen der Theorie sind ausgiebig in den oben genannten Referenzen behandelt. Die folgenden Ausführungen beschränken sich auf wesentliche Aspekte, die charakteristisch für das gekoppelte thermo-viskoelastische Problem sind. Insbesondere soll hier die Diskussion, über einen adäquaten Ansatz der Elementformulierung hinsichtlich der Materialeigenschaft aufgenommen werden.

Für die Diskretisierung beliebig geformter Körper wird weitestgehend das isoparametrische Elementkonzept herangezogen. Hierbei ist die Auswahl geeigneter Ansatzfunktionen in Bezug auf Stabilität, Konvergenzverhalten und numerischer Aufwand zu beachten. Standardmäßige, lineare Elemente führen, insbesondere bei biegedominierten Problemstellungen oder nahezu inkompressiblem Materialverhalten zu künstlichen Versteifungseffekten.³ Grundsätzlich tritt dieser Effekt auch bei höherwertigen Elementen mit quadratischen Ansatzfunktionen auf, allerdings in abgeschwächter Form. Sie sind jedoch aus Sicht des numerischen Aufwands unattraktiv, da der Besetzungsgrad der Tangentematrizen wesentlich größer ist, womit der Aufwand zur Lösung der zugehörigen linearen Gleichungssysteme erhöht wird. Dieser Aufwand kann scheinbar eingeschränkt werden, indem die Diskretisierung reduziert wird. Eine Beurteilung des Aufwands gelingt aus dem Verhältnis der Elementanzahl zum Polynomgrad der Ansatzfunktionen. Die Ansatzfunktionen, welche in der Standard FE-Formulierung aus Lagrange Polyno-

³vgl. Abschnitt 4.2.2.

men konstruiert werden, neigen bei hohen Polynomgraden zu Oszillationen. Daher sind Elementformulierungen hoher Ordnung entwickelt worden, die auf hierarchischen Ansatzfunktionen basieren und aus Legendre-Polynomen konstruiert werden.⁴ In [Düster et al., 2003] werden beispielsweise Legendre Polynome im Rahmen finiter Hyperelastizität angewandt und in [Düster et al., 2002] für Elastoplastizität bei kleinen Deformationen vorgestellt. In einer kürzlich erschienen Arbeit von Netz et al. [2013a] ist die Anwendung der Legendre Polynome auf die finite Viskoelastizität in Kombination mit Zeitintegrationsverfahren hoher Ordnung erweitert worden. Die Umsetzung der Legendre-Polynome in Kombination mit den Rosenbrock-Verfahren erfolgte in [Netz et al., 2013b].

Für nichtlineare Probleme haben sich jedoch insbesondere Elemente niedriger Ordnung als effizient erwiesen. Zur Vermeidung des Lockings sind einige Herangehensweisen entwickelt worden, die in der Literatur ausgiebig behandelt werden. Ein einfacher Ansatz, der gleichzeitig effizient und speicherplatzsparend ist, beruht auf einer Unterintegration der Elemente, siehe [Zienkiewicz et al., 1971] oder [Malkus and Hughes, 1978]. Eine Unterintegration oder reduzierte Integration führt generell auf einen Rangabfall der tangentialen Steifigkeitsmatrix, der durch zusätzliche Stabilisierungstechniken, zurückführend auf die Arbeiten von Flanagan and Belytschko [1981] und Belytschko et al. [1984], behoben werden muss, da es sonst Instabilitäten zur Folge hat. Mit Hilfe der reduzierten Integration können locking-freie Elemente entwickelt werden, die die effizienteste Möglichkeit zur Berechnung der Steifigkeitsmatrix bieten. Der große Nachteil dieses Vorgehens liegt darin, dass die Auswahl von notwendigen Stabilisierungsfaktoren nicht ausreichend physikalisch begründet ist und im ungünstigen Fall sogar die Lösung verfälscht, [Wriggers, 2008]. Es existieren diverse Arbeiten, in denen physikalisch sinnvolle Methoden zur Berechnung der Stabilisierungsfaktoren vorgeschlagen werden. Im Rahmen finiter Deformationen sind diesbezüglich die Arbeiten von Reese et al. [2000], Reese and Wriggers [2000] und Reese [2005] hervorzuheben.

Eine weitere Elemententwicklung zur Elimination des Lockingverhaltens wird in der Literatur als “Enhanced Assumed Strain Elemente” (EAS-Elemente) bezeichnet und führt im Spezialfall auf die Methode der inkompatiblen Moden, siehe [Wilson et al., 1973] und [Taylor et al., 1976]. Eine erste Formulierung für die geometrisch lineare Theorie mit einer mathematischen Herleitung aus dem Hu-Washizu Variationsprinzip wurde von Simo and Rifai [1990] erarbeitet. Die Erweiterung auf finite Deformationen ist von Simo and Armero [1992] und Simo et al. [1993] entwickelt worden. Weiterführende Entwicklungen finden sich bei Wriggers and Hueck [1996]. EAS-Elemente zeichnen sich durch hervorragende Eigenschaften gegenüber Locking sowohl bei nahezu inkompressiblem Verhalten als auch bei biegedominierten Problemstellungen aus. Sie erreichen zudem eine hohe Genauigkeit bei grober Diskretisierung und sind robust

⁴Eine weitere Entwicklung hierarchischer Ansatzfunktionen basiert auf einer Klasse von Spline Funktionen, den sogenannten NURBS (*Non-Uniform Rational B-Splines*). Die Pionierarbeit in der Umsetzung von NURBS im Rahmen der FEM leistete Hughes et al. [2005].

bei stark verzerrten Netzen. Allerdings weisen Enhanced Strain Elemente auch Schwächen auf. Neben dem zusätzlichen Speicherbedarf, dem numerisch hohen Aufwand auf Elementebene und der Komplexität in der Implementierung zeigen sie eine beträchtliche Sensitivität bei Druckbeanspruchung. Hierbei werden unphysikalische Bifurkationen beobachtet, die durch “Hourglass”-förmige Eigenformen gekennzeichnet sind, siehe [Wriggers and Reese, 1996]. Vorschläge, die das Problem teilweise lösen, sind von Korelc and Wriggers [1996], Glaser and Armero [1997] sowie von Reese and Wriggers [2000] und Reese [2005] vorgelegt. Diese garantieren jedoch keine unbedingte Stabilität, womit das Problem der Hourglass-Instabilität im Zusammenhang mit den EAS-Elementen noch ein offener Punkt bleibt.

Abschließend sollen die gemischten Elemente, die in dieser Arbeit in Kombination mit der iterationsfreien Lösungsprozedur ihre Anwendung finden, erwähnt werden. Gemischte Elemente basieren, ähnlich wie die EAS-Elemente, auf gemischte Variationsprinzipien.⁵ Typischerweise werden gemischte Elemente angewandt, wenn kinematische Zwangsbedingungen, wie z.B. inkompressibles Verhalten bei gummiartigen Materialien, zu erfüllen sind. Daher wird ein gemischtes Variationsprinzip aufgestellt, das der zu erfüllenden Zwangsbedingung genügt. In diesem Fall beruht das Variationsprinzip auf einem volumetrisch-deviatorischen Split der kinematischen Größen. Dies hat zur Folge, dass die Modellierung der Materialgleichungen erheblich aufwendiger wird, insbesondere bei thermomechanisch gekoppelten Problemstellungen, da der volumetrisch-deviatorische Split in die Energiebilanz eingeht.⁶ Der Aufwand wird reduziert, wenn in die Evolutionsgleichung nur der Spannungsdeviator eingeht, siehe [Reese, 2001]. Der Modellierungsaufwand ist im Vergleich zu der numerischen Effizienz der gemischten Elemente vertretbar. Sie zeigen ein locking-freies Verhalten bei nahezu Inkompressibilität, sind zudem robust und verhalten sich nicht sensitiv bei groben Netzverzerrungen. Der Rechenaufwand auf Elementebene ist im Vergleich zu den EAS-Elementen deutlich geringer bei gleicher Genauigkeit.

5.2.1. Isoparametrisches Konzept

Im Rahmen der Finite-Elemente Methode wird der kontinuierliche Körper \mathcal{B} in ein diskretes Gebiet \mathcal{B}^h zerlegt, welche aus den n_e nicht-überlappenden Subgebieten $\Omega_e \subset \mathcal{B}^h$, den sogenannten finiten Elementen, gebildet wird, siehe Abbildung 5.1. Der Rand des Körpers $\partial\mathcal{B}$ wird analog durch den stückweise stetigen Rand $\Gamma_e \subset \partial\mathcal{B}^h$ approximiert. Es gilt:

$$\mathcal{B} \approx \mathcal{B}^h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \Omega_e, \quad \partial\mathcal{B} \approx \partial\mathcal{B}^h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \Gamma_e. \quad (5.1)$$

⁵Erläuterungen zu dem theoretischem Hintergrund von gemischten Variationsprinzipien für die lineare Theorie finden sich in [Washizu, 1975]. Zudem sind hierzu die mathematischen Monographien von Braess [2007] und von Brenner and Scott [2010] zu benennen.

⁶siehe Abschnitt 3.

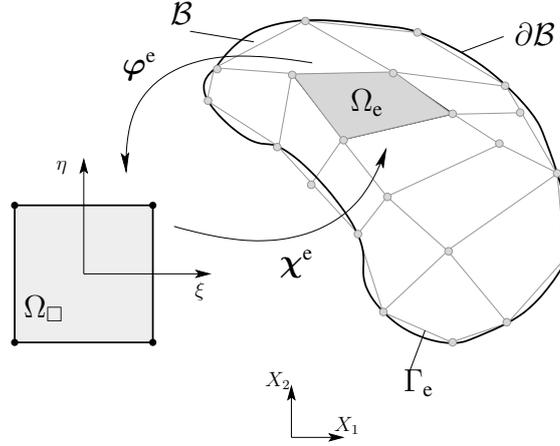


Abbildung 5.1.: Diskretisierung des Körpers und eine isoparametrische Koordinatentransformation für einen zweidimensionalen Körper

Durch ein generelles isoparametrisches Konzept werden im Gebiet des finiten Elements sowohl die Geometrie als auch alle weiteren Feldgrößen durch Ansatzfunktionen approximiert, deren Freiheitsgrade mit den diskreten Knotenwerten der Feldgrößen identifiziert werden, siehe hierzu [Oden, 1972], [Hughes, 2000], [Zienkiewicz and Taylor, 2005a] und [Wriggers, 2008]. Die exakte Lösung des Problem im infiniten kontinuierlichen Raum wird auf den endlich-dimensionalen diskreten algebraischen Lösungsraum approximiert, indem skalare Ansatzfunktionen für die approximierenden Feldgrößen definiert werden. Folglich wird das Verschiebungsfeld mittels einer Linearkombination der Ansatzfunktionen $N_j(\mathbf{x})$ des Knotens j für $j = 1, \dots, n_n$ und $\mathbf{x} \in \Omega$, durch

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \approx \mathbf{u}^h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{n_n} N_j(\mathbf{x}) \mathbf{u}_j(t), \quad \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) \approx \delta \mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_n} N_j(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}_j, \quad (5.2)$$

approximiert. Hierin entsprechen $\mathbf{u}_j(t)$ den Knotenverschiebungen und $\delta \mathbf{u}_j$ den virtuellen Knotenverschiebungen. Üblicherweise werden für die Ansatzfunktion Lagrange-Polynome gewählt, die auf dem normierten Referenzelement Ω_{\square} , mit den lokalen Koordinaten $\boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta, \zeta\}^T$, für $\xi \in [-1, 1]$, $\eta \in [-1, 1]$ und $\zeta \in [-1, 1]$ definiert sind. Die Polynome erfüllen die Eigenschaft, dass sie genau an einem Knoten den Wert 1 annehmen und an allen anderen Knoten den Wert 0, d.h. dass an jedem Knoten genau eine Ansatzfunktion den Wert 1 besitzt und innerhalb des Elements alle Ansatzfunktionen sich stets zu 1 addieren, siehe [Schwarz and Köckler, 2004].

Mittels der Formulierung der Ansatzfunktionen bezüglich des Referenzelements wird für jedes Element Ω_e die Transformation der Koordinaten $\mathbf{x} \in \Omega_e$ auf die Koordinaten $\boldsymbol{\xi}$ des Referenzelementes nach

$$\mathbf{x} = \boldsymbol{\chi}^e(\boldsymbol{\xi}) \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\varphi}^e(\mathbf{x}), \quad (5.3)$$

5. Konsistente Raum- Zeitdiskretisierung

mit $\varphi^e = \chi^{e-1}$, ausgeführt, siehe Abbildung 5.1. Diese isoparametrische Transformation induziert die Übereinstimmung der global definierten Verschiebungen (5.2) mit den lokalen im Element definierten Verschiebungen für $\mathbf{x} \in \Omega_e$

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}, t) = \mathbf{N}_a(\mathbf{x}) \mathbf{u}_a(t) = \mathbf{N}^e(\varphi^e(\mathbf{x})) \mathbf{u}^e, \quad (5.4)$$

$$\delta \mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_a(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}_a = \mathbf{N}^e(\varphi^e(\mathbf{x})) \delta \mathbf{u}^e. \quad (5.5)$$

Die Anordnung der Knotenverschiebungen \mathbf{u}_j und virtuellen Knotenverschiebungen $\delta \mathbf{u}_j$ in Spaltenmatrizen führt auf die Matrix der Ansatzfunktionen $\mathbf{N}_a(\mathbf{x})$, den Gesamtvektor der Knotenverschiebungen $\mathbf{u}_a(t)$ und den Gesamtvektor der virtuellen Knotenverschiebungen $\delta \mathbf{u}_a$. Der Gesamtvektor der Verschiebungen und der der virtuellen Verschiebungen kann formal in bekannte und unbekannte Größen partitioniert werden. Durch die Aufteilung

$$\mathbf{u}_a(t) = \begin{Bmatrix} \mathbf{u}(t) \\ \bar{\mathbf{u}}(t) \end{Bmatrix} \quad \text{und} \quad \delta \mathbf{u}_a = \begin{Bmatrix} \delta \mathbf{u} \\ \delta \bar{\mathbf{u}} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \delta \mathbf{u} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix}, \quad (5.6)$$

lässt sich der Verschiebungsansatz (5.2), mit $\mathbf{N}_a(\mathbf{x}) = [\mathbf{N}(\mathbf{x}) \quad \bar{\mathbf{N}}(\mathbf{x})]$ in die folgende Form

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}, t) = \mathbf{N}_a(\mathbf{x}) \mathbf{u}_a(t) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \mathbf{u}(t) + \bar{\mathbf{N}}(\mathbf{x}) \bar{\mathbf{u}}(t), \quad (5.7)$$

$$\delta \mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_a(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}_a = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}, \quad (5.8)$$

überführen. $\mathbf{u}(t)$ sind hierin die unbekanntes und $\bar{\mathbf{u}}(t)$ die bekannten, vorgegebenen Knotenverschiebungen. An den Dirichlet-Randflächen, an denen Knotenverschiebungen vorliegen, verschwinden die virtuellen Knotenverschiebungen, $\delta \bar{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$. Die übrigen virtuellen Knotenverschiebungen $\delta \mathbf{u}$ sind beliebig. Die Zuordnung der Elementknotenverschiebungen \mathbf{u}^e zu dem Vektor aller Knotenverschiebungen gelingt formal mittels der Koinzidenzmatrix \mathbf{Z}_a^e ,

$$\mathbf{u}^e = \mathbf{Z}_a^e \mathbf{u}_a = [\mathbf{Z}^e \quad \bar{\mathbf{Z}}^e] \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \bar{\mathbf{u}} \end{Bmatrix} = \mathbf{Z}^e \mathbf{u} + \bar{\mathbf{Z}}^e \bar{\mathbf{u}}, \quad (5.9)$$

die durch die Partitionierung in bekannte und unbekannte Verschiebungsfreiheitsgrade ebenfalls zerlegt wird. Die Koinzidenzmatrizen enthalten nur Nullen und Einsen und dienen der formalen Darstellung der lokal, d.h. in einem Element zugeordneten, Freiheitsgrade und der global aufsummierenden Matrizen, [Hartmann, 2003]. Die konkreten Zuordnungs- bzw. Implementierungsanweisungen, die durch die Koinzidenzmatrizen beschrieben werden, sind zum Beispiel in [Hughes, 2000] dargestellt.⁷

⁷Eine andere als die hier gewählte Notation der Assemblierungsanweisung in globale Matrizen ist zum Beispiel in [Wriggers, 2008] mit Hilfe von

$$\bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega_e} (\dots) d\Omega_e$$

angegeben.

In Analogie zu dem Verschiebungsfeld wird das generelle isoparametrische Elementkonzept auf das Temperaturfeld angewandt. Um für gekoppelte Feldprobleme eine monotone Konvergenz zu gewährleisten, dürfen die Ansatzfunktionen nicht unabhängig voneinander gewählt werden, [Altenbach et al., 1991] und [Gabbert, 1987]. Die gleiche Wahl der Ansatzfunktionen für das Verschiebungs- und Temperaturfeld genügt dieser Forderung. Mit den oben eingeführten Ansatzfunktionen bezüglich der Elementknoten lautet die Approximation des Temperaturfeldes

$$\begin{aligned}\theta(\mathbf{x}, t) &\approx \theta^h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{n_n} N_j(\mathbf{x}) \Theta_j(t) \\ &= \mathbf{N}_{\Theta_a}^T(\mathbf{x}) \Theta_a(t) = \mathbf{N}_{\Theta}^T(\mathbf{x}) \Theta(t) + \bar{\mathbf{N}}_{\Theta}^T(\mathbf{x}) \bar{\Theta}(t),\end{aligned}\quad (5.10)$$

sowie die der virtuellen Temperaturen

$$\begin{aligned}\delta\theta(\mathbf{x}) &\approx \delta\theta^h(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_n} N_j(\mathbf{x}) \delta\Theta_j \\ &= \mathbf{N}_{\Theta_a}^T(\mathbf{x}) \delta\Theta_a = \mathbf{N}_{\Theta}^T(\mathbf{x}) \delta\Theta.\end{aligned}\quad (5.11)$$

Hierbei wurde bereits die Aufteilung in unbekannte Θ und bekannte $\bar{\Theta}$ Knotentemperaturen vorgenommen, wobei die bekannten virtuellen Knotentemperaturen die Dirichlet Randbedingungen erfüllen, $\delta\bar{\Theta} = \mathbf{0}$.⁸ Die Anwendung des isoparametrischen Ansatzes ergibt ferner, dass die global definierten diskreten Temperaturen nach (5.10) und (5.11) mit den lokalen Knotentemperaturen des Elements übereinstimmen

$$\theta^h(\mathbf{x}, t) = \mathbf{N}_{\Theta_a}^T(\mathbf{x}) \Theta_a(t) = \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\varphi^e(\mathbf{x})) \theta^e, \quad (5.12)$$

$$\delta\theta^h(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_{\Theta_a}^T(\mathbf{x}) \delta\Theta_a = \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\varphi^e(\mathbf{x})) \delta\theta^e. \quad (5.13)$$

Auf Basis der definierten Ansatzfunktionen für das Verschiebungsfeld (5.7), (5.8) und das Temperaturfeld (5.10), (5.11) sowie der Berücksichtigung der Transformationseigenschaften (5.4), (5.5) und (5.12), (5.13) gelingt die Herleitung der diskreten Form des Gleichgewichtsbedingung (4.23) in einer Matrixnotation worin die Symmetrie der tensoriellen kinetischen und kinematischen Größen ausgenutzt wird, siehe [Hartmann, 2003]. Es führt zu der approximierten Form

$$\pi_M(\mathbf{u}, \theta, \mathbf{q}, \delta\mathbf{u}, t) \longrightarrow \pi_M^h(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, \delta\mathbf{u}, t), \quad (5.14)$$

⁸Trotz der Wahl gleicher Ansatzfunktionen für das Verschiebungs- und Temperaturfeld unterscheidet sich die Matrix der Ansatzfunktionen $\mathbf{N}_{\Theta_a} = [\mathbf{N}_{\Theta} \quad \bar{\mathbf{N}}_{\Theta}]$ der Knotentemperaturen von denen der Knotenverschiebungen \mathbf{N}_a aufgrund der Dimension. Daher sind diese mit dem Index Θ gekennzeichnet.

mit

$$\pi_M^h(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, \delta \mathbf{u}, t) = \delta \mathbf{u}^T \left\{ \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \left\{ \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^{eT}(\mathbf{x}) \mathbf{S}^e(\mathbf{x}, t) d\Omega_e - \int_{\Omega_e} \mathbf{N}^{eT}(\mathbf{x}) \varrho(\mathbf{x}) \mathbf{k}^e d\Omega_e - \int_{\Gamma_e} \mathbf{N}^{eT}(\mathbf{x}) \mathbf{t}^e(\mathbf{x}, t) d\Gamma_e \right\} \right\} = 0. \quad (5.15)$$

Die Matrix \mathbf{B}^e resultiert aus der Diskretisierung des Operators $\text{grad } \delta \mathbf{u}$. Es repräsentiert die Ableitung der Ansatzfunktionen nach den räumlichen Koordinaten und hat für eine drei dimensionale Formulierung die Gestalt

$$\mathbf{B}^e(\varphi^e(\mathbf{x})) = [\mathbf{B}_1^e \dots \mathbf{B}_{n_{en}}^e] \in \mathbb{R}^{6 \times 3n_{en}} \quad (5.16)$$

mit

$$\mathbf{B}_a^e(\varphi^e(\mathbf{x})) = \begin{bmatrix} n_{a,x}^e & 0 & 0 \\ 0 & n_{a,y}^e & 0 \\ 0 & 0 & n_{a,z}^e \\ n_{a,y}^e & n_{a,x}^e & 0 \\ 0 & n_{a,z}^e & n_{a,y}^e \\ n_{a,z}^e & 0 & n_{a,x}^e \end{bmatrix}, \quad a = 1, \dots, n_{en} \quad (5.17)$$

worin $n_a^e(\xi)$ die im Referenzelement Ω_\square am Knoten a definierten Ansatzfunktion darstellt.⁹ n_{en} entspricht der Anzahl der Knoten eines Elements. Die Formulierung der diskreten Form der Gleichgewichtsbedingung in Größen der Referenzkonfiguration erfolgt durch den Operator $[\mathbf{F} \otimes \mathbf{F}]^{T_{23}}$, der in der Matrixnotation folglich

$$\mathbf{F}_{23}^e = \begin{bmatrix} f_{11}f_{11} & f_{12}f_{12} & f_{13}f_{13} & 2f_{11}f_{12} & 2f_{12}f_{13} & 2f_{13}f_{11} \\ f_{21}f_{21} & f_{22}f_{22} & f_{23}f_{23} & 2f_{21}f_{22} & 2f_{22}f_{23} & 2f_{23}f_{21} \\ f_{31}f_{31} & f_{32}f_{32} & f_{33}f_{33} & 2f_{31}f_{32} & 2f_{32}f_{33} & 2f_{33}f_{31} \\ f_{11}f_{21} & f_{12}f_{22} & f_{13}f_{23} & f_{11}f_{22} + f_{12}f_{21} & f_{12}f_{23} + f_{13}f_{22} & f_{13}f_{21} + f_{11}f_{23} \\ f_{21}f_{31} & f_{22}f_{32} & f_{23}f_{33} & f_{21}f_{32} + f_{22}f_{31} & f_{22}f_{33} + f_{23}f_{32} & f_{23}f_{31} + f_{21}f_{33} \\ f_{31}f_{11} & f_{32}f_{12} & f_{33}f_{13} & f_{31}f_{12} + f_{32}f_{11} & f_{32}f_{13} + f_{33}f_{12} & f_{33}f_{11} + f_{31}f_{13} \end{bmatrix}, \quad (5.18)$$

angegeben werden kann, siehe [Hartmann, 2003]. Hierin sind $f_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{F} \mathbf{e}_j$ die Komponenten des Deformationsgradienten. Mit (5.18) gelingt die materielle Formulierung von (5.15), die wiederum in einer Matrixnotation, angeben wird:¹⁰

$$\pi_M^h(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, \delta \mathbf{u}) = \delta \mathbf{u}^T \left\{ \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^{eT}(\mathbf{X}) \mathbf{F}_{23}^e \tilde{\mathbf{T}}^e(\mathbf{X}, t) d\Omega_e - \bar{\mathbf{p}}^e(\mathbf{X}, t) \right\} = 0, \quad (5.19)$$

⁹Die Gestalt der Matrix \mathbf{B}^e in räumlichen Größen entspricht der Verzerrungs-Verschiebungsmatrix der geometrisch linearen Theorie.

¹⁰Für eine generelle tensorielle Notation der schwachen Formulierung sei auf [Wriggers, 2008] verwiesen.

worin die volumenhaft und die auf der Oberfläche flächenhaft angreifenden Lasten in dem Vektor

$$\bar{\mathbf{p}}^e(\mathbf{X}, t) := \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \left\{ \int_{\Omega_e} \mathbf{N}^{eT}(\mathbf{X}) \varrho(\mathbf{X}) \mathbf{k}^e d\Omega_e + \int_{\Gamma_e} \mathbf{N}^{eT}(\mathbf{X}) \mathbf{t}^e(\mathbf{X}, t) d\Gamma_e \right\} \quad (5.20)$$

zusammen gefasst sind. Aufgrund der Beliebigkeit der Variation der Verschiebungen $\delta \mathbf{u}$ verschwindet der Klammerausdruck in (5.15) bzw. (5.19) und es resultiert ein System von nichtlinearen algebraischen Gleichungen $\pi_M^h(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, \delta \mathbf{u}, t) \rightarrow \mathbf{g}(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t)$ mit

$$\mathbf{g}(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t) = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^{eT}(\mathbf{x}) \mathbf{S}^e(\mathbf{x}, t) d\Omega_e - \bar{\mathbf{p}}^e(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0}, \quad (5.21)$$

bzw.

$$\mathbf{g}(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t) = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^{eT}(\mathbf{X}) \mathbf{F}_{23}^e \tilde{\mathbf{T}}^e(\mathbf{X}, t) d\Omega_e - \bar{\mathbf{p}}^e(\mathbf{X}, t) = \mathbf{0}, \quad (5.22)$$

dessen Anzahl der Freiheitsgrade sich aus dem Produkt der Anzahl der Knoten der Struktur und der Anzahl der unbekanntenen Freiheitsgrade pro Knoten ergibt, $\mathbf{g} \in \mathbb{R}^{n_u}$.¹¹

Durch die Transformationseigenschaft der isoparametrischen Formulierung ergeben sich keine Unterschiede, wenn von der Referenz- oder Momentankonfiguration eines Elements auf das Einheitselement, das eine Referenzkonfiguration darstellt, die der Körper nie einnimmt, transformiert wird. Dies vereinfacht insbesondere die räumliche Formulierung des Kontinuumsproblems, da es völlig beliebig ist, ob von dem Referenzelement Ω_\square auf die Ausgangskonfiguration eines Prozesses oder auf die Momentankonfiguration transformiert wird. Die Abbildung eines Elements ist durch die kinematische Beziehung der Deformation definiert

$$\mathbf{F}^e = \mathbf{j}^e \mathbf{J}^{e-1}, \quad \text{mit} \quad J_e = \det \mathbf{F}^e = \frac{\det \mathbf{j}^e}{\det \mathbf{J}^e} \quad (5.23)$$

und ist in Abbildung 5.2 veranschaulicht.

Die 2. Piola-Kirchhoff Spannungen, die in (5.19) bzw. (5.22) aufgrund der Symmetrie als Spaltenvektor $\tilde{\mathbf{T}}^e := \{\tilde{t}_{11}, \tilde{t}_{22}, \tilde{t}_{33}, \tilde{t}_{12}, \tilde{t}_{23}, \tilde{t}_{13}\}^T$ formuliert werden und über den Push-Forward Operator in Relation zu den gewichteten Cauchy-Spannungen stehen $\mathbf{S}^e = \mathbf{F}_{23}^e \tilde{\mathbf{T}}^e$ sind über die Elastizitätsbeziehung definiert. Infolge der Approximation mittels den Ansatzfunktionen kann die Elastizitätsbeziehung in die diskrete Form

$$\tilde{\mathbf{T}}^e(\mathbf{X}, t) = \tilde{\Phi}^e(\mathbf{C}^e(\mathbf{X}, t), \theta^e(\mathbf{X}, t), \mathbf{q}^e(\mathbf{X}, t)), \quad (5.24)$$

¹¹Die Anzahl der Freiheitsgrade am Knoten der hier untersuchten Kontinuums-elemente ergibt sich aus den Verschiebungsfreiheitsgraden pro Knoten, die sich wiederum aus der Dimension des Problems ergeben, und den Temperaturfreiheitsgraden am Knoten, die den Wert 1 haben.

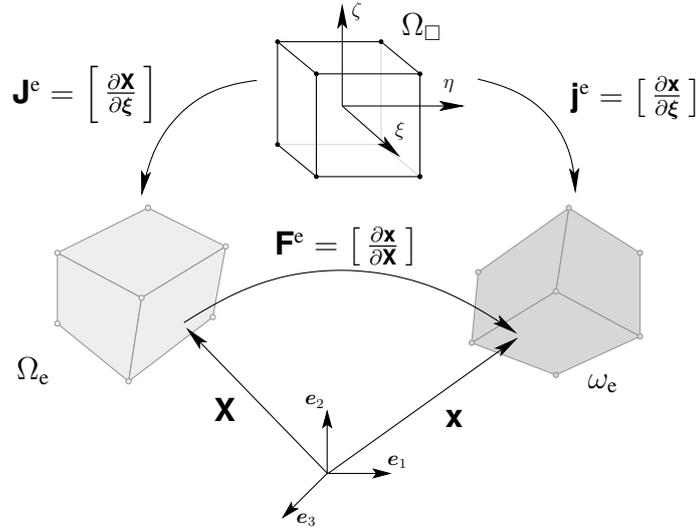


Abbildung 5.2.: Isoparametrische Abbildung der Deformation eines Elements

dargestellt werden. Hierin sind die abhängigen Größen ebenfalls über die Ansatzfunktion im Element an den diskreten Knoten definiert. Die erforderlichen Integrationen über den Elementbereich werden üblicherweise numerisch mittels einer Gauss-Quadratur ausgeführt, siehe hierzu [Dhatt and Touzot, 1985] oder [Schwarz and Köckler, 2004]. Dabei wird zunächst das Integral in den Parameterraum des Referenzelementes Ω_{\square} transformiert, [Burg et al., 2008]

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^{eT}(\mathbf{x}) \mathbf{S}^e(\mathbf{x}, t) d\Omega_e &= \int_{\Omega_{\square}} \mathbf{B}^{eT}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{S}^e(\boldsymbol{\xi}, t) \det \mathbf{j}^e(\boldsymbol{\xi}) d\Omega_{\square} \\ &= \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \mathbf{B}^{eT}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{S}^e(\boldsymbol{\xi}, t) \det \mathbf{j}^e(\boldsymbol{\xi}) d\xi d\eta d\zeta. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Hierbei ist $\det \mathbf{j}^e(\boldsymbol{\xi})$ die Determinante der Jacobi-Matrix der Koordinatentransformation, siehe Abbildung 5.2. Im Allgemeinen führt das Produkt im Integranden von (5.25) nicht auf ein Polynom sondern auf eine rationale Funktion, so dass eine numerische Integration als praktisch erscheint. Dies führt auf die Approximation

$$\int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \mathbf{B}^{eT}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{S}^e(\boldsymbol{\xi}, t) \det \mathbf{j}^e(\boldsymbol{\xi}) d\xi d\eta d\zeta \approx \sum_{k=1}^{n_{GP}} W_k \mathbf{B}^{eT}(\boldsymbol{\xi}_k) \mathbf{S}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t) \det \mathbf{j}^e(\boldsymbol{\xi}_k), \quad (5.26)$$

mit den Gauss-Punkt Koordinaten $\boldsymbol{\xi}_k = \{\xi, \eta, \zeta\}_k^T$, den Wichtungsfaktoren W_k sowie der Anzahl der Gausspunkte n_{GP} . Die Gauss-Quadratur hat sich im Rahmen der Finite-Elemente Methode aufgrund der Genauigkeit durchgesetzt: ein Polynom vom

Grad $p = 2n_{\text{GP}} - 1$ wird exakt integriert. Dies gilt allerdings im eindimensionalen Parameterraum. Die Integrationsformeln für den mehrdimensionalen Raum werden durch Produktansätze von den eindimensionalen Integrationsformeln hergeleitet. Es sei hier angemerkt, dass diese Vorgehensweise bezüglich des numerischen Aufwandes nicht effizient ist, hierzu sei auf die Diskussionen in [Hammer and Stroud, 1958], [Irons, 1971] und [Hellen, 1972] verwiesen.

In (5.24) müssen die inneren Variablen im Element bestimmt werden. Aufgrund der Gauss-Quadratur werden diese an den räumlichen Integrationspunkten berechnet, indem die Evolutionsgleichungen (4.4) an den Quadraturpunkten mittels

$$\dot{\mathbf{q}}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t) = \tilde{\mathbf{r}}^e(\mathbf{C}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t), \boldsymbol{\theta}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t), \mathbf{q}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t), t), \quad (5.27)$$

ausgewertet werden. Formal können die Differentialgleichungen und damit alle inneren Variablen von allen Quadraturpunkten in einem globalen Vektor $\mathbf{q}(t)$ der Dimension n_Q angeordnet werden, die sich aus dem Produkt der Anzahl aller Integrationspunkte $n_e \times n_{\text{GP}}$ und der Anzahl der inneren Variablen im Element n_q ergibt,¹² siehe Abbildung 5.3.

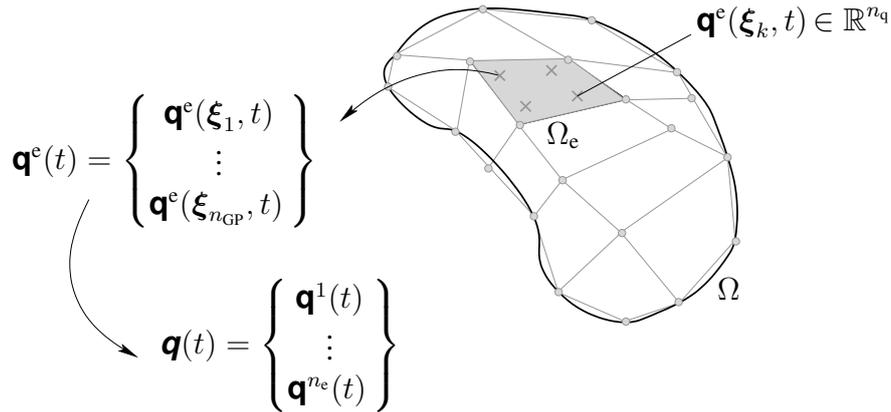


Abbildung 5.3.: Schematische Darstellung der Assemblierung aller inneren Variablen $\mathbf{q}(t) \in \mathbb{R}^{n_Q}$ eines Gebiets Ω

In Analogie zu den Koinzidenzmatrizen für die Elementknotenverschiebungen wird eine Zuordnung der Form

$$\mathbf{q}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t) = \mathbf{Z}_{qk}^e \mathbf{q}(t), \quad \mathbf{q}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t) \in \mathbb{R}^{n_q} \quad (5.28)$$

mit der Koinzidenzmatrix $\mathbf{Z}_{qk}^e \in \mathbb{R}^{n_q \times n_Q}$ für die n_q inneren Variablen am Gauss-Punkt $\boldsymbol{\xi}_k$ im Element e eingeführt.¹³ Da alle inneren Variablen und deren Evolutionsgleichungen

¹²D.h. es gilt $n_Q = n_e \times n_{\text{GP}} \times n_q$

¹³Die hier gewählte Notation der Koinzidenzmatrix stellt die Auswertung von \mathbf{Z}_q^e am Gauss-Punkt $\boldsymbol{\xi}_k$ dar:

$$\mathbf{Z}_{qk}^e = \mathbf{Z}_q^e|_{\boldsymbol{\xi}_k}$$

5. Konsistente Raum- Zeitdiskretisierung

von Gauss-Punkt zu Gauss-Punkt entkoppelt sind, gilt umgekehrt, [Hartmann, 2003]

$$\mathbf{q}(t) = \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{k=1}^{n_{GP}} \mathbf{z}_{qk}^{eT} \mathbf{q}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t), \quad (5.29)$$

womit die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen (5.27), die am Gausspunkt ausgewertet werden, formal zu einem globalen System von gewöhnlichen Differentialgleichungen zusammengefasst werden können

$$\dot{\mathbf{q}}(t) - \mathbf{r}(t, \mathbf{u}(t), \boldsymbol{\Theta}(t), \mathbf{q}(t)) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{q}(t) \in \mathbb{R}^{n_q}, \quad (5.30)$$

das aufgrund der konstitutiven Gleichungen nichtlinear von den Verschiebungen und dem Temperaturfeld abhängt. Das Temperaturfeld wird mittels der Diskretisierung der schwachen Form der Wärmeleitungsgleichung (4.42) bestimmt. Entsprechend dem Verschiebungsfeld wird mit Einführung der Ansatzfunktionen (5.10) und (5.11) das Temperaturfeld im diskreten Lösungsraum approximiert,

$$\pi_{\Theta}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \theta, \dot{\theta}, \mathbf{q}, \delta\theta, t) \longrightarrow \pi_{\Theta}^h(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\Theta}, \dot{\boldsymbol{\Theta}}, \mathbf{q}, \delta\boldsymbol{\Theta}, t), \quad (5.31)$$

wodurch die diskrete Form von (4.42) angegeben werden kann

$$\begin{aligned} \pi_{\Theta}^h(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\Theta}, \dot{\boldsymbol{\Theta}}, \mathbf{q}, \delta\boldsymbol{\Theta}, t) = \\ \delta \boldsymbol{\Theta}_a^T \left\{ \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \left\{ \int_{\Omega_e} \varrho(\mathbf{x}) c_p^h \mathbf{N}_{\Theta}^e(\mathbf{x}) \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\mathbf{x}) d\Omega_e \dot{\boldsymbol{\theta}}^e + \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_{\Theta}^{eT}(\mathbf{x}) \kappa^h \mathbf{B}_{\Theta}^e(\mathbf{x}) d\Omega_e \boldsymbol{\theta} \right. \right. \\ \left. \left. + \int_{\Gamma_e} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{N}_{\Theta}^e d\Gamma_e - \int_{\Omega_e} \varrho(\mathbf{x}) (p^h + r^h + \delta^h) \mathbf{N}_{\Theta}^e d\Omega_e \right\} \right\} = 0. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Der Gradient des Temperaturfeldes und der virtuellen Temperaturen wird ähnlich wie (5.16) durch die Matrix

$$\mathbf{B}_{\Theta}^e(\boldsymbol{\varphi}^e(\mathbf{x})) = [\mathbf{B}_{\Theta_1}^e \dots \mathbf{B}_{\Theta_{n_{en}}}^e] \in \mathbb{R}^{3 \times n_{en}} \quad (5.33)$$

approximiert. In dieser sind die Ableitungen der Ansatzfunktion nach den räumlichen Koordinaten $n_a^e(\boldsymbol{\xi})$ im Referenzelement Ω_{\square} am Knoten a , die durch den Vektor

$$\mathbf{B}_{\Theta_a}^e(\boldsymbol{\varphi}^e(\mathbf{x})) = \begin{Bmatrix} n_{a,x}^e \\ n_{a,y}^e \\ n_{a,z}^e \end{Bmatrix}, \quad a = 1, \dots, n_{en} \quad (5.34)$$

dargestellt werden, zusammengefasst. Die mit $(\cdot)^h$ indizierten Größen stellen Näherungen der entsprechenden Größen dar und sind von den diskreten Verschiebungen

und Temperaturen abhängig. Wegen der Beliebigkeit der virtuellen Temperaturen müssen die Ausdrücke der geschweiften Klammer verschwinden. Es resultiert ein System von gewöhnlichen Differentialgleichung 1. Ordnung zur Beschreibung der Temperaturevolution

$$\mathbf{C}_p(t, \mathbf{u}(t), \boldsymbol{\Theta}(t)) \dot{\boldsymbol{\Theta}}_a(t) = \mathbf{r}_{\Theta_a}(t, \mathbf{u}(t), \dot{\mathbf{u}}(t), \boldsymbol{\Theta}(t), \mathbf{q}(t)). \quad (5.35)$$

Hierin ist die Wärmekapazitätsmatrix durch

$$\mathbf{C}_p(t, \mathbf{u}(t), \boldsymbol{\Theta}(t)) := \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \int_{\Omega_e} \varrho c_p^h \mathbf{N}_\Theta^e \mathbf{N}_\Theta^{eT} d\Omega_e, \quad (5.36)$$

abkürzend zusammengefasst, die aufgrund der Beziehung (3.110) für die Wärmekapazität mit $c_p^h = \hat{c}_p^h(t, \mathbf{u}(t), \boldsymbol{\Theta}(t))$ von den Knotenverschiebungen und -temperaturen abhängt. Mit der Annahme (3.112) reduziert sich die Abhängigkeit der Wärmekapazität und damit die der Wärmekapazitätsmatrix auf eine reine Temperaturabhängigkeit. Die rechte Seite von (5.35) ergibt sich aus den Integralen Ausdrücken von (5.32), die folgend zusammengefasst sind

$$\mathbf{r}_{\Theta_a}(t, \mathbf{u}(t), \dot{\mathbf{u}}(t), \boldsymbol{\Theta}(t), \mathbf{q}(t)) := -\mathbf{C}_\kappa \boldsymbol{\Theta}_a + \mathbf{R}_\Theta + \mathbf{R}_\Theta^{\text{ext}}, \quad (5.37)$$

mit der Matrix

$$\mathbf{C}_\kappa(t, \mathbf{u}(t), \boldsymbol{\Theta}(t)) := \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \int_{\Omega_e} \kappa^h \mathbf{B}_\Theta^{eT} \mathbf{B}_\Theta^e d\Omega_e, \quad (5.38)$$

die über die Konduktivität κ auch von den diskreten Temperaturwerten abhängen. Die restlichen beiden Terme ergeben sich aus

$$\mathbf{R}_\Theta(t, \mathbf{u}(t), \dot{\mathbf{u}}(t), \boldsymbol{\Theta}(t), \mathbf{q}(t)) := -\sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \int_{\Omega_e} \varrho (r^h + p^h + \delta^h) \mathbf{N}_\Theta^e d\Omega_e, \quad (5.39)$$

$$\mathbf{R}_\Theta^{\text{ext}}(t, \mathbf{u}(t), \boldsymbol{\Theta}(t)) := \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \int_{\Gamma_e} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{N}_\Theta^e d\Gamma_e. \quad (5.40)$$

Hierbei resultieren die Abhängigkeiten von \mathbf{R}_Θ aufgrund des thermoelastischen Koppungsterms $p^h = p^h(t, \mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\Theta})$ und aufgrund des Dissipationsterms $\delta^h = \delta^h(t, \mathbf{u}, \boldsymbol{\Theta}, \mathbf{q})$. Die Abhängigkeit von $\mathbf{R}_\Theta^{\text{ext}}$ basiert auf dem Cauchy'schen Wärmeflussvektor, der aufgrund der geometrischen Nichtlinearität ferner von den Verschiebungen abhängt.

Zusammenfassend ergeben sich aus der diskreten Form der Gleichgewichtsbedingung, der diskreten Form der Evolutionsgleichung der inneren Variablen und der Differentialgleichung der diskretisierten Wärmeleitungsgleichung ein DAE-System, siehe Tabelle (5.1). Eine detaillierte Erläuterung zum DAE-System und weitere Definitionen wie

Tabelle 5.1.: Semidiskretes System des thermomechanisch gekoppelten Problems

Zur Berechnung von $\mathbf{u}(t)$, $\Theta(t)$ und $\mathbf{q}(t)$ im Intervall $t \in [t_0, t_e]$ ist das semi-diskrete DAE-System vom Index 1		
$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{r}(t, \mathbf{u}(t), \Theta(t), \mathbf{q}(t)),$	$\mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0$	(5.30)
$\mathbf{C}_p \dot{\Theta}(t) = \mathbf{r}_\Theta(t, \mathbf{u}(t), \dot{\mathbf{u}}(t), \Theta(t), \mathbf{q}(t)),$	$\Theta(t_0) = \Theta_0$	(5.35)
$\mathbf{0} = \mathbf{g}(t, \mathbf{u}(t), \Theta(t), \mathbf{q}(t)),$	$\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0$	(5.21)
zu lösen.		

z.B. eines Index¹⁴ finden sich in [Hairer and Wanner, 1996] oder [Strehmel and Weiner, 1995]. Das in Tabelle 5.1 zusammengefasste DAE-System stellt ein semi-diskretisiertes System dar, das zur Berechnung der Knotenverschiebungen, der Knotentemperaturen und der inneren Variablen im Sinne der vertikalen Linienmethode noch in der Zeit diskretisiert werden muss.

5.2.2. Verschiebungs- und Temperatursteuerung

Die schwache Formulierung basierend auf dem Prinzip der virtuellen Verschiebungen bzw. virtuellen Temperaturen kann zur Berechnung der Lagerreaktionen und Wärmeströme nicht herangezogen werden, da die definierten Testfunktionen den geometrischen Randbedingungen genügen müssen. Zweckmäßigerweise sind andere Variationsformulierung heranzuziehen, wie beispielsweise die Methode der Lagrange-Multiplikatoren, siehe Anhang A.1.

Im diesem Sinne werden zur Berücksichtigung der geometrischen Randbedingungen an den Dirichlet-Rändern Zwangsbedingungen für die Knotenverschiebungen

$$\mathbf{c}_u(t, \mathbf{u}_a(t)) := \mathbf{Z}_u^T \mathbf{u}_a(t) - \bar{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{c}_u \in \mathbb{R}^{n_p} \quad (5.41)$$

mit der Zuordnungsmatrix

$$\mathbf{Z}_u := \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n_u \times n_p} \\ \mathbf{I}_{n_p} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Z}_u \in \mathbb{R}^{n_{\text{dof}} \times n_p}, \quad (5.42)$$

eingeführt. $\bar{\mathbf{u}}(t) \in \mathbb{R}^{n_p}$ ist erneut der Vektor der vorgegebenen und $\mathbf{u}_a(t) \in \mathbb{R}^{n_{\text{dof}}}$ der Vektor aller Verschiebungsfreiheitsgrade. Alle Einträge in $\mathbf{u}_a(t)$ werden als unbekannt be-

¹⁴Als differentiellen Index bezeichnet man die kleinste Zahl k für die das DAE-System durch algebraischen Umformungen in ein explizites, gewöhnliches Differentialgleichungssystem überführt werden kann, [Fritzen, 1997].

handelt und in die Anteile

$$\mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^{n_u} \wedge \hat{\mathbf{u}}(t) \in \mathbb{R}^{n_p}, \quad \text{mit } \mathbf{u}_a = \{\mathbf{u}(t) \ \hat{\mathbf{u}}(t)\}^T, \quad (5.43)$$

zerlegt. $\hat{\mathbf{u}}$ sind die Verschiebungsfreiheitsgrade an den Dirichlet-Rändern mit den geometrischen Randbedingungen und werden als unbekannt behandelt. Die Anwendung der Zwangsbedingung auf die Variationsformulierung (5.15) liefert nach der Methode der Lagrange-Multiplikatoren, [Hartmann et al., 2008b]

$$\begin{aligned} \pi_M(t, \mathbf{u}_a, \delta \mathbf{u}_a, \Theta_a, \mathbf{q}, \lambda_u) &= \delta \mathbf{u}_a^T \mathbf{g}_a(t, \mathbf{u}_a(t), \Theta_a(t), \mathbf{q}(t)) + \lambda_u^T(t) \mathbf{Z}_u^T \delta \mathbf{u}_a \\ &= \delta \mathbf{u}_a^T \{\mathbf{g}_a(t, \mathbf{u}_a(t), \Theta_a(t), \mathbf{q}(t)) + \mathbf{Z}_u \lambda_u(t)\} = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Die Unbekannten stellen alle Knotenverschiebungen $\mathbf{u}_a \in \mathbb{R}^{n_{\text{dof}}}$ und die Lagrange-Multiplikatoren $\lambda_u(t) \in \mathbb{R}^{n_p}$ dar. Die Gleichung (5.44) muss für beliebige virtuelle Verschiebungen $\delta \mathbf{u}_a \in \mathbb{R}^{n_{\text{dof}}}$ gelten, womit der Ausdruck in der Klammer identisch Null sein muss und zu der algebraischen Gleichung

$$\mathbf{g}_a(t, \mathbf{u}_a(t), \Theta_a(t), \mathbf{q}(t)) + \mathbf{Z}_u \lambda_u(t) = \mathbf{0}, \quad (5.45)$$

führt.

In Analogie zu (5.41) wird zur Bestimmung der Wärmeströme die Zwangsbedingung

$$\mathbf{c}_\Theta(t, \Theta_a(t)) := \mathbf{Z}_\Theta^T \Theta_a(t) - \bar{\Theta}(t) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{c}_\Theta \in \mathbb{R}^{\hat{n}_p}, \quad (5.46)$$

eingeführt und entsprechend der Aufteilung der Knotenverschiebungen nach (5.43) wird eine gleichartige Zerlegung der Knotentemperaturen in $\Theta_a(t) = \{\Theta(t) \ \hat{\Theta}(t)\}^T$ vorgenommen. Nach der Methode der Lagrange-Multiplikatoren gelangt man durch die Einbindung der Zwangsbedingung in die schwache Formulierung der Wärmeleitungsgleichung und der Betrachtung der Aussagen aus [Gear, 1986] auf die Variationsgleichung

$$\begin{aligned} \pi_\Theta(t, \mathbf{u}_a, \dot{\mathbf{u}}_a, \Theta_a, \delta \Theta_a, \mathbf{q}, \lambda_\Theta) &= \\ \delta \Theta_a^T \{\mathbf{C}_{p_a} \dot{\Theta}_a(t) - (\mathbf{r}_{\Theta_a}(t, \mathbf{u}_a(t), \dot{\mathbf{u}}_a(t), \Theta_a(t), \mathbf{q}(t)) + \mathbf{Z}_\Theta \lambda_\Theta(t))\} &= \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (5.47)$$

die für beliebige virtuelle Temperaturen $\delta \Theta_a^T$ verschwinden muss, d.h. es resultiert die Differentialgleichung

$$\mathbf{C}_{p_a} \dot{\Theta}_a(t) = \mathbf{r}_{\Theta_a}(t, \mathbf{u}_a(t), \dot{\mathbf{u}}_a(t), \Theta_a(t), \mathbf{q}(t)) + \mathbf{Z}_\Theta \lambda_\Theta(t), \quad (5.48)$$

zur Berechnung der unbekannt Knotentemperaturen $\Theta_a(t) \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{dof}}}$ und den Lagrange-Multiplikatoren $\lambda_\Theta(t) \in \mathbb{R}^{\hat{n}_p}$. Werden alle Gleichungen zusammengefasst, entsteht ein DAE-System, siehe Tabelle 5.2, dessen Lösung neben den primären Variablen zusätzlich die Lagrange-Multiplikatoren liefert, die als Reaktionskräfte bzw. Wärmeströme interpretiert werden können. In [Hartmann et al., 2008b] wird eine Vorgehensweise, basierend auf einem DIRK/MLNA Ansatz, zur Lösung des rein isothermen Falls vorgestellt. Die Übertragung auf eine iterationsfreie Vorgehensweise für thermomechanisch gekoppelte Problemstellungen wird in Abschnitt 5.3 dargestellt.

Tabelle 5.2.: Erweiterung des DAE-Systems für die Berechnung der Lagrange-Multiplikatoren

Zur Berechnung von $\mathbf{u}_a(t)$, $\Theta_a(t)$, $\mathbf{q}(t)$ sowie $\lambda(t) = \{\lambda_u(t) \ \lambda_\Theta\}^T$ im Intervall $t \in [t_0, t_e]$ und den Anfangsbedingungen \mathbf{u}_{a0}, Θ_{a0}, \mathbf{q}_0 ist das DAE-System	
$\mathbf{0} = \dot{\mathbf{q}}(t) - \mathbf{r}(t, \mathbf{u}_a(t), \Theta_a(t), \mathbf{q}(t)),$	(5.30)
$\mathbf{0} = \mathbf{C}_{pa} \dot{\Theta}_a(t) - \mathbf{r}_{\Theta a}(t, \mathbf{u}_a(t), \dot{\mathbf{u}}_a(t), \Theta_a(t), \mathbf{q}(t)) + \mathbf{Z}_\Theta \lambda_\Theta(t),$	(5.48)
$\mathbf{0} = \mathbf{g}_a(t, \mathbf{u}_a(t), \Theta_a(t), \mathbf{q}(t)) + \mathbf{Z}_u \lambda_u(t),$	(5.45)
$\mathbf{0} = \mathbf{Z}_u^T \mathbf{u}_a(t) - \bar{\mathbf{u}}(t),$	(5.41)
$\mathbf{0} = \mathbf{Z}_\Theta^T \Theta_a(t) - \bar{\Theta}(t),$	(5.46)
zu lösen, die in eine implizite Form	
$\mathbf{F}(t, \mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) = \mathbf{0}, \quad \text{mit} \quad \mathbf{y}(t) = \{\mathbf{u}_a(t), \Theta_a(t), \lambda(t), \mathbf{q}(t)\}^T,$	
überführt werden kann.	

5.2.3. Gemischte Elementformulierung

Die gemischte Elementformulierung basiert auf dem in Abschnitt 4.2.2 vorgestellten Dreifeldfunktional, das wiederum aus dem Hu-Washizu Funktional abgeleitet ist, siehe hierzu [Wriggers, 2008]. Bei dieser Formulierung wird ein linearer oder quadratischer Ansatz für das Verschiebungsfeld gewählt. Zudem werden die volumetrischen Größen (der Druck und die Volumendehnung) durch einen konstanten bzw. linearen Ansatz innerhalb der Dreifeld-Formulierung beschrieben. Neben den Ansatzfunktionen für das Verschiebungsfeld und dem Temperaturfeld erfordert dies die Einführung von Ansatzfunktionen für die Volumendehnung $\Gamma(\mathbf{x}, t)$ und dem hydrostatischen Druck $\lambda_p(\mathbf{x}, t)$ sowie deren Variationen. Im Kontext zur isoparametrischen Formulierung werden die Ansätze

$$\Gamma^h(\mathbf{x}, t) = \check{\mathbf{N}}^T(\mathbf{x}) \Gamma(t), \quad \delta \Gamma^h(\mathbf{x}) = \check{\mathbf{N}}^T(\mathbf{x}) \delta \Gamma, \quad (5.49)$$

$$\lambda_p^h(\mathbf{x}, t) = \check{\mathbf{N}}^T(\mathbf{x}) \lambda_p(t), \quad \delta \lambda_p^h(\mathbf{x}, t) = \check{\mathbf{N}}^T(\mathbf{x}) \delta \lambda_p, \quad (5.50)$$

gewählt. Analog zu (5.7) und (5.8) gilt weiterhin

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}, t) = \mathbf{N}(\mathbf{x})\mathbf{u}(t) + \bar{\mathbf{N}}(\mathbf{x})\bar{\mathbf{u}}(t), \quad (5.51)$$

$$\delta\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \mathbf{N}(\mathbf{x})\delta\mathbf{u}. \quad (5.52)$$

$\bar{\mathbf{N}}(\mathbf{x})\bar{\mathbf{u}}(t)$ genügt wieder den geometrischen und $\mathbf{N}(\mathbf{x})\mathbf{u}(t)$ den homogenisierten wesentlichen Randbedingungen. Die Ansatzfunktionen für den Druck und die Volumendehnung müssen keinen Randbedingungen genügen. n_Γ definiert dabei die Anzahl der Druck- bzw. Volumendehnungsfreiheitsgrade. $\Gamma(t)$, $\lambda_p(t)$, $\delta\Gamma(t)$, $\delta\lambda_p(t) \in \mathbb{R}^{n_\Gamma}$ stellen die diskreten Größen der Volumendehnung und des Druckes sowie deren virtuelle Größen der gesamten Struktur dar. Ein Einsetzen der Ansätze (5.49) und (5.50) in (4.32) liefert zunächst

$$\delta\Gamma^T \left\{ \int_{\Omega} \check{\mathbf{N}} \left(\frac{\varrho_R}{\theta_0} \frac{\theta^h}{\varphi^h} U' \left(\frac{\check{\mathbf{N}}^T \Gamma}{\varphi^h} \right) - \check{\mathbf{N}}^T \lambda_p \right) d\Omega \right\} = 0, \quad (5.53)$$

d.h. für beliebige virtuelle Volumendehnungen $\delta\Gamma$ muss

$$\lambda_p(t) = \mathbf{H}^{-1} \mathbf{s}_p(\Gamma(t)), \quad \text{bzw.} \quad \lambda_p^h(\mathbf{X}, t) = \check{\mathbf{N}}^T(\mathbf{X}) \mathbf{H}^{-1} \mathbf{s}_p(\Gamma(t)), \quad (5.54)$$

mit

$$\mathbf{H} = \int_{\Omega} \check{\mathbf{N}} \check{\mathbf{N}}^T d\Omega, \quad \text{und} \quad \mathbf{s}_p(\Gamma) = \int_{\Omega} \frac{\varrho_R}{\theta_0} \frac{\theta^h}{\varphi^h} U' \left(\frac{\Gamma^h}{\varphi^h} \right) \check{\mathbf{N}} d\Omega, \quad (5.55)$$

gelten. Dabei berechnet sich θ^h aus (5.12) und es gilt $\varphi^h = \varphi^h(\theta^h)$ sowie $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{n_\Gamma \times n_\Gamma}$ und $\mathbf{s}_p \in \mathbb{R}^{n_\Gamma}$. Entsprechend führt das Einsetzen der Ansatzfunktionen in (4.33) auf

$$\delta\lambda_p^T \left\{ \int_{\Omega} \check{\mathbf{N}} \left(J - \check{\mathbf{N}}^T \Gamma \right) d\Omega \right\} = 0, \quad (5.56)$$

und somit bei beliebigem $\delta\lambda_p$ auf

$$\Gamma(\mathbf{u}_a(t)) = \mathbf{H}^{-1} \mathbf{s}_\Gamma(\mathbf{u}_a(t)) \quad \text{bzw.} \quad \Gamma^h(\mathbf{X}, t) = \check{\mathbf{N}}^T(\mathbf{X}) \mathbf{H}^{-1} \mathbf{s}_\Gamma \quad (5.57)$$

mit

$$\mathbf{s}_\Gamma(\mathbf{u}_a(t)) = \int_{\Omega} J(\mathbf{u}_a(t)) \check{\mathbf{N}} d\Omega. \quad (5.58)$$

Mit den Beziehungen aus (5.54) und (5.57) ist es ersichtlich, dass der Druck und die Volumendehnung sich in Abhängigkeit der Verschiebungen darstellen lassen und damit eliminierbar sind. Das Einsetzen dieser Schlussfolgerung in die Gleichgewichtsbedingung (4.31) bzw. (4.36) liefert

$$\mathbf{g}(t, \mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}) = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \left\{ \mathbf{S}^D + J \check{\mathbf{N}}^T \mathbf{H}^{-1} \mathbf{s}_p \mathbf{e} \right\} d\Omega - \bar{\mathbf{p}}(t) = \mathbf{0}. \quad (5.59)$$

In der hier vorgestellten Matrixnotation sind die Cauchy-Spannungen aufgrund der Symmetrie als Spaltenvektoren $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^6$ dargestellt und der Einheitstensor 2. Stufe ist durch den Vektor $\mathbf{e} = \{1 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0\}^T$ gegeben.

Durch die Elimination der Volumendehnungs- und Druckfreiheitsgrade entsteht aus der Diskretisierung infolge der gemischten Elemente erneut ein nicht-lineares Gleichungssystem zur Berechnung der unbekanntenen Knotenverschiebungen $\mathbf{u}(t)$, das im Fall der thermomechanisch gekoppelten Problemstellung und dem nichtlinearen Materialmodell zusätzlich von den diskreten Knotentemperaturen $\Theta(t)$ und den inneren Variablen $\mathbf{q}(t)$ abhängt. Zur Berechnung der Knotentemperaturen wird die diskrete Wärmeleitungsgleichung herangezogen. Im Rahmen der Diskretisierung ist die additive Zerlegung des Spannungszustandes in einen deviatorischen Anteil und einen Kugelanteil, die aus der gemischten Elementformulierung resultieren, zu berücksichtigen. Diese Zerlegung wirkt über die Relation (3.115) auf die lokale Formulierung des thermo-elastischen Kopplungsterms, siehe Abschnitt 5.3.3.

Aus dem gemischten Diskretisierungsansatz resultiert erneut, analog zu der Diskretisierung mittels der isoparametrischen Elemente, ein DAE-System gemäß Tabelle 5.1 bzw. Tabelle 5.2. Eine detaillierte Darstellung der gemischten Elementformulierung für den rein isothermen Fall ist in [Hartmann, 2003] gegeben.

5.3. Zeitdiskretisierung mittels Rosenbrock Verfahren

Der nachfolgende Schritt der bisher beschriebenen Raumdiskretisierung mit Hilfe der Finite-Elemente Methode stellt die Zeitdiskretisierung des DAE-Systems, siehe Tabelle 5.2, dar. Der numerischen Integration von DAE-Systemen wurde in den letzten Jahrzehnten innerhalb der numerischen Mathematik große Aufmerksamkeit gewidmet. In den Standardwerken [Hairer et al., 1993] und [Hairer and Wanner, 1996] werden Verfahren für Differentialgleichungssysteme mit unterschiedlichen Eigenschaften und für DAE-Systeme intensiv behandelt. Aus der deutschsprachigen Literatur ist z.B. das Buch von Strehmel and Weiner [1995] zu nennen, das einen umfassenden Überblick zur diesem Thema gibt.

Ein wesentlicher, positiver Aspekt einer Semidiskretisierung liegt darin begründet, dass zunächst die gesamte Vielfalt an numerischen Integrationsverfahren zur Verfügung steht. Um jedoch eine Aussage über die Eignung spezieller Verfahren zu treffen, sind eine Analyse der Eigenschaften des semidiskreten Systems und insbesondere die Kenntnis der Struktur der konstitutiven Gleichungen sehr hilfreich. Insbesondere die spezielle Eigenschaft der Steifheit und eine starke Nichtlinearität der konstitutiven Gleichungen sind hervorzuheben, die die Auswahl der geeigneten Zeitintegrationsverfahren deutlich einschränken und zu einem erheblichen numerischen Aufwand führen können, [Hairer et al., 1989b].

Der Begriff der Steifheit ist dabei in einem mathematisch exakten Sinne kaum zu fassen. Vielmehr lässt er sich in einem qualitativen Sinn phänomenologisch beschreiben, was in der Literatur durchaus unterschiedlich geschieht. Eine mögliche Charakterisierung der Steifheit wurde von Dekker and Verwer [1984] angegeben. Eine wesentliche Eigenschaft steifer Systeme ist die Existenz von glatten und von transienten Lösungskomponenten,¹⁵ die sehr schnell gedämpft werden. Diese transienten Komponenten können bei der praktischen Berechnung große Schwierigkeiten bereiten, da sie in der Lösung außerhalb einer transienten Phase numerisch nicht präsent sind, aber dennoch oftmals die Stabilitätseigenschaften des Verfahrens bestimmen. Insbesondere bei expliziten Verfahren führt dies zu äußerst starken Restriktionen der Schrittweiten. Vor allem wenn an die numerische Näherungslösung keine hohen Genauigkeitsanforderungen gestellt wird und die Schrittweitenbeschränkung ausschließlich aus Gründen der Stabilitätsprobleme besteht, ist dieser numerische Aufwand in der praktischen Anwendung nicht akzeptabel. Durch implizite Verfahren können diese Restriktionen ausgeschlossen werden, wodurch sich allerdings der Aufwand auf die nun zu lösenden nichtlinearen Gleichungssysteme verlagert.

In den letzten Jahren sind viele Anstrengungen unternommen worden, geeignete Verfahren zur Lösung steifer Differentialgleichungs- und DAE-Systeme, die als Grenzfall eines steifen Systems aufgefasst werden können,¹⁶ zu entwickeln. Als geeignete Verfahren für derartige Systeme, zeichneten sich besonders (implizite) Einschrittverfahren, die beispielsweise bei Problemstellungen der Plastizitäts- und Viskoplastizitätstheorie in den Arbeiten von Fritzen [1997], Ellsiepen [1999], Ellsiepen and Hartmann [2001], Hartmann [2002], Hartmann et al. [2008a] und Bier [2008] behandelt worden sind, aus. Grundsätzlich sind auch Mehrschrittverfahren – im steifen Fall also insbesondere BDF-Verfahren [Brenan et al., 1996] – bei Aufgabenstellungen aus dem Bereich der Plastizitätstheorie anwendbar. So werden etwa von Eckert et al. [2004] BDF-Verfahren, die sehr gute Stabilitätseigenschaften aufweisen, bei der Behandlung von Problemen der Elastoplastizität eingesetzt. Ihre Verwendung wird jedoch von Wittek [1991, S. 44] aus mehreren Gründen als problematisch beurteilt.¹⁷

Die bedeutendste Klasse der Einschrittverfahren zur numerischen Integration von steifen Systemen sind die impliziten Runge-Kutta Verfahren, welche in [Hairer and Wanner, 1996] bzw. [Strehmel and Weiner, 1995] umfangreich für steife Differentialgleichungen und DAE-Systeme behandelt werden. Sie zeichnen sich vor allem dadurch aus, dass

¹⁵Der Begriff "glatt" wird hier im Sinne geringer Variation gebraucht, wobei "transient" als stark variierend verstanden wird.

¹⁶Zwischen den Ergebnissen für steife Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen und DAE-Systemen besteht der Zusammenhang, dass viele Aussagen für DAE-Systeme sich aus den Ergebnissen für steife Systeme im Grenzfall eines unendlich großen Steifigkeitsparameters gewinnen lassen und umgekehrt, siehe [Hairer et al., 1988] und [Hairer et al., 1989b],

¹⁷Einschrittverfahren sind Zeitintegrationsverfahren, bei denen die numerische Lösung zur Zeit t_{n+1} lediglich aus der Lösung des vorhergehenden Zeitpunkts t_n abhängt. Mehrschrittverfahren benötigen hingegen bei der Berechnung des Zeitschritts von t_n nach t_{n+1} die numerische Lösung an zurückliegenden Zeitschritten t_{n-k} .

durch gewisse Freiheiten bei der Wahl der Parameter sehr verschiedene Methoden konstruiert werden können, die zu den behandelten Problemstellungen angepasst werden können. Implizite Verfahren bedürfen aufgrund der impliziten Struktur der Verfahrensvorschrift die Bereitstellung der Funktionalmatrix der zugrundeliegenden Funktion der Differentialgleichung oder eine Approximation derselben. Ihr Einsatz im Rahmen der numerischen Methoden kann erfolgen entweder

- durch die Behandlung der in impliziten Verfahrensvorschriften auftretenden nichtlinearen Gleichungssysteme mittels Newton-Iterationen,¹⁸
- oder durch eine direkte Einbeziehung in die Verfahrensvorschrift,

womit die linear-impliziten Runge-Kutta Verfahren hergeleitet werden. Im Rahmen dieser Arbeit werden linear-implizite Runge-Kutta Verfahren vom Rosenbrock-Typ, siehe [Rosenbrock, 1963], herangezogen. Sie verbinden gute Implementierbarkeit mit guten Stabilitätseigenschaften und erlauben zudem eine einfache Umsetzung einer Schrittweitenadaptivität. Im Gegensatz zu den impliziten Runge-Kutta Verfahren erfordern Rosenbrock-Typ Verfahren in jedem Integrationsschritt nur die Lösung linearer Gleichungssysteme. Dies führt zwar zu einem Verlust der B-Stabilität, welche bei impliziten Runge-Kutta Verfahren gilt, jedoch können Rosenbrock Typ Verfahren ein unbeschränktes Stabilitätsgebiet besitzen und A-stabil bzw. L-stabil sein.¹⁹ Eine nicht vorhandene B-Stabilität scheint jedoch nicht einschränkend in der Anwendbarkeit auf die hier behandelten Problemstellungen zu sein. Vor allem, wenn die Steifheit eines nichtlinearen Systems durch einen konstanten linearen Anteil hervorgerufen wird, können die guten Stabilitätseigenschaften erhalten bleiben und B-Konvergente Verfahren hergeleitet werden, siehe [Strehmel and Weiner, 1995]. Zudem wird der Nutzen der B-Stabilität von impliziten Runge-Kutta Verfahren erheblich eingeschränkt, da in einer praktischen Implementierung die auftretenden nichtlinearen Gleichungssysteme nicht exakt gelöst werden, womit die Eigenschaft der B-Stabilität verloren geht, [Wittekindt, 1991, S. 47].

Rosenbrock Verfahren sind in verschiedenen Fachbereichen an unterschiedlichen Anwendungsmöglichkeiten umgesetzt worden. Exemplarisch sind die Arbeiten von Wolfbrandt [1977], Roche [1988], Link [1991], Lang [2001] und Wensch [2003] erwähnt, die umfangreich die numerischen Eigenschaften unter verschiedenen Gesichtspunkten untersucht haben.

Die Verfahrensvorschrift der Rosenbrock-Verfahren werden im Allgemeinen an diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren hergeleitet, [Hairer and Wanner, 1996]. Die Darstellung ist zunächst noch nicht auf die spezielle Struktur der in dieser Arbeit auftretenden Gleichungen bezogen, sondern geht von allgemeinen Systemen aus. Sie werden erst an ein allgemeines Anfangswertproblem motiviert und anschließend in einem weiteren

¹⁸Dieses führt z.B. zu den impliziten Runge-Kutta Verfahren oder zu den BDF-Verfahren.

¹⁹In Bezug auf die Stabilitätstheorie von Integrationsverfahren für Differentialgleichungssysteme und DAE-Systeme, sowie deren Klassifizierung sei auf [Strehmel and Weiner, 1995] verwiesen.

Abschnitt auf die Gleichungen des aus der Finite-Elemente-Diskretisierung resultierenden DAE-Systems erweitert.

5.3.1. Herleitung der Verfahrensvorschrift

Diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren

Die Konstruktion der Verfahrensvorschrift von Rosenbrock-Verfahren, lässt sich anhand von diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren motivieren.

Die Herleitung der diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren erfolgt zunächst durch die Betrachtung eines Systems von gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. Ordnung

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0; \quad \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m, \quad t \in [0, T]. \quad (5.60)$$

Ein Runge-Kutta Verfahren approximiert die gesuchte Lösung $\mathbf{y}(t)$ des Anfangswertproblems (5.60) an den diskreten Stellen $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n < t_{n+1} < \dots < t_N = T$ mit den Zeitschritten $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$ für $n = 0, \dots, N - 1$. Für $n = 0$ gilt die Anfangsbedingung $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$. Die Verfahrensvorschrift zur Berechnung von $\mathbf{y}(t_{n+1})$ aus dem Wert $\mathbf{y}(t_n)$ lässt sich aus dem Hauptsatz der Integralrechnung gewinnen

$$\mathbf{y}(t_{n+1}) = \mathbf{y}(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \dot{\mathbf{y}}(t) dt = \mathbf{y}(t_n) + \Delta t_n \int_0^1 \dot{\mathbf{y}}(t_n + \tau \Delta t_n) d\tau, \quad (5.61)$$

wobei das Integral auf das Einheitsgebiet transformiert wird, $t = t_n + \tau \Delta t_n$. Ersetzt man die Ableitung $\dot{\mathbf{y}}(t)$ durch die Funktion $\mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t))$ aus (5.60), so ist ein Integral über die Funktion in (5.61) auszuwerten. Dies erfolgt näherungsweise mit Hilfe einer Quadraturformel

$$\mathbf{y}(t_{n+1}) \approx \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}(t_n + c_i \Delta t_n, \mathbf{y}(t_n + c_i \Delta t_n)), \quad (5.62)$$

mit den Wichtungsfaktoren b_i und den Stützstellen c_i für $i = 1, \dots, s$, der Quadraturformel sowie der Näherung $\mathbf{y}_n \approx \mathbf{y}(t_n)$. Die unbekanntenen Zwischenwerte $\mathbf{y}(t_n + c_i \Delta t_n)$ werden durch einen erneuten Integrationschritt mit einer weiteren Quadratur bestimmt

$$\mathbf{y}(t_n + c_i \Delta t_n) \approx \mathbf{Y}_{ni} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^s a_{ij} \mathbf{f}(t_n + c_j \Delta t_n, \mathbf{Y}_{nj}), \quad (5.63)$$

die als Stufenwerte \mathbf{Y}_{ni} bezeichnet werden. Dabei werden neue Wichtungsfaktoren a_{ij} eingeführt, jedoch die gleichen Stützstellen

$$T_{ni} = t_n + c_i \Delta t_n, \quad c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (5.64)$$

5. Konsistente Raum- Zeitdiskretisierung

gewählt. Der Ausdruck $\dot{\mathbf{Y}}_{nj} := \mathbf{f}(T_{nj}, \mathbf{Y}_{nj})$, der in der Summe aus (5.63) auftritt, wird als Stufenableitung bezeichnet. Die Stufenableitung ist aufgrund der eingeführten Quadratur eine diskrete Größe und stellt den diskreten Wert der Differentialgleichung (5.60) dar. Die Wichtungsfaktoren a_{ij} und b_i sowie die Stützstellen c_i werden üblicherweise in dem sogenannten Butcher-Array (5.65)

$$\begin{array}{c|cccc}
 c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} \\
 c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} \\
 \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\
 c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} \\
 \hline
 & b_1 & b_2 & \dots & b_s
 \end{array}
 \Leftrightarrow
 \begin{array}{c|c}
 \mathbf{c} & \mathbf{A} \\
 \hline
 & \mathbf{b}^T
 \end{array}
 \quad (5.65)$$

zusammengefasst, wodurch verschiedene Runge-Kutta Verfahren unterschieden werden. Vollimplizite Runge-Kutta Verfahren sind solche Verfahren, bei denen die obere Dreiecksmatrix der Wichtungsmatrix $[a_{ij}]$ mindestens einen von Null verschiedenen Koeffizienten enthält. Damit entsteht eine Kopplung aller Stufenwerte. Bei diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren muss die Bedingung $a_{ij} = 0$ für $j > i$ erfüllt werden. Im Fall der expliziten Runge-Kutta Verfahren, bei denen die Wichtungsmatrix eine strikte untere Dreiecksmatrix $a_{ij} = 0$ für $j \geq i$ repräsentiert, lassen sich die Stufenwerte \mathbf{Y}_{ni} für $i = 1, \dots, s$ und damit der neue Wert der Näherungslösung \mathbf{y}_{n+1} sukzessiv direkt bestimmen. Während für voll-implizite Verfahren diese Zwischenwerte als Lösung eines gekoppelten, nichtlinearen Gleichungssystems der Dimension $m \times s$ berechenbar sind, so sind bei diagonal-impliziten Verfahren s Lösungen eines nichtlinearen Gleichungssystems der Dimension m durchzuführen. In einer praktischen Umsetzung kann die numerische Berechnung solcher Systeme, besonders bei großen Dimensionen m , mit einem sehr hohen Aufwand verbunden sein, was das Hauptdefizit bei der Anwendung impliziter Runge-Kutta Verfahren ist.

Bei den im Folgenden betrachteten diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren läuft die Summe in (5.63) wegen $a_{ij} = 0$ für $j > i$ jeweils nur bis zur aktuellen Stufe i , so dass die Berechnung der Stufenwerte sich auf

$$\mathbf{Y}_{ni} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^i a_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj} + \Delta t_n a_{ii} \dot{\mathbf{Y}}_{ni}, \quad (5.66)$$

reduziert. Hierbei wird die Stufenableitung $\dot{\mathbf{Y}}_{ni} = \mathbf{f}(T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni})$ an dem aktuellen Stufenwert ausgewertet und der sogenannte Startvektor

$$\mathbf{S}_{ni} := \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj}, \quad (5.67)$$

eingeführt, welcher lediglich von bereits berechneten Stufenableitungen abhängt und damit in jeder Stufe i als bekannt vorausgesetzt werden kann. (5.66) stellt ein nichtlineares

Gleichungssystem zur Berechnung der Stufenwerte \mathbf{Y}_{ni} dar, welches zu den Stufenzeiten T_{ni} gelöst werden muss. Über die Lösung der nichtlinearen Gleichungen sind somit die Stufenableitungen aus (5.66) durch

$$\dot{\mathbf{Y}}_{ni} = \frac{\mathbf{Y}_{ni} - \mathbf{S}_{ni}}{\Delta t_n a_{ii}}, \quad i = 1, \dots, s \quad (5.68)$$

bestimmt. Die gesuchte Näherungslösung zum nächsten Zeitpunkt t_{n+1} (5.62) ergibt sich dann aus der Aufsummierung der Stufenableitungen

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}(t_n) + \Delta t_n \sum_{i=1}^s b_i \dot{\mathbf{Y}}_{ni}(T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}). \quad (5.69)$$

Mit der Einbeziehung einer steif-genauen Eigenschaft $a_{sj} = b_j$ nach Prothero and Robinson [1974] stimmt die neue Näherungslösung mit der Stufenlösung der letzten Stufe T_{ns} überein. Es gilt dann $\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{Y}_{ns}$.

Eine Verallgemeinerung der diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren für DAE-Systeme in der impliziten Form

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) = \mathbf{0}, \quad (5.70)$$

gemäß Tabelle 5.1 bzw. Tabelle 5.2 führt auf das nichtlineare Gleichungssystem

$$\mathbf{F}(T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}, \dot{\mathbf{Y}}_{ni}(T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni})) = \mathbf{0}, \quad i = 1, \dots, s \quad (5.71)$$

für die unbekanntenen Stufenwerte und die Stufenableitungen nach (5.68). In Zusammenhang mit der steif-genauen Eigenschaft wird die Einhaltung der algebraischen Nebenbedingung gewährleistet,²⁰ was bei rein projizierten Runge-Kutta Verfahren durch das Lösen eines zusätzlichen, nichtlinearen Gleichungssystems erzwungen wird, [Hairer and Wanner, 1996].

Linear-implizite Runge-Kutta Verfahren vom Rosenbrock-Typ

Wie bereits eingangs erwähnt, können die linear-impliziten Runge-Kutta Verfahren vom Rosenbrock-Typ von den diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren abgeleitet werden. Bei den Rosenbrock-Verfahren wird die Jacobi-Matrix von (5.60) direkt in die Verfahrensvorschrift eingesetzt, d.h. in jeder Stufe wird lediglich ein Iterationsschritt mit einem Newton-Verfahren ausgeführt, siehe [Hairer and Wanner, 1996] bzw. [Strehmel and Weiner, 1995].

Die Verfahrensvorschrift wird zunächst an einem autonomen Anfangswertproblem $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y})$ vorgestellt. Im Hinblick auf die vorgestellte Integrationsvorschrift der diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren muss für das autonome System in jeder Stufe i

²⁰Das DAE-System in expliziter Form mit der algebraischen Nebenbedingung (5.21) ist in Tabelle 5.1 dargestellt.

5. Konsistente Raum- Zeitdiskretisierung

das nichtlineare Gleichungssystem

$$\mathbf{F}(\dot{\mathbf{Y}}_{ni}) := \dot{\mathbf{Y}}_{ni} - \mathbf{f}(\mathbf{Y}_{ni}) = \mathbf{0}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (5.72)$$

mit den Stufenwerten aus (5.66) gelöst werden. Die Anwendung des Newton-Raphson Verfahrens wird nur einmal ausgewertet und führt auf das lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{F}(\dot{\mathbf{Y}}_{ni}^{(1)}) = \mathbf{F}(\dot{\mathbf{Y}}_{ni}^{(0)}) + \left. \frac{d\mathbf{F}}{d\dot{\mathbf{Y}}_{ni}} \right|_{\dot{\mathbf{Y}}_{ni}^{(0)}} \left\{ \dot{\mathbf{Y}}_{ni}^{(1)} - \dot{\mathbf{Y}}_{ni}^{(0)} \right\} = \mathbf{0}. \quad (5.73)$$

Für diesen Linearisierungsschritt benötigt man einen Startwert. Der Grundgedanke besteht nun darin, den Startwert $\dot{\mathbf{Y}}_{ni}^{(0)}$ als eine Linearkombination der bereits berechneten Steigungswerte

$$\dot{\mathbf{Y}}_{ni}^{(0)} = -\frac{1}{a_{ii}} \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj}, \quad \gamma_{ij} \in \mathbb{R}, \quad (5.74)$$

zu wählen, wobei neue Wichtungsfaktoren $\gamma_{ij} = a_{ij} - \alpha_{ij}$ und $a_{ii} = \gamma_{ii}$ eingeführt werden. Die Konkretisierung des Linearisierungsschrittes (5.73) und das Einsetzen des Startwertes (5.74) liefert das folgende lineare Gleichungssystem

$$\left[\mathbf{I} - \gamma_{ii} \Delta t_n \mathbf{J}_{ni} \right] \dot{\mathbf{Y}}_{ni}^{(1)} = \Delta t_n \mathbf{J}_{ni} \left\{ \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj} \right\} + \mathbf{f} \left(\mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj} \right), \quad (5.75)$$

zur Bestimmung der Stufenableitung $\dot{\mathbf{Y}}_{ni}^{(1)}$. Hierbei entspricht

$$\mathbf{J}_{ni} := \left. \frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{Y}_{ni}} \right|_{\mathbf{Y}_{ni}^{(0)}} \quad (5.76)$$

der Jacobi-Matrix ausgewertet an dem Startwert. Mit der speziellen Wahl von $\gamma_{ii} = \gamma$ für $i = 1, \dots, s$ gelingt es, dass in jeder Stufe T_{ni} die Jacobi-Matrix (5.76) unverändert bleibt, $\mathbf{J}_{ni} \rightarrow \mathbf{J}_n = d\mathbf{f}/d\mathbf{Y}_{ni}|_{(t_n, \mathbf{y}_n)}$, womit sich der Aufwand zur Lösung des resultierenden Gleichungssystems auf eine LU-Zerlegung in der ersten Stufe reduziert. Anschließend erfolgen in den weiteren Stufen nur noch Rücksubstitutionen.

Um das Verfahren auch für nicht autonome Differentialgleichungen zu erweitern, wird die triviale Beziehung $\dot{t} = 1$ eingeführt, womit das System

$$\dot{\tilde{\mathbf{y}}} = \left\{ \begin{array}{c} \dot{t} \\ \dot{\mathbf{y}} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) \end{array} \right\} = \tilde{\mathbf{f}}(\tilde{\mathbf{y}}), \quad (5.77)$$

formuliert werden kann. Die Anwendung der Rosenbrock-Verfahren liefert ein Glei-

chungssystem zur Berechnung der Stufenableitungen von (5.77)

$$\dot{\tilde{\mathbf{Y}}}_{ni} = \tilde{\mathbf{f}}(T_{ni}, \tilde{\mathbf{Y}}_{ni}) + \Delta t_n \left. \frac{d\tilde{\mathbf{f}}}{d\tilde{\mathbf{Y}}_{ni}} \right|_{\tilde{\mathbf{y}}_n} \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \dot{\tilde{\mathbf{Y}}}_{nj} \quad (5.78)$$

$$= \left\{ \mathbf{f} \left(T_{ni}, \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj} \right) \right\} + \Delta t_n \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} & \frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{Y}_{ni}} \end{bmatrix} \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \left\{ \begin{matrix} 1 \\ \dot{\mathbf{Y}}_{nj} \end{matrix} \right\}. \quad (5.79)$$

Nach Elimination der Steigungswerte für die triviale t -Komponente resultiert die Verfahrensvorschrift für das s -stufige Rosenbrock-Verfahren. Es berechnet ausgehend von der Näherungslösung \mathbf{y}_n zur Zeit t_n die Näherungslösung \mathbf{y}_{n+1} zur Zeit t_{n+1}

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s b_i \dot{\mathbf{Y}}_{ni}, \quad (5.80)$$

indem die s linearen Gleichungssysteme

$$\begin{aligned} [\mathbf{I} - \gamma \Delta t_n \mathbf{J}_n] \dot{\mathbf{Y}}_{ni} &= \gamma_i \Delta t_n \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \right|_{(t_n, \mathbf{y}_n)} + \Delta t_n \mathbf{J}_n \left\{ \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj} \right\} + \\ &+ \mathbf{f} \left(T_{ni}, \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj} \right), \quad i = 1, \dots, s \end{aligned} \quad (5.81)$$

zur Berechnung der Stufenableitungen gelöst werden. Die Verfahrensvorschrift ist durch die Stufenzahl s , den Koeffizienten $\gamma_i = \sum_{j=1}^i \gamma_{ij}$, die Stützstellen $c_i = \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij}$ mit $T_{ni} = t_n + c_i \Delta t_n$ sowie die Wichtungsfaktoren $\mathbf{b} = \{b_1, \dots, b_s\}^T$ festgelegt. Die Koeffizientenmatrizen $\tilde{\mathbf{A}} = [\alpha_{ij}] \in \mathbb{R}^{s \times s}$ und $\mathbf{\Gamma} = [\gamma_{ij}] \in \mathbb{R}^{s \times s}$ mit $\alpha_{ij} = 0$ für $i < j$ und $\gamma_{ij} = 0$ für $i > j$ sind als untere Dreiecksmatrizen

$$\tilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \alpha_{2,1} & 0 & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{s,1} & \cdots & \alpha_{s,s-1} & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{\Gamma} = \begin{bmatrix} \gamma_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ \gamma_{2,1} & \gamma_{2,2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ \gamma_{s,1} & \cdots & \alpha_{s,s-1} & \gamma_{s,s} \end{bmatrix}, \quad (5.82)$$

definiert. Die Matrix-Vektor Operation $\mathbf{J}_n \{ \sum_j \gamma_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj} \}$ der rechten Seite des Gleichungssystems (5.81) kann vor allem bei großen Systemen numerisch aufwendig werden. Im Hinblick auf die Implementierung kann sie vermieden werden, indem nach Kaps and Wanner [1981] und Shampine [1982] bzw. in [Hairer and Wanner, 1996] die Substitution der Stufenableitungen

$$\mathbf{V}_{ni} = \Delta t_n \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (5.83)$$

5. Konsistente Raum- Zeitdiskretisierung

eingeführt wird. Mit der Bedingung $\gamma_{ii} = \gamma \neq 0$ für alle i , kann die untere Koeffizientenmatrix $\mathbf{\Gamma} = [\gamma_{ij}]$ invertiert werden, so dass umgekehrt

$$\dot{\mathbf{y}}_{ni} = \frac{1}{\gamma \Delta t_n} \mathbf{V}_{ni} - \frac{1}{\Delta t_n} \sum_{j=1}^{i-1} c_{ij} \mathbf{V}_{nj}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (5.84)$$

gilt. Die neu eingeführte Koeffizientenmatrix $\mathbf{C} = \text{diag} \{ \gamma_{11}^{-1}, \dots, \gamma_{ss}^{-1} \} - \mathbf{\Gamma}^{-1}$ ist eine strikte untere Dreiecksmatrix und ergibt sich aus der Invertierung der Matrix $\mathbf{\Gamma}$. Die Substitution der Stufenableitungen (5.84) in (5.81) führt auf eine äquivalente Formulierung des linearen Gleichungssystems

$$\left[\frac{1}{\gamma \Delta t_n} \mathbf{I} - \mathbf{J}_n \right] \mathbf{V}_{ni} = \gamma_i \Delta t_n \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \right|_{(t_n, \mathbf{y}_n)} + \mathbf{f} \left(T_{ni}, \mathbf{y}_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{V}_{nj} \right) + \sum_{j=1}^{i-1} \left(\frac{c_{ij}}{\Delta t_n} \right) \mathbf{V}_{nj} \quad (5.85)$$

mit neuen resultierenden Koeffizienten

$$[a_{ij}] = [\alpha_{ij}] \mathbf{\Gamma}^{-1} \quad \text{und} \quad (m_1, \dots, m_s) = (b_1, \dots, b_s) \mathbf{\Gamma}^{-1}, \quad (5.86)$$

womit die Näherungslösung zum nächsten Zeitschritt sich aus

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \sum_{i=1}^s m_i \mathbf{V}_{ni}, \quad (5.87)$$

berechnet. Eine Zusammenfassung in Form eines Struktogrammes ist in Tabelle 5.3 abgebildet.

Tabelle 5.3.: Verfahrensvorschrift der Rosenbrock-Verfahren

Gegeben: Koeffizienten c_i, a_{ij}, c_{ij}, m_i des s -stufigen Rosenbrock-Verfahrens, sowie die Näherungslösung $\mathbf{y}(t_n)$ zum Zeitpunkt t_n	
Schleife	über die Zeitschritte $n = 0, \dots, N$
	Schleife über die Stufen $i = 1, \dots, s$
	Setze $T_{ni} := t_n + c_i \Delta t_n, \mathbf{S}_{ni} := \mathbf{y}_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{V}_{nj},$
	Löse nach (5.85) $\mathbf{K}_n(t_n, \mathbf{y}_n) \mathbf{V}_{ni} = \mathbf{F}_{ni}(T_{ni}, \mathbf{S}_{ni})$
Update	$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \sum_{i=1}^s m_i \mathbf{V}_{ni}$

Erweiterung der Verfahrensvorschrift für DAE-Systeme

Hinsichtlich der Herleitung von Rosenbrock-Verfahren für semi-explizite DAE-Systeme der Form

$$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{r}(t, \mathbf{q}(t), \mathbf{u}(t)), \quad \mathbf{q} \in \mathbb{R}^{n_q} \quad (5.88a)$$

$$\mathbf{0} = \mathbf{g}(t, \mathbf{q}(t), \mathbf{u}(t)), \quad \mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_u} \quad (5.88b)$$

bieten sich prinzipiell zwei Vorgehensweisen an, die als direkter und indirekter Zugang bezeichnet werden, siehe [Strehmel and Weiner, 1995, S. 382ff]. Der indirekte Zugang ist ausführlich in [Wensch, 2003] bzw. [Wensch et al., 2003] behandelt worden und basiert auf dem Satz über implizite Funktionen. Beim direkten Zugang, wird das System (5.88) formal regularisiert, indem es in ein singular gestörtes Anfangswertproblem

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{r}(t, \mathbf{q}, \mathbf{u}), \quad (5.89a)$$

$$\varepsilon \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{g}(t, \mathbf{q}, \mathbf{u}), \quad (5.89b)$$

mit $0 < \varepsilon \ll 1$ überführt wird. Mit der Definition des Lösungsvektors $\mathbf{y} := \{\mathbf{q}, \mathbf{u}\}^T$ führt die direkte Anwendung der Diskretisierungsvorschrift (5.81) mit anschließender Grenzwertbildung $\varepsilon \rightarrow 0$ auf das gekoppelte lineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{I} - \gamma \Delta t_n \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r} & -\gamma \Delta t_n \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r} \\ -\gamma \Delta t_n \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{g} & -\gamma \Delta t_n \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{g} \end{bmatrix}_{\mathbf{y}_n} \begin{Bmatrix} \dot{\mathbf{Q}}_{ni} \\ \dot{\mathbf{U}}_{ni} \end{Bmatrix} &= \gamma_i \Delta t_n \begin{Bmatrix} \partial_t \mathbf{r} \\ \partial_t \mathbf{g} \end{Bmatrix}_{\mathbf{y}_n} + \\ &+ \Delta t_n \begin{bmatrix} \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r} & \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r} \\ \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{g} & \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{g} \end{bmatrix}_{\mathbf{y}_n} \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} \begin{Bmatrix} \dot{\mathbf{Q}}_{nj} \\ \dot{\mathbf{U}}_{nj} \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} \mathbf{r}(T_{ni}, \mathbf{S}_{ni}^q, \mathbf{S}_{ni}^u) \\ \mathbf{g}(T_{ni}, \mathbf{S}_{ni}^q, \mathbf{S}_{ni}^u) \end{Bmatrix}, \end{aligned} \quad (5.90)$$

zur Berechnung der Stufenableitungen $\dot{\mathbf{Y}}_{ni} = \{\dot{\mathbf{Q}}_{ni} \quad \dot{\mathbf{U}}_{ni}\}$ für $i = 1, \dots, s$. Mit $\mathbf{y}_n := \{\mathbf{q}_n, \mathbf{u}_n\}^T$ wird die Auswertung an den Zeitschritten t_n symbolisiert und die eingeführten Vektoren

$$\mathbf{S}_{ni}^q = \mathbf{q}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \dot{\mathbf{Q}}_{nj}, \quad \mathbf{S}_{ni}^u = \mathbf{u}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \dot{\mathbf{U}}_{nj} \quad (5.91)$$

definieren die Startvektoren des Lösungsvektor. Im Hinblick auf die Implementierung wird zur Vermeidung der aufwendigen Matrix-Vektor Operation die Substitution (5.84) in äquivalenter Form

$$\begin{Bmatrix} \dot{\mathbf{Q}}_{ni} \\ \dot{\mathbf{U}}_{ni} \end{Bmatrix} := \frac{1}{\gamma \Delta t_n} \begin{Bmatrix} \mathbf{V}_{ni}^q \\ \mathbf{V}_{ni}^u \end{Bmatrix} - \frac{1}{\Delta t_n} \sum_{j=1}^{i-1} c_{ij} \begin{Bmatrix} \mathbf{V}_{nj}^q \\ \mathbf{V}_{nj}^u \end{Bmatrix}, \quad (5.92)$$

eingeführt, wodurch die Vorschrift

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r} - \hat{\gamma} \mathbf{I} & \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r} \\ \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{g} & \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{g} \end{bmatrix}_{\mathbf{z}_n} \begin{Bmatrix} \mathbf{V}_{ni}^q \\ \mathbf{V}_{ni}^u \end{Bmatrix} &= - \left\{ \gamma_i \Delta t_n \begin{Bmatrix} \partial_t \mathbf{r} \\ \partial_t \mathbf{g} \end{Bmatrix}_{\mathbf{z}_n} + \begin{Bmatrix} \mathbf{r}(T_{ni}, \mathbf{S}_{ni}^q, \mathbf{S}_{ni}^u) \\ \mathbf{g}(T_{ni}, \mathbf{S}_{ni}^q, \mathbf{S}_{ni}^u) \end{Bmatrix} \right\} + \\ &+ \left\{ \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_{ij} \mathbf{V}_{nj}^q \right\}, \quad i = 1, \dots, s \end{aligned} \quad (5.93)$$

mit $\hat{\gamma} := 1/\gamma\Delta t_n$ und $\hat{c}_{ij} := c_{ij}/\Delta t_n$ sowie den neu definierten Startvektoren

$$\mathbf{s}_{ni}^q = \mathbf{q}_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{v}_{nj}^q, \quad \mathbf{s}_{ni}^u = \mathbf{u}_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{v}_{nj}^u, \quad (5.94)$$

resultiert, vgl.(5.85). Die Näherungslösung zum nächsten Zeitpunkt t_{n+1} berechnet sich analog zu (5.87) durch

$$\mathbf{q}_{n+1} = \mathbf{q}_n + \sum_{i=1}^s m_i \mathbf{v}_{ni}^q, \quad \mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \sum_{i=1}^s m_i \mathbf{v}_{ni}^u \quad (5.95)$$

Die Methode erfordert in jedem Integrationsschritt die Lösung s linearer Gleichungssysteme mit ein und derselben Koeffizientenmatrix, was im Vergleich zu derzeitigen FE-Lösungen, eine erhebliche Reduktion der Rechenzeit impliziert. Im Rahmen der finiten Viskoelastizität konnte es von Hamkar and Hartmann [2008] bzw. Hartmann and Hamkar [2010] demonstriert werden.

5.3.2. Umsetzung auf thermomechanisch gekoppelte Probleme

In Verbindung mit dem thermomechanisch gekoppelten Problem und dem aus der Semi-diskretisierung resultierenden DAE-System ist es zweckmäßig, zur Herleitung der Verfahrensvorschrift das System in die zuvor beschriebene semi-explizite Form zu transformieren. Im Hinblick auf die Implementierung ist es für die Transformation hilfreich, die zu behandelten Gleichungen zunächst zusammenzufassen. Hierbei werden die primären Knotenvariablen durch die Zuweisung

$$\mathbf{w}_a(t) := \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_a(t) \\ \Theta_a(t) \end{array} \right\}, \quad (5.96)$$

formal zusammengeführt. Das DAE-System aus Tabelle 5.2 wird dann in die kompakte Form

$$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{r}(t, \mathbf{q}(t), \mathbf{w}_a(t), \dot{\mathbf{w}}_a(t)) \quad (5.97a)$$

$$\mathbf{C}_a(\mathbf{w}_a(t)) \dot{\mathbf{w}}_a(t) = \mathbf{f}_a(t, \mathbf{q}(t), \mathbf{w}_a(t), \dot{\mathbf{w}}_a(t)) + \mathbf{Z}_a \boldsymbol{\lambda} \quad (5.97b)$$

$$\mathbf{0} = \mathbf{c}_c(t, \mathbf{w}_a(t)) = \mathbf{Z}_a^T \mathbf{w}_a(t) - \bar{\mathbf{w}}(t) \quad (5.97c)$$

überführt.²¹ Aus der Zusammenfassung der Knotenvariablen (5.96) werden zusätzlich die Größen

$$\mathbf{f}_a := \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{g}_a \\ \mathbf{r}_{\Theta_a} \end{array} \right\}, \quad \boldsymbol{\lambda} := \left\{ \begin{array}{l} \lambda_u \\ \lambda_{\Theta} \end{array} \right\}, \quad \mathbf{C}_a := \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{C}_{pa} \end{bmatrix}, \quad (5.98)$$

²¹Im Allgemeinen können bei den Materialmodellen die Evolutionsgleichungen zusätzlich noch von den Geschwindigkeiten $\dot{\mathbf{u}}_a$ abhängen, wie es z.B. bei dem Viskoplastizitätsmodell aus [Hartmann, 2006a] formuliert ist. Diese Verallgemeinerung ist hier bei der Herleitung der Verfahrensvorschrift mit berücksichtigt, womit ohne weiteres die Behandlung von erweiterten, konstitutiven Gleichung ermöglicht wird.

definiert. Zudem resultiert, aufgrund der neuen Variable \mathbf{w}_a , eine implizite Differentialgleichung (5.97b). Diese kann in eine explizite Form transformiert werden. Nach dem Ansatz von Lubich and Roche [1990] gelingt es durch die Substitution $\dot{\mathbf{w}}_a(t) := \mathbf{y}_a(t)$ die Differentialgleichung als ein explizites DAE System darzustellen

$$\dot{\mathbf{w}}_a = \mathbf{y}_a \quad (5.99a)$$

$$\mathbf{0} = \mathbf{f}_a(t, \mathbf{q}, \mathbf{w}_a, \mathbf{y}_a) - \mathbf{C}_a(t, \mathbf{w}_a)\mathbf{y}_a + \mathbf{Z}_a\boldsymbol{\lambda}. \quad (5.99b)$$

Mit der obigen Transformation (5.99) und den Gleichungen (5.97a) sowie (5.97c) gelingt die eingangs geforderte allgemeine explizite Form des DAE-Systems (vgl. (5.88))

$$\mathbf{H}\dot{\mathbf{v}}(t) = \mathbf{F}(t, \mathbf{v}(t)), \quad \mathbf{v}(t_0) = \mathbf{v}_0, \quad (5.100)$$

indem der Unbekanntenvektor und die rechte Seite

$$\mathbf{v} := \begin{Bmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{w}_a \\ \mathbf{y}_a \\ \boldsymbol{\lambda} \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{F} := \begin{Bmatrix} \mathbf{r}(t, \mathbf{q}, \mathbf{w}_a, \mathbf{y}_a) \\ \mathbf{y}_a \\ \mathbf{f}_a(t, \mathbf{q}, \mathbf{w}_a, \mathbf{y}_a) - \mathbf{C}_a(t, \mathbf{w}_a)\mathbf{y}_a + \mathbf{Z}_a\boldsymbol{\lambda} \\ \mathbf{c}_c(t, \mathbf{w}_a) \end{Bmatrix}, \quad (5.101)$$

sowie die konstante Diagonalmatrix $\mathbf{H} := \text{diag}\{\mathbf{I} \ \mathbf{I} \ \mathbf{0} \ \mathbf{0}\}$ definiert werden. Die Integration des nicht autonomen Anfangswertproblems (5.100) durch die Rosenbrock-Verfahren führt auf das lineare Gleichungssystem

$$[\hat{\gamma}\mathbf{H} - \partial_{\mathbf{v}}\mathbf{F}_n] \mathbf{V}_{ni} = \gamma_i \Delta t_n \partial_t \mathbf{F}_n + \mathbf{F} \left(T_{ni}, \mathbf{v}_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{V}_{nj} \right) + \mathbf{H} \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_{ij} \mathbf{V}_{nj}, \quad (5.102)$$

zur Berechnung der Stufenableitungen \mathbf{V}_{ni} für $i = 1, \dots, s$. Die Näherungslösung zum nächsten Zeitschritt ergibt sich wiederum aus der gewichteten Aufsummierung der Stufenableitung

$$\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \sum_{i=1}^s m_i \mathbf{V}_{ni}. \quad (5.103)$$

Über die Auswertung des Unbekanntenvektors \mathbf{v} nach (5.101) lässt sich das Gleichungssystem (5.102) ausformuliert angeben²²

$$\begin{bmatrix} \partial_{\mathbf{q}}\mathbf{r}_n - \hat{\gamma}\mathbf{I} & \partial_{\mathbf{w}}\mathbf{r}_n & \partial_{\mathbf{y}}\mathbf{r}_n & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\hat{\gamma}\mathbf{I} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{Q}_n & \mathbf{G}_n & \mathbf{A}_n & \mathbf{Z} \\ \mathbf{0} & \mathbf{Z}^\top & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{V}_{ni}^q \\ \mathbf{V}_{ni}^w \\ \mathbf{V}_{ni}^y \\ \mathbf{V}_{ni}^\lambda \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} \mathbf{F}_{ni}^q \\ \mathbf{F}_{ni}^w \\ \mathbf{F}_{ni}^y \\ \mathbf{F}_{ni}^\lambda \end{Bmatrix}, \quad (5.104)$$

²²Der Index $(\cdot)_a$ an den Knotenvektoren, der jeweils alle Knotenwerte kennzeichnet, wird im Folgenden aufgrund der Übersichtlichkeit ignoriert. Die eingeführten Knotenvektoren repräsentieren nach wie vor alle Freiheitsgrade. Die Unterscheidung zwischen den Freiheitsgraden an den Dirichlet-Rändern erfolgt wie zuvor mit dem Symbol $(\hat{\cdot})$. Die Freiheitsgrade an denen keine geometrischen Randbedingungen vorliegen werden im Folgenden durch das Symbol $(\check{\cdot})$ gekennzeichnet.

Die rechte Seite des Gleichungssystems wird durch die Ausdrücke

$$\mathbf{F}_{ni}^q := \mathbf{r}(T_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, \mathbf{W}_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}) + \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_{ij} \mathbf{V}_{nj}^q, \quad (5.105a)$$

$$\mathbf{F}_{ni}^w := \mathbf{Y}_{ni} + \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_{ij} \mathbf{V}_{nj}^w, \quad (5.105b)$$

$$\mathbf{F}_{ni}^y := \mathbf{f}(T_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, \mathbf{W}_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}) - \mathbf{C}(T_{ni}, \mathbf{W}_{ni}) \mathbf{Y}_{ni} + \mathbf{Z} \boldsymbol{\lambda}_{ni}, \quad (5.105c)$$

$$\mathbf{F}_{ni}^\lambda := \gamma_i \Delta t_n \partial_t \mathbf{c}_c + \mathbf{c}_c(T_{ni}, \mathbf{W}_{ni}), \quad (5.105d)$$

repräsentiert und die in der Funktionalmatrix vorkommenden partiellen Ableitungen werden durch die Größen

$$\mathbf{Q}_n := \left. \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \{ \mathbf{f}(t, \mathbf{q}, \mathbf{w}, \mathbf{y}) - \mathbf{C}(t, \mathbf{w}) \mathbf{y} \} \right|_{\{t=t_n, \mathbf{q}=\mathbf{q}_n, \mathbf{w}=\mathbf{w}_n, \mathbf{y}=\mathbf{y}_n\}}, \quad (5.106)$$

$$\mathbf{G}_n := \left. \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} \{ \mathbf{f}(t, \mathbf{q}, \mathbf{w}, \mathbf{y}) - \mathbf{C}(t, \mathbf{w}) \mathbf{y} \} \right|_{\{t=t_n, \mathbf{q}=\mathbf{q}_n, \mathbf{w}=\mathbf{w}_n, \mathbf{y}=\mathbf{y}_n\}}, \quad (5.107)$$

$$\mathbf{A}_n := \left. \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \{ \mathbf{f}(t, \mathbf{q}, \mathbf{w}, \mathbf{y}) - \mathbf{C}(t, \mathbf{w}) \mathbf{y} \} \right|_{\{t=t_n, \mathbf{q}=\mathbf{q}_n, \mathbf{w}=\mathbf{w}_n, \mathbf{y}=\mathbf{y}_n\}}, \quad (5.108)$$

wiedergegeben. Die Stufenwerte, an denen die Funktionen für $i = 1, \dots, s$ ausgewertet werden, ergeben sich zu

$$T_{ni} = t_n + c_i \Delta t_n, \quad \mathbf{Q}_{ni} = \mathbf{q}_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{V}_{nj}^q, \quad (5.109)$$

$$\mathbf{W}_{ni} = \mathbf{w}_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{W}_{nj}, \quad \mathbf{Y}_{ni} = \mathbf{y}_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{Y}_{nj}. \quad (5.110)$$

Die Näherungslösung zum nächsten Zeitschritt (5.103) könnte durch das Lösen des Gleichungssystems (5.104) mittels eines direkten Gleichungslösers oder für sehr große Systeme mit Hilfe von iterativen Gleichungslösern ermittelt werden. Einen allgemeinen Überblick über die Anwendbarkeit und den numerischen Aufwand von linearen Gleichungslösern wird in [Golub and van Loan, 1996] gegeben. Hier jedoch wird eine entkoppelte Lösungsstrategie angestrebt.

Zur Lösung des Gleichungssystems

Im Hinblick auf eine effiziente Implementierung wird das Gleichungssystem jedoch nicht in der Form (5.104) gelöst. Die geschachtelte Lösungsmethodik des FE-Ansatzes, in dem global für das gesamte Gebiet ein Gleichungssystem zur Berechnung der primären Variablen gelöst wird und lokal an jedem Gauss-Punkt eines Elementes kleine Systeme zur Lösung der inneren Variablen berechnet werden, soll auf die Methodik der Rosenbrock-Verfahren übertragen werden. Dies erfolgt bei linearen Gleichungssystemen mit Hilfe des Schur-Komplements, d.h. der sogenannten statischen Kondensation.

Hierin wird eine Unbekannte in Abhängigkeit der weiteren Unbekannten angegeben, womit die Dimension des Gleichungssystems reduziert wird.

Aufgrund der Struktur der obigen Matrix gelingt es zunächst, aus der zweiten Gleichung von (5.104) durch

$$\mathbf{V}_{ni}^y = -\mathbf{F}_{ni}^w + \hat{\gamma} \mathbf{V}_{ni}^w \quad (5.111)$$

die Stufenableitung \mathbf{V}_{ni}^y zu eliminieren. Mit dieser Relation resultiert aus der ersten Gleichung von (5.104) eine Bestimmungsgleichung für die Stufenableitung der inneren Variablen

$$\mathbf{V}_{ni}^q = \underbrace{[\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_n - \hat{\gamma} \mathbf{I}]^{-1} \mathbf{F}_{ni}^q}_{\mathbf{x}_{ni}^q} - \underbrace{[\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_n - \hat{\gamma} \mathbf{I}]^{-1} [\partial_{\mathbf{w}} \mathbf{r}_n \quad \partial_{\mathbf{y}} \mathbf{r}_n \quad \mathbf{0}]}_{[\mathbf{X}_n^w \quad \mathbf{X}_n^y \quad \mathbf{0}]} \begin{Bmatrix} \mathbf{V}_{ni}^w \\ \mathbf{V}_{ni}^y \\ \mathbf{V}_{ni}^\lambda \end{Bmatrix}, \quad (5.112a)$$

$$= -\mathbf{x}_{ni}^q - [\mathbf{X}_n^w \quad \mathbf{X}_n^y] \begin{Bmatrix} \mathbf{V}_{ni}^w \\ \mathbf{V}_{ni}^y \end{Bmatrix} = -\mathbf{x}_{ni}^q - \mathbf{X}_n^w \mathbf{V}_{ni}^w - \mathbf{X}_n^y \mathbf{V}_{ni}^y, \quad (5.112b)$$

$$= -\mathbf{x}_{ni}^q - \mathbf{X}_n^w \mathbf{V}_{ni}^w - \mathbf{X}_n^y \{-\mathbf{F}_{ni}^w + \hat{\gamma} \mathbf{V}_{ni}^w\}, \quad (5.112c)$$

in Abhängigkeit der unbekanntenen Stufenableitungen \mathbf{V}_{ni}^w für die primären Variablen. Die explizite Invertierung der Matrizen in den Definitionen der Größen \mathbf{X}_n^w , \mathbf{X}_n^y und \mathbf{x}_{ni}^q in (5.112a) wird vermieden, indem zur Berechnung der Größen lineare Gleichungssysteme

$$[\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_n - \hat{\gamma} \mathbf{I}] [\mathbf{X}_n^w \quad \mathbf{X}_n^y] = [\partial_{\mathbf{w}} \mathbf{r}_n \quad \partial_{\mathbf{y}} \mathbf{r}_n], \quad (5.113)$$

$$[\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_n - \hat{\gamma} \mathbf{I}] \mathbf{x}_{ni}^q = -\mathbf{F}_{ni}^q, \quad (5.114)$$

formuliert werden. Es sei angemerkt, dass die Größen \mathbf{X}_n^w und \mathbf{X}_n^y nur zu jedem Zeitschritt, also unabhängig von den Stufen, berechnet werden, während die Berechnung von \mathbf{x}_{ni}^q in jeder Stufe erfolgt. In Bezug auf eine effiziente FE-Implementierung werden die Gleichungssysteme (5.113) und (5.114) lokal an den Gauss-Punkten berechnet, da die formale Assemblierung der inneren Variablen in einen globalen Vektor zu einer Entkopplung der Gleichungen führt. Der Aufwand zur Berechnung der definierten Größen reduziert sich auf das Lösen eines Gleichungssystems der Dimension der inneren Variablen am Gauss-Punkt.

Mit Beziehung (5.112) wird eine Unbekannte des Gleichungssystems (5.104) eliminiert und es resultiert ein auf die Dimension der primären Variablen und der Lagrange Multiplikatoren, reduziertes Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} \mathbf{G}_n + \hat{\gamma} \mathbf{A}_n - \mathbf{Q}_n [\mathbf{X}_n^w + \hat{\gamma} \mathbf{X}_n^y] & \mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{V}_{ni}^w \\ \mathbf{V}_{ni}^\lambda \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} \mathbf{F}_{ni}^y + \mathbf{Q}_n \mathbf{x}_{ni}^q - [\mathbf{A}_n - \mathbf{Q}_n \mathbf{X}_n^y] \mathbf{F}_{ni}^w \\ \mathbf{F}_{ni}^\lambda \end{Bmatrix} \quad (5.115)$$

zur Berechnung der $i = 1, \dots, s$ Stufenableitungen \mathbf{V}_{ni}^w und \mathbf{V}_{ni}^λ . Um die oben geschilderte FE-typische geschachtelte Struktur zu erhalten wird im Sinne der Verschiebungssteuerung, siehe Abschnitt 5.2.2, die Partitionierung der primären Variablen

$$\mathbf{w} := \{ \check{\mathbf{w}} \quad \hat{\mathbf{w}} \}^T, \quad (5.116)$$

eingeführt womit auch die Aufteilung $\mathbf{V}_{ni}^w = \{ \mathbf{V}_{ni}^{\check{w}} \quad \mathbf{V}_{ni}^{\hat{w}} \}^T$ resultiert. $\hat{\mathbf{w}}$ entspricht dem Vektor der primären Variablen an dem Dirichlet-Rand und $\check{\mathbf{w}}$ sind die Freiheitsgrade an denen keine Randbedingungen vorgegeben sind. Diese Aufteilung überführt das Gleichungssystem (5.115) auf die folgende Gestalt

$$\begin{bmatrix} \check{\mathbf{K}}_n^{\check{w}} & \check{\mathbf{K}}_n^{\hat{w}} & \mathbf{0} \\ \hat{\mathbf{K}}_n^{\check{w}} & \hat{\mathbf{K}}_n^{\hat{w}} & \mathbf{I} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{V}_{ni}^{\check{w}} \\ \mathbf{V}_{ni}^{\hat{w}} \\ \mathbf{V}_{ni}^\lambda \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \check{\mathbf{F}}_{ni}^y - \check{\mathbf{Q}}_n \check{\mathbf{x}}_{ni}^q - [\check{\mathbf{A}}_n - \check{\mathbf{Q}}_n \check{\mathbf{X}}_n^y] \check{\mathbf{F}}_{ni}^w \\ \hat{\mathbf{F}}_{ni}^y - \hat{\mathbf{Q}}_n \hat{\mathbf{x}}_{ni}^q - [\hat{\mathbf{A}}_n - \hat{\mathbf{Q}}_n \hat{\mathbf{X}}_n^y] \hat{\mathbf{F}}_{ni}^w \\ \mathbf{F}_{ni}^\lambda \end{bmatrix}. \quad (5.117)$$

Die Steifigkeitsmatrix $\mathbf{K}_n^w := \mathbf{G}_n + \hat{\gamma} \mathbf{A}_n - \mathbf{Q}_n [\mathbf{X}_n^w + \hat{\gamma} \mathbf{X}_n^y]$ ist hierin aufgrund der Partitionierung des Unbekanntenvektors in Blockmatrizen aufgeteilt, die sich über die Assemblierungsvorschrift aus der Elementsteifigkeitsmatrix ergeben.²³

Offensichtlich ist mittels der dritten Gleichung aus (5.117)

$$\mathbf{V}_{ni}^{\hat{w}} = -\mathbf{F}_{ni}^\lambda = -\gamma_i \Delta t_n \partial_t \mathbf{c}_c - \mathbf{c}_c(T_{ni}, \mathbf{W}_{ni}), \quad (5.118)$$

explizit bestimmt. Dies ermöglicht die Auflösung des Gleichungssystems in ein Gleichungssystem der Dimension der unbekannt primären Variablen, d.h. der Dimension der Knotenverschiebungen und -temperaturen

$$\check{\mathbf{K}}_n^{\check{w}} \mathbf{V}_{ni}^{\check{w}} = -\check{\mathbf{F}}_{ni}^y + \check{\mathbf{Q}}_n \check{\mathbf{x}}_{ni}^q + [\check{\mathbf{A}}_n - \check{\mathbf{Q}}_n \check{\mathbf{X}}_n^y] \check{\mathbf{F}}_{ni}^w - \check{\mathbf{K}}_n^{\hat{w}} \mathbf{V}_{ni}^{\hat{w}}, \quad (5.119)$$

sowie die Bestimmungsgleichung

$$\mathbf{V}_{ni}^\lambda = -\hat{\mathbf{F}}_{ni}^y + \hat{\mathbf{Q}}_n \hat{\mathbf{x}}_{ni}^q + [\hat{\mathbf{A}}_n - \hat{\mathbf{Q}}_n \hat{\mathbf{X}}_n^y] \hat{\mathbf{F}}_{ni}^w - \hat{\mathbf{K}}_n^{\check{w}} \mathbf{V}_{ni}^{\check{w}} - \hat{\mathbf{K}}_n^{\hat{w}} \mathbf{V}_{ni}^{\hat{w}}, \quad (5.120)$$

womit die Unbekannten $\mathbf{V}_{ni}^{\check{w}}$, $\mathbf{V}_{ni}^{\hat{w}}$ und \mathbf{V}_{ni}^λ , sukzessiv für $i = 1, \dots, s$ aus (5.118), (5.119), und (5.120) berechnet werden. Zusammenfassend wird in Tabelle 5.4 die globale Vorgehensweise der Integrationsvorschrift der Rosenbrock-Verfahren unter Hinzunahme der Verschiebungssteuerung schematisiert dargestellt.

Aufbau des Gleichungssystem

Der Rechenaufwand des in Tabelle 5.4 angegebenen Algorithmus der Zeitintegration des DAE-Systems mit den Rosenbrock-Verfahren besteht im wesentlichen in der Lösung des Gleichungssystems (5.119). In diesem Abschnitt wird daher eine effiziente Vorgehensweise vorgeschlagen, die zunächst die Struktur der eingeführten Partitionierung nach (5.116) ausnutzt. In weiteren Schritten werden dann die Gleichungen mit Hinzunahme der Partitionierung primärer Variablen nach (5.96) bzw. (5.98) formuliert. Dadurch wird die zu berechnende Dimension des Gleichungssystem ersichtlich. Die eingangs eingeführte Transformation des System in ein DAE-System (5.99) und die damit verbundene Erhöhung der Unbekannten führt somit nicht zu einem zusätzlichen numerischen Aufwand.

²³Der Aufbau der Elementmatrizen wird in Abschnitt 5.3.3 ausführlich behandelt.

Tabelle 5.4.: Rosenbrock-Verfahren im Rahmen nichtlinearer FE für thermomechanische gekoppelte Problemstellungen

Gegeben: Koeffizienten der Rosenbrock-Verfahren Anfangsbedingungen $\mathbf{y}^T(t_0) = \{\mathbf{q}_0, \mathbf{u}_0\}^T = \mathbf{y}_0^T$,	
Schleife	über die Zeitschritte $n = 0, \dots, N$
	Schleife über die Stufen $i = 1, \dots, s$
	<i>Berechne auf globaler Ebene</i> $T_{ni} = t_n + c_i \Delta t_n, \quad \mathbf{S}_{ni}^v = \mathbf{v}_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{V}_{nj}, \quad (5.110)$
	<i>Löse auf lokaler Ebene (Elementebene)</i> $[\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_n - \hat{\gamma} \mathbf{I}] [\mathbf{X}_n^w \mathbf{X}_n^y] = [\partial_{\mathbf{w}} \mathbf{r} \partial_{\mathbf{y}} \mathbf{r}], \quad \text{für } i = 1 \quad (5.113)$
	$[\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_n - \hat{\gamma} \mathbf{I}] [\mathbf{x}_{ni}^q] = [\mathbf{F}_{ni}^q] \quad (5.114)$
	<i>Berechne auf globaler Ebene</i> $\mathbf{V}_{ni}^{\hat{w}} = -\mathbf{F}_{ni}^\lambda, \quad (5.118)$
	<i>Löse auf globaler Ebene</i> $\tilde{\mathbf{K}}_n^{\hat{w}} \mathbf{V}_{ni}^{\hat{w}} = -\mathbf{R}_{ni}^{\hat{w}} - \tilde{\mathbf{K}}_n^{\hat{w}} \mathbf{V}_{ni}^{\hat{w}} \quad (5.119)$
	<i>Berechne auf globaler Ebene</i> $\mathbf{V}_{ni}^\lambda = -\mathbf{R}_{ni}^{\hat{w}} - \hat{\mathbf{K}}_n^{\hat{w}} \mathbf{V}_{ni}^{\hat{w}} - \hat{\mathbf{K}}_n^{\hat{w}} \mathbf{V}_{ni}^{\hat{w}} \quad (5.120)$
	$\mathbf{V}_{ni}^y = -\mathbf{F}_{ni}^w + \hat{\gamma} \mathbf{V}_{ni}^w \quad (5.111)$
	$\mathbf{V}_{ni}^q = -\mathbf{x}_{ni}^q - \mathbf{X}_n^w \mathbf{V}_{ni}^w - \mathbf{X}_n^y \mathbf{V}_{ni}^y \quad (5.112)$
Update $\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \sum_{i=1}^s m_i \mathbf{V}_{ni} \quad (5.103)$	
Schrittweitenadaptivität Fehlerschätzung des lokalen Integrationsfehlers Berechne neue Schrittweite Falls Schritt nicht akzeptiert, verringere Schrittweite	

Koeffizientenmatrix des Gleichungssystem (5.119) Die Koeffizientenmatrix des Gleichungssystem entspricht der oberen linken Blockmatrix der Gesamtsteifigkeitsmatrix \mathbf{K}_n^w . Aufgrund von (5.115) und (5.117) gilt für die Koeffizientenmatrix

$$\check{\mathbf{K}}_n^w = \check{\mathbf{G}}_n + \hat{\gamma} \check{\mathbf{A}}_n - \check{\mathbf{Q}}_n [\mathbf{X}_n^w + \hat{\gamma} \mathbf{X}_n^y]. \quad (5.121)$$

Die hierin enthaltenen partiellen Ableitungen berechnen sich nach (5.106), (5.107) und (5.108), welche durch die Berücksichtigung der Partitionierung (5.116) und die daraus resultierende Aufteilung der Funktion $\mathbf{f} = \{\check{\mathbf{f}} \quad \hat{\mathbf{f}}\}^T$, zu

$$\check{\mathbf{G}}_n = \left. \frac{\partial \check{\mathbf{f}}}{\partial \mathbf{w}} \right|_{\{\mathbf{q}=\mathbf{q}_n, \mathbf{w}=\check{\mathbf{w}}_n, \mathbf{y}=\check{\mathbf{y}}_n\}} - \left. \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} \{ \mathbf{C}(\mathbf{w}) \mathbf{y} \} \right|_{\mathbf{w}=\check{\mathbf{w}}_n, \mathbf{y}=\check{\mathbf{y}}_n}, \quad (5.122a)$$

$$\check{\mathbf{A}}_n = \left. \frac{\partial \check{\mathbf{f}}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\{\mathbf{q}=\mathbf{q}_n, \mathbf{w}=\check{\mathbf{w}}_n, \mathbf{y}=\check{\mathbf{y}}_n\}} - \mathbf{C}(\check{\mathbf{w}}_n), \quad (5.122b)$$

$$\check{\mathbf{Q}}_n = \left. \frac{\partial \check{\mathbf{f}}}{\partial \mathbf{q}} \right|_{\{\mathbf{q}=\mathbf{q}_n, \mathbf{w}=\check{\mathbf{w}}_n, \mathbf{y}=\check{\mathbf{y}}_n\}}, \quad (5.122c)$$

konkretisiert werden. Die Matrizen \mathbf{X}_n^w und \mathbf{X}_n^y werden nach dem linearen Gleichungssystem

$$[\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_n - \hat{\gamma} \mathbf{I}] [\mathbf{X}_n^w \quad \mathbf{X}_n^y] = [\partial_{\mathbf{w}} \mathbf{r}_n \quad \partial_{\mathbf{y}} \mathbf{r}_n] \Big|_{\mathbf{w}=\check{\mathbf{w}}_n, \mathbf{y}=\check{\mathbf{y}}_n}, \quad (5.123)$$

bestimmt, die sich wiederum aus (5.113) herleiten. Um die Struktur der Koeffizientenmatrix zu präzisieren, werden folgend die Substitution (5.96) und die damit hervorgehenden Größen (5.98) zurückgeführt. Mit der Funktion $\check{\mathbf{f}}$, die die diskrete Gleichung der schwachen Form und den rechten Anteil der diskreten Wärmeleitungsgleichung zusammenfasst $\check{\mathbf{f}} = \{\mathbf{g} \quad \mathbf{r}_\Theta\}^T$, vgl. (5.98)₁, können die Ableitungen in (5.122) formuliert werden

$$\left. \frac{\partial \check{\mathbf{f}}}{\partial \mathbf{w}} \right|_{\{\mathbf{q}=\mathbf{q}_n, \mathbf{w}=\check{\mathbf{w}}_n, \mathbf{y}=\check{\mathbf{y}}_n\}} = \begin{bmatrix} \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{g} & \partial_{\Theta} \mathbf{g} \\ \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r}_\Theta & \partial_{\Theta} \mathbf{r}_\Theta \end{bmatrix}_{\mathbf{v}_n}, \quad (5.124)$$

$$\left. \frac{\partial \check{\mathbf{f}}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\{\mathbf{q}=\mathbf{q}_n, \mathbf{w}=\check{\mathbf{w}}_n, \mathbf{y}=\check{\mathbf{y}}_n\}} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \partial_{\mathbf{y}_u} \mathbf{r}_\Theta & \mathbf{0} \end{bmatrix}_{\mathbf{v}_n}, \quad (5.125)$$

$$\left. \frac{\partial \check{\mathbf{f}}}{\partial \mathbf{q}} \right|_{\{\mathbf{q}=\mathbf{q}_n, \mathbf{w}=\check{\mathbf{w}}_n, \mathbf{y}=\check{\mathbf{y}}_n\}} = \begin{bmatrix} \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{g} \\ \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_\Theta \end{bmatrix}_{\mathbf{v}_n}. \quad (5.126)$$

Zudem gilt aufgrund der Struktur der Matrix \mathbf{C}_a aus (5.98)₃ und über die Berücksichtigung der Zerlegung der primären Variable in ihren physikalischen Ursprung, für das

Produkt

$$\mathbf{C}(\mathbf{w})\mathbf{y} = \left\{ \mathbf{0} \quad \mathbf{0} \quad \check{\mathbf{C}}_p \check{\mathbf{y}}_\Theta \quad \hat{\mathbf{C}}_p \hat{\mathbf{y}}_\Theta \right\}^T, \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} \check{\mathbf{C}}_p &= \mathbf{C}_p(\Theta)|_{\Theta=\check{\Theta}_n}, \\ \hat{\mathbf{C}}_p &= \mathbf{C}_p(\Theta)|_{\Theta=\hat{\Theta}_n}, \end{aligned} \quad (5.127)$$

und die Matrizen in (5.123) können in Bezug auf die Partitionierung folgend

$$\mathbf{X}_n^{\check{w}} := \begin{bmatrix} \mathbf{X}_n^u & \mathbf{X}_n^\Theta \end{bmatrix} = \left[\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_n - \hat{\gamma} \mathbf{I} \right]^{-1} \begin{bmatrix} \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r}_n & \partial_{\Theta} \mathbf{r}_n \end{bmatrix}, \quad (5.128a)$$

$$\mathbf{X}_n^{\check{y}} := \begin{bmatrix} \mathbf{X}_n^{y_u} & \mathbf{X}_n^{y_\Theta} \end{bmatrix} = \left[\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_n - \hat{\gamma} \mathbf{I} \right]^{-1} \begin{bmatrix} \partial_{y_u} \mathbf{r}_n & \partial_{y_\Theta} \mathbf{r}_n \end{bmatrix}, \quad (5.128b)$$

zerlegt werden.

Die hier zusammengeführten Relationen ermöglichen es, die Koeffizientenmatrix in Abhängigkeit der Knotenverschiebungen und Knotentemperaturen, die den unabhängigen Variablen des ursprünglichen DAE-Systems entsprechen, zu konstruieren. Werden die partiellen Ableitungen von (5.121) nach (5.122) ausgeführt und anschließend zusammengefasst erhält man als Resultat die Koeffizientenmatrix in der Form

$$\check{\mathbf{K}}_n^{\check{w}} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_n^{uu} & \mathbf{K}_n^{u\Theta} \\ \mathbf{K}_n^{\Theta u} & \mathbf{K}_n^{\Theta\Theta} \end{bmatrix}, \quad (5.129)$$

mit

$$\mathbf{K}_n^{uu} = \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{g}_n - \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{g}_n \left[\mathbf{X}_n^u + \hat{\gamma} \mathbf{X}_n^{y_u} \right], \quad (5.130a)$$

$$\mathbf{K}_n^{u\Theta} = \partial_{\Theta} \mathbf{g}_n - \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{g}_n \left[\mathbf{X}_n^\Theta + \hat{\gamma} \mathbf{X}_n^{y_\Theta} \right], \quad (5.130b)$$

$$\mathbf{K}_n^{\Theta u} = \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r}_{\Theta n} - \partial_{\mathbf{u}} \{ \check{\mathbf{C}}_p \mathbf{y}_\Theta \}_n + \hat{\gamma} \partial_{y_u} \mathbf{r}_{\Theta n} - \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_{\Theta n} \left[\mathbf{X}_n^u + \hat{\gamma} \mathbf{X}_n^{y_u} \right], \quad (5.130c)$$

$$\mathbf{K}_n^{\Theta\Theta} = \partial_{\Theta} \mathbf{r}_{\Theta n} - \partial_{\Theta} \{ \check{\mathbf{C}}_p \mathbf{y}_\Theta \}_n - \hat{\gamma} \mathbf{C}_{p_n} - \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_{\Theta n} \left[\mathbf{X}_n^\Theta + \hat{\gamma} \mathbf{X}_n^{y_\Theta} \right]. \quad (5.130d)$$

Aufbau der rechten Seite des Gleichungssystems (5.119) Die Formulierung der rechten Seite des Gleichungssystems (5.119) in Abhängigkeit von den Knotenverschiebungen und -temperaturen erfolgt, indem, analog zur Koeffizientenmatrix, die Partitionierung der Variablen zurückgeführt werden. Der in (5.119) vorkommende Steifigkeitsanteil $\check{\mathbf{K}}_n^{\check{w}}$, der aufgrund der statischen Kondensation zu der rechten Seite addiert wird, kann äquivalent nach (5.121), (5.122) und (5.123) berechnet werden. Die partiellen Ableitungen werden jedoch an den Größen, an denen Randbedingungen aufgebracht sind, ausgewertet, d.h. es werden die Ableitungen $\partial_{\mathbf{w}}(\cdot)|_{\{\mathbf{q}=\mathbf{q}_n, \mathbf{w}=\hat{\mathbf{w}}_n, \mathbf{y}=\hat{\mathbf{y}}_n\}}$ und $\partial_{\mathbf{y}}(\cdot)|_{\{\mathbf{q}=\mathbf{q}_n, \mathbf{w}=\hat{\mathbf{w}}_n, \mathbf{y}=\hat{\mathbf{y}}_n\}}$ ausgewertet.

Im Folgenden werden die verbleibenden Terme der rechten Seite des Gleichungssystems erläutert. Zur Veranschaulichung werden diese Terme zunächst durch den Vektor

$$\mathbf{R}_{ni} := \check{\mathbf{F}}_{ni}^y - \check{\mathbf{Q}}_n \check{\mathbf{x}}_{ni}^q - \left[\check{\mathbf{A}}_n - \check{\mathbf{Q}}_n \check{\mathbf{X}}_n^y \right] \check{\mathbf{F}}_{ni}^w, \quad (5.131)$$

zusammengefasst. Mit Berücksichtigung der Beziehungen (5.105b), (5.105c), (5.113) und (5.114) und einigen trivialen algebraischen Umformungen kann (5.131) in die detaillierte Form

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{ni} = & -\mathbf{f}(\mathbf{Q}_{ni}, \mathbf{W}_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}) - [\mathbf{C}(\mathbf{w}_n) - \mathbf{C}(\mathbf{W}_{ni})] \mathbf{Y}_{ni} + \\ & + \left[\partial_{\mathbf{y}} \check{\mathbf{f}}_n \right] \mathbf{Y}_{ni} + \left[\partial_{\mathbf{y}} \check{\mathbf{f}}_n \right] \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_{ij} \mathbf{V}_{nj}^w - \mathbf{C}(\mathbf{w}_n) \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_{ij} \mathbf{V}_{nj}^w - \\ & - \mathbf{Q}_n \left\{ \mathbf{x}_{ni}^q + \mathbf{X}_n^y \left\{ \mathbf{Y}_{ni} + \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_{ij} \mathbf{V}_{nj}^w \right\} \right\}, \end{aligned} \quad (5.132)$$

überführt werden. In Bezug auf die Implementierung wird im nächsten Schritt die Aufteilung der primären Variable $\mathbf{w} = \{\mathbf{u}, \Theta\}^T$ eingearbeitet. Für die Auswertung der Funktion \mathbf{f} an den Stufenwerten folgt daher die Gleichung

$$\mathbf{f}(T_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, \mathbf{W}_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{g}(T_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, \mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}) \\ \mathbf{r}_{\Theta}(T_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, \mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}^u, \mathbf{Y}_{ni}^{\Theta}) \end{array} \right\}. \quad (5.133)$$

Hierbei müssen die diskrete Gleichung der Gleichgewichtsbedingung und die diskretisierte Form der rechten Seite der Wärmeleitungsgleichung an den Stufenwerten ausgewertet werden. Die Stufenwerte bezogen auf den Verschiebungsvektor und die Knotentemperaturen berechnen sich aus

$$\mathbf{U}_{ni} = \mathbf{u}_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{V}_{nj}^u, \quad \Theta_{ni} = \Theta_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{V}_{nj}^{\Theta}, \quad (5.134)$$

$$\mathbf{Y}_{ni}^u = \mathbf{y}_{u_n} + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{V}_{nj}^{y_u}, \quad \mathbf{Y}_{ni}^{\Theta} = \mathbf{y}_{\Theta_n} + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{V}_{nj}^{y_{\Theta}}. \quad (5.135)$$

Die rechte Seite der diskretisierten Wärmeleitungsgleichung kann gemäß (5.37) durch

$$\mathbf{r}_{\Theta}(\mathbf{Q}_{ni}, \mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}^u) = -\mathbf{C}_{\kappa} \Theta_{ni} + \mathbf{p}_{ni} + \mathbf{d}_{ni}, \quad (5.136)$$

beschrieben werden. In obiger Gleichung wird die Konduktivitätsmatrix \mathbf{C}_{κ} aus (5.38) bestimmt. \mathbf{p}_{ni} entspricht der diskreten Form der thermoelastischen Kopplung p^h und resultiert aus (5.39). Aufgrund der zuvor hergeleiteten Relation für die thermoelastische Kopplung²⁴ besteht die Abhängigkeit $\mathbf{p}_{ni} = \hat{\mathbf{p}}(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}^u)$. Hierin gilt eine lineare Beziehung bezüglich dem Vektor \mathbf{Y}_{ni}^u , das die Verzerrungsraten repräsentiert. Infolgedessen lässt sich der Vektor der thermoelastischen Kopplung hinsichtlich einer Auswertung an den Stützstellen durch

$$\mathbf{p}_{ni} = \mathbf{P}(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}) \mathbf{Y}_{ni}^u = \mathbf{P}_{ni} \mathbf{Y}_{ni}^u, \quad (5.137a)$$

bzw. hinsichtlich einer Auswertung an den Zeitschritten durch

$$\mathbf{p}_n = \mathbf{P}(\mathbf{u}_n, \Theta_n) \mathbf{y}_{u_n} = \mathbf{P}_n \mathbf{y}_{u_n}, \quad (5.137b)$$

²⁴vgl. Abschnitt 5.2.1 bzw. (5.39)

darstellen. Die hier eingeführten Matrizen \mathbf{P}_{ni} bzw. \mathbf{P}_n werden im folgenden Abschnitt näher bestimmt. Des Weiteren wurde in (5.136) die inelastische Dissipation in diskreter Form

$$\mathbf{d}_{ni} = \mathbf{d}(\mathbf{Q}_{ni}, \mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}), \quad (5.138)$$

gemäß (5.39), eingeführt.

Mit dem Einsetzen von (5.138), (5.137), (5.136) und (5.133) in (5.132) und unter Berücksichtigung der Diagonalform von $\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{c}_p \end{bmatrix}$ gelangt man nach einigen Umformungen auf die abschließende Form der rechten Seite des Gleichungssystems

$$\mathbf{R}_{ni} := \{ \mathbf{R}_{ni}^u \quad \mathbf{R}_{ni}^\Theta \}^T, \quad (5.139)$$

mit

$$\mathbf{R}_{ni}^u = \mathbf{g}(\mathbf{Q}_{ni}, \mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}) - [\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{g}_n] \mathbf{x}_{ni}^q, \quad (5.140)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{ni}^\Theta = & -\mathbf{C}_\kappa(\Theta_n) \Theta_{ni} + \mathbf{d}_{ni} + [\mathbf{C}_p^n - \mathbf{C}_p^{ni}] \mathbf{Y}_{ni}^\Theta + [\mathbf{P}_{ni} - \mathbf{P}_n] \mathbf{Y}_{ni}^u + \\ & -\mathbf{P}_n \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_{ij} \mathbf{V}_{nj}^u + \mathbf{C}_p^n \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_{ij} \mathbf{V}_{nj}^\Theta - [\partial_{\Theta} \mathbf{r}_{\Theta_n}] \mathbf{x}_{ni}^q. \end{aligned} \quad (5.141)$$

5.3.3. Formulierung auf Elementebene

In den beiden vorherigen Abschnitten wurde die globale Lösungsprozedur nach Tabelle 5.4 erläutert. Insbesondere wurden die Struktur des linearen Gleichungssystems und die damit verbundenen globalen Größen, welche aus der Integration des semidiskreten DAE-Systems mittels der Rosenbrock-Verfahren resultieren, dargestellt. Im Rahmen einer Finite-Elemente Implementierung, aus der die diskrete Form der lokalen Gleichgewichtsbedingung (5.21) bzw. (5.59), die diskrete Evolutionsgleichung (5.27) und die diskrete Wärmeleitungsgleichung (5.35) resultieren, können diese globalen Größen lokal an jedem finiten Element bzw. aufgrund einer numerischen Integration mittels der Gauss-Quadratur sogar an jedem Integrationspunkt (Gauss-Punkt) eines Elements berechnet werden. Folgend soll die lokale Umsetzung der Prozedur, insbesondere die Formulierung der Gleichungen auf Elementebene erläutert werden.

In Tabelle 5.4 ist das Struktogramm des Algorithmus abgebildet. Innerhalb der Stufe i eines Integrationsschrittes müssen in jedem Element die Evolutionsgleichung und die diskreten Feldgleichungen sowie alle weiteren Größen des globalen linearen Gleichungssystems, die aus der Linearisierung der Feldgleichungen resultieren, berechnet werden. Diese Größen sind symbolisch in Tabelle 5.5 zusammengetragen. Die Herleitung der partiellen Ableitungen im Sinne einer konsistenten Linearisierung wird im Anhang A.3 in einer Tensornotation angegeben. Hier werden sie in Bezug auf die zuvor vorgestellte FE-Diskretisierung in einer Matrixnotation formuliert, womit eine klare Darstellung der implementierten Gleichungen auf Elementebene hervorgeht.

Das Gleichungssystem (5.114) bzw. (5.128) geht aus der Evolutionsgleichung (5.27) hervor, und kann am Gauss-Punkt unter Ausnutzung von (5.9) und (5.28) sowie der

Tabelle 5.5.: Symbolische Darstellung der Integrationschleife innerhalb einer Stufe

Schleife	über die Stufen $i = 1, \dots, s$
	...
	Schleife über die Elemente $e = 1, \dots, n_e$
	Berechne: $\mathbf{x}^e \leftarrow \mathbf{r}^e, \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}^e$ $\mathbf{X}^e \leftarrow \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}^e, \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r}^e, \partial_{\theta} \mathbf{r}^e,$ $\mathbf{R}^e \leftarrow \mathbf{g}^e, \mathbf{r}_{\theta}^e, \mathbf{x}^e, \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{g}^e \mathbf{x}^e,$ $\mathbf{k}^e \leftarrow \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{g}^e \mathbf{X}^e, \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{g}^e, \partial_{\theta} \mathbf{g}^e, \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_{\theta}^e, \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r}_{\theta}^e, \partial_{\theta} \mathbf{r}_{\theta}^e, \partial_{\dots} \mathbf{r}_{\theta}^e,$
	Assembliere
	$\mathbf{R}_{ni} \leftarrow \mathbf{R}^e, \quad \check{\mathbf{K}}_n^{\check{w}} \leftarrow \mathbf{k}^e$

Eigenschaft der Koinzidenzmatrizen

$$\mathbf{z}_{\bar{\mathbf{q}}}^{\bar{\mathbf{e}}} \Big|_{\bar{\xi}_k} \mathbf{z}_{\mathbf{q}}^{\mathbf{T}} \Big|_{\xi_k} = \begin{cases} \mathbf{I} & \text{für } \bar{\mathbf{e}} = \mathbf{e} \quad \wedge \quad \bar{\xi}_k = \xi_k, \\ \mathbf{0} & \text{sonst,} \end{cases} \quad (5.142)$$

die eine Einheitsmatrix $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{n_q \times n_q}$ ergeben, wenn das Produkt an dem selben Gauspunkt ausgeführt wird, formuliert werden. Dementsprechend können die Matrizen der Gleichungssysteme, die aufgrund der Verfahrensvorschrift zum jedem Zeitschritt t_n berechnet werden, in die lokale Form

$$\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_n = \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{k=1}^{n_{GP}} \mathbf{z}_{\mathbf{q}k}^{\mathbf{T}} \frac{\partial \tilde{\mathbf{r}}^e(\mathbf{C}^e(\xi_k), \theta^e(\xi_k), \mathbf{q}^e(\xi_k))}{\partial \mathbf{q}^e(\xi_k)} \mathbf{z}_{\mathbf{q}k}^e, \quad (5.143)$$

und

$$\partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r}_n = 2 \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{k=1}^{n_{GP}} \mathbf{z}_{\mathbf{q}k}^{\mathbf{T}} \frac{\partial \tilde{\mathbf{r}}^e(\mathbf{C}^e(\xi_k), \theta^e(\xi_k), \mathbf{q}^e(\xi_k))}{\partial \mathbf{C}^e(\xi_k)} \tilde{\mathbf{B}}^e(\xi_k) \mathbf{z}^e, \quad (5.144)$$

überführt werden. Die Matrix $\tilde{\mathbf{B}}^e = \mathbf{F}_{23}^{e\mathbf{T}} \mathbf{B}^e$ resultiert aus der impliziten Abhängigkeit des rechten Cauchy-Green Tensors $\mathbf{C}^e = 2\mathbf{E}^e(\mathbf{u}^e) + \mathbf{I}$ von den Verschiebungen, indem die Kettenregel

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{r}}^e}{\partial \mathbf{u}^e} = \frac{\partial \tilde{\mathbf{r}}^e}{\partial \mathbf{C}^e} \frac{\partial \mathbf{C}^e}{\partial \mathbf{E}^e} \frac{\partial \mathbf{E}^e}{\partial \mathbf{u}^e} = 2 \frac{\partial \tilde{\mathbf{r}}^e}{\partial \mathbf{C}^e} \mathbf{F}_{23}^{e\mathbf{T}} \mathbf{B}^e \quad (5.145)$$

angewendet wird. Mit Einführung der lokalen Formulierungen der Matrizen, d.h. der Formulierung der Matrizen am Gauss-Punkt

$$\mathbf{x}_n^u = \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{k=1}^{n_{GP}} \mathbf{z}_{qk}^{eT} \mathbf{X}_u^e(\xi_k) \tilde{\mathbf{B}}^e(\xi_k) \mathbf{z}^e, \quad \mathbf{x}_n^\Theta = \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{k=1}^{n_{GP}} \mathbf{z}_{qk}^{eT} \mathbf{X}_\Theta^e(\xi_k) \mathbf{N}^{eT}(\xi_k) \mathbf{z}^e, \quad (5.146)$$

und der lokalen Formulierung des Vektors

$$\mathbf{x}_{ni}^q = \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{k=1}^{n_{GP}} \mathbf{z}_{qk}^{eT} \mathbf{x}^e(\xi_k), \quad (5.147)$$

sowie der Ausnutzung von (5.143) und (5.144) und einer anschließenden Faktorisierung der Koinzidenzmatrizen wird es offensichtlich, dass statt der globalen Gleichungen (5.114) und (5.128a) lediglich die Gleichungssysteme

$$\left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{r}}^e(\mathbf{C}_k^e, \boldsymbol{\theta}_k^e, \mathbf{q}_k^e)}{\partial \mathbf{q}_k^e} - \hat{\gamma} \mathbf{I} \right] [\mathbf{x}_{uk}^e \mid \mathbf{x}_k^e] = \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{r}}^e(\mathbf{C}_k^e, \boldsymbol{\theta}_k^e, \mathbf{q}_k^e)}{\partial \mathbf{C}_k^e} \mid \mathbf{F}_k^{qe} \right], \quad (5.148)$$

der Dimension n_q an den Gauss-Punkten ξ_k auszuwerten sind, womit der Aufwand zur Berechnung der inneren Variablen praktisch durch das Lösen obiger linearer Gleichungssysteme wiedergegeben ist. Hierin wird (5.105a) durch den Vektor \mathbf{F}_k^{qe} am Gauss-Punkt repräsentiert. In einer klassischen nichtlinearen FE-Implementierung sind an den Gauss-Punkten hingegen nichtlineare Gleichungssysteme der Dimension des Materialmodells zu berechnen. Es sei hier angemerkt, dass in (5.148) aufgrund der Anschaulichkeit nur \mathbf{X}_u^e dargestellt ist. Die Berechnung von \mathbf{X}_Θ^e am Gauss-Punkt erfolgt in gleicher Form, außer dass auf der rechten Seite des Gleichungssystem die Evolutionsgleichung nach den Knotentemperaturen abzuleiten ist, $\partial \tilde{\mathbf{r}}^e / \partial \boldsymbol{\theta}^e$.

Die diskreten Größen der Feldgleichungen auf lokaler Ebene bilden sich offensichtlich direkt aus dem FE-Ansatz, d.h. aus der Wahl der Elementformulierung. Für eine gemischte Elementformulierung ergibt sich, wie zuvor vorgestellt, die Gleichgewichtsbedingung (4.36) und in diskreter Form (5.59), die einerseits von den deviatorischen Spannungen²⁵ abhängt, welche eine Funktion aller primären Variablen ist, und andererseits linear von dem Verschiebungsgradienten. Im Zusammenhang mit der Linearisierung nach (5.130a) folgt aus der Differentiation nach den Verschiebungen (I) ein konstitutiver Anteil, der aufgrund der inelastischen Konstitutivbeziehung aus der physikalischen Nichtlinearität hervorgeht, und (II) ein resultierender Anteil der mechanischen Steifigkeit, der auf die geometrische Nichtlinearität zurückzuführen ist. (III) Zudem liegen Terme vor, die aufgrund der Volumendehnung der gemischten Formulierung zu berücksichtigen sind. Insgesamt ist festzuhalten, dass die Ableitung in drei Summanden zerlegbar ist

$$\partial_u \mathbf{g}_n := \partial_u \mathbf{g}_n^{(I)} + \partial_u \mathbf{g}_n^{(II)} + \partial_u \mathbf{g}_n^{(III)}. \quad (5.149)$$

²⁵Aufgrund der gemischten Elementformulierung, in der die Volumendehnungen über eine eingeführte Variable explizit betrachtet wird, gehen hier deviatorische Anteile der Spannung ein.

Steifigkeitsanteil (I) von (5.130a): Mit der zuvor definierten Beziehung (5.146)₁ und der additiven Zerlegung der Materialgleichung, in einen Gleichgewichtsanteil, der unabhängig von den inneren Variablen ist, und einen Überspannungsanteil,²⁶ der die inelastischen Spannungsanteile berücksichtigt, kann zunächst durch

$$[\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{g}_n] \mathbf{X}_n^u = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \left[\int_{\Omega_e} \mathbf{B}^{eT} \mathbf{F}_{23}^e \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}}^e(\mathbf{C}^e, \mathbf{q}^e)}{\partial \mathbf{q}^e} \mathbf{X}^e \mathbf{F}_{23}^{eT} \mathbf{B}^e d\Omega_e \right] \mathbf{z}^e, \quad (5.150)$$

ein Anteil der konstitutiven Elementsteifigkeitsmatrix vorweggenommen werden. Mit dem verbleibenden konstitutiven Anteil, des aus der Differentiation bei konstanter Deformation resultiert, lässt sich der Beitrag der Elementsteifigkeit (5.130a) in materieller Form folgend

$$\partial_u \mathbf{g}_n^{(I)} - \partial_{\mathbf{q}} \mathbf{g}_n \mathbf{X}_n^u = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \left[\int_{\Omega_e} \mathbf{B}^{eT} \mathbf{F}_{23}^e \tilde{\mathbf{C}}_M^e \mathbf{F}_{23}^{eT} \mathbf{B}^e d\Omega_e \right] \mathbf{z}^e, \quad (5.151)$$

angeben. Hierin ist der Tangentenoperator durch

$$\tilde{\mathbf{C}}_M^e := 2 \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}^e(\mathbf{C}^e, \boldsymbol{\theta}^e, \mathbf{q}^e)}{\partial \mathbf{C}^e} - \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}}^e(\mathbf{C}^e, \mathbf{q}^e)}{\partial \mathbf{q}^e} \mathbf{X}^e, \quad (5.152)$$

definiert, worin der erste Summand

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}^e(\mathbf{C}^e, \boldsymbol{\theta}^e, \mathbf{q}^e)}{\partial \mathbf{C}^e} = \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}e}(\mathbf{C}^e, \boldsymbol{\theta}^e)}{\partial \mathbf{C}^e} + \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}}^e(\mathbf{C}^e, \mathbf{q}^e)}{\partial \mathbf{C}^e}, \quad (5.153)$$

aufgrund des Materialmodells wiederum additiv zerlegt werden kann. Anhand des deviatorischen Spannungszustands des Gleichgewichtsanteils ist nur der isochore Anteil der Deformation in dem ersten Term involviert.

Steifigkeitsanteil (II) von (5.130a): Der aus der geometrischen Nichtlinearität herführende Steifigkeitsanteil berechnet sich aus der Linearisierung bei konstanten Spannungen. In Bezug auf die in [Hartmann, 2003] dargestellte Konvention lässt sich dieser Anteil für eine räumliche Formulierung des gemischten Elements in der Matrixnotation

$$\partial_u \mathbf{g}_n^{(II)} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \left[\int_{\Omega_e} \mathbf{B}_{\text{NL}}^{eT} \mathbf{M}_S^e \mathbf{B}_{\text{NL}}^e d\Omega_e \right] \mathbf{z}^e, \quad (5.154)$$

²⁶Siehe Abschnitt 3

angeben. Die in diesem Anteil der Steifigkeitsmatrix eingehende Diskretisierung des Verschiebungsgradienten ist durch die Matrix

$$\mathbf{B}_{\text{NL}}^e = \begin{bmatrix} n_{1,x}^e & 0 & 0 & n_{2,x}^e & 0 & 0 & \dots & n_{n_{\text{en}},x}^e & 0 & 0 \\ 0 & n_{1,y}^e & 0 & 0 & n_{2,y}^e & 0 & \dots & 0 & n_{n_{\text{en}},y}^e & 0 \\ 0 & 0 & n_{1,z}^e & 0 & 0 & n_{2,z}^e & \dots & 0 & 0 & n_{n_{\text{en}},z}^e \\ n_{1,y}^e & 0 & 0 & n_{2,y}^e & 0 & 0 & \dots & n_{n_{\text{en}},y}^e & 0 & 0 \\ 0 & n_{1,z}^e & 0 & 0 & n_{2,z}^e & 0 & \dots & 0 & n_{n_{\text{en}},z}^e & 0 \\ 0 & 0 & n_{1,x}^e & 0 & 0 & n_{2,x}^e & \dots & 0 & 0 & n_{n_{\text{en}},x}^e \\ n_{1,z}^e & 0 & 0 & n_{2,z}^e & 0 & 0 & \dots & n_{n_{\text{en}},z}^e & 0 & 0 \\ 0 & n_{1,x}^e & 0 & 0 & n_{2,x}^e & 0 & \dots & 0 & n_{n_{\text{en}},x}^e & 0 \\ 0 & 0 & n_{1,y}^e & 0 & 0 & n_{2,y}^e & \dots & 0 & 0 & n_{n_{\text{en}},y}^e \end{bmatrix}, \quad (5.155)$$

berücksichtigt. Zudem gehen in die Beziehung (5.154) die Komponenten des Kirchhoff'schen Spannungsvektors $\mathbf{S}^D + J\tilde{\mathbf{N}}^T\mathbf{H}^{-1}\mathbf{s}_p \mathbf{e}$ aus (5.59),²⁷ über die Matrix

$$\mathbf{M}_S^e = \begin{bmatrix} s_{11}^e & 0 & 0 & s_{12}^e & 0 & 0 & s_{13}^e & 0 & 0 \\ 0 & s_{22}^e & 0 & 0 & s_{23}^e & 0 & 0 & s_{12}^e & 0 \\ 0 & 0 & s_{33}^e & 0 & 0 & s_{13}^e & 0 & 0 & s_{23}^e \\ s_{12}^e & 0 & 0 & s_{22}^e & 0 & 0 & s_{23}^e & 0 & 0 \\ 0 & s_{23}^e & 0 & 0 & s_{33}^e & 0 & 0 & s_{13}^e & 0 \\ 0 & 0 & s_{13}^e & 0 & 0 & s_{11}^e & 0 & 0 & s_{12}^e \\ s_{13}^e & 0 & 0 & s_{23}^e & 0 & 0 & s_{33}^e & 0 & 0 \\ 0 & s_{12}^e & 0 & 0 & s_{13}^e & 0 & 0 & s_{11}^e & 0 \\ 0 & 0 & s_{23}^e & 0 & 0 & s_{12}^e & 0 & 0 & s_{22}^e \end{bmatrix}, \quad (5.156)$$

in die obige Gleichung ein. (5.156) kann mittels des Operators $[\mathbf{I} \otimes \mathbf{F}^T]^{T_{23}}$, welche in eine Matrixform $\mathbf{F}_T^e \in \mathbb{R}^{9 \times 9}$ überführt werden kann, siehe [Hartmann, 2003], auf die materielle Darstellung

$$\mathbf{M}_S^e = \mathbf{F}_T^{eT} \mathbf{M}_T^e \mathbf{F}_T^e, \quad (5.157)$$

transformiert werden.

Steifigkeitsanteil (III) von (5.130a): Abschließend sei noch der konstitutive Anteil betrachtet, der aus dem Kugelanteil der der Spannung aufgrund der gemischten Elementformulierung hervorgeht. Infolge der impliziten Abhängigkeit der Volumendehnung von den Verschiebungen resultiert durch die notwendige Rücktransformation auf die Referenzkonfiguration, der anschließenden Linearisierung und der Vortransformation auf die

²⁷Der Kirchhoff'sche Spannungstensor \mathbf{S} ist symmetrisch und kann daher in einer Matrixform folgenderweise definiert $\mathbf{S} = \{s_{11}, s_{22}, s_{33}, s_{12}, s_{23}, s_{13}\}^T$ werden.

5. Konsistente Raum- Zeitsdiskretisierung

Momentankonfiguration zunächst²⁸ der Beitrag

$$\partial_{\mathbf{u}} \mathbf{g}_n^{(\text{III-a})} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \left[\int_{\Omega_e} \lambda_p^e J^e \mathbf{B}^{eT} (\mathbf{e}\mathbf{e}^T - 2\mathbf{I}) \mathbf{B}^e d\Omega_e \right] \mathbf{z}^e. \quad (5.158)$$

Ein weiterer Term ergibt sich aus der Linearisierung des hydrostatischen Drucks, dass durch die Gleichung

$$\partial_{\mathbf{u}} \mathbf{g}_n^{(\text{III-b})} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} [\mathbf{k}_s^{eT} \mathbf{k}_p \mathbf{k}_s^e] \mathbf{z}^e, \quad (5.159)$$

mit

$$\mathbf{k}_s^e = \int_{\Omega_e} J^e \check{\mathbf{N}}^e \mathbf{e}^T \mathbf{B}^e d\Omega_e, \quad \mathbf{k}_p^e = \mathbf{H}^{e-1} \left[\int_{\Omega_e} \frac{\partial_R}{\theta_0} \frac{\mathbf{N}_{\Theta}^{eT} \boldsymbol{\theta}^e}{\varphi^e} U''' \left(\frac{\check{\mathbf{N}}^{eT} \boldsymbol{\Gamma}^e}{\varphi^e} \right) \check{\mathbf{N}}^e \check{\mathbf{N}}^{eT} d\Omega_e \right] \mathbf{H}^{e-1} \quad (5.160)$$

bestimmt ist. Aus der Summe beider Terme $\partial_{\mathbf{u}} \mathbf{g}^{(\text{III})} = \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{g}^{(\text{III-a})} + \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{g}^{(\text{III-b})}$ erhält man somit den Steifigkeitsanteil der Kugelspannungen, die de facto nur die volumetrische Deformation berücksichtigt. Mit (5.151) und (5.154) sowie (5.158) und (5.159) sind alle Terme der Elementsteifigkeitsmatrix bestimmt, die den Beitrag der Gesamtsteifigkeit nach (5.130a) definieren.

Steifigkeitsanteile von (5.130b): Im Weiteren wird die Elementformulierung der Blockmatrix nach (5.130b) näher betrachtet. Die Berechnung der Matrix \mathbf{X}_n^{Θ} erfolgt in Analogie zu dem zuvor hergeleitetem Gleichungssystem (5.148). In diesem Fall ist allerdings die Ableitung der diskreten Evolutionsgleichung nach den Temperaturen zu bestimmen. Diese berechnet sich am Element gemäß

$$\partial_{\Theta} \mathbf{r}_n = \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{k=1}^{n_{GP}} \mathbf{z}^{eT} \frac{\partial \tilde{\mathbf{r}}^e(\mathbf{C}^e(\boldsymbol{\xi}_k), \boldsymbol{\theta}^e(\boldsymbol{\xi}_k), \mathbf{q}^e(\boldsymbol{\xi}_k))}{\partial \boldsymbol{\theta}^e(\boldsymbol{\xi}_k)} \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\boldsymbol{\xi}_k) \mathbf{z}_{\Theta}^e. \quad (5.161)$$

Die Differentiation der Gleichgewichtsbedingung nach den Temperaturen gelingt, indem zum einen die deviatorischen Spannungen berücksichtigt werden, die linear von den Temperaturen abhängen, und zum anderen die Abhängigkeit der Volumendehnung von der Temperatur, welche in dem Kugelanteil der Spannung vorliegt

$$\partial_{\Theta} \mathbf{g}_n = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \left[\int_{\Omega_e} \mathbf{B}^{eT} \left\{ \frac{1}{\theta^h} \mathbf{S}_{eq}^D + J^e \mathbf{e} \check{\mathbf{N}}^{eT} \mathbf{H}^{e-1} \mathbf{m}_p^e \right\} \mathbf{N}_{\Theta}^{eT} d\Omega_e \right] \mathbf{z}_{\Theta}^e. \quad (5.162)$$

²⁸Es sei hier angemerkt, dass dieser Prozess, d.h. Rücktransformation–Linearisierung–Vortransformation selbstverständlich auch für alle anderen Anteile durchgeführt wird.

Die partielle Ableitung des hydrostatischen Drucks nach der Temperatur des Kugelanteils ist aus der diskreten Form, siehe (5.55)₂, zu bilden, woraus der Vektor

$$\mathbf{m}_p^e = \int_{\Omega_e} \varrho_R \beta^h \check{\mathbf{N}}^e d\Omega_e, \quad (5.163)$$

resultiert, der über die skalare Funktion

$$\beta^h = \frac{\theta}{\theta_0} \frac{\varphi'}{\varphi^2} \left(\left(\frac{1}{\theta} \frac{\varphi}{\varphi'} - 1 \right) U' \left(\frac{\Gamma}{\varphi} \right) - \frac{\Gamma}{\varphi} U'' \left(\frac{\Gamma}{\varphi} \right) \right), \quad (5.164)$$

definiert ist. In obiger Gleichung sind selbstverständlich alle unabhängigen Variablen diskretisiert zu behandeln, d.h. es gilt $\theta^h = \mathbf{N}_\Theta^{eT} \boldsymbol{\theta}^e$, $\Gamma^h = \check{\mathbf{N}}^{eT} \boldsymbol{\Gamma}^e$ und $\varphi^h = \varphi(\theta^h)$.²⁹ Zur Vervollständigung von (5.130b) ist noch der Beitrag aus den Überspannungen hinzuzufügen. Dieser Anteil wird aus der zuvor ermittelten Matrix \mathbf{X}_Θ^e durch

$$[\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{g}_n] \mathbf{X}_n^\Theta = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \left[\int_{\Omega_e} \mathbf{B}^{eT} \mathbf{F}_{23} \frac{\partial \check{\mathbf{T}}_{ov}^e(\mathbf{C}^e, \mathbf{q}^e)}{\partial \mathbf{q}^e} \mathbf{X}_\Theta^e \mathbf{N}_\Theta^{eT} d\Omega_e \right] \mathbf{z}_\Theta^e, \quad (5.165)$$

berechnet. Damit ist der Steifigkeitsanteil nach (5.130b) aus der Summe von (5.162) und (5.165) vollständig beschrieben, wodurch der Tangentenoperator

$$\mathbf{C}_t^e = \frac{1}{\theta^e} \mathbf{S}_{eq}^{eD} - \mathbf{F}_{23} \frac{\partial \check{\mathbf{T}}_{ov}^e}{\partial \mathbf{q}^e} \mathbf{X}_\Theta^e, \quad (5.166)$$

aufgestellt wird. Die Herleitung aller Gleichungen des mechanischen Anteils der Steifigkeitsmatrix, der aus der Gleichgewichtsbedingung entwickelt wird, ist für das hier behandelte Materialverhalten abgeschlossen.

Steifigkeitsanteile von (5.130c) und (5.130d): Die Anteile der Steifigkeitsmatrix nach (5.130c) und (5.130d) ergeben sich aus der Linearisierung der Wärmeleitungsgleichung bzw. seiner rechten Seite (5.136). Offensichtlich implizieren diese Terme unterschiedliche Beiträge zu der Steifigkeitsmatrix. Es ist daher naheliegend, die Anteile einzeln zu betrachten, wie im Folgenden dargestellt wird.

Angesichts der zu berücksichtigenden Abhängigkeit der rechten Seite der Wärmeleitungsgleichung (5.136) von den primären Variablen, genügt es, für die Differentiation nach den inneren Variablen ausschließlich den Dissipationsterm

$$\mathbf{d}^e(\mathbf{u}^e, \boldsymbol{\theta}^e, \mathbf{q}^e) = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \int_{\Omega_e} \varrho_R \delta^e \mathbf{N}_\Theta^e d\Omega_e, \quad (5.167)$$

²⁹Der Index $(\cdot)^h$ ist zugunsten der Übersichtlichkeit in (5.164) weggelassen worden.

5. Konsistente Raum- Zeiddiskretisierung

mit $\delta^e = \delta^h(\mathbf{u}^e, \boldsymbol{\theta}^e, \mathbf{q}^e)$ einzubeziehen. Hierdurch erhält man für das Produkt aus der Ableitung nach den inneren Variablen und den Matrizen nach (5.146) mit Einbeziehung der Eigenschaft (5.142) die lokale Formulierung

$$[\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_{\Theta n}] \mathbf{X}_n^u = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_{\Theta}^{eT} \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_{\Theta}^e \left\{ \mathbf{C}_{\delta_q}^{eT} \mathbf{X}_u^e \right\} \mathbf{F}_{23}^{eT} \mathbf{B}^e d\Omega_e \mathbf{z}^e, \quad (5.168)$$

und

$$[\partial_{\mathbf{q}} \mathbf{r}_{\Theta n}] \mathbf{X}_n^{\Theta} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_{\Theta}^{eT} \int_{\Omega_e} \left(\mathbf{C}_{\delta_q}^{eT} \mathbf{X}_{\Theta}^e \right) \mathbf{N}_{\Theta}^e \mathbf{N}_{\Theta}^{eT} d\Omega_e \mathbf{z}_{\Theta}^e. \quad (5.169)$$

Der oben eingeführte Tangentenoperator resultiert aus der Ableitung des inelastischen Dissipationsterms nach den inneren Variablen. Es gilt $\mathbf{C}_{\delta_q}^e := \rho_R \partial \delta^e / \partial \mathbf{q}^e$. Zur Berechnung der weiteren Terme der Steifigkeitsmatrix nach (5.130c) und (5.130d) ist die Ableitung von (5.136) nach den Verschiebungen und Temperaturen zu formulieren. Es werden wie zuvor für die Gleichgewichtsbedingung die Terme einzeln aufgestellt. Für die Ableitung nach den Verschiebungen gilt formal die Zerlegung

$$\partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r}_{\Theta n} = \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r}_{\Theta}^{(I)} + \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r}_{\Theta}^{(II)} + \partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r}_{\Theta}^{(III)}. \quad (5.170)$$

Der erste Beitrag wird aus der Ableitung des Terms $\mathbf{C}_{\kappa}(\mathbf{u}^e, \boldsymbol{\theta}^e) \boldsymbol{\theta}^e$ nach den Verschiebungen gebildet, der aus der Wärmeleitfähigkeitsmatrix in lokaler Form hervorgeht

$$\mathbf{C}_{\kappa} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_{\Theta}^{eT} \int_{\Omega_e} J^e \kappa^e \mathbf{B}_{\Theta}^{eT} \mathbf{B}_{\Theta}^e d\Omega_e. \quad (5.171)$$

Die Verschiebungen gehen durch die spezifische Wärmeleitfähigkeit $\kappa^e = \kappa^h(\mathbf{u}^e, \boldsymbol{\theta}^e)$ in das Element ein, dessen Differentiation auf den lokalen Ausdruck

$$\partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r}_{\Theta}^{(I)} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_{\Theta}^{eT} \left[\int_{\Omega_e} \kappa^e J^e \left[\mathbf{B}_{\Theta}^{eT} (\mathbf{B}_{\Theta}^e \boldsymbol{\theta}^e) \mathbf{e}^T - 2 \hat{\mathbf{M}}_{\text{NL}}^e \right] \mathbf{B}^e d\Omega_e \right] \mathbf{z}^e, \quad (5.172)$$

führt und aufgrund der Materialgleichung³⁰ aus einem konstitutiven Anteil und einem weiteren Anteil gebildet wird, der aus der geometrischen Nichtlinearität resultiert. Dieser Anteil wird durch die Matrix

$$\hat{\mathbf{M}}_{\text{NL}}^{eT} = \begin{bmatrix} n_{1,x}^e(n_{a,x}^e \theta_a) & \dots & n_{n_{\text{en}},x}^e(n_{a,x}^e \theta_a) \\ n_{1,y}^e(n_{a,y}^e \theta_a) & \dots & n_{n_{\text{en}},y}^e(n_{a,y}^e \theta_a) \\ n_{1,z}^e(n_{a,z}^e \theta_a) & \dots & n_{n_{\text{en}},z}^e(n_{a,z}^e \theta_a) \\ n_{1,x}^e(n_{a,y}^e \theta_a) + n_{1,y}^e(n_{a,x}^e \theta_a) & \dots & n_{n_{\text{en}},x}^e(n_{a,y}^e \theta_a) + n_{n_{\text{en}},y}^e(n_{a,x}^e \theta_a) \\ n_{1,y}^e(n_{a,z}^e \theta_a) + n_{1,z}^e(n_{a,y}^e \theta_a) & \dots & n_{n_{\text{en}},y}^e(n_{a,z}^e \theta_a) + n_{n_{\text{en}},z}^e(n_{a,y}^e \theta_a) \\ n_{1,x}^e(n_{a,z}^e \theta_a) + n_{1,z}^e(n_{a,x}^e \theta_a) & \dots & n_{n_{\text{en}},x}^e(n_{a,z}^e \theta_a) + n_{n_{\text{en}},z}^e(n_{a,x}^e \theta_a) \end{bmatrix}, \quad (5.173)$$

³⁰Die Wärmeleitfähigkeit des Materials ist durch das Modell des Fourier'schen Wärmeflusses nach (3.47) charakterisiert.

repräsentiert.³¹ Die Matrix \mathbf{B}_Θ^e , nach (5.33), symbolisiert den räumlich diskretisierten Gradientenoperator, der aus der Ableitung der Ansatzfunktion nach den räumlichen Koordinaten zusammensetzt ist und zur Berechnung des Temperaturgradienten $\text{grad } \theta$ herangezogen wird.

Der zweite Summand aus (5.170) beschreibt den Tangentenanteil, der aus der Linearisierung des thermoelastischen Kopplungsterms (5.137) entsteht. In einer diskreten Form, basierend auf einer gemischten Elementformulierung erhält man für den Kopplungsterm

$$\mathbf{p}(\mathbf{u}^e, \theta^e, \mathbf{y}_u^e) = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_\Theta^e (\mathbf{N}_\Theta^{eT} \theta^e) \left\{ \frac{1}{\theta^h} \mathbf{S}_{\text{eq}}^{eD} + J^e \mathbf{e} \check{\mathbf{N}}^{eT} \mathbf{H}^{e-1} \mathbf{m}_p^e \right\}^T \mathbf{B}^e d\Omega_e \mathbf{y}_u^e. \quad (5.174)$$

Die lineare Abhängigkeit von den Verzerrungsraten, die aufgrund der Rosenbrock-Verfahren über die Variable \mathbf{y}_u^e substituiert ist, siehe (5.137), bleibt natürlich auf lokaler Ebene erhalten und es gelingt, mit $\mathbf{S}_p^e := \mathbf{S}_{\text{eq}}^{eD} + J^e \mathbf{e} (\mathbf{N}^{eT} \theta^e) \check{\mathbf{N}}^{eT} \mathbf{H}^{e-1} \mathbf{m}_p^e$ die abkürzende Darstellung

$$\mathbf{p}(\mathbf{u}^e, \theta^e, \mathbf{y}_u^e) = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \mathbf{P}^e(\mathbf{u}^e, \theta^e) \mathbf{y}_u^e, \quad \text{mit} \quad \mathbf{P}^e = \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_\Theta^e \mathbf{S}_p^{eT} \mathbf{B}^e d\Omega_e, \quad (5.175)$$

für (5.174) zu formulieren. Wird die Linearisierung ausgeführt, so ist zum einen ein Anteil zu berücksichtigen, der lediglich auf einen isochoren Deformationszustand zurückzuführen ist, und ein weiterer, welcher aus dem volumetrischen Anteil der Deformation abgeleitet wird. Dementsprechend resultiert die lokale Gleichung auf Elementebene

$$\partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r}_\Theta^{(II)} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \left[\int_{\Omega_e} J^e \mathbf{N}_\Theta^e \mathbf{y}_u^{eT} \mathbf{B}^{eT} \mathbf{C}_\Theta^{pe} \mathbf{B}^e d\Omega_e + \mathbf{k}_s^{pe} \mathbf{k}_p^{pe} \mathbf{k}_s^e \right] \mathbf{z}^e. \quad (5.176)$$

Der Tangentenoperator

$$\mathbf{C}_\Theta^{pe} = \mathbf{C}_{\text{eq}}^{\text{iso}e} + (\mathbf{N}_\Theta^{eT} \theta^e) \check{\mathbf{N}}^{eT} \mathbf{H}^{e-1} \mathbf{m}_p^e [\mathbf{e} \mathbf{e}^T \mathbf{M} - 2\mathbf{I}], \quad (5.177)$$

korrespondiert entsprechend der gemischten Formulierung und wird aus einem Anteil $\mathbf{C}_{\text{eq}}^{\text{iso}e} = \partial \mathbf{T}_{\text{eq}}^{\text{iso}} / \partial \mathbf{C}$ aufgestellt, welcher über den isochoren Deformationszustand definiert ist. Der zweite Anteil in (5.177) geht aus den Kugelspannungen hervor, somit aus den volumetrischen Deformationen. Weiterhin resultieren aus dem Kugelspannungszustand die Steifigkeitsanteile

$$\mathbf{k}_s^{pe} = \int_{\Omega_e} J^e \mathbf{N}_\Theta^e \mathbf{y}_u^{eT} (\mathbf{N}_\Theta^{eT} \theta^e) \mathbf{B}^{eT} \mathbf{e} \check{\mathbf{N}}^{eT} d\Omega_e, \quad \mathbf{k}_p^{pe} = \mathbf{H}^{e-1} \left[\int_{\Omega_e} \varrho_R \frac{\partial \beta^h}{\partial \Gamma} \check{\mathbf{N}}^e \check{\mathbf{N}}^{eT} d\Omega_e \right] \mathbf{H}^{e-1}. \quad (5.178)$$

³¹Eine Herleitung dieser Matrix ist im Anhang A.3 ausführlich dargestellt.

5. Konsistente Raum- Zeitdiskretisierung

Diese Größen entsprechen der Linearisierung von β^h nach den Verschiebungen in diskreter Form. Hierbei wird die implizite Abhängigkeit von den Volumendehnungen ausgenutzt, womit die skalare Funktion

$$\frac{\partial \beta^h}{\partial \Gamma} = \frac{\theta}{\theta_0} \frac{\varphi'}{\varphi^2} \left(\left(1 - \frac{1}{\theta} \frac{\varphi}{\varphi'} \right) U' \left(\frac{\Gamma}{\varphi} \right) - \left(3 - \frac{1}{\theta} \frac{\varphi}{\varphi'} \right) \frac{\Gamma}{\varphi} U'' \left(\frac{\Gamma}{\varphi} \right) + \frac{\Gamma^2}{\varphi^2} U''' \left(\frac{\Gamma}{\varphi} \right) \right), \quad (5.179)$$

gebildet werden kann. Analog zu (5.164) werden alle unabhängigen Variablen als diskrete Größen im Element berechnet. Der dritte Beitrag aus (5.170) wird aus der Differentiation des inelastischen Dissipationsterms der Wärmeleitungsgleichung nach dem Verschiebungsfeld gebildet, und es gilt in lokaler Form

$$\partial_{\mathbf{u}} \mathbf{r}_{\Theta}^{(\text{III})} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_{\Theta}^{eT} \left[\int_{\Omega_e} \mathbf{N}_{\Theta}^e \mathbf{C}_{\delta_u}^e \mathbf{F}_{23}^{eT} \mathbf{B}^{eT} d\Omega_e \right] \mathbf{z}^e, \quad (5.180)$$

mit dem resultierendem Tangentenoperator $\mathbf{C}_{\delta_u}^e := 2 \varrho_R \partial \delta^e / \partial \mathbf{C}^e$. Damit sind alle Steifigkeitsanteile nach (5.170) dargestellt, und es werden im Folgenden die Ableitungen nach den Temperaturen

$$\partial_{\Theta} \mathbf{r}_{\Theta n} = \partial_{\Theta} \mathbf{r}_{\Theta}^{(\text{I})} + \partial_{\Theta} \mathbf{r}_{\Theta}^{(\text{II})} + \partial_{\Theta} \mathbf{r}_{\Theta}^{(\text{III})}, \quad (5.181)$$

auf Elementebene formuliert. Über die Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärmeleitfähigkeit wird der erste Term gebildet und man gelangt zur Gleichung

$$\partial_{\Theta} \mathbf{r}_{\Theta}^{(\text{I})} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_{\Theta}^{eT} \left[\int_{\Omega_e} J^e \frac{\partial \kappa^h}{\partial \theta} \mathbf{B}_{\Theta}^{eT} (\mathbf{B}_{\Theta}^e \theta^e) \mathbf{N}_{\Theta}^{eT} + J^e \kappa^h \mathbf{B}_{\Theta}^{eT} \mathbf{B}_{\Theta}^e d\Omega_e \right] \mathbf{z}_{\Theta}^e. \quad (5.182)$$

Der zweite Anteil resultiert aus der thermoelastischen Kopplung (5.174). Durch die Differentiation dieser Gleichung nach den Knotentemperaturen gelingt die Herleitung des zweiten Terms

$$\partial_{\Theta} \mathbf{r}_{\Theta}^{(\text{II})} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_{\Theta}^{eT} \left[\int_{\Omega_e} \mathbf{N}_{\Theta}^e \mathbf{y}_u^{eT} \mathbf{B}^{eT} \left\{ \frac{1}{\theta^e} \mathbf{S}_{\text{eq}}^{\text{eD}} + J^e \mathbf{e} \check{\mathbf{N}}^{eT} \mathbf{H}^{e-1} (\mathbf{m}_p^e + \theta^h \mathbf{m}_p^{e'}) \right\} \mathbf{N}_{\Theta}^{eT} d\Omega_e \right] \mathbf{z}_{\Theta}^e, \quad (5.183)$$

mit

$$\mathbf{m}_p^{e'} = \int_{\Omega_e} \varrho_R \frac{\partial \beta^h}{\partial \theta} \check{\mathbf{N}}^e d\Omega_e. \quad (5.184)$$

Der abschließende Steifigkeitsanteil aus (5.181) wird über die Ableitung des inelastischen Dissipationsterms gebildet, der in lokaler Form durch

$$\partial_{\Theta} \mathbf{r}_{\Theta}^{(\text{III})} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_{\Theta}^{eT} \left[\int_{\Omega_e} \varrho_R \frac{\partial \delta^e}{\partial \theta} \mathbf{N}_{\Theta}^e \mathbf{N}_{\Theta}^{eT} d\Omega_e \right] \mathbf{z}_{\Theta}^e, \quad (5.185)$$

mit dem skalarwertigen Tangentenoperator $\varrho_R \partial \delta^e / \partial \theta = \varrho_R \partial \delta^h / \partial \theta|_{\theta=\theta^h(\theta^e)}$ angegeben werden kann. Zur vollständigen Angabe der Steifigkeitsanteile verbleiben noch drei Anteile aus (5.130c) und (5.130d). Für die Wärmekapazitätsmatrix (5.36) in einer lokalen Form gilt

$$\check{\mathbf{C}}_p = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \int_{\Omega_e} \varrho_R c_p^e \mathbf{N}_\Theta^e \mathbf{N}_\Theta^{eT} d\Omega_e, \quad (5.186)$$

mit der spezifischen Wärmekapazität $c_p^e := c_p^h(\theta^e)$, die in Abhängigkeit der diskreten Knotentemperaturen berechnet wird. Im Weiteren ist die Abhängigkeit von den Verzerrungsraten zu berücksichtigen. Diese leisten über die thermoelastische Kopplung einen Beitrag zur Elementsteifigkeit. Aus der Differentiation des Kopplungsterms (5.175) nach den substituierten Verzerrungsraten \mathbf{y}_u^e folgt die Elementformulierung

$$\partial_{\mathbf{y}_u} \mathbf{r}_{\Theta_n} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \mathbf{P}^e(\mathbf{u}^e, \theta^e). \quad (5.187)$$

Vervollständigt wird die Elementsteifigkeit durch die Elementgleichung

$$\partial_\Theta \{ \check{\mathbf{C}}_p \mathbf{y}_\Theta \}_n = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \left[\int_{\Omega_e} \varrho_R \frac{\partial c_p^e}{\partial \theta} (\mathbf{N}_\Theta^{eT} \mathbf{y}_\Theta^e) \mathbf{N}_\Theta^e \mathbf{N}_\Theta^{eT} d\Omega_e \right] \mathbf{z}_\Theta^e \quad (5.188)$$

mit dem skalarwertigen Tangentenoperator $\varrho_R \partial c_p^e / \partial \theta = \varrho_R \partial c_p^h / \partial \theta|_{\theta=\theta^h(\theta^e)}$. Dieser Anteil der Steifigkeit berücksichtigt die explizite Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärmekapazität. Eine Zusammenfassung der Steifigkeitsanteile nach (5.129) für die hier dargestellte, gemischte Elementformulierung ist in Tabelle 5.6 zu finden.

Für die Lösung des linearen Gleichungssystems bedarf es neben der Bereitstellung der Elementsteifigkeitsmatrix auch der Elementgleichung der rechten Seite nach (5.139). Der aus der Gleichgewichtsbedingung resultierende Anteil (5.140) wird im Element mittels der Gleichung

$$\mathbf{R}_{ni}^u(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^{eT} \left\{ \mathbf{h}^e + J^e \mathbf{e} \check{\mathbf{N}}^{eT} \mathbf{H}^{e-1} \mathbf{s}_p^e \right\} d\Omega_e, \quad (5.189)$$

bestimmt. Hierbei gilt für den lokalen Differenzvektor $\mathbf{h}^e = \mathbf{h}(\mathbf{q}^e, \mathbf{u}^e, \theta^e)|_{ni}$, der aufgrund von $\mathbf{S}^D = \mathbf{S}_{eq}^{iso} + \mathbf{F}_{23} \tilde{\mathbf{T}}_{ov}^e$ über die Differenz

$$\mathbf{h}^e = \mathbf{S}^{De} - \mathbf{F}_{23}^e \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{ov}^e}{\partial \mathbf{q}^e} \mathbf{x}^e = \mathbf{S}_{eq}^{iso e} - \mathbf{F}_{23}^e \left(\tilde{\mathbf{T}}_{ov}^e - \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{ov}^e}{\partial \mathbf{q}^e} \mathbf{x}^e \right), \quad (5.190)$$

berechnet wird. Für den thermischen Anteil der rechten Seite (5.141) sind bereits bei der Herleitung der Steifigkeitsmatrix alle Größen im Element beschrieben. Hier ist lediglich zu beachten, dass sie Größen die in die Steifigkeitsmatrix eingehen zum Zeitpunkt t_n ausgewertet werden und die Größen der rechten Seite zu jeder Stufe $T_{ni}, i = 1, \dots, s$.

Tabelle 5.6.: Zusammenfassung der Anteile der Elementsteifigkeitsmatrix

Anteil der Steifigkeitsmatrix nach (5.130a):

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{uu}^e = & \int_{\Omega_e} J^e \mathbf{B}^{eT} [\mathbf{C}_M^e + \lambda_p^e (\mathbf{e}\mathbf{e}^T - 2\mathbf{I})] \mathbf{B}^e d\Omega_e + \mathbf{k}_s^{eT} \mathbf{k}_p^e \mathbf{k}_s^e + \\ & + \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_{NL}^{eT} \mathbf{M}_S^e \mathbf{B}_{NL}^e d\Omega_e \end{aligned} \quad (5.151, 5.154, 5.158, 5.159)$$

Anteil der Steifigkeitsmatrix nach (5.130b):

$$\mathbf{K}_{u\theta}^e = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^{eT} \left\{ \mathbf{C}_t^e + J^e \check{\mathbf{N}}^{eT} \left(\mathbf{H}^{e-1} \mathbf{m}_p^e \right) \mathbf{e} \right\} \mathbf{N}_{\Theta}^{eT} d\Omega_e \quad (5.162, 5.165, 5.166)$$

Anteil der Steifigkeitsmatrix nach (5.130c):

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\theta u}^e = & \int_{\Omega_e} \kappa^e J^e \left[\mathbf{B}_{\Theta}^{eT} (\mathbf{B}_{\Theta}^e \theta^e) \mathbf{e}^T - \hat{\mathbf{M}}_{NL}^e \right] \mathbf{B}^e d\Omega_e + \mathbf{k}_s^{peT} \mathbf{k}_p^e \mathbf{k}_s^e + \\ & + \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_{\Theta}^e \left[\left\{ \mathbf{C}_{\delta_u}^e - \mathbf{C}_{\delta_q}^{eT} \mathbf{X}_u^e \right\} \mathbf{F}_{23}^{eT} + \hat{\gamma} \mathbf{S}_p^{eT} \right] \mathbf{B}^e d\Omega_e + \\ & + \int_{\Omega_e} J^e \mathbf{N}_{\Theta}^e \mathbf{y}_u^{eT} \mathbf{B}^{eT} \mathbf{C}_{\Theta}^{pe} \mathbf{B}^e d\Omega_e \end{aligned} \quad (5.168, 5.172, 5.176, 5.180, 5.187)$$

Anteil der Steifigkeitsmatrix nach (5.130d):

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\theta\theta}^e = & \int_{\Omega_e} J^e \left\{ \frac{\partial \kappa^h}{\partial \theta} \mathbf{B}_{\Theta}^{eT} (\mathbf{B}_{\Theta}^e \theta^e) \mathbf{N}_{\Theta}^{eT} + \kappa^h \mathbf{B}_{\Theta}^{eT} \mathbf{B}_{\Theta}^e \right\} d\Omega_e + \\ & + \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_{\Theta}^e \mathbf{y}_u^{eT} \mathbf{B}^{eT} \left\{ \frac{1}{\theta^h} \mathbf{S}_{eq}^{eD} + J^e \mathbf{e} \check{\mathbf{N}}^{eT} \mathbf{H}^{e-1} (\mathbf{m}_p^e + \theta^h \mathbf{m}_p^{e'}) \right\} \mathbf{N}_{\Theta}^{eT} d\Omega_e - \\ & - \int_{\Omega_e} \varrho_R \left(\hat{\gamma} c_p^e + \frac{\partial c_p^e}{\partial \theta} (\mathbf{N}_{\Theta}^{eT} \mathbf{y}_{\Theta}^e) + \frac{\partial \delta^e}{\partial \theta} + \frac{1}{\varrho_R} \mathbf{C}_{\delta_q}^{eT} \mathbf{X}_{\Theta}^e \right) \mathbf{N}_{\Theta}^e \mathbf{N}_{\Theta}^{eT} d\Omega_e \end{aligned} \quad (5.169, 5.182, 5.183, 5.185, 5.186, 5.188)$$

5.3.4. Adaptive Schrittweitenkontrolle

Der Gesamtaufwand bei praktischen Berechnungen ist im Wesentlichen davon abhängig, welche Genauigkeitsanforderungen an die Näherungslösung gestellt werden. Ist eine hohe Genauigkeit erwünscht, so kann dies kleine Schrittweiten und damit einen hohen Rechenaufwand zur Folge haben, während bei geringeren Genauigkeitsansprüchen die Schritte sehr viel größer gewählt werden können, falls keine Stabilitätsprobleme bestehen. Aufgrund zeitabhängiger Änderungen der Eigenschaften der Gleichungssysteme sind adaptive Strategien zur Steuerung der Zeitschritte im allgemeinen unerlässlich. Ziel einer Schrittweitensteuerung ist die Kontrolle des globalen Diskretisierungsfehlers, so dass bei möglichst großen Zeitschritten eine vorgegebene Fehlertoleranz in einer geeigneten gewichteten Norm zum Endzeitpunkt der Rechnung nicht überschritten wird. Eine derartige Steuerung beruht üblicherweise auf einer Schätzung des lokalen Diskretisierungsfehlers. Eine in der Praxis bewährte Strategie zur Schrittweitensteuerung sind sogenannte eingebettete Verfahren, welche im Rahmen dieser Arbeit angewandt werden. Die folgenden Erläuterungen zu der Prozedur orientieren sich an den in [Hairer and Wanner, 1996], [Strehmel and Weiner, 1995] oder [Törnig and Spellucci, 1990] beschriebenen.³²

Zu dem in Gleichung (5.60) definierten Anfangswertproblem sei die exakte Lösung durch $\mathbf{y}(t_n)$ gegeben. Der lokale Integrationsfehler $\delta(t_{n+1}, \mathbf{y}; \Delta t_n)$ ergibt sich aus der Differenz der exakten Lösung $\mathbf{y}(t_{n+1})$ und der numerischen Lösung \mathbf{y}_{n+1} , welche durch den Integrationsschritt des angewendeten Verfahrens vorliegt

$$\delta(t_{n+1}, \mathbf{y}; \Delta t_n) = \mathbf{y}(t_{n+1}) - \underbrace{\{\mathbf{y}(t_n) + \Delta t_n \Phi(t_n, \mathbf{y}; \Delta t_n)\}}_{\mathbf{y}_{n+1}} \quad (5.191)$$

Φ ist die sogenannte Verfahrensfunktion. Diese Funktion ist nur formal explizit dargestellt und enthält ebenfalls implizite Verfahren. Für viele Einschrittverfahren, insbesondere der Klasse der Runge-Kutta Verfahren, kann aufgrund der Konsistenz³³ für den lokalen Integrationsfehler die Form

$$\delta(t_{n+1}, \mathbf{y}; \Delta t_n) = \Delta t_n^{p+1} \Psi(t_n, \mathbf{y}(t)) + \mathcal{O}(\Delta t_n^{p+2}) \quad (5.193)$$

³²Neben der Verwendung eingebetteter Verfahren eignen sich zu Steuerung der Schrittweiten die Richardson-Extrapolation. Eine weitere Möglichkeit der adaptiven Schrittweitensteuerung bieten die sogenannten *predictive controller*, die auf Elemente der Regelungstechnik zurückgreifen, siehe hierzu [Gustafsson et al., 1988] und [Gustafsson, 1994]. Allgemeine Untersuchungen dieser beiden Prozeduren finden sich in [Hairer and Wanner, 1996] und der dort zitierten Literatur.

³³Ein Einschrittverfahren $\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}(t_n) + \Delta t_n \Phi(t_n, \mathbf{y}_n; \Delta t_n)$ heißt konsistent mit dem Anfangswertproblem (5.60), wenn es gilt:

$$\lim_{\Delta t_n \rightarrow 0} \max_{0 \leq t \leq T} \|\mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) - \Phi(t_n, \mathbf{y}_n; \Delta t_n)\| = 0. \quad (5.192)$$

5. Konsistente Raum- Zeitdiskretisierung

hergeleitet werden. Der lokale Integrationsfehler besteht aus dem Hauptteil des lokalen Fehlers $\Delta t_n^{p+1} \Psi(t_n, \mathbf{y}(t))$ sowie einer Größe der Ordnung Δt_n^{p+2} . Der Hauptteil des lokalen Fehlers dient im Allgemeinen zur Abschätzung des lokalen Fehlers, um damit die Schrittweiten zu steuern. Zur Schätzung des Hauptteils des lokalen Fehlers kann ein aus dem Verfahren der Ordnung $\hat{p} \geq p + 1$ gewonnener weiterer Näherungswert

$$\hat{\mathbf{y}}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \hat{\Phi}(t_n, \mathbf{y}; \Delta t_n), \quad (5.194)$$

mit der Verfahrensfunktion $\hat{\Phi}(t_n, \mathbf{y}; \Delta t_n)$ verwendet werden. Beide Verfahren führen zu den lokalen Fehlern

$$\delta = \mathbf{y}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_{n+1} = \Delta t_n^{p+1} \Psi(t_n, \mathbf{y}) + \mathcal{O}(\Delta t_n^{p+2}), \quad (5.195)$$

$$\hat{\delta} = \mathbf{y}(t_{n+1}) - \hat{\mathbf{y}}_{n+1} = \Delta t_n^{\hat{p}+1} \hat{\Psi}(t_n, \mathbf{y}) + \mathcal{O}(\Delta t_n^{\hat{p}+2}), \quad (5.196)$$

so dass aufgrund von $\hat{p} \geq p + 1$ durch Bildung der Differenz beider Fehler sich der lokale Integrationsfehler des Verfahrens niedrigerer Ordnung abschätzen lässt:

$$\delta - \hat{\delta} = \hat{\mathbf{y}}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1} = \Delta t_n^{\hat{p}+1} \hat{\Psi}(t_n, \mathbf{y}) + \mathcal{O}(\Delta t_n^{\hat{p}+2}) \approx \Delta t_n^{\hat{p}+1} \hat{\Psi}(t_n, \mathbf{y}). \quad (5.197)$$

Mit der Forderung, dass der Fehler eine vorgegebene Toleranz

$$\|\Delta t_n^{\hat{p}+1} \hat{\Psi}(t_n, \mathbf{y})\| \approx \|\hat{\mathbf{y}}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}\| \leq \varepsilon_r \|\hat{\mathbf{y}}_n\| + \varepsilon_a, \quad (5.198)$$

(mit ε_a und ε_r als vom Nutzer definierte absolute und relative Fehlertoleranzen), nicht überschreitet, und der Annahme, dass der Fehler $\|\hat{\Psi}(t_n, \mathbf{y})\| \approx C$ über einen Zeitschritt näherungsweise konstant bleibt, lässt sich der Fehler folgendermaßen abschätzen:

$$\|\hat{\mathbf{y}}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}\| \approx C \Delta t_n^{\hat{p}+1}. \quad (5.199)$$

Die Forderung der Gleichheit des Fehlers für eine neue Schrittweite Δt_{new} mit der vorgegebenen Fehlertoleranz liefert

$$C \Delta t_{\text{new}}^{\hat{p}+1} = \varepsilon_r \|\hat{\mathbf{y}}_n\| + \varepsilon_a. \quad (5.200)$$

Eine Abschätzung der neuen Schrittweite resultiert aus der Auswertung der Beziehungen (5.199) und (5.200) durch Eliminierung von C :

$$\Delta t_{\text{new}} = \Delta t_n \left(\frac{\varepsilon_r \|\hat{\mathbf{y}}_n\| + \varepsilon_a}{\|\hat{\mathbf{y}}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}\|} \right)^{1/(\hat{p}+1)}. \quad (5.201)$$

Aufgrund der verschiedenen physikalischen Eigenschaften, der in dem Lösungsvektor \mathbf{y} integrierten Größen, und der Vermeidung zu häufiger Änderungen der Schrittweiten ist es zweckmäßig [Ellsiepen and Hartmann, 2001], den geschätzten lokalen Fehler $\mathbf{y}_{\text{err}} := \hat{\mathbf{y}}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}$ durch

$$\mathbf{u}_{\text{err}} := \hat{\mathbf{u}}_{n+1} - \mathbf{u}_{n+1}, \quad \Theta_{\text{err}} := \hat{\Theta}_{n+1} - \Theta_{n+1}, \quad (5.202)$$

$$\mathbf{q}_{\text{err}} := \hat{\mathbf{q}}_{n+1} - \mathbf{q}_{n+1}, \quad \lambda_{\text{err}} := \hat{\lambda}_{n+1} - \lambda_{n+1}, \quad (5.203)$$

bezüglich den physikalischen Größen zu separieren und gemäß Deuffhard and Bornemann [2008] eine möglichst glatte Norm, die ein skalares Maß für den Fehler liefert, zu definieren. Dem Vorschlag von Hairer and Wanner [1996] folgend werden die Normen in (5.201) als Euklidische Normen

$$e_u := \sqrt{\frac{1}{n_u} \sum_{k=1}^{n_u} \left(\frac{u_{\text{err}}^k}{\varepsilon_r^u |u_n^k| + \varepsilon_a^u k} \right)^2}, \quad e_\theta := \sqrt{\frac{1}{\hat{n}_\Theta} \sum_{k=1}^{\hat{n}_\Theta} \left(\frac{\theta_{\text{err}}^k}{\varepsilon_r^\theta |\theta_n^k| + \varepsilon_a^\theta k} \right)^2}, \quad (5.204)$$

für die Verschiebungen und Temperaturen definiert. Hierin entsprechen u_{err}^k und θ_{err}^k der k -ten Komponente der Vektoren \mathbf{u}_{err} bzw. Θ_{err} .³⁴ Die Fehlermaße gewichten den Fehler also komponentenweise mit vorgegebenen absoluten und relativen Toleranzen. Für die inneren Variablen wird nach Ehlers and Ellsiepen [1998] bzw. Diebels et al. [1999] eine Maximum Norm

$$e_q := \max_{1 \leq k \leq n_q} \left| \frac{q_{\text{err}}^k}{\varepsilon_r |q_n^k| + \varepsilon_a^k} \right|, \quad (5.205)$$

definiert. Das Maximum dieser gewichteten Fehlermaße, $e_m = \max(e_u, e_\theta, e_q)$, dient dann zur Bestimmung der neuen Schrittweite:

$$\Delta t_{\text{new}} = \Delta t_n \cdot \begin{cases} \max(f_{\min}, f_{\text{safety}} e_m^{-1/(\hat{p}+1)}) & \text{falls } e_m > 1 \\ \min(f_{\max}, f_{\text{safety}} e_m^{-1/(\hat{p}+1)}) & \text{falls } e_m \leq 1 \end{cases} \quad (5.206)$$

Der Faktor $0 < f_{\text{safety}} < 1$ verhindert zu starke Oszillationen der Schrittweitenprozedur und die Faktoren f_{\min} und f_{\max} verhindern zu starke Schrittweitenänderungen.³⁵

Ein wesentlicher Aspekt der für die Fehlerschätzung erforderlichen Lösungen verschiedener Ordnung besteht darin, dass sie mit möglichst geringem numerischen Aufwand bestimmt werden. Die Konstruktion von eingebetteten Verfahren, bei denen neben der Näherungslösung \mathbf{y}_{n+1} der Ordnung p lediglich mittels zusätzlicher Wichtungsfaktoren \hat{b}_i eine Näherungslösung $\hat{\mathbf{y}}_{n+1}$ der Ordnung \hat{p} berechnet wird, genügt diesem Aspekt. Der Aufwand zur Erzeugung der Näherungslösungen besteht maßgeblich aus der Berechnung der s Stufenableitungen $\dot{\mathbf{Y}}_{ni}$, womit anschließend beide Näherungslösungen durch

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s b_i \dot{\mathbf{Y}}_{ni}, \quad \hat{\mathbf{y}}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s \hat{b}_i \dot{\mathbf{Y}}_{ni}, \quad (5.207)$$

der Ordnung p und $\hat{p} \neq p$, nahezu ohne weiteren Aufwand zur Verfügung stehen. Gleichzeitig resultiert aus

$$\mathbf{y}_{\text{err}} = \hat{\mathbf{y}}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1} = \Delta t_n \sum_{i=1}^s (\hat{b}_i - b_i) \dot{\mathbf{Y}}_{ni}, \quad (5.208)$$

eine Schätzung des Fehlers für ein Verfahren niedriger Ordnung.

³⁴Die Euklidische Norm wird auch für die Lagrange-Multiplikatoren als Fehlermaß gewählt.

³⁵Siehe hierzu [Hairer et al., 1993] und [Hairer and Wanner, 1996].

6. Numerische Beispiele

In diesem Kapitel wird die in dieser Arbeit entwickelte iterationsfreie Lösungsprozedur anhand einigen repräsentativen Beispielen getestet. Dabei wird die Leistungsfähigkeit der vorgestellten numerischen Konzepte und Lösungsalgorithmen demonstriert. Alle Berechnungen erfolgten mittels dem *in-house* Code TASAFEM, ein Finite-Elemente Programm für raum-zeitadaptive gekoppelte Strukturberechnungen, siehe [Hartmann, 2006b]. Zu diesem Zweck wurde das Materialmodell basierend auf die Materialgleichungen des Abschnitt 3.4 und alle erforderlichen Gleichungen der konsistenten Raum-Zeitdiskretisierung nach Abschnitt 5.2 und Abschnitt 5.3 algorithmisch in das Programm implementiert. Für die Arithmetik wurden optimierte BLAS und LAPACK Routinen eingesetzt. Die Lösung der linearen Gleichungssysteme erfolgte mittels PARDISO, siehe hierzu [Schenk and Gärtner, 2004], einem parallelen Gleichungslöser für spärlich besetzte, unsymmetrische Matrizen. Hinsichtlich einer effizienten Umsetzung wurden in dem Programm insbesondere das Datenmanagement verbessert. Dies umfasste zum einen die Speicherformate der Matrizen, die mit einer komprimierten Zeilenspeicherung, dem CSR-Format¹ für dünnbesetzte Matrizen beschrieben wurden. Zudem wurden komplexe Datentypen eingeführt, die eine Parallelisierung mit OpenMP ermöglichen, siehe [Chapman et al., 2008]. Für die Generierung der Modelle im Preprozess und der Auswertung der Ergebnisse im Postprozess wurden Schnittstellen zu dem Softwarepaket GiD, einem Pre- und Postprozessor, das am “International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE)” entwickelt wurde, ausgearbeitet. Alle Rechnungen sind auf einem Linux-Rechner² mit Hilfe des Intel Fortran Compilers *ifort* bei doppelt genauer Arithmetik angefertigt.

6.1. Untersuchung der numerischen Effizienz

In einem ersten Beispiel wird die numerische Performance der hier vorgestellten, iterationsfreien Lösungsprozedur untersucht und der herkömmlichen Vorgehensweise zur Lösung von Anfangs-Randwertproblemen finiter Problemstellung der nichtlinearen Viskoelastizität gegenübergestellt.

Für dieses erste Beispiel ist ein Zugprobenkörper eines rußgefüllten Elastomeres, wie sie typischerweise in Fahrzeugreifen zur Anwendung kommen, ausgewählt, sie-

¹Compressed Row Storage (CRS) oder Compressed Sparse Row (CSR) ist ein häufig genutztes Verfahren zum Speichern dünnbesetzter Matrizen.

²GNU/Linux x86_64 mit zwei Intel Xeon Quad-Core CPUs à 2.50 GHz und 16 GB Arbeitsspeicher

6. Numerische Beispiele

he Abbildung 6.1a. Aufgrund der Rotationssymmetrie des Probenkörpers ist es ausreichend ein Achtel der Zugprobe zu modellieren. Dies ist in Abbildung 6.1b dargestellt. Das FE-Modell ist aus insgesamt $n_e = 2160$ Q1P0 Elementen³ generiert. Die Kopfflächen der Probe sind fixiert, $\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$. Dies entspricht in etwa dem Einspannen des Kopfes in eine Zug-Druckmaschine. An den Seitenflächen der Probe sind Symmetrie-Randbedingungen aufgebracht und die Fußfläche wird verschiebungsgesteuert belastet, siehe Abbildung 6.1b.

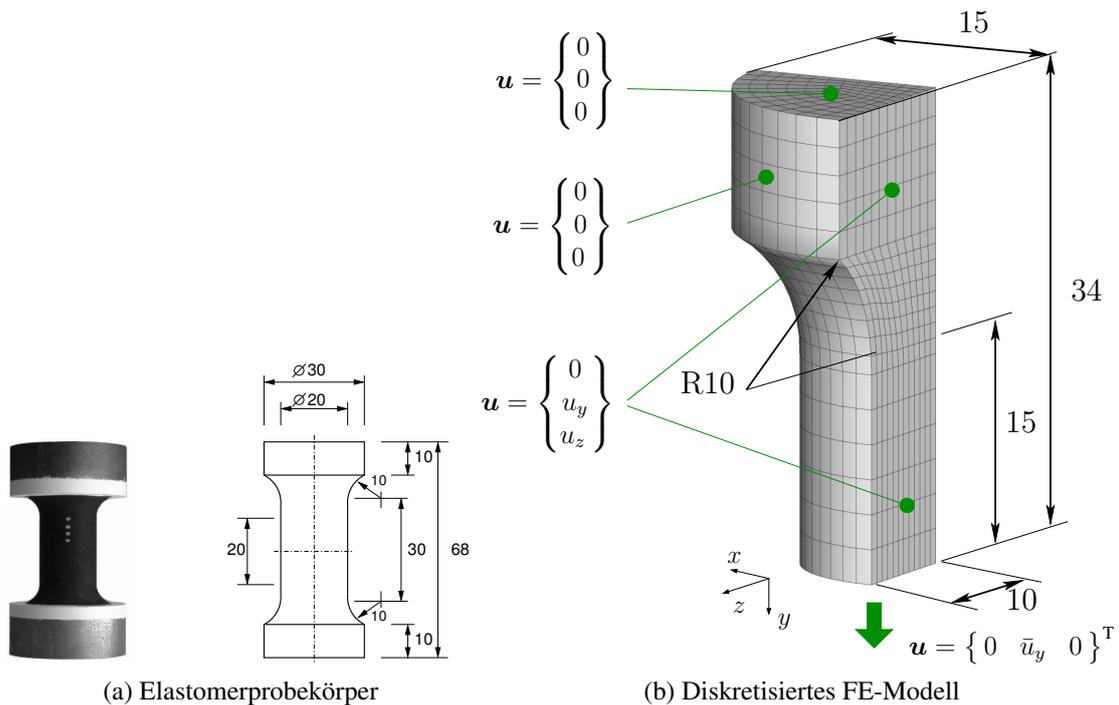


Abbildung 6.1.: Rotationssymmetrischer Elastomerprobekörper mit den zugehörigen Massen in [mm] und das diskretisierte FE-Modell mit den aufgebrauchten Randbedingungen

Die im Folgenden aufgeführten Berechnungen sind zunächst auf isotherme Belastungsprozesse beschränkt. Daher wird das Materialverhalten mittels dem Modell der finiten Viskoelastizität aus Abschnitt 3.4.3 beschrieben. Die zur vollständigen Beschreibung des Modells benötigten Materialparameter des Gleichgewichtsanteils c_{10} , c_{01} und α mit einem fiktiven Kompressionsmodul von $K = 1000 \text{ N/mm}^2$, sind der Arbeit von Hartmann and Neff [2003] entnommen. Die Materialparameter für den Überspannungsanteil μ , η_0 und s stammen aus [Hartmann, 2003]. Zur Übersicht sind alle Materialparameter in Tabelle 6.1 zusammengetragen.

Zunächst wird der monotone Zugprozess nach Abbildung 6.2a analysiert. Die Pro-

³Siehe hierzu Abschnitt 5.2.3.

Tabelle 6.1.: Materialparameter für die Berechnung isothermer Prozesse

K	c_{10}	c_{01}	α	μ	η_0	s
[MPa]	[MPa]	[MPa]	[MPa]	[MPa]	[MPa s]	[MPa ⁻¹]
1000	0.1788	0.1958	3.67e-02	0.2	180	1.0e-03

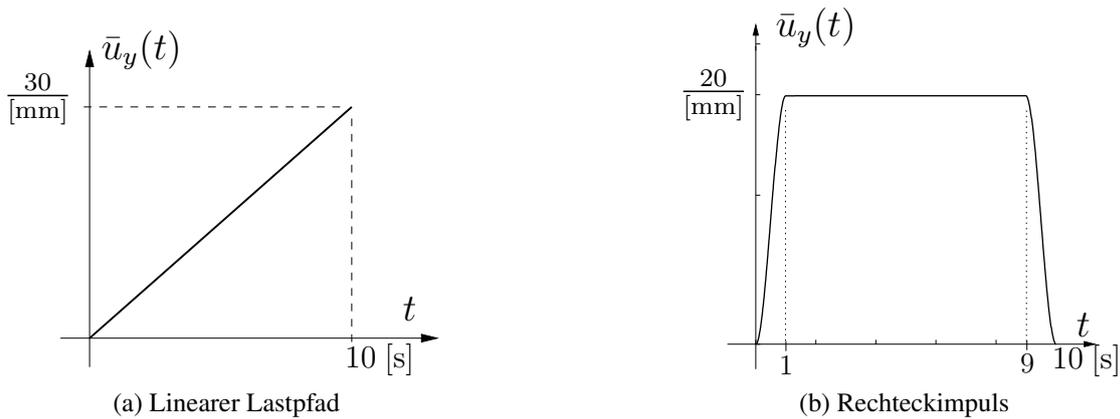


Abbildung 6.2.: Belastungspfade der simulierten Prozesse

be wird in der Mitte der Querschnittsfläche bei $y = 0$ innerhalb 10 s linear auf eine maximale Amplitude von 30 mm belastet. Hieraus resultiert eine nicht-homogene drei-dimensionale Spannungsverteilung, dessen axiale Komponente zu den Zeitpunkten $t = 1$ s, $t = 5$ s und $t = 10$ s in Abbildung 6.3 abgebildet ist. Die die in Abbildung 6.4a dargestellte Kraft-Verschiebungskennlinie ist aus den Knotenverschiebungen der Querschnittsfläche bei $y = 0$ ermittelt. Der typische “s-förmige” Verlauf der Kennlinie, als Reaktion auf den monotonen Belastungsprozess, ist durch das Berechnungsmodell qualitativ und quantitativ zutreffend wiedergegeben. Eine Übereinstimmung zu experimentellen Daten kann aus [Sedlan, 2000] validiert werden.

Konvergenzverhalten Zur Demonstration des Konvergenzverhaltens der iterationsfreien Lösungsprozedur wird erneut der monotone Zugversuch der Elastomerprobe, angewandt auf die finite, nichtlineare Viskoelastizität, herangezogen. Die Berechnungen erfolgten mittels drei Rosenbrock-Verfahren aus Tabelle A.3. Zur Anwendung kommen das einstufige Linear-Implizite Euler der Ordnung $p = 1$, siehe [Hairer and Wanner, 1996], das Verfahren 2-ter Ordnung ROS2 von Verwer et al. [1999] mit $p = 2$ und zwei Stufen sowie das vierstufige Verfahren ROSI2P2 von Rang and Angermann [2008] mit der Ordnung $p = 3$. Der Prozess wird mit den vier verschiedenen konstanten Zeitschritten $\Delta t_n = 0.1$ s, $\Delta t_n = 0.05$ s, $\Delta t_n = 0.025$ s und $\Delta t_n = 0.0125$ s berechnet. Für die

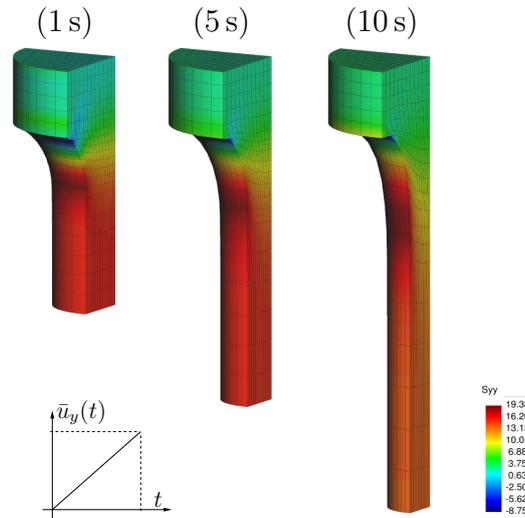


Abbildung 6.3.: Konturplot des Spannungsverlaufs in axialer Richtung bei monotoner Zugbelastung nach Abbildung 6.2a

Auswertung der Konvergenz wurden die Fehlermaße

$$\varepsilon_n^{\mathbf{u}} = \frac{1}{n_n} \sum_{j=1}^{n_n} \|\Delta \mathbf{u}_n\|, \quad \varepsilon_n^{\lambda} = \frac{1}{n_n} \sum_{j=1}^{n_n} \|\Delta \lambda_n\|, \quad \varepsilon_n^{\mathbf{q}} = \frac{1}{n_Q} \sum_{j=1}^{n_Q} \|\Delta \mathbf{q}_n\|, \quad (6.1)$$

für die jeweiligen primären Variablen definiert. Hierin entsprechen die zu bildenden Normen einer Euklidischen Norm für die Differenz des Verschiebungsvektors $\Delta \mathbf{u}_n = \mathbf{u}_n^{\text{ref}} - \mathbf{u}_n$, der Differenz der Lagrange Multiplikatoren $\Delta \lambda_n = \lambda_n^{\text{ref}} - \lambda_n$ und der Differenz der inneren Variablen $\Delta \mathbf{q}_n = \mathbf{q}_n^{\text{ref}} - \mathbf{q}_n$. Aufgrund der hier nicht existierenden, analytischen Lösung ist als Referenzlösung $\{\mathbf{u}_n^{\text{ref}}, \lambda_n^{\text{ref}}, \mathbf{q}_n^{\text{ref}}\}^T$ eine numerische Lösung, die mit dem DIRK-Verfahren von Alexander [1977] der Ordnung $p = 3$ und einer Zeitschrittweite von $\Delta t_n = 5.0e-04$ ermittelt wurde, herangezogen. In Abbildung 6.5 sind die Ordnungsdigramme, die sich aus dem Fehlermaß (6.1) bezüglich der hier untersuchten Verfahren ergeben haben, abgebildet. Hierbei ist der über den gesamten Zeitintervall $t_n = [t_0, t_N]$ maximale aufgetretene Fehler über die Zeitschritte Δt_n abgebildet. Aus den Steigungen der dargestellten Verläufe ergeben sich die erreichte Konvergenzordnung der Verfahren. Die Strichlinien in Abbildung 6.5 kennzeichnen die theoretisch zu erreichende Ordnung der Verfahren. Offensichtlich konnten alle drei Verfahren die theoretische Ordnung erreichen. Eine detaillierte Untersuchung des Konvergenzverhaltens von Rosenbrock-Verfahren angewandt auf die hier betrachtete Problemstellung und der Diskussion über das Phänomen einer Ordnungsreduktion findet sich in [Hartmann and Hamkar, 2010].

Genauigkeitsuntersuchung Ein äußerst interessanter Aspekt hinsichtlich der Beurteilung der numerischen Performance der hier vorgestellten, iterationsfreien Lösungs-

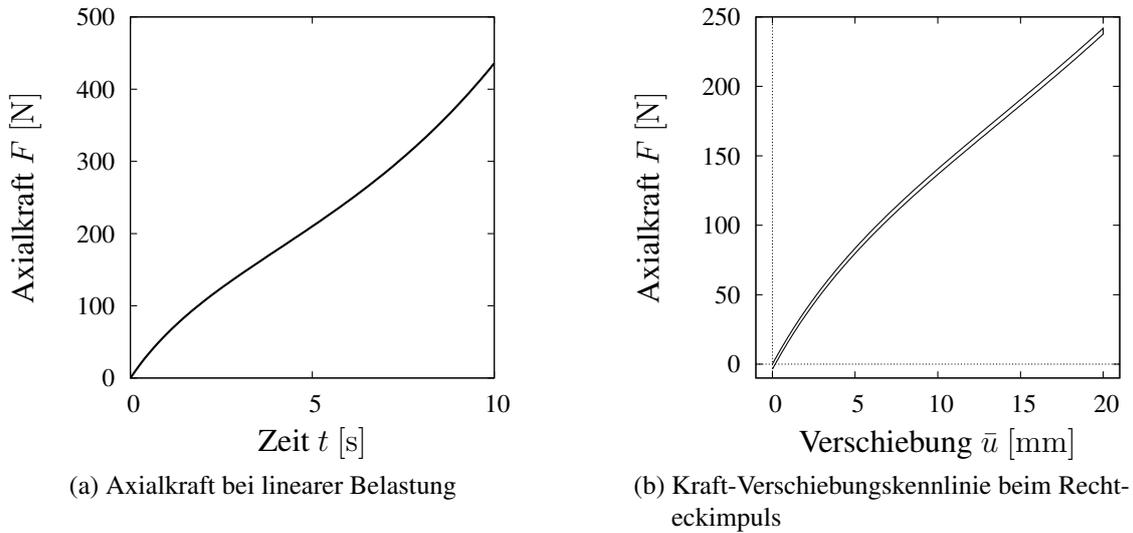


Abbildung 6.4.: Materialantwort der Elastomerprobe bei monotoner Zugbelastung (a) und für den aufgetragenen Rechteckimpuls (b)

prozedur ist die Tatsache, dass der algebraische Anteil des DAE-Systems der finiten Viskoelastizität, siehe Abschnitt 5.3.1, mittels der Rosenbrock-Verfahren innerhalb eines Integrationsschrittes nicht aus iteriert wird. D.h. das Interesse bezieht sich hier auf die Auswertung der Gleichgewichtsbedingung im Rahmen der Integration durch die Rosenbrock-Verfahren. Zur Untersuchung dieser Fragestellung wird im Folgenden erneut die Zugprobe aus Abbildung 6.1b herangezogen, die mit einer höchst nichtlinearen Lastfunktion nach Abbildung 6.2b belastet wird. Der Rechteckimpuls ist mit einem Polynom realisiert um eine stetige Funktion zu erhalten. Sie hat zum einen zur Folge, dass im Vergleich zu der monotonen Belastung eine nichtlineare Randbedingung zu berücksichtigen ist. Zum anderen ist der Einfluss der Viskosität aufgrund der höheren Belastungsgeschwindigkeiten, deutlich größer. Die Materialantwort bezogen auf den Rechteckimpuls ist durch die Kraft-Verschiebungskennlinie in Abbildung 6.4b dargestellt.

Für die betrachtete Untersuchung sind die Berechnungen mit den konstanten Zeitschritten $\Delta t_n = \{2.50e-02 \text{ s}, 1.25e-03 \text{ s}, 6.25e-03 \text{ s}\}$ durchgeführt worden. Neben den zuvor vorgestellten Verfahren wurde die Untersuchung um das Verfahren ROSI2PW von Rang and Angermann [2005] erweitert. ROSI2PW besitzt vier Stufen mit der Konsistenzordnung von $p = 3$ und entspricht der Klasse von W-Methoden, die zur Berechnung eine nicht exakte Jacobi-Matrix zulassen. Durch die Interpretation der Lagrange-Multiplikatoren als den Auflagerkräften des Modells, die unmittelbar durch Auswertung der Gleichgewichtsbedingung für vorgegebene Verschiebungen ermittelt werden, siehe [Hartmann et al., 2008b], folgt aus dem Fehlverhalten der Lagrange-Multiplikatoren und somit dem der Reaktionskräfte eine Bewertung über die Güte des Erfüllens der Gleichgewichtsbedingung bei der Anwendung von Rosenbrock-Verfahren. Daher ist

6. Numerische Beispiele

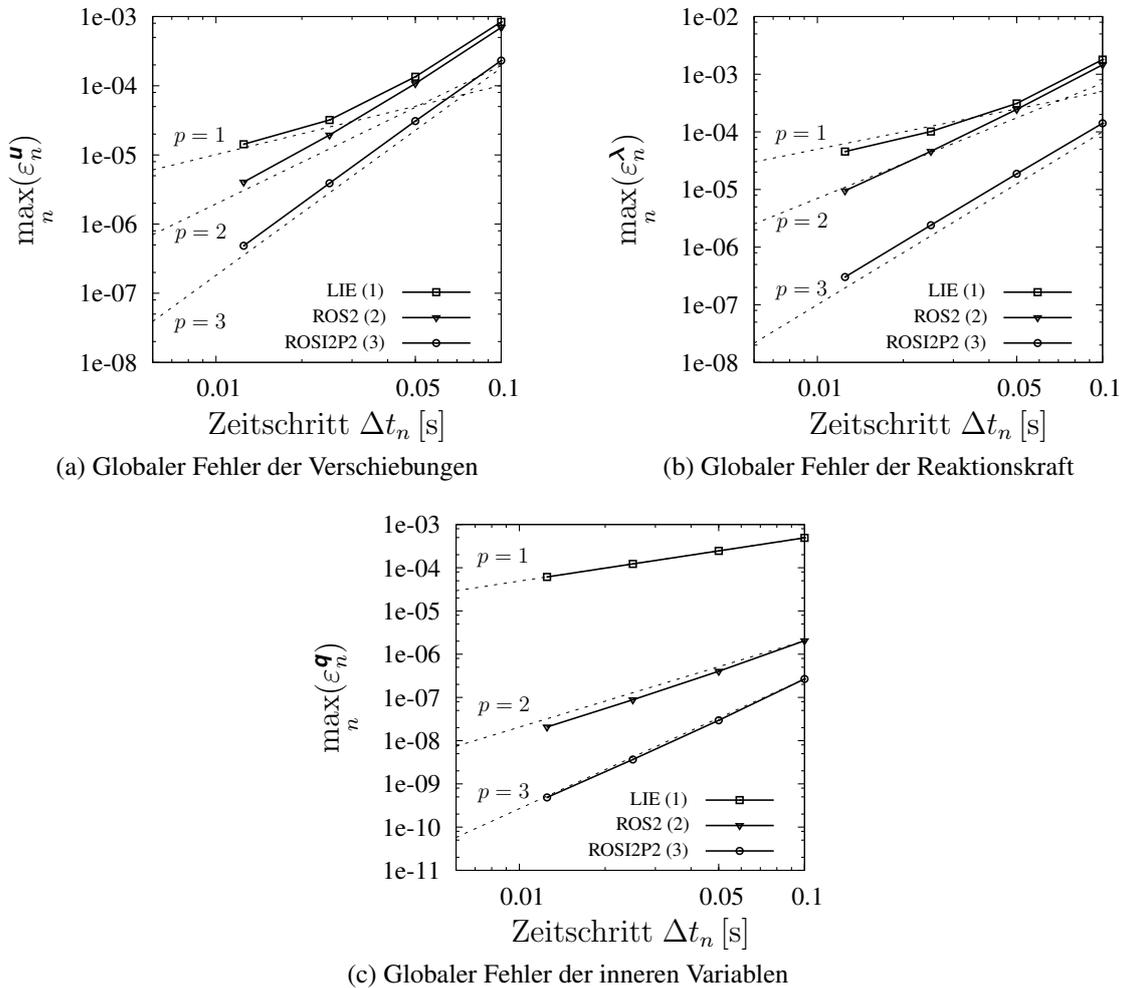
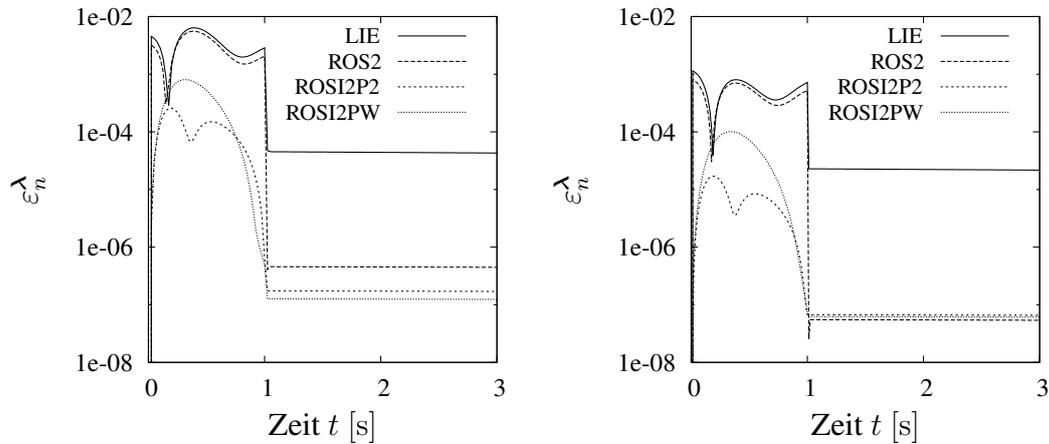


Abbildung 6.5.: Ordnungsdiagramm – Globaler Fehler ϵ_n^u , ϵ_n^λ und ϵ_n^q aufgetragen für die Zeitschrittweite Δt_n

als Ergebnis der Untersuchung der Verlauf des Fehlers der Lagrange-Multiplikatoren ϵ_n^λ nach (6.1), die aus den gewählten Zeitschritten resultieren, in den Abbildung 6.6a, 6.6b und 6.7a für einen Teil des Lastintervalls dargestellt. Innerhalb der Zuglast in dem Zeitintervall $t_n = [0, 1]$ treten die größten Fehler auf. Dennoch ist der Fehler bereits beim Linear-Impliziten Verfahren (LIE) für den größten Zeitschritt $\Delta t_n = 2.50e-02$ s, was dazu führt, dass das Intervall mit nur 40 Integrationsschritten berechnet wird, akzeptabel. Bereits durch die Verfeinerung der Schrittweite auf $\Delta t_n = 1.25e-03$ s, bzw. $\Delta t_n = 6.25e-03$ s wird der Fehler überproportional geringer und wird vernachlässigbar klein für die Verfahren hoher Ordnung ($p = 3$). Dieses gute Verhalten ist auch bei dem Konvergenzverhalten der Verfahren zu beobachten. In Abbildung 6.7b ist das Ordnungsdiagramm wiedergegeben, das den maximalen Fehler für den gesamten Zei-



(a) Verlauf des Fehlers der Reaktionskraft für $\Delta t_n = 2.50e-02$ s
 (b) Verlauf des Fehlers der Reaktionskraft für $\Delta t_n = 1.25e-03$ s

Abbildung 6.6.: Verlauf des Integrationsfehlers der Reaktionskraft ε_n^λ für zwei konstante Zeitschrittweiten $\Delta t_n = 2.50e-02$ s und $\Delta t_n = 1.25e-03$ s resultierend aus dem Belastungspfad des Rechteckimpulses

tintervall, welche aus dem Rechteckimpuls resultiert, über die gewählten Zeitschritte darstellt. Wiederum ist dem Diagramm zu entnehmen, dass alle Verfahren die theoretisch zu erreichende Ordnung erlangen.

Aufwandsuntersuchung Neben der Konvergenz ist hinsichtlich einer praktischen Anwendung der numerische Aufwand⁴ in Bezug zu einer geforderten Genauigkeit, ein wesentlicher Punkt zur Bewertung der Verfahren. Eine solche Bewertung wurde in der folgenden Untersuchung durchgeführt. Die hier vorgeschlagene Lösungsprozedur wurde mit der iterativen Vorgehensweise zur Lösung von Problemstellungen finiter Viskoelastizität verglichen. Diese Vorgehensweise schließt neben dem klassischen impliziten Euler (BE) Verfahren, das typischerweise in vielen Softwarepaketen der nichtlinearen Finite-Elemente Methode⁵ eingesetzt wird, auch DIRK-Verfahren hoher Ordnung ein, die beispielsweise im Rahmen einer DIRK/MLNA Prozedur sehr effizient in [Quint et al., 2008] bzw. in [Hartmann et al., 2009] umgesetzt sind. Es sei hier angemerkt, dass die DIRK/MLNA Prozedur die Möglichkeit eines optimierten Spannungsalgorithmus bietet. Dies wurde z.B. für die Plastizität und Viskoplastizität in [Hartmann et al., 1997] erfolgreich umgesetzt und basierend auf der Arbeit von Hartmann [2002] für die hier untersuchte finite Viskoelastizität. Durch die Optimierung reduziert sich auf

⁴Eine quantitative Kenngröße zur Bewertung des numerischen Aufwands ist die gemessene Gesamt-Rechenzeit, welche hier primär herangezogen wird.

⁵Hierzu zählen auch die in breiter Anwendung genutzten kommerziellen Softwaresysteme ANSYS und ABAQUS.

6. Numerische Beispiele

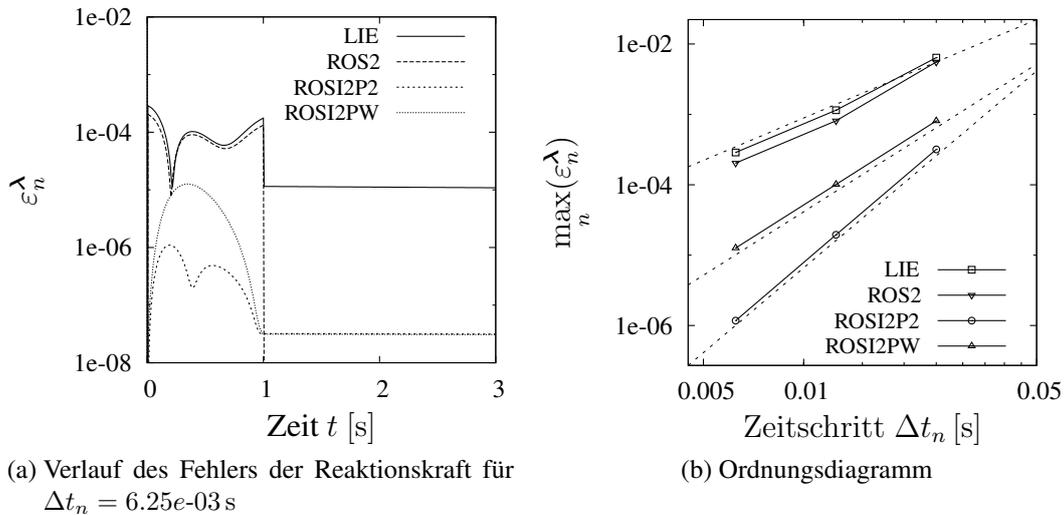


Abbildung 6.7.: Verlauf des Integrationsfehlers der Reaktionskraft ϵ_n^λ für die konstanten Zeitschritt $\Delta t_n = 6.25e-03$ s und der globale Fehler ϵ_n^λ aufgetragen über die Zeitschrittweiten $\Delta t_n = 2.50e-02$ s, $1.25e-03$ s, $6.25e-03$ s resultierend aus dem Belastungspfad des Rechteckimpulses

Gauss-Punkt Ebene die Dimension des Gleichungssystems zur Berechnung der inneren Variablen von sechs Gleichungen für sechs Unbekannte auf ein System mit drei Gleichungen für drei Unbekannte. Dies hat zur Folge, dass sich der lokale Berechnungsaufwand innerhalb der gestaffelten Iterationsschleife drastisch reduziert.⁶ Zudem wurde nach [Hartmann et al., 2009] eine lineare Extrapolation zur Abschätzung des Startvektors für die globale Newton-Iteration der DIRK/MLNA Prozedur eingeführt. Dies hat zur Folge, dass die Anzahl der globalen Iterationen nahezu halbiert werden. In anderen Worten, der hier umgesetzte Vergleich erfolgt an eine DIRK/MLNA Lösungsprozedur, die auf lokaler und globaler Ebene optimiert ist. In Abbildung 6.8 ist die Aufwands-Genauigkeitsuntersuchung veranschaulicht. Es stellt die benötigte CPU-Zeit über den gewichteten, absoluten Fehler der inneren Variablen aus (6.1) für den monotonen Zug der Elastomerprobe dar. Die Berechnungen wurden mit konstanten Zeitschritten, $\Delta t_n = (k \times 10)^{-1}$ [s] für $k = 1, 2, 4, 8$, realisiert.

Im Vergleich zu der klassischen Vorgehensweise mittels dem impliziten Euler Verfahren (BE) können zwei wesentliche Aussagen getroffen werden. Zum einen kann festgestellt werden, dass das Linear-Implizite-Euler Verfahren (LIE) mit $p = 1$ eine Rechenzeitersparnis von ca. 60% erzielt. Zum anderen können durch den Einsatz von Verfahren 2ter oder 3ter Ordnung (z.B. ROS2, ROSI2P2) hohe Genauigkeiten, trotz geringerem numerischen Aufwand, erreicht werden. Für moderate Genauigkeitsanforde-

⁶Siehe Tabelle A.2 in Anhang A.2 bezüglich der geschachtelten Schleife innerhalb der DIRK/MLNA Prozedur.

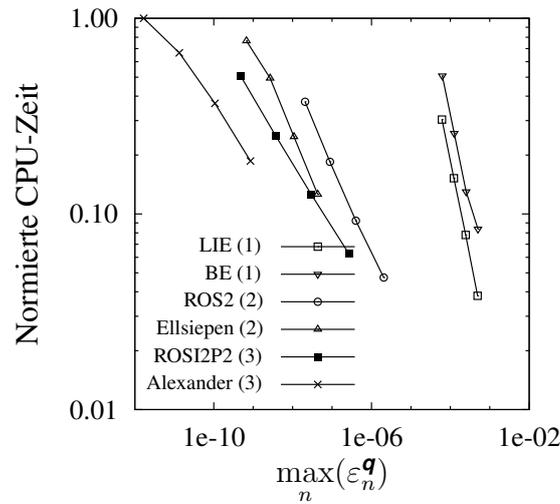


Abbildung 6.8.: Aufwands-Genauigkeitsdiagramm. Gegenüberstellung von Rosenbrock-Verfahren und DIRK-Verfahren bezüglich des numerischen Aufwands. Die Berechnungen wurden mit den konstanten Zeitschrittweiten $\Delta t_n = (k \times 10)^{-1}$ [s] für $k = 1, 2, 4, 8$ ausgeführt.

rungen ($\approx 1e-08$) ist das 4-stufige Verfahren ROSI2P2 sogar effizienter als das 2-stufige DIRK-Verfahren 2ter Ordnung von Ellsiepen [1999] mit einem optimierten Spannungsalgorithmus. Allerdings ist zu bemerken, dass die Rosenbrock-Verfahren für sehr hohe Genauigkeitsanforderungen keine essentiellen Vorteile gegenüber den DIRK-Verfahren im Hinblick auf die Rechenzeit aufweisen.

Schrittweitenverhalten Eine wesentliche Steigerung der Effizienz der Zeitintegration wird mittels der adaptiven Schrittweitensteuerung aus Abschnitt 5.3.4 erzielt. Vor allem bei Prozessen mit unterschiedlichen Zeitskalen erweist sich die adaptive Prozedur als essentiell, siehe z.B. [Hartmann and Hamkar, 2010].

Zur Veranschaulichung des prinzipiellen Verhaltens der Schrittweitensteuerung wird im Folgenden ein Modell eines Abstandhalters herangezogen. Aufgrund der Symmetrie wird die Hälfte des Abstandhalters modelliert.⁷ Abbildung 6.9a zeigt die räumliche Diskretisierung mittels gemischten Q2P1 Elementen, aus der die Anzahl der unbekanntenen Verschiebungsfreiheitsgrade $n_u = 38607$ und die der inneren Variablen $n_Q = 487296$ resultieren. Durch die hohe Ordnung der Elemente reduziert sich der Einfluss des räumlichen Diskretisierungsfehlers. Der gewählte Belastungsprozess mit einer Gesamtdauer von 30 s ist in Abbildung 6.9b dargestellt. Dieser wird aus zwei stückweise stetigen, linearen Funktionen mittels Superposition generiert. Hierbei wird der Abstandhalter innerhalb $t = 10$ s um 5% komprimiert und anschließend mit einer Belastungsge-

⁷Der Abstandhalter besitzt eine zweifache Symmetrie, so dass die Modellierung eines Viertels ausreichend wäre. Hier allerdings führt der Belastungsprozess auf eine einfache Symmetrie.

6. Numerische Beispiele

schwindigkeit von 0.3 mm/s in positiver x -Richtung und wiederum mit der doppelten Geschwindigkeit in negativer x -Richtung gesichert. Die resultierende stark inhomogene Deformation und die hervorgerufenen Schubspannungen präsentiert Abbildung 6.9c

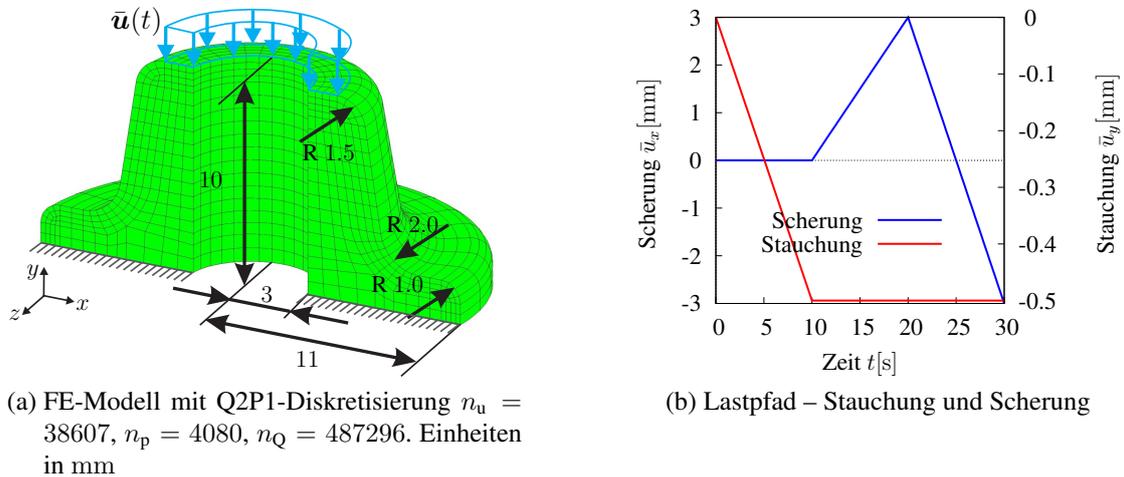


Abbildung 6.9.: Modell des Abstandhalters, FE-Netz, Lastpfad und Konturplot der Schubspannungen

Entsprechend dem Konzept der adaptiven Schrittweitensteuerung wird mit Hilfe eines eingebetteten Verfahrens der Integrationsfehler des aktuellen Zeitschritts geschätzt, um mit dieser Information den nächsten Zeitschritt zu bestimmen, siehe Abschnitt 5.3.4. Zur Abschätzung des Fehlers werden absolute und relative Fehlertoleranzen für alle primären Variablen spezifiziert. Für die Knotenverschiebungen wurde die absolute Toleranz $Atol_{\mathbf{u}} = 10^{-4}$ und die relative Toleranz $Rtol_{\mathbf{u}} = 10^{-5}$ gewählt. Die Toleranzen der inneren Variablen sind durch $Atol_{\mathbf{q}} = 10^{-5}$ und $Rtol_{\mathbf{q}} = 10^{-6}$ definiert und die Werte $Atol_{\lambda} = 10^{-3}$ und $Rtol_{\lambda} = 10^{-4}$ gelten für die Lagrange Multiplikatoren.

Abbildung 6.10a stellt die Zeitschrittweiten Δt_n dar, die für den obigen Belastungsprozess durch die adaptive Schrittweitenkontrolle ermittelt wurden. In dieser Untersuchung werden die beiden Rosenbrock-Verfahren ROS2 von Verwer et al. [1999] und ROS2S aus [Hamkar et al., 2012] mit dem DIRK-Verfahren von Ellsiepen [1999] ver-

glichen. Alle Verfahren haben eine theoretische Ordnung von $p = 2$. Zudem ist das implizite Euler Verfahren (BE) erster Ordnung mit aufgenommen. Im Gegensatz zu den

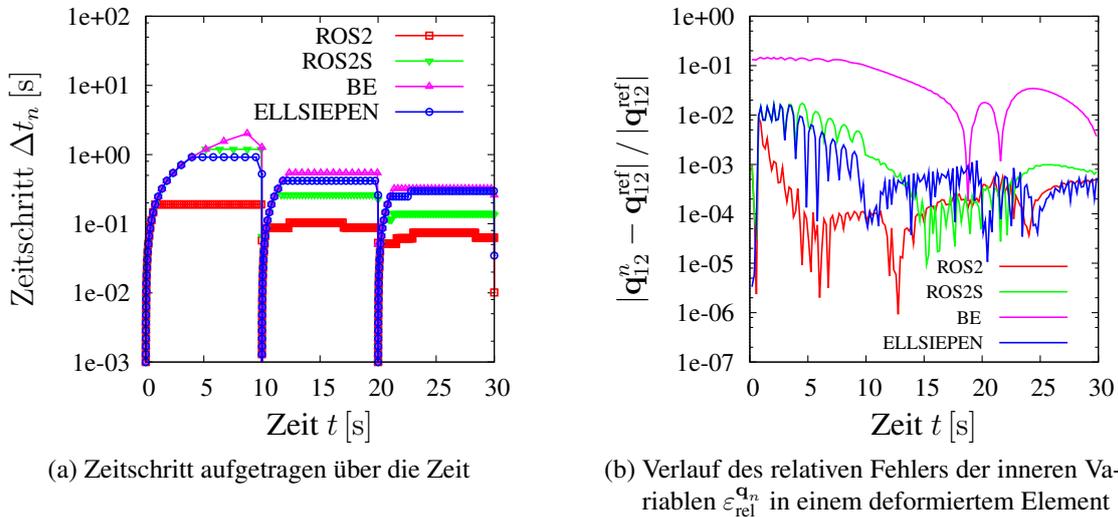


Abbildung 6.10.: Schrittweiten- und Fehlerverhalten der adaptiven Schrittweitensteuerung

Verfahren hoher Ordnung existiert für das implizite Euler Verfahren keine eingebettete Methode, womit eine Schätzung des Fehlers nicht erfolgen kann. Hier behilft man sich mit einer Vorgehensweise, die die Anzahl der globalen Iterationen n_{iter} innerhalb des Multilevel-Newton Algorithmus (MLNA) zählt, womit der Zeitschritt zum nächsten Zeitpunkt durch

$$\Delta t_n^{\text{new}} = \begin{cases} 0.75 \times \Delta t_n, & \text{falls } n_{\text{iter}} > 15, \\ 1.20 \times \Delta t_n, & \text{falls } n_{\text{iter}} < 5, \end{cases} \quad (6.2)$$

bestimmt wird. Die Anzahl der Newton-Iteration impliziert lediglich die Nichtlinearität der unterlegten Gleichungen und kann keinesfalls als Indikator dienen, mit dem der Integrationsfehler kontrolliert werden kann. Dies zeigt sich in dem Fehlerverhalten des Verfahrens. In Abbildung 6.10b ist ein relativer Fehler der inneren Variablen, welcher in einem deformierten Element berechnet wurde, für den gesamten Prozess aufgetragen. Offensichtlich ist der Fehler, der für das implizite Euler Verfahren ermittelt wurde um mehrere Zehnerpotenzen größer als bei den eingebetteten Verfahren, die sich im Rahmen der Fehlertoleranzen befinden. Dieses Verhalten ist darin begründet, dass das implizite Euler Verfahren eine Konsistenzordnung von $p = 1$ aufweist, was dazu führt, dass bei großen Zeitschritten, siehe Abbildung 6.10a der lokale Integrationsfehler größer ist als bei einem Verfahren 2ter Ordnung. D.h. die Prozedur (6.2) führt für dieses Beispiel zu großen Zeitschritten, jedoch mit einem Verlust der Genauigkeit.

Vergleicht man neben der Genauigkeit auch den numerischen Aufwand, also die Effizienz der Verfahren, so ist zunächst der Abbildung 6.10a zu entnehmen, dass die DIRK-

Verfahren für den Belastungsprozess größere Zeitschritte erreichen.⁸ Allerdings, wenn die Rechenzeiten verglichen werden, siehe Tabelle 6.2, so ist zu erkennen, dass die Rosenbrock-Verfahren, trotz der höheren Anzahl an Zeitschritten, dem Verfahren von Ellsiepen [1999] überlegen sind. Das ROS2S benötigt für den Prozess 1274 s, was ca. 35% der Rechenzeit des DIRK-Verfahrens entspricht. Die globalen und lokalen Iterationen innerhalb des MLNA sind mit immensem numerischem Aufwand verbunden, was zur Folge hat, dass ein einzelner Integrationsschritt eines DIRK-Verfahrens numerisch höhere Kosten verursacht. Hieran wird wiederum die Effizienz einer iterationsfreien Prozedur ersichtlich.

Tabelle 6.2.: Aufwandsvergleich der adaptiven Schrittweitenkontrolle

Verfahren	p	s	$\max \varepsilon_{\text{rel}}^{\text{an}}$	Zeitschritte	CPU s	CPU %
ROS2	2(1)	2	$9.08e-03$	357	2229	60.70
ROS2S	2(1)	3	$1.74e-02$	180	1274	34.69
ELLSIEPEN	2(1)	2	$1.16e-02$	138	3672	100.0
BE	1(-)	1	$1.47e-01$	162	2541	69.20

6.2. Veranschaulichung spezieller thermomechanischer Effekte

In einem weiteren Simulationsbeispiel wird das Materialmodell auf seine physikalische Aussagekraft hin untersucht, indem mittels eines vereinfachten Modells der finiten Entropieelastizität zwei spezielle, thermomechanische Effekte analysiert werden. Hierbei handelt es sich um den thermoelastischen Inversionseffekt und den Joule-Gough Effekt, vgl. Abschnitt 3.1.

Zur Veranschaulichung der finiten Entropieelastizität wird der Gleichgewichtsanteil der Elastizitätsbeziehung nach (3.68) und (3.69) mit den zweiten Piola-Kirchhoff Spannungen

$$\tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}} = \varrho_{\text{R}} \frac{\theta}{\theta_0} \frac{J}{\varphi} U'(J/\varphi) \mathbf{C}^{-1} + 2\varrho_{\text{R}} \frac{\theta}{\theta_0} J^{-2/3} \left((w_1 + w_2 \text{II}_{\bar{\mathbf{C}}}) \mathbf{I} - w_2 \bar{\mathbf{C}} - \frac{1}{3} (w_1 \text{I}_{\bar{\mathbf{C}}} + 2w_2 \text{II}_{\bar{\mathbf{C}}}) \bar{\mathbf{C}}^{-1} \right), \quad (6.3)$$

⁸Aufgrund der Belastungsfunktion, die einer stückweise stetigen Funktion entspricht, ergibt es sich auf natürliche Weise, dass die Schrittweitenkontrolle zu Beginn jedes Intervalls, d.h. für $t = \{0, 10, 20\}$ s, mit der Anfangsschrittweite $\Delta t_n = 10^{-3}$ s startet.

und die aus Potentialbeziehung für die Entropie (3.36) hergeleitete Relation

$$s = -\frac{1}{\theta_0} (U(J/\varphi) + \bar{v}(\bar{\mathbf{C}})) - \psi'_{\Theta} + \frac{\theta}{\theta_0} \frac{\varphi'}{\varphi^2} J U'(J/\varphi), \quad (6.4)$$

herangezogen. Die Ableitung des thermischen Anteils der freien Energie nach der Temperatur berechnet sich nach (3.113) zu

$$\psi'_{\Theta} = -\varrho_{\text{R}} c_p \left(c_{\text{pk}}(\theta - \theta_0) + (1 - c_{\text{pk}}\theta_0) \ln \frac{\theta}{\theta_0} \right). \quad (6.5)$$

Für die aufgeführten Untersuchungen dient der einaxiale Zugversuch. Dieser lässt sich durch den Deformationsgradienten

$$\mathbf{F} = \lambda \mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_x + \lambda_q (\mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z) \quad (6.6)$$

beschreiben, worin $\lambda = L/L_0$ der Axialstreckung und λ_q der Querstreckung entspricht. Mit der Determinante des Deformationsgradienten $J = \lambda \lambda_q^2$ aus (6.6) resultiert aufgrund von $\bar{\mathbf{C}} = J^{-2/3} \mathbf{C}$ der unimodulare rechte Strecktensor der einaxialen Zugdeformation

$$\bar{\mathbf{C}} = J^{-2/3} (\lambda^2 \mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_x + \lambda_q^2 (\mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z)), \quad (6.7)$$

woraus sich unmittelbar die Invarianten

$$\text{I}_{\bar{\mathbf{C}}} = J^{-2/3} (\lambda^2 + 2\lambda_q^2), \quad \text{II}_{\bar{\mathbf{C}}} = J^{2/3} (\lambda^{-2} + 2\lambda_q^{-2}), \quad (6.8)$$

ergeben. Weiterhin resultiert aus dem Prozess der einachsigen Zugbelastung offensichtlich, dass $\tilde{t}_{22} = \tilde{t}_{33} = 0$ und $\tilde{t}_{ij} = 0$ für $i \neq j$,⁹ womit durch Auswertung von (6.7) der Gleichgewichtszustand des einaxialen Zuges durch die Spannungsrelationen

$$\tilde{t}_{11} = \varrho_{\text{R}} f(\lambda, \lambda_q, \theta), \quad (6.9a)$$

$$0 = g(\lambda, \lambda_q, \theta), \quad (6.9b)$$

beschrieben ist. Die beiden obigen Gleichungen stellen nichtlineare Funktionen in Abhängigkeit der Streckung λ , λ_q und der Temperatur θ dar, die für den betrachteten Prozess wie folgt

$$\begin{aligned} f(\lambda, \lambda_q, \theta) &= \frac{\theta}{\theta_0} \frac{J}{\varphi} U'(J/\varphi) \lambda^{-2} + \\ &+ \frac{\theta}{\theta_0} (2J^{-2/3} (w_1 w_2 \text{I}_{\bar{\mathbf{C}}} - w_2 \lambda^2 J^{-2/3}) - \frac{1}{3} (w_1 \text{I}_{\bar{\mathbf{C}}} + 2w_2 \text{II}_{\bar{\mathbf{C}}}) \lambda^{-2} J^{-2/3}), \end{aligned} \quad (6.10a)$$

$$\begin{aligned} g(\lambda, \lambda_q, \theta) &= \frac{\theta}{\theta_0} \frac{J}{\varphi} U'(J/\varphi) \lambda_q^{-2} + \\ &+ \frac{\theta}{\theta_0} (2J^{-2/3} (w_1 w_2 \text{I}_{\bar{\mathbf{C}}} - w_2 \lambda_q^2 J^{-2/3}) - \frac{1}{3} (w_1 \text{I}_{\bar{\mathbf{C}}} + 2w_2 \text{II}_{\bar{\mathbf{C}}}) \lambda_q^{-2} J^{-2/3}), \end{aligned} \quad (6.10b)$$

⁹Für den Fall dass die Zugbelastung in Richtung des Einheitsvektors \mathbf{e}_x erfolgt.

6. Numerische Beispiele

formuliert sind. Für die Ableitungen $w_1 = \partial\bar{v}/I_{\bar{C}}$ und $w_2 = \partial\bar{v}/II_{\bar{C}}$ gelten nach (3.52) die Ausdrücke

$$w_1 = c_{10} + 3\alpha I_{\bar{C}}^2, \quad \text{und} \quad w_2 = \frac{2}{3}c_{01}II_{\bar{C}}^{1/2}. \quad (6.11)$$

Es sei hier angemerkt, dass für den isothermen Prozess die Temperatur in (6.9) konstant ist und als ein Parameter behandelt werden kann. Dies ermöglicht für einen Dehnungs-gesteuerten Prozess¹⁰ die Berechnung der Querstreckung aus (6.9b) bzw. (6.10b), mit

$$g(\lambda, \lambda_q, \theta_0) = 0 \quad \rightarrow \quad \lambda_q(\lambda, \theta_0). \quad (6.12)$$

und damit die Berechnung der Gleichgewichtsspannung nach (6.9a) für verschiedene Temperaturen.

Zur Bestimmung der Temperatur als Funktion der Streckung dient der adiabate, reversible Prozess. Bei diesem Prozess folgt aus der Dissipationsungleichung und den Materialgleichungen, dass die Entropieproduktion verschwindet, womit über die Auswertung der Bilanzgleichung für die spezifische Entropie die Aussage getroffen werden kann, dass $s(\mathbf{X}, t)$ materiell konstant ist und auf den Wert $s = 0$ gesetzt werden kann. Aus diesem Zusammenhang heraus

$$s = s(\lambda, \lambda_q(\lambda), \theta) = 0, \quad (6.13)$$

und der zuvor berechneten Querstreckung $\lambda_q(\lambda)$ kann die nichtlineare Funktion

$$s = s(\lambda, \theta) = 0 \quad \rightarrow \quad \theta = \theta(\lambda) \quad (6.14)$$

aufgestellt werden, womit die Temperatur als Funktion der Streckung berechnet werden kann.

Für die Simulation der homogenen Zugdeformation wird das FE-Volumenelement nach Abbildung 6.11 verwendet. Die für den Prozess notwendigen Randbedingungen

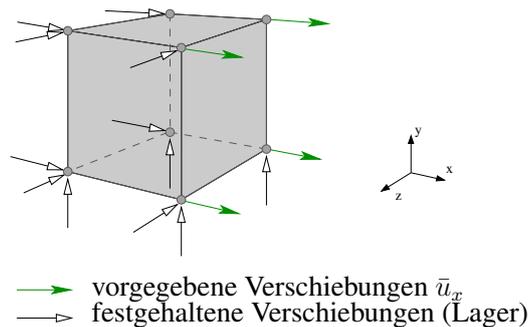


Abbildung 6.11.: FE-Volumenelement des homogenen Zugversuchs mit den notwendigen geometrischen Randbedingungen

sind der Abbildung zu entnehmen.

¹⁰d.h. die Axialstreckung λ ist vorgegeben und somit bekannt.

Für die Validierung und Verifikation im Hinblick auf die physikalische Plausibilität des implementierten Materialmodells und der numerischen Genauigkeit ist eine Gegenüberstellung der in (6.12) und (6.14) hergeleiteten analytischen Relationen und der numerischen Simulation des einaxialen Zuges erarbeitet und in den Abbildung 6.12 und Abbildung 6.13 zusammengefasst. In einer ersten Darstellung, siehe Abbildung 6.12, sind die Spannungskennlinien bei den verschiedenen Temperaturen $\theta = 253\text{K} + i20\text{K}$ für $i = 0, 1, \dots, 4$ aufgetragen. Die erforderlichen Materialparameter des mechanischen Anteils des Materialmodells sind der Tabelle 6.1 entnommen. Für die Materialparameter des thermischen Anteils sind die Werte aus Tabelle 6.3 gewählt, die der Arbeit von Heimes [2005] entnommen sind. Die abgebildeten Komponenten der ersten Piola-Kirchhoff

Tabelle 6.3.: Materialparameter zur Berechnung der einachsigen Zugbelastung

c_{p0}	c_{pk}	κ_0	α_t	θ_0	ϱ_R
$\left[\frac{\text{J}}{\text{kg K}}\right]$	$\left[\frac{1}{\text{K}}\right]$	$\left[\frac{\text{W}}{\text{m K}}\right]$	$\left[\frac{1}{\text{K}}\right]$	$[\text{K}]$	$\left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right]$
1.539e+03	3.75e-03	0.2595	2.06e-04	273.15	1.0e-00

Spannung t_R^{11} beschreiben die Spannungen, welche auf die Querschnittsfläche $A_0(\theta)$ bezogene Normalkraft N entspricht, die sich im thermo-dynamischen Gleichgewicht befindet. Aus Abbildung 6.12f ist die lineare Temperaturabhängigkeit der Spannung, die charakteristisch für die Entropieelastizität ist, deutlich ersichtlich. Im Gegensatz hierzu ist in Abbildung 6.13, welche die Temperaturevolution bei den vorgegebenen Streckungen $\lambda = 1, 2, 3, 4, 5$ darstellt, ein nichtlineares Verhalten erkennbar, siehe Abbildung 6.13f.

Thermoelastische Inversion Zur Veranschaulichung der thermoelastischen Inversion wird eine weitere Simulation mit dem FE-Modell nach Abbildung 6.11 und den selben Materialparametern wie zuvor durchgeführt. Hierzu wird eine definierte Gesamtstreckung λ aufgebracht, und das Verhalten der auf das Element der Referenzkonfiguration bezogenen Spannung t_R^{11} als Funktion der Temperatur analysiert. Die Berechnung des Inversionseffektes erfolgt mit der Ausgangstemperatur von 273.15 K und wird bei konstanter Streckung über fünf identische Inkremente bis 373.15 K gesteigert. Das Ergebnis dieses Vorgehens ist in Abbildung 6.14 dargestellt. Die Spannung t_R^{11} ist für die verschiedenen Streckungen $\lambda_1 = 1.01$, $\lambda_2 = 1.03$, $\lambda_3 = 1.06$, $\lambda_4 = 1.12$ und $\lambda_5 = 1.2$, über die Temperatur aufgetragen. Der Inversionseffekt ist deutlich erkennbar; die Spannungen als Funktion der Temperatur nehmen bei kleinen Streckungen ab, wohingegen eine Zunahme bei größeren Streckungen auftritt. Dieses Verhalten ist durch die Überlagerung der thermischen Dehnung und der linearen Temperaturabhängigkeit der Gleichgewichtsspannungen erklärbar, siehe [Lion, 2000b].

6. Numerische Beispiele

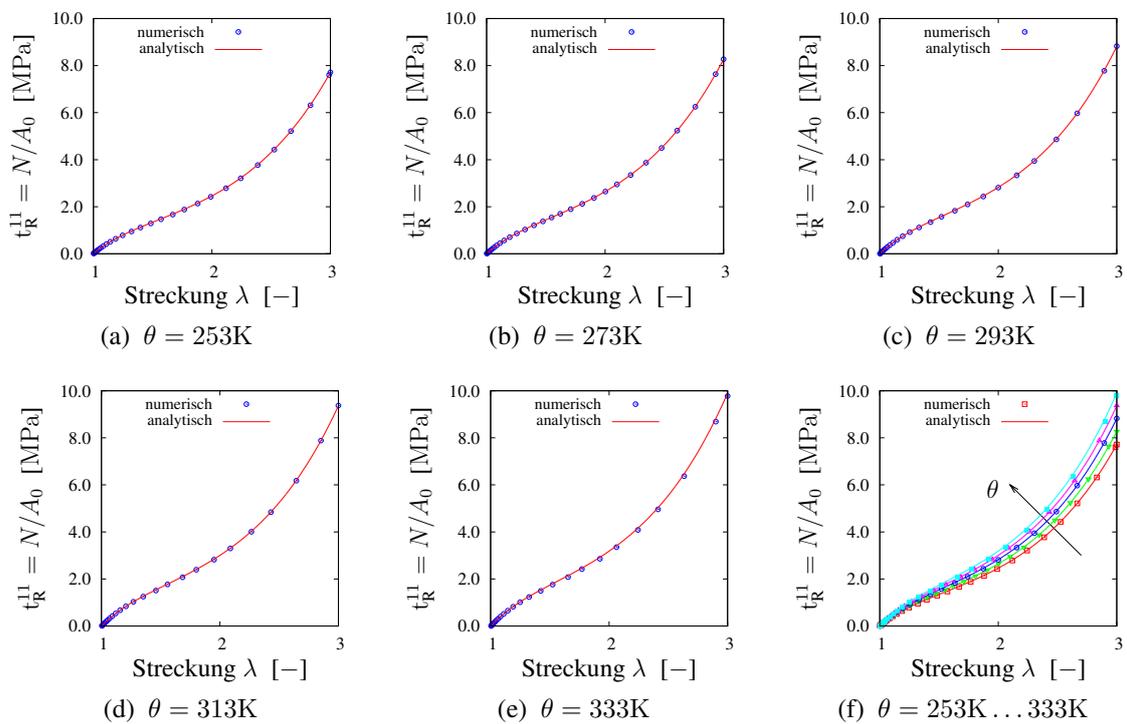


Abbildung 6.12.: Temperaturabhängigkeit der Gleichgewichtsspannung der finiten Entropieelastizität

6.2. Veranschaulichung spezieller thermomechanischer Effekte

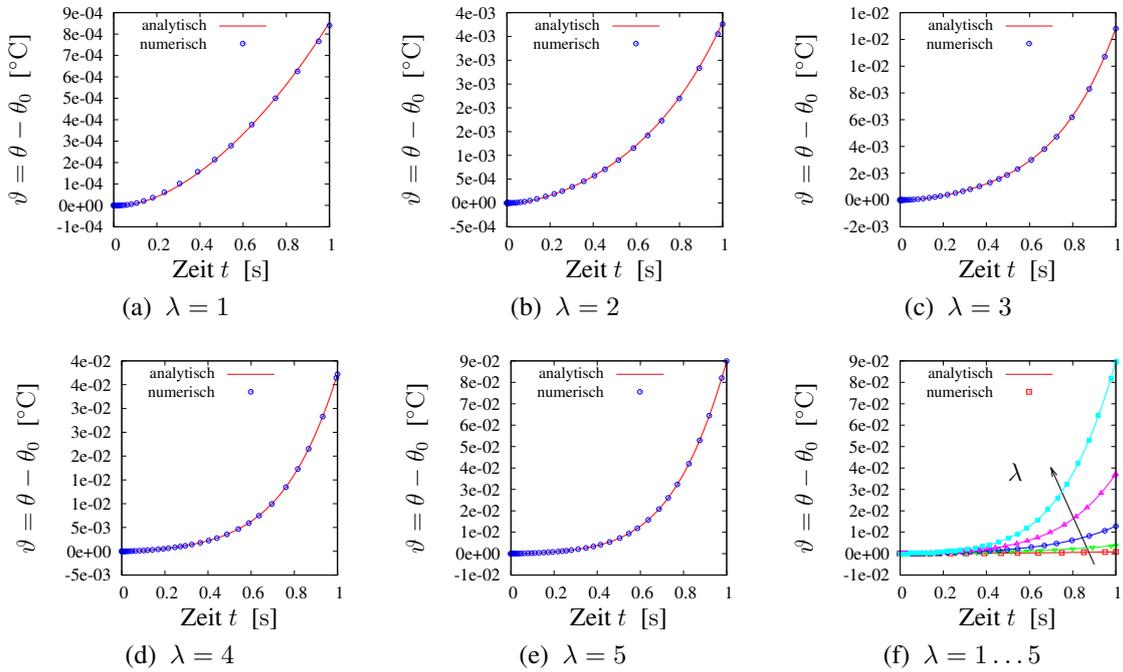


Abbildung 6.13.: Temperaturentwicklung bei adiabater Zugbelastung

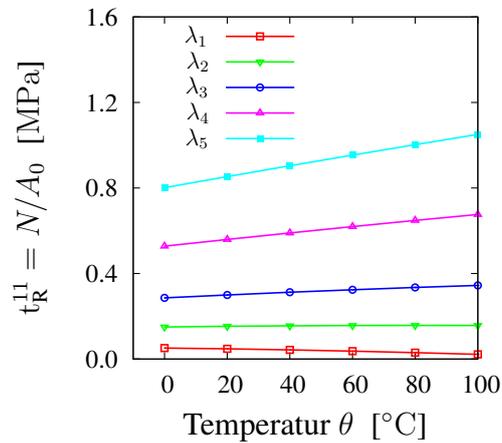


Abbildung 6.14.: Thermoelastischer Inversionseffekt. Darstellung von Spannungskennlinien als Funktion der Temperatur bei konstanter Streckung. Die Punkte kennzeichnen die numerischen, die durchgezogenen Linien die analytischen Lösungen

Joule-Gough Effekt Der Joule-Gough Effekt beschreibt, entgegengesetzt dem Verhalten von Metallen, die Temperaturerhöhung bei einem dehnungsgesteuerten Zugversuch unter adiabater Bedingung, d.h. eine durch ein Gewicht belastete Probe zieht sich bei Erwärmung zusammen, während die Absenkung der Temperatur eine Verlängerung bewirkt, [Joule, 1859].

Dieses typische Materialverhalten bei Elastomeren ist in Abbildung 6.15 dargestellt und mit Hilfe des FE-Modells aus Abbildung 6.11 bezogen auf das aufgestellte Materialmodell simuliert. Offensichtlich ist bei kleinen Zugverformungen die Temperaturän-

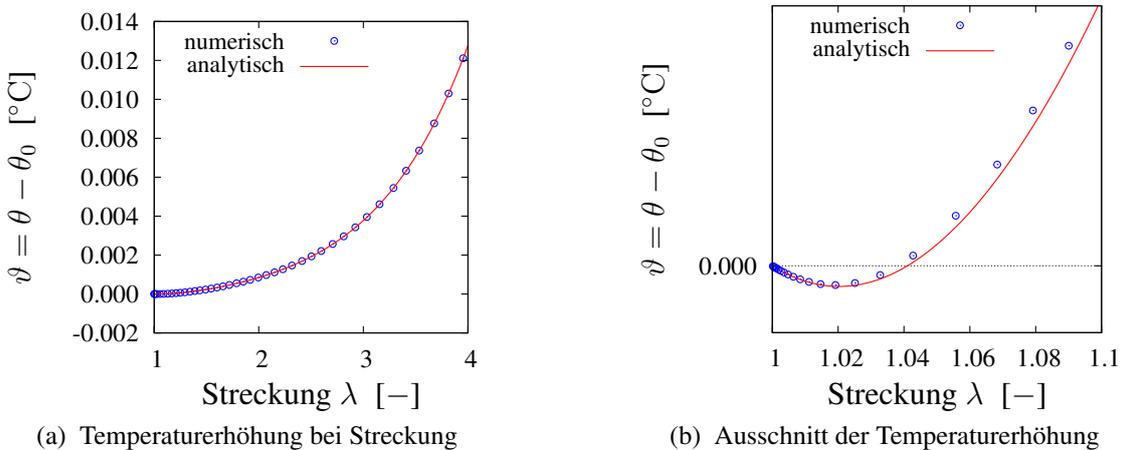


Abbildung 6.15.: Joule-Gough Effekt – Temperaturverlauf bei adiabater Zugdeformation.

derung zunächst negativ, siehe Abbildung 6.15b. Dieses Verhalten wird wesentlich vom thermischen Ausdehnungskoeffizient α_t bestimmt, hierzu [Treloar, 1975]. Für $\alpha_t = 0$ verschwindet dieser Effekt. Bei moderaten Verformungen, d.h. ab dem sogenannten thermoelastischen Inversionspunkt, stellt man eine Temperaturerhöhung fest, deren Ursache auf die Entropieelastizität zurückzuführen ist. Aufgrund der adiabaten Bedingung ist die Entropie materiell konstant, womit eine Dehnungszunahme eine Entropieabnahme bewirken würde. Daher antwortet das Material mit einem Zuwachs der Temperatur, Lion [2000a].

6.3. Untersuchung des Materialverhaltens

Für die numerische Untersuchung von thermomechanisch gekoppelten Problemstellungen bezüglich des vorgestellten Materialmodells der finiten Thermoviskoelastizität und der entwickelten iterationsfreien Lösungsprozedur, wird im Folgenden erneut der Elastomerkörper aus Abbildung 6.1a herangezogen. Das Modell der Elastomerprobe ist geometrisch identisch und mit denselben Annahmen der Symmetrie. Allerdings ist die

Diskretisierung geringfügig anders gewählt worden, da in diesem Beispiel neben den geometrischen Randbedingungen zusätzlich auch gemischte Randbedingungen hinzugefügt sind. In Abbildung 6.16a ist das FE-Netz der Elastomerprobe dargestellt. Das

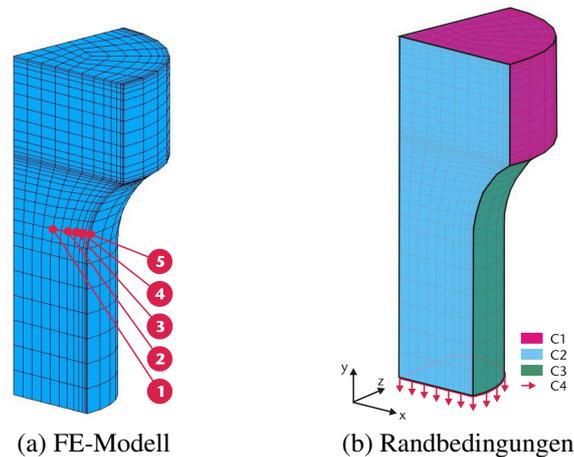


Abbildung 6.16.: Berechnungsmodell der Elastomerprobe mit fünf selektierten Auswertungsknoten und den Randflächen mit verschiedenen gewählten Dirichlet- und Neumann-Bedingungen

Volumen ist hierbei mit dem gemischten FE-Ansatz mit insgesamt $n_e = 2560$ Q1P0 Elementen diskretisiert. An der äußeren Oberfläche, siehe Abbildung 6.16b - Fläche C3, ist ein freier konvektiver Wärmeübergang mit entsprechender Umgebungstemperatur θ_∞ vorgegeben. Üblicherweise wird für den konvektiven Anteil des Wärmestroms die lineare Beziehung der Temperaturdifferenz nach

$$\bar{q}_{\text{konv}} = h_c (\theta - \theta_\infty), \quad (6.15)$$

angenommen. Nach Incropera et al. [2007] kann für den Wärmeübergangskoeffizient h_c der freien Konvektion ein Wert zwischen $2 \dots 25 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$ angenommen werden.¹¹ Im FE-Modell wird der Wärmestrom durch Flächenelemente berücksichtigt. Es wurden 144 vierknotige, deformationsabhängige Flächenelemente verwendet, die mit den Flächen der Volumenelemente an der freien Oberfläche koinzidieren. Hieraus ergibt sich für das gesamte FE-Modell $n_n = 3201$ Knoten, was gleichzeitig der Anzahl der Temperaturfreiheitsgrade entspricht. D.h. an den Dirichleträndern, siehe Abbildung 6.16b - Fläche C1, C2, C4, sind ausschließlich Verschiebungsfreiheitsgrade vorgegeben, welche, bis auf die Belastungsfunktion über Fläche C4, den Bedingungen aus Abbildung 6.1b entsprechen. Die Belastungsfunktion wird entsprechend Abbildung 6.17a gewählt. Sie setzt sich zum einen aus einer zyklischen Funktion über ein Intervall von 200 s zusammen, die mit einem hyperbolischen Tangens überlagertem Sinus der Kreisfrequenz $0.2\pi \text{ s}^{-1}$

¹¹Für die betrachteten Untersuchungen wurde $h_c = 12.5 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$ gewählt.

6. Numerische Beispiele

und einer Amplitude von 25 mm realisiert ist. Ab dem Zeitpunkt von $t = 200$ s ist zudem eine konstante Lastfunktion über eine Haltezeit von 200 s angefügt. Der Aufbau des Modells wird mit der Angabe einer konstanten, über den Körper homogen verteilten Anfangstemperatur von $\theta(t_0) = 293.15$ K und den Materialparameter aus der Tabelle A.4 in Anhang A.5 komplettiert. Der Prozess wird mit der adaptiven Schrittweitensteuerung,

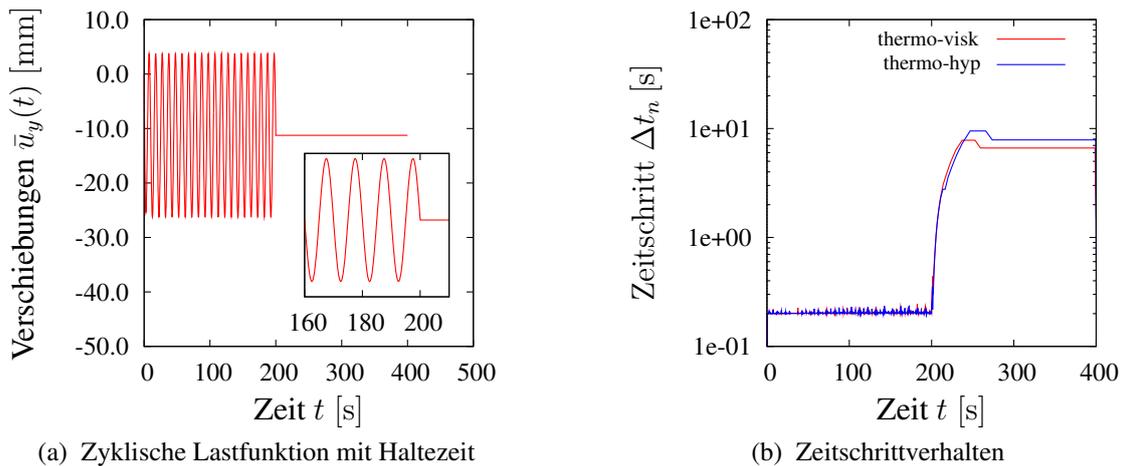


Abbildung 6.17.: Aufgebrachte zyklische Belastungsfunktion mit Haltezeit und das resultierende Zeitschrittverhalten

für zwei verschiedene Modellannahmen berechnet. Zunächst wird das rein thermohyperelastische Materialverhalten berücksichtigt, in dem alle inelastischen Dissipationsterme unbeachtet bleiben. Dieser Modellannahme, mit der Bezeichnung “thermo-hyp”, wird das Modell “thermo-visk”, das zusätzlich alle viskosen Effekte berücksichtigt, gegenübergestellt. Das Schrittweitenverhalten der beiden simulierten Modellannahmen ist in Abbildung 6.17b dargestellt. Das Verhalten der Zeitschritte unterscheidet sich unwesentlich voneinander. Im Bereich der nichtlinearen Belastungsfunktion müssen die Zeitschritte permanent den geforderten Toleranzen aufgrund der thermomechanischen Kopplungseffekte und der damit verbundenen nichtlinearen Materialfunktionen anpassen werden. Mit dem Beginn der Haltefunktion, wenn dem Körper darüber hinaus keine mechanische Energie zugeführt wird und die Spannungen relaxieren, erweist sich die Schrittweitensteuerung als sehr effizient, da die Zeitschritte rapide vergrößert werden können. Zum Ende des Prozesses bleiben die Zeitschritte relativ konstant. Hier wirkt der Einfluss des Wärmeübergangs auf die Schrittweitensteuerung. Offensichtlich resultieren aus dem Belastungsprozess sehr komplexe thermomechanische Vorgänge in dem Körper, die im wesentlichen durch die thermoelastische Kopplung und die inelastische Dissipation charakterisiert sind. Diese führen über die eingeführte mechanische Energie zu einer Temperaturerhöhung im Körper, welche folgend untersucht wird.

Abbildung 6.18 zeigt die Temperaturverteilung in dem Körper zu verschiedenen Zeitpunkten, die für die Modellannahme “thermo-visk” berechnet wurde. Durch die zykli-

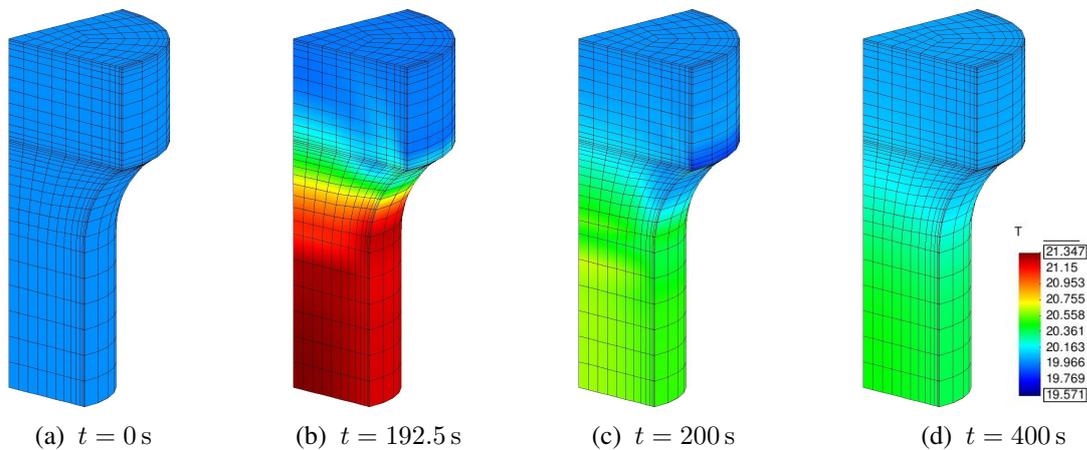
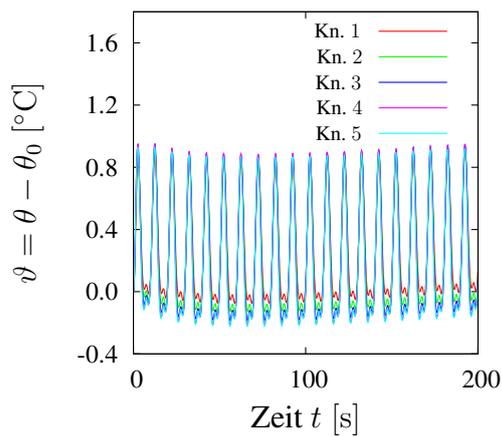


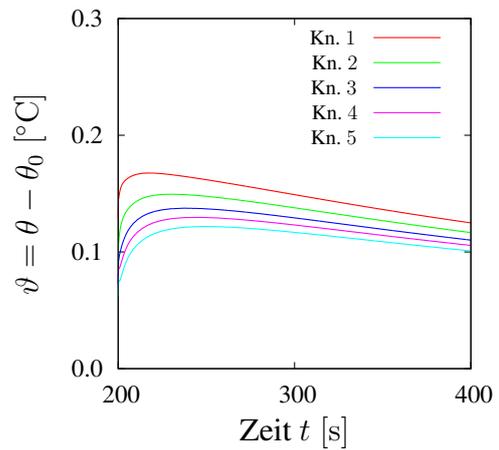
Abbildung 6.18.: Temperaturverteilung zu verschiedenen Zeitpunkten für den Fall der Thermoviskoelastizität

sche Be- und Entlastung findet im Körper eine Aufheizung statt, siehe Abbildung 6.18a - Abbildung 6.18c. Das thermische Aufheizen erreicht den höchsten Wert, wenn der Probenkörper eine maximale Streckung erfährt. Abbildung 6.18b zeigt exemplarisch die Temperaturverteilung für die Belastungsamplitude des letzten Zyklus. Im Bereich der Haltezeit $t = 200\text{ s}$ bis $t = 400\text{ s}$ relaxiert der Körper und es findet eine Abkühlung statt, siehe Abbildung 6.18d. Zudem wird Wärme über die Oberfläche an die Umgebung abgegeben.

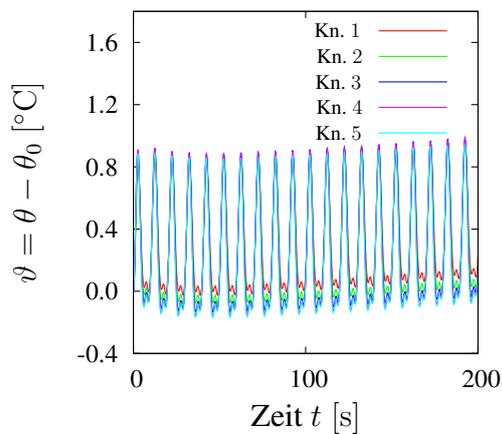
Fokussiert man sich auf einzelne, lokale Punkte im Körper, so stellt sich ein detailliertes Bild des thermomechanisch gekoppelten Vorgangs heraus. Für solch eine Untersuchung sind in Abbildung 6.16a fünf Knoten definiert, die an der Symmetrieffläche vom Inneren des Körpers bis zur äußeren Oberfläche platziert sind. Abbildung 6.19 stellt die Temperaturverläufe, bzw. die Temperaturzuwächse ϑ , die an diesen Knoten für beide Modellannahmen ermittelt wurden, dar. Hierbei werden die unterschiedlichen Belastungsintervalle separiert betrachtet. Die Temperaturentwicklung in dem Körper für die Modellannahme “thermo-hyp”, siehe Abbildung 6.19a, resultiert ausschließlich aufgrund des Phänomens der thermoelastischen Kopplung. Es zeichnet sich eine relativ konstante Temperaturentwicklung innerhalb des zyklischen Belastungsintervalls aus. Der Körper erfährt eine geringe Temperaturerhöhung von ca. $\vartheta \approx 0.1\text{ °C}$, die im Körperinneren, am Knoten 1, am höchsten ist, siehe Abbildung 6.19b. Für den Fall der Annahme “thermo-visk” werden die inelastischen Dissipationsterme berücksichtigt. Dies führt zu einer höheren Temperaturentwicklung im Körper, die an der leichten Steigung der Amplituden in Abbildung 6.19c zu erkennen ist. Es resultiert ein Temperaturzuwachs, der am Knoten 1 etwa $\vartheta \approx 0.25\text{ °C}$ erreicht. Im Bereich der konstanten Last, während der Körper relaxiert, fällt die Temperatur im Vergleich zu “thermo-hyp” schneller, was an den Steigungen der Kurven in Abbildung 6.19b und Abbildung 6.19d ersicht-



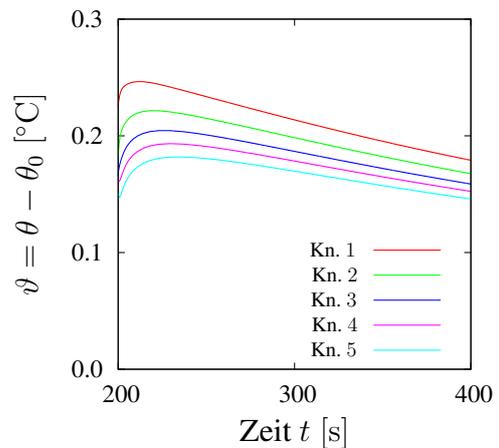
(a) thermo-hyp: Intervall zyklische Last



(b) thermo-hyp: Intervall konstante Last



(c) thermo-visk: Intervall zyklische Last



(d) thermo-visk: Intervall konstante Last

Abbildung 6.19.: Temperaturzuwächse an den selektierten Knoten aus Abbildung 6.16a der beiden Modellannahmen bei separiert betrachteten Belastungsintervallen

lich wird. Sie verbleibt aber zum Ende des Intervalls auf einem höheren Temperaturniveau. Interessanterweise steigt in beiden Fällen zu Beginn der Haltezeit die Temperatur kurzfristig an, bevor sie sinkt.

Gleichermaßen bewirken die inelastischen Dissipationseffekte, aufgrund der Entwicklung der viskosen Verzerrungen, auch eine Änderung des Deformationsfeldes. Dieser erwartungsgemäße Unterschied der Deformation wird durch den Vergleich der axialen Verschiebungskomponente des Knoten 1 in Abbildung 6.20 verdeutlicht. Schon bereits

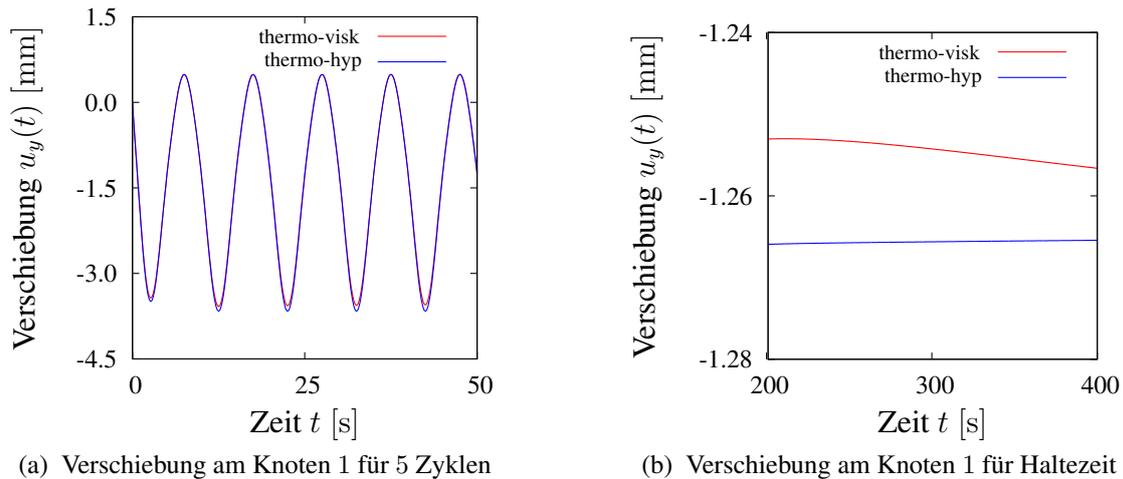


Abbildung 6.20.: Verlauf der axialen Verschiebungskomponente am Knoten 1 für die ersten fünf Zyklen und über die Haltezeit

nach den ersten fünf Zyklen kristallisiert sich nach Abbildung 6.20a heraus, dass der Knoten eine vergleichsweise andere axiale Verschiebung erfährt. Zudem wird durch die Abbildung 6.20b der Unterschied im Relaxationsverhalten, der im Fall von “thermo-visk” zusätzlich über die Viskositätsfunktion beeinflusst wird, veranschaulicht.

Zum Abschluss der Untersuchung wird auf einige Erläuterungen zu dem thermomechanisch gekoppelten Prozess in Bezug auf das formulierte Materialmodell eingegangen. Wie eingangs bereits dargestellt, ist die Temperaturerhöhung im Inneren des Probenkörpers am höchsten. Daher wird für die abschließende Untersuchung ein Knoten im Zentrum der Querschnittsfläche (Fläche C4 in Abbildung 6.16) bei $y = 0$ gewählt. Für diesen Knoten ist in Abbildung 6.21 der Temperaturzuwachs über dem gesamten Belastungsintervall aufgetragen. Zunächst ist der bei Elastomeren typische Temperaturverlauf¹² als Folge einer zyklischen Belastung zu beobachten, der aufgrund einer zur Zeitachse unsymmetrisch verlaufenden Spannungsleistung resultiert und im Wesentlichen von dem Wärmeausdehnungskoeffizient beeinflusst wird, siehe hierzu [Reese, 2001]. Zudem kann man feststellen, dass aufgrund der höheren Verformung, die der Körper auf Höhe des Knoten erfährt,¹³ eine höhere Spannungsleistung bewirkt wird, auf

¹²Hiermit ist die abwechselnde Folge von auftretenden kleinen und großen Amplituden gemeint.

¹³Sowohl größere radiale als auch axiale Verzerrungen

6. Numerische Beispiele

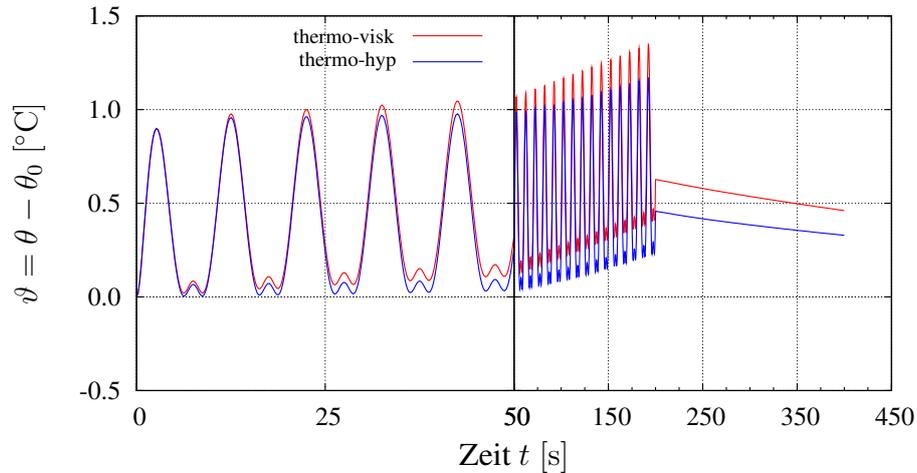


Abbildung 6.21.: Temperaturverlauf eines inneren Knotens bei $y = 0$

die der Körper mit einem Temperaturanstieg antwortet, die an dieser Stelle um ca. 1°C höher ist als zuvor. Der aus der Spannungsleistung hergeleitete thermoelastische Kopplungsterm wird durch diesen beschriebenen Prozess wiedergegeben. Neben der thermoelastischen Kopplung bewirkt die Inelastizität, die dissipative Effekte hervorruft, eine zusätzliche Temperaturentwicklung im Körper. Zur Quantifizierung des Einflusses der inelastischen Dissipation ist in Abbildung 6.22 die Differenz der beiden Temperaturverläufe aus Abbildung 6.21 realisiert worden. Die Kurve beschreibt den Temperaturzu-

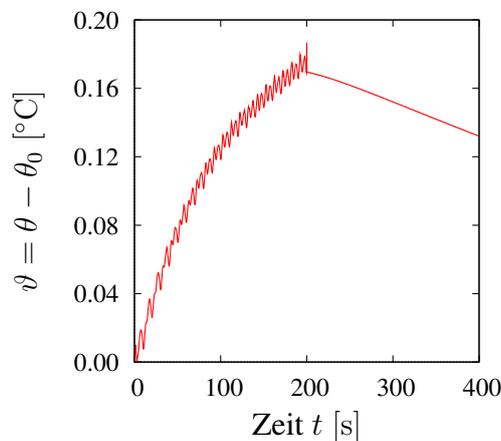


Abbildung 6.22.: Differenz des Temperaturverlaufs aus Abbildung 6.21

wachs, der durch den Dissipationsterm dem Körper pro Zeit zugeführt wird, womit die Aussage getroffen werden kann, dass die Zufuhr der thermischen Energie pro Zyklus zunimmt. Während der konstanten Last ist eine Abnahme des Temperaturzuwachses zu beobachten. Die Begründung liegt in der Entwicklung der inelastischen Verzerrungen und der damit resultierenden Zunahme der Hysterese, wodurch ständig mechanische

Energie in Wärme dissipiert. Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 6.23 visualisiert. In

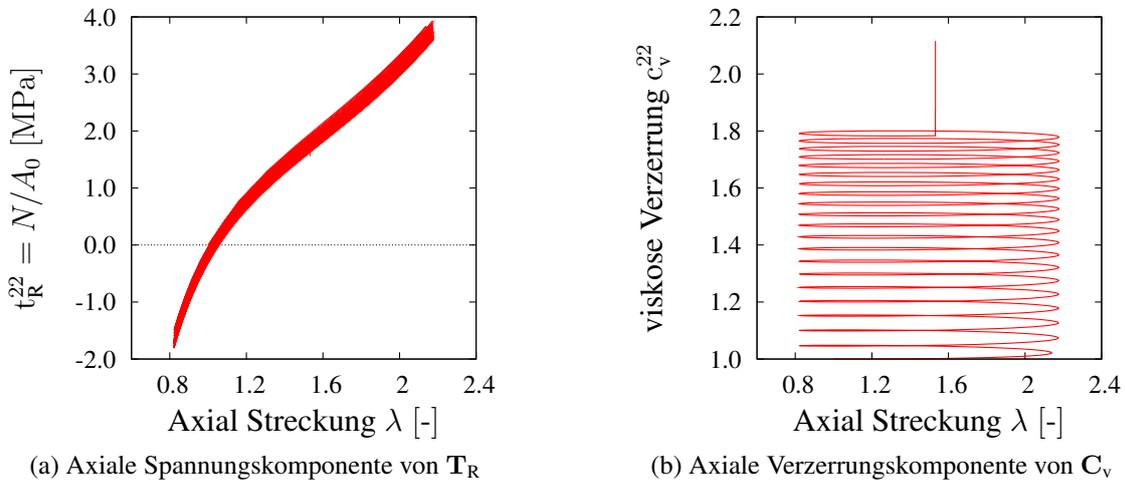


Abbildung 6.23.: Materialantwort bei zyklischer Belastung

Abbildung 6.23b ist die axiale Spannungskomponente des ersten Piola-Kirchhoff'schen Spannungstensors über die axiale Streckung aufgetragen. Man erkennt in der Abbildung die charakteristisch s-förmige Spannungs-Dehnungskennlinie, aus der mit jedem Zyklus eine ausgeprägte Hysterese gebildet wird. Mit dem Auftragen der inneren Variablen, was hier der axialen Komponente des viskosen rechten Cauchy-Green Tensors entspricht, über die axiale Streckung ist die Entwicklung der Hysterese deutlicher zu erkennen. Betrachtet man in Abbildung 6.23b den Verlauf der inneren Variablen, so ist festzuhalten, dass sie sich aufgrund der Temperaturabhängigkeit sogar über das zyklische Belastungsintervall hinaus entwickeln. Gleichzeitig kann man feststellen, dass die Hysterese mit jedem Zyklus größer wird, was durch die Vergrößerung der eingeschlossenen Fläche eines Zyklus nachzuvollziehen ist.

6.4. Untersuchung einer praxisrelevanten Anwendung

Aus ingenieurwissenschaftlicher Sicht ist für eine Bewertung der hier vorgestellten iterationsfreien Lösungsprozedur die Anwendbarkeit der Verfahren auf praxisrelevante Fragestellungen ein essentieller Punkt. Die Anforderungen, die den numerischen Verfahren hierbei gestellt werden, sind neben einem stabilen und robusten Verhalten für ein breites Spektrum an thermomechanisch gekoppelten Problemstellungen auch die effiziente Lösung der komplexen Modelle mit großer Anzahl von Freiheitsgraden, die typischerweise aus Problemen der Praxis resultieren.

6. Numerische Beispiele

Als Beispiel für die Untersuchung einer praxisrelevanten Anwendung wurde ein Elastomerlager gewählt, das als Verformungslager für die Lagerung von Brücken eingesetzt wird. Verformungslager übertragen die Kräfte über die Verformung des Elastomers, sind allseits beweglich und erlauben die Aufnahme horizontaler und vertikaler Lasten bei gleichzeitiger Verdrehung um alle drei Achsen. In Abbildung 6.24 ist ein Bild eines solchen Lagers abgebildet. Es besteht üblicherweise aus einem viskoelastischen Elastomerblock, in den Stahlplatten einvulkanisiert sind. Diese dienen der Versteifung des Lagers.

Die numerische Simulation des Lagers erfolgt mittels eines generischen Modells, das auf die geometrischen Ausführungen nach [Block, 2010] basiert. Das hieraus entstandene Modell mit der zugehörigen Bemaßung ist in Abbildung 6.25 abgebildet. Aufgrund der gewählten Randbedingungen und der Lastfunktion kann eine einfache Symmetrie ausgenutzt werden, d.h. die Hälfte des Lagers wurde modelliert. Die in dem Modell angedeutete Festhaltekonstruktion, die für eine Übertragung der Horizontalkräfte zwischen Überbau und Unterkonstruktion dient, ist hinsichtlich der fehlenden Information der Lastübertragung in der Simulation nicht berücksichtigt. Die Lasten werden direkt auf das Lager übertragen, was einer real höheren Belastung entspricht. Die dafür vorgesehenen Randflächen sind in Abbildung 6.26b dargestellt. Das



Abbildung 6.24.: Elastomerlager im Einbau

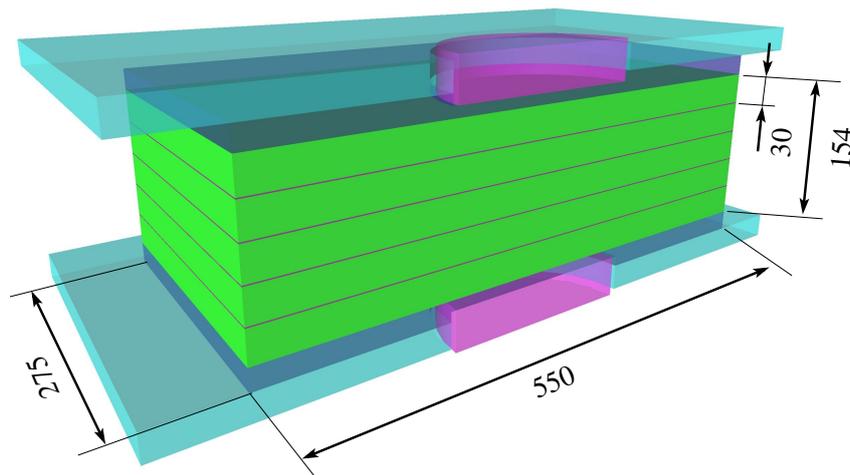


Abbildung 6.25.: Modell des Brückenlagers mit den eingezeichneten Dimensionen. Einheiten in [mm]

Lager wird an der unteren Oberfläche (gelb) fest eingespannt, womit alle Verschiebungsfreiheitsgrade zu Null gesetzt werden. An der oberen Fläche (blau) wird die Last aufgebracht, und die Frontfläche (grün) entspricht einer Symmetrieffläche. Hier sind alle Verschiebungsfreiheitsgrade senkrecht zur Fläche gleich Null. Zudem werden adiabate Temperaturrandbedingungen an den Oberflächen angenommen, womit der Wärmestrom über die Randflächen zu Null gesetzt wird. Abbildung 6.26a stellt das FE-Modell dar. Das Lager wurde mit 6912 Q1P0 Elementen¹⁴ diskretisiert. Dies entspricht einer Anzahl von 8125 Knoten, denen im Allgemeinen jeweils vier Freiheitsgrade zugeordnet sind.¹⁵ Unter Beachtung der Randbedingungen resultiert hieraus ein Modell, dass durch insgesamt 29 975 unbekannte Freiheitsgrade und einer Anzahl von 331 776 inneren Variablen charakterisiert ist. In Abbildung 6.26c und Abbildung 6.26d sind die Zuordnungen des verwendeten Materials dargestellt. Das Lager besteht aus fünf viskoelastischen Elastomerschichten, die mit dem Materialmodell aus Abschnitt 3.4 modelliert werden. Die in Magenta dargestellten Volumen in Abbildung 6.26d entsprechen den Metalleinlagen.¹⁶ Sie werden mit einer vereinfachten Annahme der Thermo-Hyperelastizität modelliert. Die Elastizitätsbeziehung wird mit einem Mooney-Rivlin Ansatz abgebildet.¹⁷ Die hierfür notwendigen Materialparameter c_{10} und c_{01} werden im Zusammenhang zur Theorie kleiner Verzerrungen aus dem Kompressionsmodul K hergeleitet, siehe [Hartmann, 2003]. Der Kompressionsmodul wird der Arbeit von Quint [2012] entnommen und wurde für das Stahl 51CrV4 gewählt. Die für den thermischen Anteil des Materialmodells notwendigen Parameter konnten aus den Werten des Stahls 51CrV4, [Quint, 2012], interpoliert werden. Die Werte der Materialparameter des Modells sind in Tabelle A.5 im Anhang A.5 zusammengefasst. Die nicht Berücksichtigung der Plastizität in dem Modell ist im Rahmen der Untersuchung tragbar, da die resultierenden Spannungen unterhalb der spezifizierten Fließspannungen des Stahls verbleiben und eine Plastifizierung des Stahls ausgeschlossen werden kann.

Die Brückenlager sind vielen verschiedenen Beanspruchungen unterworfen, die auf (quasi) statische und/oder dynamische Lasten bzw. deren Überlagerung zurückzuführen sind. Dynamische Beanspruchungen der Brücke und somit des Lagers, die z.B. durch die Verkehrslast zustande kommen, oder seismische Beanspruchungen werden durch die hier entwickelten numerischen Verfahren nicht ausreichend genau abgedeckt.¹⁸ Daher wird in der Simulation neben der Temperatur ausschließlich das Eigengewicht als bleibende konstante Last und eine zyklische Beanspruchung, wie beispielsweise durch

¹⁴Davon sind 1152 Q1P0 Elemente für die Metallschichten verwendet worden. Eine Metallschicht wird mit 288 Elemente diskretisiert. Über die Höhe der Metallschicht wird eine Elementreihe verwendet.

¹⁵Knoten mit vorgesehenen Randbedingungen besitzen natürlich weniger als vier Freiheitsgrade.

¹⁶In Abbildung 6.26d sind die Metallschichten als ein Ausschnitt des Lagers abgebildet.

¹⁷vgl. Abschnitt 3.4

¹⁸Für eine adäquate Simulation von dynamischen Prozessen bedarf es der Abbildung der Trägheitsterme der Impulsbilanz. Die hier vorgestellte quasi-statische Betrachtungsweise ist für Prozesse in einem Frequenzbereich bis 5 Hz durchaus anwendbar.

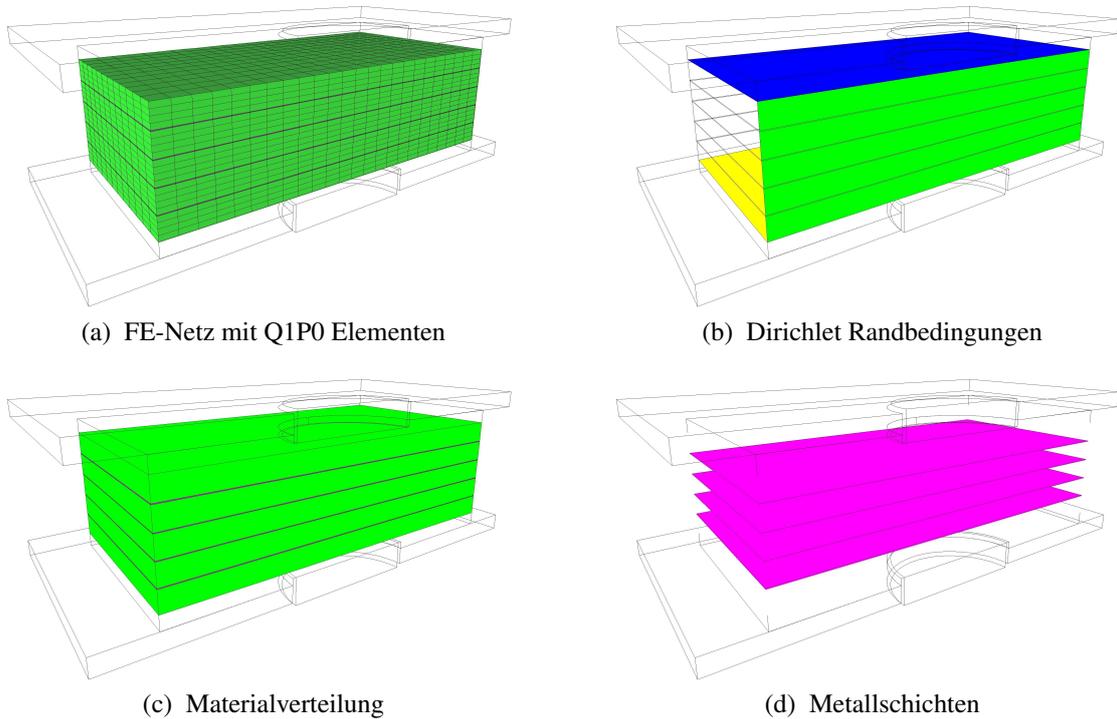


Abbildung 6.26.: Berechnungsmodell der Lagerstruktur mit der gewählten Diskretisierung (a), den aufgebracht Verschiebungsrandbedingungen (b) und den Volumen zugeordneten Material (c) und (d)

den Wind übertragen wird, berücksichtigt. In Abbildung 6.27a sind die umgesetzten Lastfunktionen festgehalten, die die angenommenen Beanspruchungen repräsentieren. Das Eigengewicht der Brücke wird über eine verschiebungsgesteuerte Drucklast realisiert, die als lineare Funktion in 10 s aufgebracht wird und ab einer Stauchung von 10 mm konstant über den gesamten Zeitintervall verbleibt. Neben der Drucklast wird das Lager in Längsrichtung zyklisch auf Scherung belastet. Dies wird mittels einer harmonischen Sinusfunktion mit der Kreisfrequenz $0.4\pi \text{ s}^{-1}$, der ein Tangens Hyperbolicus superponiert ist, realisiert. Der Tangens Hyperbolicus bewirkt eine Verschiebung um die Mittellage. Somit wird das Lager in positiver Längsrichtung (x -Richtung) um 40 mm geschert und in negativer Richtung um 5 mm.

Der Belastungsprozess wird mit dem vierstufigen ROSI2PW Verfahren von Rang and Angermann [2008] mit der adaptiven Schrittweitensteuerung berechnet. Die hierfür benötigten Toleranzen sind folgend gewählt worden: Die Toleranzen für die Knotenverschiebungen sind $Atol_{\mathbf{u}} = 10^{-4}$, $Rtol_{\mathbf{u}} = 10^{-5}$ und die der Knotentemperaturen $Atol_{\Theta} = 10^{-2}$, $Rtol_{\Theta} = 10^{-3}$. Die Toleranzen der inneren Variablen sind $Atol_{\mathbf{q}} = 10^{-4}$, $Rtol_{\mathbf{q}} = 10^{-5}$ und die der Lagrange-Multiplikatoren sind $Atol_{\lambda} = 10^{-3}$, $Rtol_{\lambda} = 10^{-4}$. Abbildung 6.27b stellt für diese Simulation die berechneten Zeitschrittweiten dar. Of-

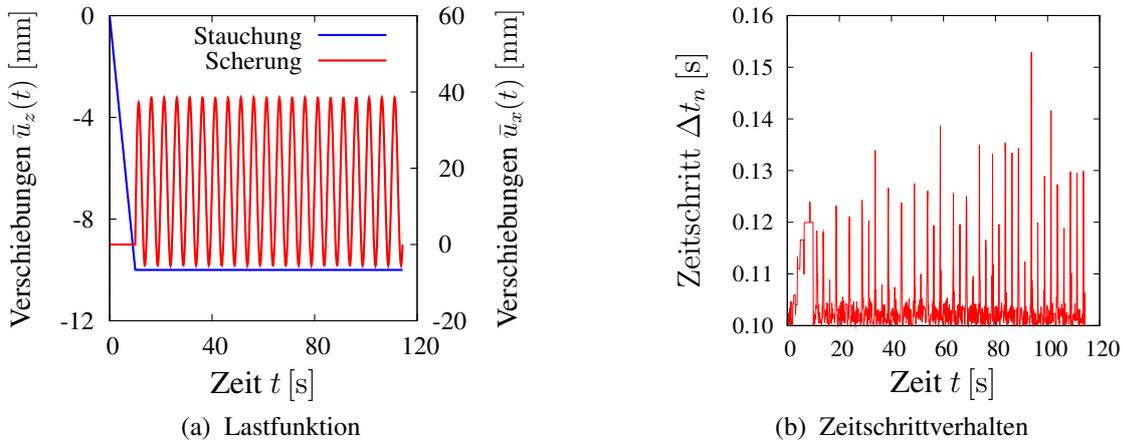


Abbildung 6.27.: Vorgesehene Lastfunktion mit zyklischer Scherung $\bar{u}_x(t)$ mit einer zuvor aufgebrachten Drucklast $\bar{u}_z(t)$ und die berechneten Zeitschrittweiten

fenbar resultiert für das definierte Modell ein äußerst komplexer Deformationsprozess. Durch die Schrittweitensteuerung werden die Zeitschritte nicht wesentlich vergrößert. Die Komplexität des untersuchten Problems ist auf das nichtlineare Materialmodell und die nichtlineare Lastfunktion zurückzuführen. Zusätzlich verkomplizieren die Metallschichten das Problem, da sie eine enorme Versteifung für das Modell bewirken, wodurch die Anforderungen an die Diskretisierung extrem erhöht wird. Die hergeleitete Lösungsprozedur erwies sich für dieses hoch anspruchsvolle Beispiel als sehr effizient und robust. Für die Berechnung des gesamten Prozesses benötigte das Verfahren 37881 Zeitschritte, was auf der gewählten Rechnerarchitektur im Durchschnitt 179450 s dauerte. Die CPU Zeit scheint auf den ersten Blick sehr hoch zu sein. Bedenkt man allerdings, dass das Verfahren für die Berechnung eines einzigen Zeitschritts weniger als fünf Sekunden (ca. 4.7s) benötigt, in der unter anderem mindestens ein lineares Gleichungssystem mit einer Systemmatrix mit 2 870 141 von Null verschiedenen Einträgen gelöst werden muss, so relativiert sich diese CPU Zeit.

Zur Untersuchung des Temperatureinflusses auf die mechanischen Eigenschaften des Lagers wurde die Simulation des Belastungsprozesses für drei unterschiedliche konstante Anfangstemperaturverteilungen $\theta(\mathbf{x}, t_0) = \{0, 20, 50\}$ [°C] durchgeführt. Bevor jedoch der Einfluss der Temperatur untersucht wird, sollen zunächst die resultierenden thermomechanischen Materialeigenschaften diskutiert werden. Am Beispiel der Anfangstemperatur von $\theta(\mathbf{x}, t_0) = 20$ °C ist in Abbildung 6.28 die Temperaturverteilung in dem Lager zu verschiedenen Prozesszeiten visualisiert. Infolge der Drucklast, die eine Vorspannung in dem Körper verursacht, erfährt das Lager den höchsten Temperaturzuwachs bei $t = 10$ s, siehe Abbildung 6.28b. Die anschließende zyklische Scherung initiiert in jedem Zyklus an einer Amplitude lokal zwar eine maximale Temperaturerhö-

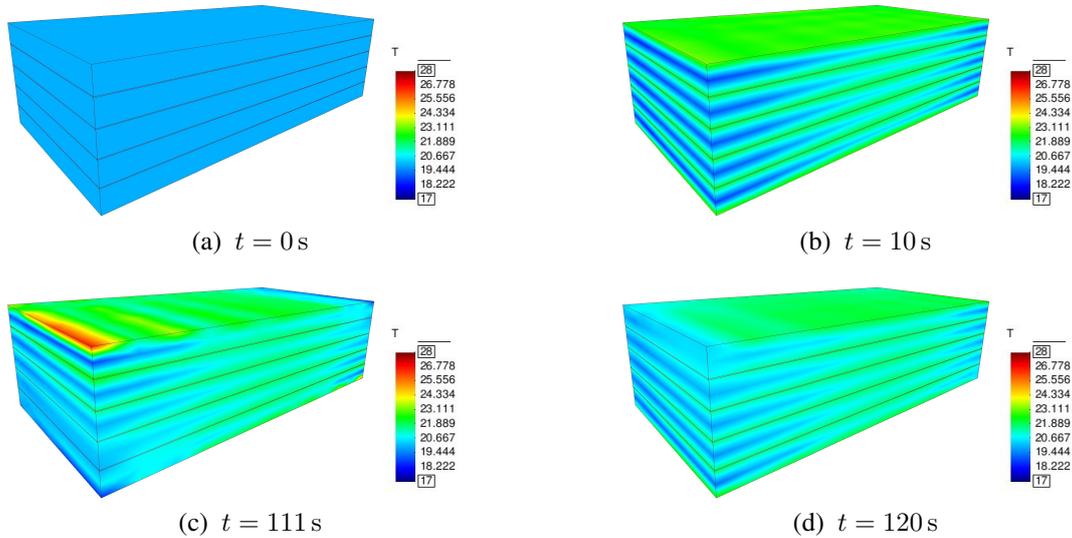


Abbildung 6.28.: Temperaturverteilung zu verschiedenen Lastzeitpunkten

hungen, siehe Abbildung 6.28c, führt allerdings zu einer geringeren Aufheizung des Lagers, siehe Abbildung 6.28d. Die Temperaturerhöhung entlang der Höhe des Lagers ist bei allen Elastomerschichten mittig nahe der Metalleinlagen ausgeprägter, siehe Abbildung 6.28b. Diese Feststellung kann leicht durch die Spannungsverteilung und der damit zugehörigen inneren Spannungsleistung erläutert werden. Die berechneten Spannungen sind im nächsten Ergebnis dargestellt. Abbildung 6.29 zeigt die Spannungsverteilung des Lagers zum Ende der Belastung. In Abbildung 6.29a sind die Spannungen in Scher-

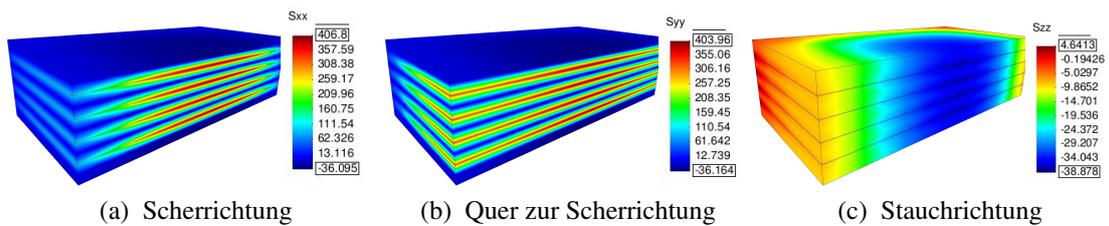


Abbildung 6.29.: Spannungsverteilung der Spannungscomponenten zum Belastungsende

richtung abgebildet, und Abbildung 6.29b zeigt die Spannungen quer zur Scherrichtung. Offensichtlich werden durch die Scherlast an den Metalleinlagen in der Mitte des Lagers, d.h. an der Symmetrieffläche, die höchsten Normalspannungen induziert, die zu den Lagerändern abklingen. Diese inhomogene Verteilung wird vor allem verdeutlicht, wenn man die Spannungen, welche durch die Drucklast in axialer Richtung verursacht werden, betrachtet, siehe Abbildung 6.29c. Das Spannungsbild korrespondiert mit der

zuvor dargelegten Feststellung der Temperaturverteilung des Lagers.

Betrachtet man die Deformation des Lagers, so beobachtet man erwartungsgemäß aufgrund der weit niedrigeren Steifigkeit des Elastomers¹⁹ eine größere Verformung der Elastomerschichten. Eine Verformung der Metallschichten lässt sich allerdings auch verzeichnen. In Abbildung 6.30 ist die Deformation der Metallschichten bei maximaler Scherung überhöht dargestellt. In den Metalleinlagen ist die thermoelastische Kopplung

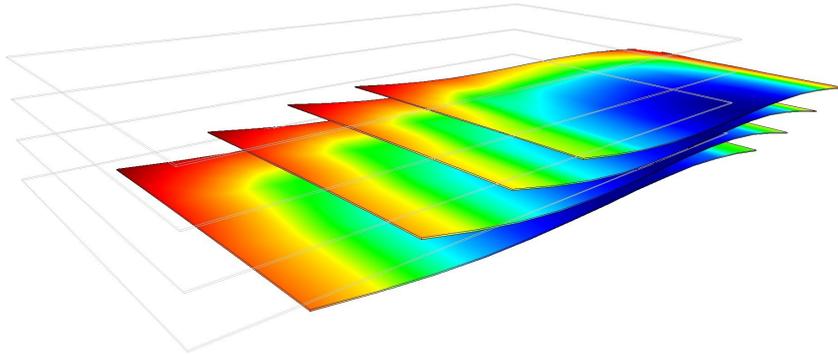


Abbildung 6.30.: Darstellung der deformierten Metallschichten bei maximaler Scherung mit einem Überhöhungsfaktor von 10

berücksichtigt. Die im Vergleich schwache Deformation induziert eine derart hohe Spannungsleistung, die aufgrund des Kopplungsterms im Körper zu einer derart prägnanten Temperaturerhöhung führt.

Wie eingangs geschildert, wird der Belastungspfad für drei verschiedene Anfangstemperaturen des Lagers berechnet. Hierbei liegt insbesondere das Interesse daran, den Einfluss der Temperatur auf die durch das Lager aufzunehmenden Auflagerkräfte zu untersuchen. Die in der Auflagerfläche resultierenden Kraftkomponenten sind in Abbildung 6.31 bezüglich der Belastungszeit für die Anfangstemperatur $\theta(\mathbf{x}, t_0) = 20^\circ\text{C}$ dargestellt. Die Komponenten in axialer Kompressionsrichtung F_z und der Richtung quer zur Scherrichtung F_y beschreiben näherungsweise einen konstanten Kraftverlauf über die Zeit. Die zyklischen Lastwechsel scheinen keinen Einfluss aufzuweisen. Dem entgegen sind die Zyklen in dem Verlauf der Kraft F_x in Scherrichtung deutlich zu sehen. Sie sind allerdings um ca. 10^2 [kN] geringer als die axiale Kraftkomponente. Werden, wie anhand der Abbildung 6.32 gezeigt, die beiden Kraftkomponenten in axialer Richtung und der Querrichtung zur Scherung näher untersucht, so können zwei interessante Ergebnisse festgehalten werden. Zum einen ist eine deutliche Relaxation der Kraft zu erkennen, was durch die thermomechanischen Kopplungsphänomene bewirkt wird. Zum anderen kann festgestellt werden, dass die zyklischen Lastwechsel in relativ schwacher Ausprägung sowohl für die Auflagerkraft F_y quer zur Scherrichtung als

¹⁹Der Kompressionsmodul des Stahls ist um zwei Zehnerpotenzen höher, siehe Tabelle A.5 im Anhang A.5

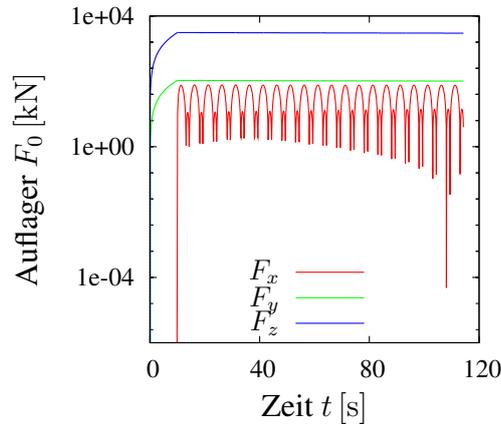


Abbildung 6.31.: Für die Auflagerfläche ermittelten Auflagerkräfte aller drei Richtungen

auch für die Auflagerkraft F_z beobachtet werden können. Dies kann während der Relaxation der Kraft festgestellt werden und wird durch zyklische Temperaturänderung verursacht. Der Einfluss der Anfangstemperatur scheint allerdings vernachlässigbar gering zu sein. Um die Auswirkung der Anfangstemperatur zu verdeutlichen, werden im Folgenden Beispiel die Differenzen der Kraftkomponenten bezüglich der Anfangstemperatur $\theta(\mathbf{x}, t_0) = 0^\circ\text{C}$, die als Referenz dient, abgebildet. In Abbildung 6.33 sind die Differenzen über dem Belastungsintervall aufgetragen. Die Kurven ($F_{\Delta 50}$) ergeben sich aus der Differenz der Auflagerkraft bei $\theta(\mathbf{x}, t_0) = 50^\circ\text{C}$ zu der Auflagerkraft die bei $\theta(\mathbf{x}, t_0) = 0^\circ\text{C}$ ermittelt wurde. In gleicherweise resultieren die Kurven ($F_{\Delta 20}$) die aus der Differenz der Auflagerkräfte bei $\theta(\mathbf{x}, t_0) = 20^\circ\text{C}$ und $\theta(\mathbf{x}, t_0) = 0^\circ\text{C}$ berechnet sind. Offensichtlich sind die Auflagerkräfte von der Anfangstemperatur abhängig, siehe Abbildung 6.33a und Abbildung 6.33b. Mit steigender Temperatur $20^\circ\text{C} \rightarrow 50^\circ\text{C}$ nimmt der Einfluss zu. Die Differenzen der Auflagerkräfte bezüglich der Referenztemperatur 0°C sind größer. Zudem deuten die abfallenden Steigungen der Kurven in den Abbildungen darauf hin, dass der Einfluss der Anfangstemperatur auf einen Grenzwert tangiert.

Die Temperaturentwicklung in dem Lager wird auch durch die Anfangstemperatur beeinflusst. Diese Beobachtung ist in Abbildung 6.34 festgehalten. Dort ist die Temperaturänderung eines Eckknotens der oberen Fläche²⁰ des Lagers abgebildet, siehe Abbildung 6.34a und die Temperaturänderung an dem gegenüberliegenden Eckknoten der unteren Fläche²¹ des Lagers ist in Abbildung 6.34b dargestellt. Die Temperaturänderung aufgrund der Kompression, für $t = [0, 10]\text{s}$, ist für beide Knoten in etwa gleich groß. Die anschließende zyklische Belastung führt an den dargestellten Knoten zu keiner Aufheizung. Hier überwiegt der Einfluss der Relaxation, da der Körper weiterhin

²⁰Die Verschiebungsrandfläche (blaue Fläche nach Abbildung 6.26b), die gestaucht und geschert wird.

²¹Die Verschiebungsrandfläche (gelbe Fläche nach Abbildung 6.26b), die festgehalten wird.

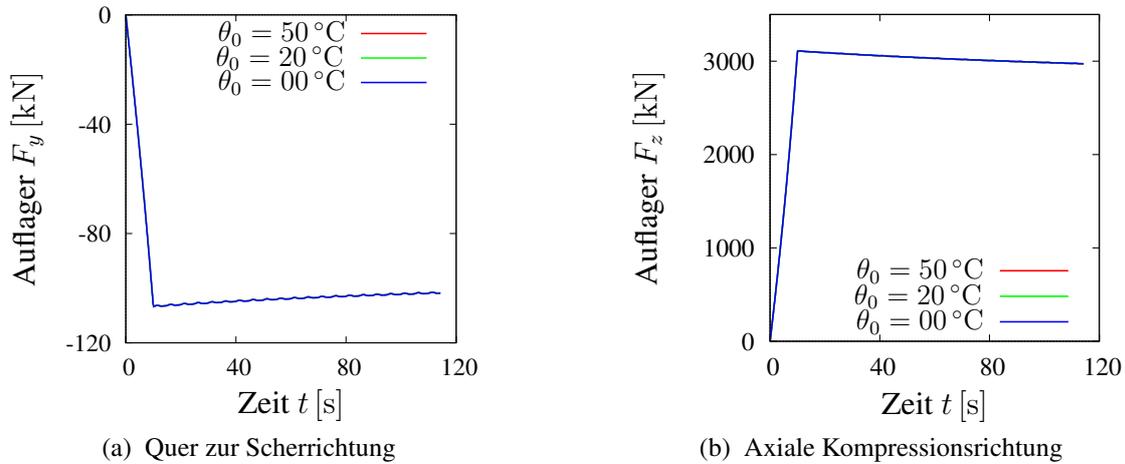


Abbildung 6.32.: Auflagerkräfte der Komponenten in axialer Richtung und der Querrichtung zur Scherung für die gewählten Anfangstemperaturverteilung, mit $\theta_0 = \theta(\mathbf{x}, t_0)$

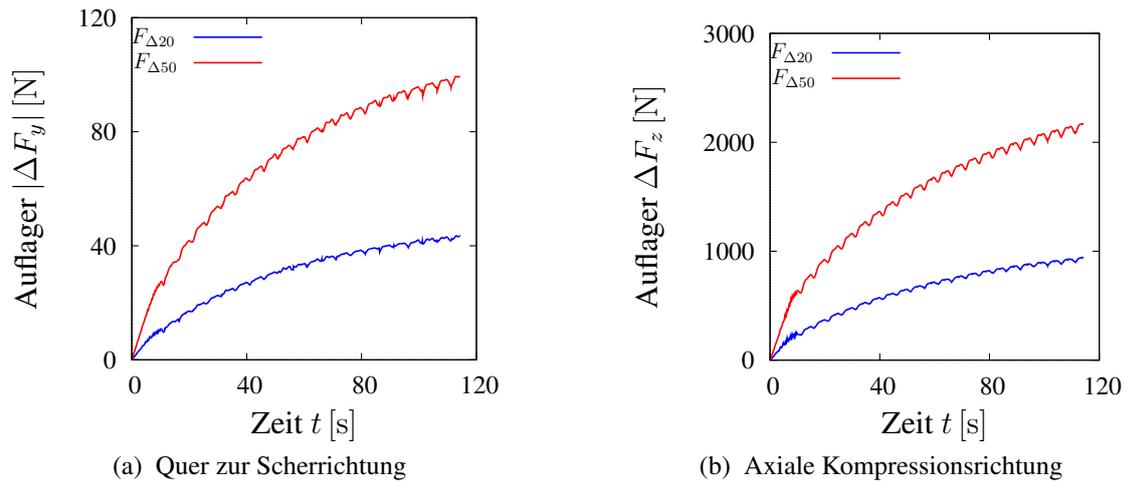
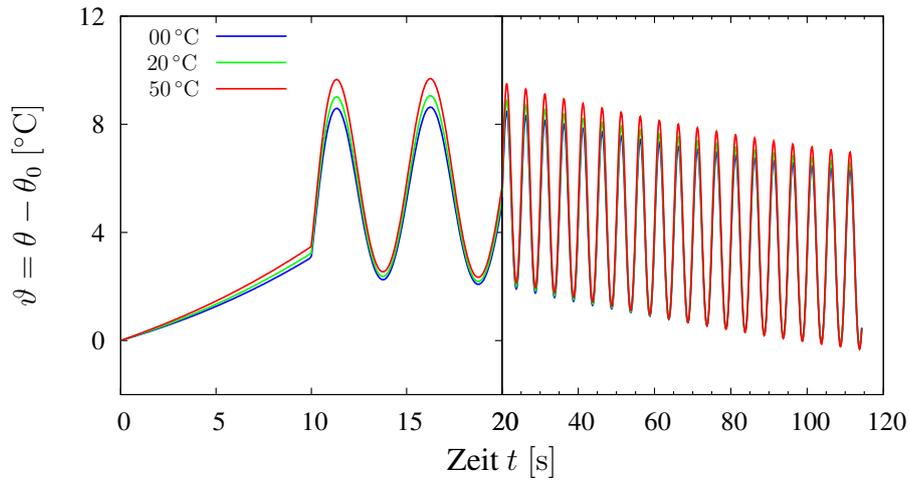


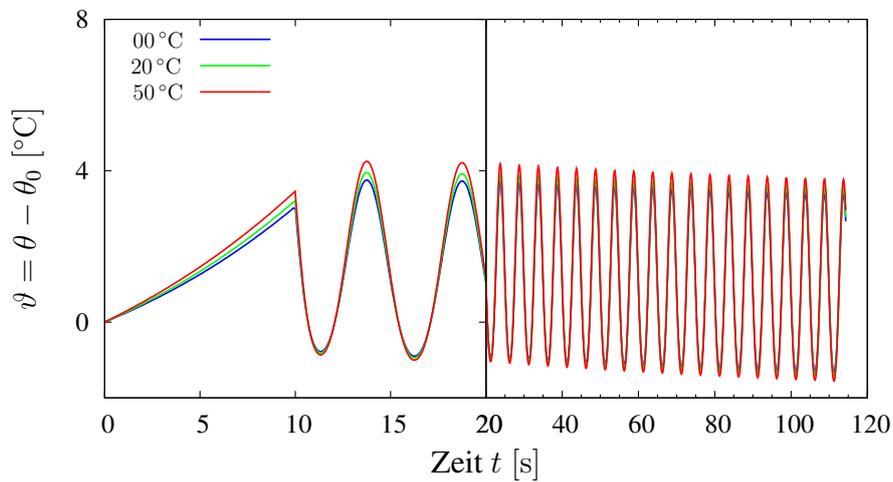
Abbildung 6.33.: Differenzen der Auflagerkräfte für die Komponenten in in axialer Richtung und der Querrichtung zur Scherung

in Kompression gehalten wird. Die zyklische Temperaturerhöhung und -senkung führt zu keiner Aufheizung der Knoten, es findet sogar zu einer Temperaturabnahme statt. Interessanterweise ist der Temperaturzuwachs pro Zyklus für den Fall mit der höchsten Anfangstemperatur im Vergleich auch am Höchsten, womit die eingangs erwähnte Abhängigkeit gezeigt ist.

Durch die zuvor aufgeführte Untersuchung, konnte die Wechselwirkung des mechanischen zu dem thermischen Verhalten des Lagers bezogen auf die gewählte Anfangstemperatur gezeigt werden. In Bezug auf das gesamte thermomechanische Verhalten



(a) Temperaturverlauf an dem Eckknoten der oberen Fläche



(b) Temperaturverlauf an dem Eckknoten der unteren Fläche

Abbildung 6.34.: Verlauf der Temperaturdifferenz $\vartheta = \theta - \theta_0$ bei den gewählten Anfangstemperaturen $\theta(\mathbf{x}, t_0) = \{0.0, 20.0, 50.0\}$ [°C] für zwei verschiedene Knoten.

ist der Einfluss der Anfangstemperaturverteilung für den untersuchten Temperaturbereich jedoch gering. Dies ist zum einen damit begründet, dass bereits die aufgebrachte mechanische Last in dem Lager eine hohe mechanische Spannungsleistung hervorruft, was zu einer relativ hohen Temperaturerhöhung führt, die den Effekt der Anfangstemperatur mindert. Auf der anderen Seite würden größere Scheramplituden zu einer höheren Dissipation führen. Hinsichtlich der temperaturabhängigen Materialfunktionen des Dissipationsterms wächst mit jedem Zyklus der Einfluss der inelastischen Dissipation gegenüber dem thermoelastischen Kopplungsterm, woraus höhere Temperaturänderungen hervorgehen, was wiederum von der Anfangstemperatur abhängig ist.

7. Zusammenfassung und Ausblick

Die jüngsten Fortschritte im Rahmen der Finiten Element Methode können grundsätzlich in zwei Entwicklungsrichtungen unterteilt werden. Auf der einen Seite wurden Verfahren bezüglich einer phänomenologischen Modellbildung komplexer konstitutiver Beziehungen ausgeweitet. Auf der anderen Seite, als Folge von verschärften Genauigkeitsanforderungen und dem Bedarf nach hoch numerisch aufgelösten Modellen, wurden effiziente Techniken und Methoden zur Lösung des Gesamtproblems entwickelt. Die hier vorliegende Arbeit liefert einen Beitrag im Entwicklungsfortschritt effizienter Lösungsstrategien.

Unter diesem Gesichtspunkt wird in dieser Arbeit die numerische Behandlung thermomechanisch gekoppelter Strukturberechnungen mit Hilfe der nichtlinearen Finite-Elemente Methode (FEM) im Rahmen einer modernen Betrachtungsweise einer konsistenten Raum- und Zeitdiskretisierung am Beispiel eines temperaturabhängigen Elastomerwerkstoffes unter der Annahme großer Verzerrungen umgesetzt. Hierbei wird erstmalig sogenannte Rosenbrock-Verfahren auf das zugrundeliegende Algebro-Differentialgleichungssystem (DAE-System) angewendet. Der differentielle Anteil des DAE-Systems besteht aus der semi-diskretisierten schwachen Form der Wärmeleitungsgleichung sowie den Evolutionsgleichungen der inneren Variablen, welche die ratenabhängigen, viskosen Eigenschaften des Materials beschreiben. Der algebraische Anteil wird durch die diskretisierte schwache Form der Gleichgewichtsbedingungen wiedergegeben.

Nach einer kurzen Einführung in die kontinuumsmechanischen Grundlagen, in der alle relevanten kinematischen Relationen zur Beschreibung finiter Deformationen bereitgestellt werden, und der Herleitung der Bilanzgleichungen der Thermodynamik und der Kontinuumsmechanik werden die grundlegenden Prinzipien zur Konstruktion thermodynamisch sinnvoller Materialgleichungen nach dem Konzept der thermomechanisch einfachen Stoffe erläutert. Die Entwicklung des Materialmodells, zur phänomenologischen Beschreibung der thermomechanischen Eigenschaften elastomerer Strukturen, erfolgt durch die sukzessive Auswertung der Dissipationsungleichung. Damit ist eine thermodynamische Konsistenz a priori gewährleistet. Das Materialmodell basiert auf einer multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten in einen mechanischen und einen thermischen Anteil, der rein volumetrische Deformation erzeugt. Als thermodynamisches Potential dient die freie Energie, die in Bezug auf den eingeführten Variablensatz additiv in einem elastischen und einem inelastischen Energieanteil sowie einem rein thermischen Anteil zerlegt wird. Der Wärmefluss im Kontinuum wird mit dem Fourier-

schen Wärmeleitgesetz modelliert. Grundsätzlich wird bei der Entwicklung des Modells die Überlegung berücksichtigt, möglichst ein problemorientiertes Modell zu erhalten. Im Gegensatz zu einer Idealvorstellung, ein Materialmodell müsse den Werkstoff in seiner Gesamtheit beschreiben, sind diese Modelle auf essentielle Phänomene unter gegebenen Belastungen fokussiert, was in der Regel eine effiziente numerische Umsetzung zur Folge hat.

Auf Grundlage der lokalen Form des Anfangs-Randwertproblems (ARWP) werden die Variationsfunktionale des thermomechanisch gekoppelten Problems angegeben und im Hinblick auf eine geeignete Elementformulierung eine gemischte Variationsformulierung hergeleitet. Die integrale Form des ARWP wird im darauf folgenden Schritt im Sinne einer konsistenten Raum- und Zeitdiskretisierung approximiert. Basierend auf einem monolithischen Ansatz werden für die räumliche Diskretisierung aus einem Dreifeldfunktional gemischte Elemente hergeleitet. Bei dieser Formulierung werden unterschiedliche Ansatzfunktionen für die deviatorischen und volumetrischen Anteile der gesamten Deformation gewählt. Dies hat zur Folge, dass die isochoren und volumetrischen Spannungsanteile in der Elementformulierung unterschiedlich behandelt werden. Bei der Diskretisierung des thermoelastischen Kopplungsterms ist diese Aufteilung zusätzlich zu berücksichtigen. Die Umsetzung der Elementformulierung erfolgt in einer räumlichen Darstellung auf der Momentankonfiguration. Mit der gemischten Elementformulierung werden Locking-Phänomene infolge mechanischer Inkompressibilität vermieden.

Der Hauptteil der Arbeit befasst sich mit der Herleitung eines effizienten Zeitintegrationsverfahren zur globalen Lösung des resultierenden DAE-Systems zur Bestimmung der diskreten Temperatur- und Verschiebungsfelder. Das im Bereich der nichtlinearen FEM vorwiegend eingesetzte implizite Euler Verfahren zur Integration des semidiskreten DAE-Systems verliert im Bezug auf Effizienz seine Gültigkeit. Auch implizite Runge-Kutta Verfahren höherer Ordnung unterliegen im Rahmen einer Priorisierung der numerischen Effizienz aufgrund der iterativen Lösungsprozedur an Bedeutung. Mit der Anwendung von Rosenbrock-Verfahren auf das DAE-System wird eine komplett iterationsfreie Lösungsprozedur erzielt und auf Basis von Verfahren höherer Ordnung zudem höhere Genauigkeiten erreicht. In diesem Zusammenhang wird in dieser Arbeit die Verfahrensvorschrift für das thermomechanisch gekoppelte Mehrfeldproblem hergeleitet und die resultierenden Elementmatrizen und -gleichungen formuliert. Besonderer Augenmerk liegt in einer effizienten Implementierung der Algorithmen. Insbesondere wird eine parallele Berechnung der Elementmatrizen umgesetzt. Die typischerweise spärlich besetzten Matrizen werden mit einem Speicherformat für dünn besetzte Matrizen beschrieben, womit eine effiziente Behandlung der linearen Gleichungen ermöglicht wird. Die Berechnung der linearen Gleichungssysteme erfolgt mit einem parallelisierten Gleichungslöser für spärlich besetzte, unsymmetrische Matrizen. Die Faktorisierung der Koeffizientenmatrix wird innerhalb eines Zeitschritts einmalig durchgeführt. Dies ist vor allem für Verfahren höherer Ordnung mit mehreren Stufen interessant. Zur Kontrolle der Genauigkeit und damit der Verlässlichkeit der numerischen Lösung wird eine

Zeitschrittweitensteuerung verwendet, die mit einem vernachlässigbar kleinen numerischen Mehraufwand realisiert wird. Die Komplexität des Mehrfeldproblems erzwingt dabei geeignete Fehlernormen gesondert für die primären Variablen zu wählen.

Im Rahmen der Entwicklung effizienter Lösungsstrategien für die Behandlung finiter Thermoviskoelastizität stellt die hier vorgestellte Prozedur einen messbaren Beitrag. Anhand einfacher, numerischer Beispielrechnungen werden grundlegende Eigenschaften der thermoviskoelastischen Kopplung aufgezeigt. Am Beispiel einer periodisch beanspruchten Elastomerprobe werden dissipative Aufheizeffekte sowie der Einfluss des deformationsabhängigen Wärmestroms studiert und das Verhalten des Materialmodells bewertet. Untersuchungen bei verschiedenen nichtlinearen Belastungsprozessen liefern bei gleichen Genauigkeitsanforderungen erhebliche Rechenzeitreduktionen im Vergleich zu klassischen Verfahren, die in einem weiten Spektrum von kommerziellen FEM-Softwarepaketen implementiert sind. Auch Vergleiche mit den erheblich effizienteren DIRK-Verfahren, haben beträchtliche Rechenzeiterparnisse erzielt. Schließlich konnte die Effizienz der Lösungsprozedur im Zusammenhang eines praxisrelevanten Beispiels für thermomechanische Prozesse ausgetestet und bewertet werden.

Durch die hier vorgestellte iterationsfreie Lösungsprozedur ergeben sich entscheidende Vorteile zur numerischen Behandlung finiter Thermoviskoelastizität. Es existieren allerdings Möglichkeiten zur Weiterentwicklung auf verschiedenen Ebenen. Ein zu benennendes Nachteil des monolithischen Lösungsansatzes ist die homologe Gebietsdiskretisierung, indem alle physikalischen Felder mit dem gleichen Diskretisierungsansatz berechnet werden. Im Allgemeinen führt dies dazu, dass das physikalische Verhalten eines Feldes beschränkend gegenüber den weiteren Felder wirkt, wodurch es zu einer unnötig hohen Auflösung des Netzes führt. Die Weiterentwicklung der Lösungsprozedur bezüglich einer Netzadaptivität könnte die Problematik beheben. Hierzu bedarf es unter anderem der Formulierung geeigneter Fehlerindikatoren zur Abschätzung des räumlichen Diskretisierungsfehlers. Auf Grundlage der Identifizierung des räumlichen Diskretisierungsfehlers kann das Netz lokal verfeinert werden (h-adaptiv) und eine a priori hohe Auflösung des Netzes wird damit vermieden.

Die Anwendung von gemischten Elementen erwiesen sich bei den hier untersuchten thermomechanisch gekoppelten Fragestellungen sowohl in der einfachen, linearen Formulierung (Q1P0) als auch bei der quadratischen Form (Q2P1) als ausgesprochen robust. Eine Alternative für die räumliche Diskretisierung bietet die FEM Legendre Polynomen hoher Ordnung. Diese sind innerhalb der iterationsfreien Lösungsprozedur basierend auf die Rosenbrock Verfahren für die finite Viskoelastizität untersucht worden. Die Erweiterung des Ansatzes für thermomechanisch gekoppelte Probleme verspricht ein durchaus interessantes und lohnenswertes Potential.

Bei Beachtung der möglichen Vielfalt der konstitutiven Modellbildung könnte das in dieser Arbeit formulierte Materialmodell letztlich als beispielhaft für noch komplexere Modelle verstanden werden. Die Umsetzung einer erweiterten Formulierung des inelastischen Materialverhaltens basierend auf konstitutive Gleichungen der finiten Thermo-Viskoplastizität stellt in Zusammenhang des vorgestellten Lösungskonzepts prinzipiell

7. Zusammenfassung und Ausblick

keine Schwierigkeiten dar. Die Untersuchung des numerischen Verhaltens hierbei stellt eine weitere interessante Möglichkeit zur Weiterarbeit.

A. Anhang

A.1. Methode der Lagrange-Multiplikatoren

Mit dem Prinzip der virtuellen Verschiebungen lassen sich zum Beispiel keine Lagerkräfte (bzw. Bindungskräfte) berechnen, da die Lagerkräfte an den Lagern keine virtuelle Arbeit leisten, $\delta \mathbf{u} = 0 \forall \delta \mathbf{u} \in \partial_u \mathcal{X}_t[\mathcal{B}]$. Um diese doch zu berechnen, verwendet man folgende Motivation:

Zunächst geht man davon aus, dass das Potential

$$\Pi(\mathbf{u}) := \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathbb{R}} \Psi(\mathbf{C}(\mathbf{X}, t)) \, dV - \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathbb{R}} \mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{u} \, dV - \int_{\partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \mathbf{t}_{\mathbb{R}} \cdot \delta \mathbf{u} \, dA \rightarrow \text{minimal} \quad (\text{A.1})$$

existiert. Zur Berechnung der Lagerkräfte wird die Methode der Lagrange Multiplikatoren herangezogen. Diese verwendet das ursprüngliche Potential sowie einen Zusatzterm, der geometrischen Zwangsbedingung

$$\mathbf{C}_c(\mathbf{u}) = \mathbf{0}. \quad (\text{A.2})$$

Das neue Funktional lautet dann

$$\mathcal{L}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) := \Pi(\mathbf{u}) + \mathbf{C}_c(\mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\lambda} \quad \rightarrow \quad \text{stationär} \quad (\text{A.3})$$

$\boldsymbol{\lambda}$ stellt den sogenannten Lagrange-Multiplikator dar. Die Variation des Gesamtpotentials \mathcal{L} berechnet sich aus dem Gateaux-Differential

$$\delta \mathcal{L}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) := D_u \mathcal{L}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})[\delta \mathbf{u}] + D_{\boldsymbol{\lambda}} \mathcal{L}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})[\delta \boldsymbol{\lambda}] = 0. \quad (\text{A.4})$$

Hierin sind $\delta \mathbf{u}$ und $\delta \boldsymbol{\lambda}$ beliebig, so dass jeder Summand von (A.4) identisch Null sein muss. Die Richtungsableitung führt auf die Ausdrücke

$$D_{\boldsymbol{\lambda}} \mathcal{L}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})[\delta \boldsymbol{\lambda}] = \mathbf{C}_c \cdot \delta \boldsymbol{\lambda} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{C}_c(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad (\text{A.5})$$

sowie

$$D_u \mathcal{L}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})[\delta \mathbf{u}] = D_u \Pi(\mathbf{u})[\delta \mathbf{u}] + D_u \mathbf{C}_c(\mathbf{u})[\delta \mathbf{u}] \cdot \boldsymbol{\lambda} = 0. \quad (\text{A.6})$$

Der aus (A.5) und (A.6) zu berechnende Lagrange-Multiplikator $\boldsymbol{\lambda}$ stellt im Falle, dass \mathbf{C}_c die Dimension der Verschiebungen hat, eine Zwangskraft dar, die zum Erfüllen der Zwangsbedingung $\mathbf{C}_c(\mathbf{u}) = \mathbf{0}$ notwendig ist.

A.2. Der DIRK/MLNA Lösungsansatz

Die Approximation des Anfangswertproblems (5.60) in einer impliziten Formulierung

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) = \mathbf{0}, \quad (\text{A.7})$$

durch das DIRK-Verfahren führt auf s nichtlineare Gleichungssysteme

$$\mathbf{F}(T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}, \frac{\mathbf{Y}_{ni} - \mathbf{S}_{ni}}{\Delta t_n a_{ii}}) = \mathbf{0}, \quad i = 1, \dots, s. \quad (\text{A.8})$$

Bei DIRK-Verfahren, im Vergleich zu den vollimpliziten RK Verfahren, wird nicht ein gekoppeltes nichtlineares Gleichungssystem der Dimension $n_u \times s$ gelöst, sondern s mal das nichtlineare Gleichungssystem (A.8) der Dimension n_u . Dies ist vor allem für großdimensionale Probleme von erheblichem Vorteil. In dem Gleichungssystem (A.8) stellen die Stufenwerte die Unbekannten dar. Alternativ könnten auch die Stufenableitungen herangezogen werden, was auf

$$\mathbf{F}(T_{ni}, \mathbf{S}_{ni} + \Delta t_n a_{ii} \dot{\mathbf{Y}}_{ni}, \dot{\mathbf{Y}}_{ni}) = \mathbf{0}, \quad i = 1, \dots, s \quad (\text{A.9})$$

führt. Das einfachste DIRK-Verfahren stellt das implizite Euler Verfahren dar,¹ welches auf das nichtlineare Gleichungssystem (vgl. (A.8))

$$\mathbf{F}(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}, \frac{\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n}{\Delta t_n}) = \mathbf{0}, \quad (\text{A.10})$$

mit $\mathbf{S}_{ns} = \mathbf{y}_n$, führt.

In [Ellsiepen and Hartmann, 2001], [Hartmann, 2003] und [Hartmann, 2005] ist die grundlegende Theorie zur Anwendung auf DAE-Systeme vom Index 1 sowie der adaptiven Schrittweitensteuerung erläutert worden. Die Zeitdiskretisierung für $\mathbf{y} = \{\mathbf{u}, \mathbf{q}\}^T$ führt in jeder Stufe auf das nichtlineare Gleichungssystem

$$\mathbf{R}_{ni}(\mathbf{Y}_{ni}) := \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{G}_{ni}(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \\ \mathbf{L}_{ni}(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \end{array} \right\} = \mathbf{0}, \quad (\text{A.11})$$

in jeder Stufe i im Zeitschritt t_n nach t_{n+1} , mit

$$\mathbf{G}_{ni}(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) := \mathbf{g}(T_{ni}, \mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \quad (\text{A.12})$$

und den zeitdiskreten Gleichungen, die aus der Integration des Anteils der gewöhnlichen Differentialgleichungen resultieren

$$\mathbf{L}_{ni}(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) := \frac{\mathbf{Q}_{ni} - \mathbf{S}_{ni}^q}{\Delta t_n a_{ii}} - \mathbf{r}(T_{ni}, \mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}). \quad (\text{A.13})$$

Dabei benötigt man hier den Startvektor $\mathbf{S}_{ni}^q = \mathbf{Q}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{Q}}_{nj}$. Die partitionierten Größen lauten dabei

$$\mathbf{y}_n = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_n \\ \mathbf{q}_n \end{array} \right\}, \quad \mathbf{Y}_{ni} = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{U}_{ni} \\ \mathbf{Q}_{ni} \end{array} \right\}, \quad \mathbf{S}_{ni} = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{S}_{ni}^u \\ \mathbf{S}_{ni}^q \end{array} \right\}. \quad (\text{A.14})$$

In Tabelle A.1 ist die zuvor erläuterte Vorgehensweise nochmals zusammengefasst.

¹Das implizite Euler Verfahren ist durch die Koeffizienten $s = 1, c_1 = 1, a_{11} = 1, b_1 = 1$, definiert.

Tabelle A.1.: Zeitadaptives, eingebettetes DIRK-Verfahren

<p>Gegeben:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Koeffizienten $c_i, a_{ij}, b_j, (i, j = 1, \dots, s)$ eines steif-genauen DIRK-Verfahrens • Anfangszeitpunkt t_0, Anfangsschrittweite Δt_0 • Anfangsbedingungen $\mathbf{y}(t_0) \equiv \begin{Bmatrix} \mathbf{u}(t_0) \\ \mathbf{q}(t_0) \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_0 \\ \mathbf{q}_0 \end{Bmatrix} \equiv \mathbf{y}_0$
<p>Schleife über die Zeitschritte: $n = 0, \dots, N$</p> <p>Wiederhole</p> <p>Schleife über die Stufen: $i = 1, \dots, s$</p> $T_{ni} = t_n + c_i \Delta t_n$ $\mathbf{S}_{ni} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj}$ <p>Löse: $\mathbf{F} \left(T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}, \frac{\mathbf{Y}_{ni} - \mathbf{S}_{ni}}{\Delta t_n a_{ii}} \right) = \mathbf{0}$ für $\mathbf{Y}_{ni} = \begin{Bmatrix} \mathbf{U}_{ni} \\ \mathbf{Q}_{ni} \end{Bmatrix}$</p> <p>Speichere: $\dot{\mathbf{Y}}_{ni} = \frac{\mathbf{Y}_{ni} - \mathbf{S}_{ni}}{\Delta t_n a_{ii}}$</p> <p>Berechne lokalen Integrationsfehler</p> <p>Berechne neue Schrittweite Δt_{neu} gemäß Fehlerschätzung</p> <p>Falls Schritt nicht akzeptiert, setze $\Delta t_n = \Delta t_{\text{neu}}$</p> <p>Bis Schritt akzeptiert</p> <p>Update:</p> $t_{n+1} = t_n + \Delta t_n, \Delta t_{n+1} = \Delta t_{\text{neu}}, \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{Y}_{ns}$

² Üblicherweise wird in der FE-Literatur, bezüglich der Lösung des nichtlinearen

²Es gibt durchaus Anwendungen, siehe zum Beispiel in [Haupt and Lion, 1995] bzw. [Hartmann, 1998], bei denen die Struktur des DAE-Systems die Gestalt

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) := \begin{Bmatrix} \mathbf{g}(t, \mathbf{u}(t), \mathbf{q}(t)) \\ \dot{\mathbf{q}}(t) - \mathbf{r}(t, \mathbf{u}(t), \dot{\mathbf{u}}(t), \mathbf{q}(t)) \end{Bmatrix} = \mathbf{0}, \quad (\text{A.15})$$

erhält. Das Gleichungssystem (A.8) führt dann hier für $i = 1, \dots, s$ auf

$$\mathbf{R}_{ni}(\mathbf{Y}_{ni}) := \mathbf{F} \left(T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}, \frac{\mathbf{Y}_{ni} - \mathbf{S}_{ni}}{\Delta t_n a_{ii}} \right) = \begin{Bmatrix} \mathbf{G}_{ni}(T_{ni}, \mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \\ \mathbf{L}_{ni}(T_{ni}, \mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \end{Bmatrix} = \mathbf{0}, \quad (\text{A.16})$$

mit

$$\mathbf{L}_{ni}(T_{ni}, \mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) = \frac{\mathbf{Q}_{ni} - \mathbf{S}_{ni}^q}{\Delta t_n a_{ii}} - \mathbf{r} \left(T_{ni}, \mathbf{U}_{ni}, \frac{\mathbf{U}_{ni} - \mathbf{S}_{ni}^u}{\Delta t_n a_{ii}}, \mathbf{Q}_{ni} \right). \quad (\text{A.17})$$

Gleichungssystems (A.11) von der Anwendung des Newton-Raphson Verfahren gesprochen, was nur im Fall der expliziten Auflösung des Integrationssschrittes für die inneren Variablen stimmt. Bekannterweise werden auf Element bzw. Gauss-Punkt Ebene die Verschiebungen bzw. Verzerrungen vorgegeben und die inneren Variablen iterativ berechnet, was beim Newton Verfahren nicht auftritt. In [Hartmann, 1998] ist die FE-Vorgehensweise mit der Anwendung des Satzes für implizite Funktionen in Zusammenhang gebracht worden, was auf die Arbeit von Rabbat et al. [1979] zurückzuführen ist. Hiermit kann die geschachtelte Vorgehensweise sowie den durch Simo and Taylor [1985] geprägten Begriffes des *Konsistenten Tangentenoperators* präzise erläutert werden, siehe auch [Hartmann, 2005]. Das geschachtelte Verfahren wird als Multilevel-Newton Algorithmus (MLNA) bezeichnet. Dieses Verfahren ist auch im Zusammenhang mit gleichheitsrestringierten Optimierungsverfahren in [Hoyer and Schmidt, 1984] und die dort zitierte Literatur, angewendet worden bzw. auch bei der Lösung von Algebra-Differentialgleichungssystemen, die bei der Berechnung elektrischer Netzwerke auftreten, siehe [Rabbat et al., 1979].

Zur Erläuterung des Verfahrens geht man von dem nichtlinearen Gleichungssystem (A.16)

$$\mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}) = \mathbf{0}, \quad (\text{A.18})$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}) = \mathbf{0}, \quad (\text{A.19})$$

aus, wobei hier aufgrund der Übersichtlichkeit die Indizes nicht betrachtet werden. In einem ersten Schritt wendet man den Satz über implizite Funktionen auf (A.18) an. Nach dem Satz für implizite Funktionen existiert unter der Anforderung einer genügend glatten Funktion \mathbf{L} eine Funktion $\mathbf{Q}(\mathbf{U})$ in der Nähe der Lösung. Wenn man diese Lösung in (A.19) einsetzt,

$$\mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}(\mathbf{U})) = \mathbf{0}, \quad (\text{A.20})$$

so resultiert ein nichtlineares Gleichungssystem für die Variable \mathbf{U} . Die Anwendung des klassischen Newton-Verfahrens zur Berechnung der Variable \mathbf{U} führt in jedem Iterationsschritt (m) auf das lineare Gleichungssystem

$$\left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} \right]^{(m)} \Delta \mathbf{U} = -\mathbf{G}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m)}). \quad (\text{A.21})$$

$\Delta \mathbf{U} = \mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}$ beschreibt den Zuwachs der Größe \mathbf{U} und die Koeffizientenmatrix stellt die Funktionalmatrix dar. Die Größe $\mathbf{Q}^{(m)} = \mathbf{Q}(\mathbf{U}^{(m)})$ in (A.21) erhält man aus der Berechnung des nichtlinearen Gleichungssystems

$$\mathbf{L}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m)}) = \mathbf{0} \quad (\text{A.22})$$

für gegebenes $\mathbf{U}^{(m)}$. Des Weiteren benötigt man in (A.21) nicht nur die partielle Ableitung $\partial \mathbf{G} / \partial \mathbf{U}$ sowie $\partial \mathbf{G} / \partial \mathbf{Q}$, sondern auch die Ableitung der unbekanntenen Funktion $\mathbf{Q}(\mathbf{U})$ nach \mathbf{U} . Diese erhalten wir durch Anwendung der Kettenregel auf die Funktion

$$\mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}(\mathbf{U})) = \mathbf{0}, \quad (\text{A.23})$$

was auf

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} = \mathbf{0} \quad \rightarrow \quad \left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \right] \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} = - \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}}, \quad (\text{A.24})$$

führt. Dieses entspricht einem linearen Gleichungssystem mit mehreren rechten Seiten. Das Verfahren ist in Tabelle A.2 (Zweiebenen-Newton Verfahren) abgebildet.

Tabelle A.2.: Multilevel-Newton Verfahren in der Stufe i des Zeitschrittes $t_n \rightsquigarrow t_{n+1}$

Gegeben: $\mathbf{U}_{ni}^{(0)} = \mathbf{u}_n, \mathbf{Q}_{ni}^{(0)} = \mathbf{q}_n, \Delta t_n, T_{ni}, a_{ii}, \mathbf{S}_{ni}$	
Wiederhole $m = 0, \dots$	
<i>Lokale Ebene</i>	Gegeben: $\mathbf{U}_{ni}^{(m)}$, Argumentvektor $\mathbf{z} := (\mathbf{U}_{ni}^{(m)}, \mathbf{Q}_{ni}^{(m)})$
Lokaler Integrations-schritt	
	$\mathbf{L}(\mathbf{U}_{ni}^{(m)}, \mathbf{Q}_{ni}^{(m)}) = \mathbf{0} \quad \rightsquigarrow \mathbf{Q}_{ni}^{(m)}$
Konsistente Linearisierung	
	$\left[\begin{array}{c} \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \\ \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}} \end{array} \right]_{\mathbf{z}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} = - \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}} \Big _{\mathbf{z}} \quad \rightsquigarrow \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} \Big _{\mathbf{z}}$
<i>Globale Ebene</i>	
Löse lineares Gleichungssystem	
	$\left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} \Big _{\mathbf{z}} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \Big _{\mathbf{z}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} \Big _{\mathbf{z}} \right] \Delta \mathbf{U}_{ni} = -\mathbf{G}(\mathbf{z}) \quad \rightsquigarrow \Delta \mathbf{U}_{ni}$
Update der globalen Variablen	
	$\mathbf{U}_{ni}^{(m+1)} \leftarrow \mathbf{U}_{ni}^{(m)} + \Delta \mathbf{U}_{ni} \quad \rightsquigarrow \mathbf{U}_{ni}^{(m+1)}$
Bis	Konvergenzkriterium erfüllt ist

A.3. Tangentenoperatoren

Im Rahmen der numerischen Behandlung finiter Thermoviskoelastizität mittels der nicht linearen FEM bedarf es aufgrund der notwendigen Linearisierung der Bildung von Tangentenoperatoren. Diese werden im Folgenden für die behandelten Funktionen in Bezug auf die unabhängigen Variablen angegeben.³

³In diesen Ausführungen werden ausschließlich die Terme angegeben. Auf die Angabe einer Herleitung mit Hilfe der angewandten Regeln der Funktionalanalysis wird hier verzichtet. Der interessierte Leser möge auf die einschlägige Literatur, wie z.B. De Boer [1982], [Altenbach and Altenbach, 1994] oder [Schade and Neemann, 2009], zurückgreifen, um die Herleitung der Terme nachzuvollziehen.

A.3.1. Tangentenoperator des mechanischen Anteils

In einem ersten Schritt werden die Tangentenoperatoren des mechanischen Anteils, die aus dem Gateaux Differential der Gleichgewichtsbedingung in Richtung der primären Variablen berechnet werden, angegeben. Hierbei ist die Angabe der Ableitungen ausreichend.

Für die Linearisierung der Gleichgewichtsbedingung bezüglich des Verschiebungsfelds erhält man

$$\tilde{\mathcal{C}}_L = \tilde{\mathcal{C}}_{\text{eq}}^{\text{vol}} + \tilde{\mathcal{C}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} + \tilde{\mathcal{C}}_{\text{ov}}. \quad (\text{A.25})$$

Hierin ist der Gleichgewichtsanteil durch die Terme

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{C}}_{\text{eq}}^{\text{vol}} &= 2 \frac{d\tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{vol}}}{d\mathbf{C}} \\ &= \varrho_{\text{R}} \frac{J}{\varphi} \frac{\theta}{\theta_0} \left\{ \left(U' \left(\frac{J}{\varphi} \right) + \frac{J}{\varphi} U'' \left(\frac{J}{\varphi} \right) \right) \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} - 2U' \left(\frac{J}{\varphi} \right) (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1})^{\text{T}_{23}} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

sowie

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{C}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} &= 2 \frac{d\tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}}}{d\mathbf{C}} \\ &= 4\varrho_{\text{R}} J^{-\frac{4}{3}} \frac{\theta}{\theta_0} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \right] \frac{d^2 \bar{v}}{d\bar{\mathbf{C}} d\bar{\mathbf{C}}} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \bar{\mathbf{C}} \otimes \bar{\mathbf{C}}^{-1} \right] - \\ &\quad - \frac{2}{3} J^{-\frac{2}{3}} \left[\tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} \otimes \bar{\mathbf{C}}^{-1} + \bar{\mathbf{C}}^{-1} \otimes \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} \right] + \\ &\quad + \frac{4}{3} \varrho_{\text{R}} J^{-\frac{4}{3}} \frac{\theta}{\theta_0} \left(\bar{\mathbf{C}} \cdot \frac{d\bar{v}}{d\bar{\mathbf{C}}} \right) \left[(\bar{\mathbf{C}}^{-1} \otimes \bar{\mathbf{C}}^{-1})^{\text{T}_{23}} - \frac{1}{3} (\bar{\mathbf{C}}^{-1} \otimes \bar{\mathbf{C}}^{-1}) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

angegeben. Der Überspannungsanteil berechnet sich aus

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{C}}_{\text{ov}} &= 2 \frac{d\tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}}}{d\mathbf{C}} \\ &= -\frac{4}{3} \varrho_{\text{R}} \mu (\det \mathbf{C})^{-\frac{1}{3}} \left[(\mathbf{C}_{\text{v}}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} + \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}_{\text{v}}^{-1}) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{3} (\mathbf{C} \cdot \mathbf{C}_{\text{v}}^{-1}) (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} + (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1})^{\text{T}_{23}}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Der Tangentenoperator der Gleichgewichtsbedingung bezüglich des Temperaturfelds berechnet sich aus dem Differential

$$D_{\theta} \tilde{\mathbf{T}}[\Delta\theta] = \frac{d\tilde{\mathbf{T}}}{d\theta} \Delta\theta, \quad (\text{A.29})$$

worin die Ableitung durch die Gleichung

$$\frac{d\tilde{\mathbf{T}}}{d\theta} = \varrho_{\text{R}} \beta(J, \theta) J \mathbf{C}^{-1} - \frac{1}{\theta} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}}, \quad (\text{A.30})$$

mit der skalarwertigen Funktion

$$\beta := \frac{\partial \lambda_p}{\partial \theta} = \frac{\theta}{\theta_0} \frac{\varphi'}{\varphi^2} \left(\left(\frac{1}{\theta} \frac{\varphi}{\varphi'} - 1 \right) U' \left(\frac{J}{\varphi} \right) - \frac{J}{\varphi} U'' \left(\frac{J}{\varphi} \right) \right), \quad (\text{A.31})$$

definiert ist. Die abschließende unabhängige Variable ist durch den viskosen, rechten Cauchy-Green Tensor festgelegt, welcher den inneren Variablen des Materialmodells entspricht. Über das Differential

$$D_{C_v} \tilde{\mathbf{T}}[\mathbf{H}] = \frac{d\tilde{\mathbf{T}}}{dC_v} \mathbf{H}, \quad (\text{A.32})$$

und der Auswertung der Gateaux Ableitung erhält man den Tangentenoperator

$$\frac{d\tilde{\mathbf{T}}}{dC_v} = \frac{d\tilde{\mathbf{T}}_{ov}}{dC_v} = 2\varrho_R \mu (\det \mathbf{C})^{-\frac{1}{3}} [(\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}) - 3\mathcal{I}] (\mathbf{C}_v^{-1} \otimes \mathbf{C}_v^{-1})^{\text{T}_{23}}, \quad (\text{A.33})$$

der Gleichgewichtsbedingung bezüglich der inneren Variablen.

A.3.2. Tangentenoperator des thermischen Anteils

Die Tangentenoperatoren des thermischen Anteils des Modells werden über die Linearisierung der Wärmeleitungsgleichung

$$c_p \dot{\theta} = \theta \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta \partial \mathbf{E}} \cdot \dot{\mathbf{E}} - \frac{1}{\varrho_R} \text{Div } \mathbf{q}_R + r + \delta, \quad (\text{A.34})$$

gebildet. Mit dem Prinzip der virtuellen Temperaturen kann (A.34) in die schwache Form

$$\int \varrho_R c_p \dot{\theta} \delta \theta \, dV - \int \mathbf{q}_R \cdot \text{Grad } \delta \theta \, dV = - \int \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{n}_R \delta \theta \, dA - \int \varrho_R (r + p + \delta) \delta \theta \, dV \quad (\text{A.35})$$

überführt werden. Der Wärmeproduktionsterm p , vgl. (3.114), der die thermoelastische Kopplung beschreibt, wird über die Spannungsrelationen durch

$$\theta \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta \partial \mathbf{E}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \theta \left(\left(\frac{\varphi^{2/3}}{3\varrho_R \theta} (\text{Sp } \mathbf{S}_M^{\text{eq}}) - \frac{J \varphi'}{3\varrho_R \varphi^{1/3}} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}}}{\partial J} \cdot \mathbf{I} \right) \right) \mathbf{C}^{-1} + \frac{1}{\varrho_R \theta} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}} \quad (\text{A.36})$$

wiedergeben. Hierin können die Terme in (A.36) aufgrund der Beziehung des Spannungstensors \mathbf{S}_M^{eq} nach (3.62)₁ durch die Ausdrücke

$$\frac{1}{\varrho_R} \frac{\varphi^{2/3}}{3\theta} (\text{Sp } \mathbf{S}_M^{\text{eq}}) = \frac{1}{\theta_0} \frac{J}{\varphi} U' \left(\frac{J}{\varphi} \right), \quad (\text{A.37})$$

$$\frac{1}{\varrho_R} \frac{J \varphi'}{3\varphi^{1/3}} \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}}}{\partial J} \cdot \mathbf{I} \right) = \frac{\theta}{\theta_0} \frac{\varphi'}{\varphi^2} J \left(U' \left(\frac{J}{\varphi} \right) + \frac{J}{\varphi} U'' \left(\frac{J}{\varphi} \right) \right), \quad (\text{A.38})$$

ersetzt werden. Dadurch kann die Summe des ersten Klammersausdrucks aus (A.36) in

$$\frac{\varphi^{2/3}}{3\varrho_R\theta}(\text{Sp } \mathbf{S}_M^{\text{eq}}) - \frac{J\varphi'}{3\varrho_R\varphi^{1/3}}\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{S}}_M^{\text{eq}}}{\partial J} \cdot \mathbf{I}\right) = \frac{\theta}{\theta_0} \frac{\varphi'}{\varphi^2} J \left(\left(\frac{\varphi}{\theta\varphi'} - 1\right) U' \left(\frac{J}{\varphi}\right) - \frac{J}{\varphi} U'' \left(\frac{J}{\varphi}\right) \right), \quad (\text{A.39})$$

überführt werden. Mit Hinzunahme der skalarwertigen Funktion nach (A.31) erhält man eine kompakte Form des thermoelastischen Kopplungsterms

$$p(J, \mathbf{C}, \theta) = \left(\theta\beta J \mathbf{C}^{-1} + \frac{1}{\varrho_R} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}. \quad (\text{A.40})$$

Zur vollständigen Angabe der Terme aus (A.35) sei erneut der Dissipationsterm δ nach (3.117)

$$\delta = J_M^{2/3} \mathbf{C}_v^{-1} \bar{\mathbf{C}} \frac{d\bar{w}_{\text{ov}}}{d(\mathbf{C}_v^{-1} \bar{\mathbf{C}})} \mathbf{C}_v^{-1} \cdot \dot{\mathbf{C}}_v \quad (\text{A.41})$$

und der Fouriersche Ansatz für den Wärmestrom nach (3.47)

$$\mathbf{q}_R = -\boldsymbol{\kappa}_R \text{Grad } \theta, \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\kappa}_R = \kappa(\theta)(\det \mathbf{F}) \mathbf{C}^{-1} \quad (\text{A.42})$$

ausgeführt, welche durch die Linearisierung zu berücksichtigen sind. Mit (A.42) wird (A.35) umformuliert zu

$$\begin{aligned} \pi := & \underbrace{\int \varrho_R c_p \dot{\theta} \delta \theta \, dV}_{\pi_I} + \underbrace{\int \boldsymbol{\kappa}_R \text{Grad } \theta \cdot \text{Grad } \delta \theta \, dV}_{\pi_{II}} + \\ & + \underbrace{\int \varrho_R (r + p + \delta) \delta \theta \, dV}_{\pi_{III}} + \underbrace{\int \mathbf{q}_R \cdot \mathbf{n}_R \delta \theta \, dA}_{\pi_{IV}} = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

Zur besseren Veranschaulichung der Tangentenoperatoren des thermischen Anteils werden die Operatoren der Volumenintegrale für die Summanden π_I , π_{II} und π_{III} von (A.43) in Bezug auf die unabhängigen Variablen formuliert, die in ihrer Summe de facto den gesamten Tangentenoperator abbilden.

Tangentenoperator des ersten Summanden π_I . Zunächst wird die Linearisierung bezüglich des Verschiebungsfelds ausgeführt. Es gilt

$$D_u \pi_I[\Delta \mathbf{u}] = \int \varrho_R \dot{\theta} \delta \theta \, D_u c_p[\Delta \mathbf{u}] \, dV. \quad (\text{A.44})$$

Hierin berechnet sich das Differential aus (A.44) zu

$$D_u c_p[\Delta \mathbf{u}] = \frac{dc_p}{d\mathbf{E}} \cdot \Delta \mathbf{E}, \quad \text{mit} \quad \frac{dc_p}{d\mathbf{E}} = J \frac{\partial c_p}{\partial J} \mathbf{C}^{-1}, \quad (\text{A.45})$$

mit der skalarwertigen Materialfunktion $\partial c_p / \partial J$. Als Ergebnis der Linearisierung von π_I bezüglich des Verschiebungsfelds erhält man

$$D_{\mathbf{u}} \pi_I[\Delta \mathbf{u}] = \int \varrho_R (J \frac{\partial c_p}{\partial J} \mathbf{C}^{-1} \cdot \Delta \mathbf{E}) \dot{\theta} \delta \theta \, dV. \quad (\text{A.46})$$

In gleicher Weise wird die Linearisierung bezüglich des Temperaturfeldes gebildet:

$$D_{\theta} \pi_I[\Delta \theta] = \int \varrho_R \dot{\theta} \delta \theta \, D_{\theta} c_p[\Delta \theta] \, dV. \quad (\text{A.47})$$

Für das Differential gilt wiederum

$$D_{\theta} c_p[\Delta \theta] = \frac{\partial c_p}{\partial \theta} \Delta \theta. \quad (\text{A.48})$$

Man erhält als Resultat

$$D_{\theta} \pi_I[\Delta \theta] = \int \varrho_R \left(\frac{\partial c_p}{\partial \theta} \Delta \theta \right) \dot{\theta} \delta \theta \, dV, \quad (\text{A.49})$$

worin $\partial c_p / \partial \theta$ einer skalarwertigen Funktion entspricht.

Tangentenoperator des zweiten Summanden π_{II} . Mit Annahme der Fourier-schen Ansatzes für den Wärmefluss ergibt die Linearisierung bezüglich des Verschiebungsfeldes

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{u}} \pi_{II}[\Delta \mathbf{u}] &= \int \kappa(\det \mathbf{F}) (\mathbf{F}^{-T} \text{Grad } \theta \cdot \mathbf{F}^{-T} \text{Grad } \delta \theta) \mathbf{F}^{-T} \cdot \Delta \mathbf{H} \, dV - \\ &\quad - \int \kappa(\det \mathbf{F}) (\mathbf{F}^{-T} \text{Grad } \delta \theta) \cdot \mathbf{F}^{-T} \Delta \mathbf{H}^T (\mathbf{F}^{-T} \text{Grad } \theta) \, dV - \\ &\quad - \int \kappa(\det \mathbf{F}) (\mathbf{F}^{-T} \text{Grad } \theta) \cdot \mathbf{F}^{-T} \Delta \mathbf{H}^T (\mathbf{F}^{-T} \text{Grad } \delta \theta) \, dV. \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

In die Herleitung obiger Gleichung sind die Beziehungen

$$D_{\mathbf{u}}(\det \mathbf{F})[\Delta \mathbf{u}] = (\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} \cdot \Delta \mathbf{H}, \quad \text{und} \quad D_{\mathbf{u}} \mathbf{F}^{-T}[\Delta \mathbf{H}] = \mathbf{F}^{-T} \mathbf{H}^T \mathbf{F}^{-T} \quad (\text{A.51})$$

eingegangen. Durch die Anwendung des Gateaux Differentials gelingt, wie zuvor auch, die Linearisierung des Summanden π_{II} bezüglich des Temperaturfeldes. Man erhält nach einigen trivialen Umformungen die Beziehung

$$D_{\theta} \pi_{II}[\Delta \theta] = \int (\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \Delta \theta \text{Grad } \theta + \kappa \text{Grad } \Delta \theta \right) \cdot \mathbf{F}^{-T} \text{Grad } \delta \theta \, dV. \quad (\text{A.52})$$

Tangentenoperator des dritten Summanden π_{III} . Für den Term π_{III} der Wärmeleitungsgleichung werden die Tangenten im Einzelnen dargestellt. Zunächst der Tangentenoperator des Wärmeproduktionsterms aus (A.36) bzw. (A.40) bezüglich der Verschiebungen. Es gilt:

$$D_{\mathbf{u}} \pi_{\text{III}}^p[\Delta \mathbf{u}] = \int \varrho_{\text{R}} D_{\mathbf{u}} p(J, \mathbf{C}, \theta)[\Delta \mathbf{u}] \delta \theta \, dV. \quad (\text{A.53})$$

Die Berechnung des Differential erfolgt nach

$$D_{\mathbf{u}} p[\Delta \mathbf{u}] = \theta \left(\underbrace{D_{\mathbf{u}} J[\Delta \mathbf{u}] \beta \mathbf{C}^{-1}}_{(i)} + \underbrace{J D_{\mathbf{u}} \beta[\Delta \mathbf{u}] \mathbf{C}^{-1}}_{(ii)} + \underbrace{J \beta D_{\mathbf{u}} \mathbf{C}^{-1}[\Delta \mathbf{u}]}_{(iii)} + \underbrace{D_{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}}[\Delta \mathbf{u}]}_{(iv)} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}, \quad (\text{A.54})$$

worin die mit (i) ... (iv) markierten Terme folgend berechnet werden:

$$(i) : D_{\mathbf{u}} J[\Delta \mathbf{u}] = J \mathbf{C}^{-1} \cdot \Delta \mathbf{E} \quad \rightarrow \quad J \beta (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1}) \Delta \mathbf{E}, \quad (\text{A.55})$$

$$(ii) : D_{\mathbf{u}} \beta[\Delta \mathbf{u}] = \frac{\partial \beta}{\partial J} J \mathbf{C}^{-1} \cdot \Delta \mathbf{E} \quad \rightarrow \quad J^2 \frac{\partial \beta}{\partial J} (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1}) \Delta \mathbf{E}, \quad (\text{A.56})$$

$$(iii) : D_{\mathbf{u}} \mathbf{C}^{-1}[\Delta \mathbf{u}] = -2 \mathbf{C}^{-1} \Delta \mathbf{E} \mathbf{C}^{-1} \quad \rightarrow \quad -2 J \beta (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1})^{\text{T}_{23}} \Delta \mathbf{E}, \quad (\text{A.57})$$

$$(iv) : D_{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}}[\Delta \mathbf{u}] = 2 \frac{d \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}}}{d \mathbf{C}} \Delta \mathbf{E} \quad \rightarrow \quad \tilde{\mathbf{C}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} \Delta \mathbf{E}. \quad (\text{A.58})$$

Aus diesen Beziehungen resultiert die folgende Gleichung für (A.53):

$$D_{\mathbf{u}} \pi_{\text{IV}}^p[\Delta \mathbf{u}] = \int \delta \theta (\theta \tilde{\mathbf{C}}_{\text{p}} + \tilde{\mathbf{C}}_{\text{eq}}^{\text{iso}}) \Delta \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{E}} \, dV \quad (\text{A.59})$$

mit dem definierten Operator

$$\tilde{\mathbf{C}}_{\text{p}} := J \left(\beta + J \frac{\partial \beta}{\partial J} \right) \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} - 2 J \beta (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1})^{\text{T}_{23}}. \quad (\text{A.60})$$

Im nächsten Schritt wird der Tangentenoperator bezüglich der Temperatur angegeben. Für die Linearisierung gilt

$$D_{\theta} \pi_{\text{III}}^p[\Delta \theta] = \int \varrho_{\text{R}} D_{\theta} p(J, \mathbf{C}, \theta)[\Delta \theta] \delta \theta \, dV, \quad (\text{A.61})$$

mit dem Differential

$$D_{\theta} p(J, \mathbf{C}, \theta)[\Delta \theta] = J D_{\theta} (\theta \beta)[\Delta \theta] \mathbf{C}^{-1} + \frac{\Delta \theta}{\theta} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}}, \quad (\text{A.62})$$

und

$$D_\theta(\theta\beta)[\Delta\theta] = \left(\beta + \theta \frac{\partial\beta}{\partial\theta}\right) \quad (\text{A.63})$$

resultiert als Ergebnis

$$D_u \pi_{\text{III}}^p[\Delta\theta] = \int \delta\theta \left(J(\beta + \theta \frac{\partial\beta}{\partial\theta}) \mathbf{C}^{-1} + \frac{1}{\theta} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} \right) \Delta\theta \cdot \dot{\mathbf{E}} \, dV. \quad (\text{A.64})$$

In einem weiteren Schritt werden die Anteile des Tangentenoperators für den Dissipationsterms formuliert. Zunächst sei die Linearisierung bezüglich des Verschiebungsfelds betrachtet. Diese gelingt über die Auswertung des Differentials in

$$D_u \pi_{\text{III}}^\delta[\Delta\mathbf{u}] = \int \varrho_{\text{R}} D_u \delta[\Delta\mathbf{u}] \delta\theta \, dV = \int \varrho_{\text{R}} (\tilde{\mathbf{C}}_\delta \cdot \Delta\mathbf{E}) \delta\theta \, dV, \quad (\text{A.65})$$

worin der Operator mit

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{C}}_\delta &= 2 \frac{d\delta}{d\mathbf{C}} \\ &= 2\mu\varphi^{-\frac{2}{3}} \left[(\mathbf{C}_v^{-1} \otimes \mathbf{C}_v^{-1})^{\text{T}_{23}} \dot{\mathbf{C}}_v + \left[\frac{d\tilde{\mathbf{r}}}{d\mathbf{C}} \right]^{\text{T}} (\mathbf{C}_v^{-1} \otimes \mathbf{C}_v^{-1})^{\text{T}_{23}} \mathbf{C} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.66})$$

definiert wird. Die Linearisierung bezüglich des Temperaturfelds führt auf den Term

$$D_\theta \pi_{\text{III}}^\delta[\Delta\theta] = \int \varrho_{\text{R}} D_\theta \delta[\Delta\theta] \delta\theta \, dV = \int \varrho_{\text{R}} \delta\theta \frac{d\delta}{d\theta} \Delta\theta \, dV \quad (\text{A.67})$$

mit dem Operator

$$\frac{d\delta}{d\theta} = 2\mu\varphi^{-\frac{2}{3}} (\mathbf{C}_v^{-1} \otimes \mathbf{C}_v^{-1})^{\text{T}_{23}} \mathbf{C} \cdot \left(\frac{d\tilde{\mathbf{r}}}{d\theta} - \frac{2}{3} \frac{\varphi'}{\varphi} \dot{\mathbf{C}}_v \right). \quad (\text{A.68})$$

Hierin entspricht $\tilde{\mathbf{r}}$ der rechten Seite der Evolutionsgleichung. Aufgrund der Abhängigkeit des Dissipationsterms von den inneren Variablen ist hier zudem die Linearisierung bezüglich des viskosen Cauchy-Green Tensors auszuführen. D.h. es muss das Differential

$$D_{\mathbf{C}_v} \pi_{\text{III}}^\delta[\mathbf{H}] = \int \varrho_{\text{R}} D_{\mathbf{C}_v} \delta[\mathbf{H}] \delta\theta \, dV = \int \varrho_{\text{R}} \delta\theta \frac{d\delta}{d\mathbf{C}_v} \cdot \mathbf{H} \, dV \quad (\text{A.69})$$

bestimmt werden. Hierin ist das Differential wie folgt

$$\begin{aligned} \frac{d\delta}{d\mathbf{C}_v} &= -\mu\varphi^{-\frac{2}{3}} \left[(\mathbf{C}_v^{-1} \otimes \mathbf{C}_v^{-1} \mathbf{C} \mathbf{C}_v^{-1})^{\text{T}_{23}} + (\mathbf{C}_v^{-1} \mathbf{C} \mathbf{C}_v^{-1} \otimes \mathbf{C}_v^{-1})^{\text{T}_{23}} \right] \dot{\mathbf{C}}_v + \\ &+ \mu\varphi^{-\frac{2}{3}} \left[\frac{d\tilde{\mathbf{r}}}{d\mathbf{C}_v} \right]^{\text{T}} (\mathbf{C}_v^{-1} \mathbf{C} \mathbf{C}_v^{-1}) \end{aligned} \quad (\text{A.70})$$

definiert.

A.3.3. Tangentenoperatoren der Evolutionsgleichung

Für das hier vorgestellte Materialmodell der finiten Thermoviskoelastizität konnte die Evolutionsgleichung nach (3.87) mit

$$\dot{\mathbf{C}}_v = 4\varrho_R \frac{\mu}{\eta} \frac{\varphi^{-\frac{2}{3}}}{(\det \mathbf{C})^{\frac{1}{3}}} \left[\mathbf{C} - \frac{1}{3} (\mathbf{C}_v^{-1} \cdot \mathbf{C}) \mathbf{C}_v \right], \quad (\text{A.71})$$

hergeleitet werden. Zur Beschreibung des viskosen Verhaltens dient die Viskositätsfunktion aus (3.92)

$$\eta = \eta_0(\theta) \exp \left(- \frac{\|\varphi^{-2/3} \mathbf{C} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}}\|}{s_0(\theta) \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \|\mathbf{C}_v^{-1}\| \right)^r} \right), \quad (\text{A.72})$$

die von den Verzerrungen bzw. dem Verschiebungsfeld, den viskosen Verzerrungen und der Temperatur abhängt. D.h. es gilt die explizite Abhängigkeit der Viskositätsfunktion $\eta = \eta(\mathbf{C}, \mathbf{C}_v, \theta)$. Hierin kann die Norm durch die Gleichung

$$\|\varphi^{-\frac{2}{3}} \mathbf{C} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}}\| = 2\varrho_R \mu \frac{\varphi^{-\frac{2}{3}}}{(\det \mathbf{C})^{\frac{1}{3}}} \sqrt{\mathbf{C} \mathbf{C}_v^{-1} \cdot \mathbf{C}_v^{-1} \mathbf{C} - \frac{1}{3} (\mathbf{C} \cdot \mathbf{C}_v^{-1})^2}, \quad (\text{A.73})$$

berechnet werden. Mit der Berücksichtigung der unabhängigen Variablen nach (A.71) und (A.72) erhält die Evolutionsgleichung die Gestalt:

$$\dot{\mathbf{C}}_v = \tilde{\mathbf{r}}(\mathbf{C}, \mathbf{C}_v, \theta). \quad (\text{A.74})$$

Anhand der obigen abgekürzten Schreibweise werden im Folgenden die Tangentenoperatoren bezüglich dem Verschiebungs- und Temperaturfeld sowie den viskosen Verzerrungen angegeben.

Linearisierung bezüglich der Verschiebungen. Über die Linearisierung der Evolutionsgleichung nach den Verschiebungen durch das Differential

$$D_u \tilde{\mathbf{r}}[\Delta \mathbf{u}] = 2 \frac{d\tilde{\mathbf{r}}}{d\mathbf{C}} \Delta \mathbf{E}, \quad (\text{A.75})$$

resultiert der Tangentenoperator

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{\mathbf{r}}}{d\mathbf{C}} = & 2\varrho_R \frac{\mu}{\eta_0} \varphi^{-\frac{2}{3}} \left[\xi_1(\mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1}) + \xi_2(\mathbf{C} \otimes \mathcal{L}_v \mathbf{C}) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{3} (\mathbf{C}_v^{-1} \cdot \mathbf{C}) \left[\xi_1(\mathbf{C}_v \otimes \mathbf{C}^{-1}) + \xi_2(\mathbf{C}_v \otimes \mathcal{L}_v \mathbf{C}) \right] + \right. \\ & \left. + (\det \mathbf{C})^{-\frac{1}{3}} (\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C}_v \otimes \mathbf{C}_v^{-1}) \exp(\alpha) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.76})$$

Hierbei sind in (A.76) die Abkürzungen

$$\alpha := \frac{2\varrho_{\text{R}}\mu\varphi^{-\frac{2}{3}}}{s_0} \frac{\sqrt{\mathbf{C}\mathbf{C}_v^{-1} \cdot \mathbf{C}_v^{-1}\mathbf{C} - \frac{1}{3}(\mathbf{C} \cdot \mathbf{C}_v^{-1})^2}}{(\det \mathbf{C})^{\frac{1}{3}} \left(\sqrt{\frac{1}{3}\mathbf{C}_v^{-1} \cdot \mathbf{C}_v^{-1}} \right)^r}, \quad (\text{A.77})$$

$$\xi_1 := \frac{1}{3}(\det \mathbf{C})^{-\frac{1}{3}}(\alpha - 1) \exp(\alpha), \quad (\text{A.78})$$

$$\xi_2 := \frac{(\det \mathbf{C})^{-\frac{1}{3}}}{\tau} \alpha \exp(\alpha), \quad \tau := \mathbf{C}\mathbf{C}_v^{-1} \cdot \mathbf{C}_v^{-1}\mathbf{C} - \frac{1}{3}(\mathbf{C} \cdot \mathbf{C}_v^{-1})^2, \quad (\text{A.79})$$

$$\mathcal{L}_v := (\mathbf{C}_v^{-1} \otimes \mathbf{C}_v^{-1})^{\text{T}_{23}} - \frac{1}{3}\mathbf{C}_v^{-1} \otimes \mathbf{C}_v^{-1}, \quad (\text{A.80})$$

eingeführt worden.

Linearisierung bezüglich der inneren Variablen Die Linearisierung bezüglich der inneren Variablen erfolgt, indem das Gateaux Differential

$$D_{\mathbf{C}_v} \tilde{\mathbf{r}}[\mathbf{H}] = \frac{d\tilde{\mathbf{r}}}{d\mathbf{C}_v} \mathbf{H}, \quad (\text{A.81})$$

in Richtung der viskosen Verzerrungen ausgeführt wird. Dadurch gelingt die Herleitung des zu bestimmenden Tangentenoperators, der folgend angegeben werden kann:

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{\mathbf{r}}}{d\mathbf{C}_v} = & 4\varrho_{\text{R}} \frac{\mu}{\eta_0} \varphi^{-\frac{2}{3}} (\det \mathbf{C})^{-\frac{1}{3}} \left[\left[\hat{\xi}_1 \mathbf{C} \otimes \mathbf{C} - \hat{\xi}_2 \mathbf{C}_v \otimes \mathbf{C}_v^{-1} - \frac{1}{3}(\mathbf{C}_v^{-1} \cdot \mathbf{C}) \mathbf{C}_v \otimes \mathbf{C} \right] + \right. \\ & + \frac{1}{3}(\mathbf{C}_v^{-1} \cdot \mathbf{C})(\mathbf{C}_v^{-1} \otimes \mathbf{C}_v^{-1})^{\text{T}_{23}} + \hat{\xi}_2(\mathbf{C} \otimes \mathbf{C}_v)(\mathbf{C}_v^{-1} \otimes \mathbf{C}_v^{-1})^{\text{T}_{23}} + \\ & + \left[\hat{\xi}_1(\mathbf{C} \otimes \mathbf{C}_v^{-1}) + \frac{1}{3}\hat{\xi}_2(\mathbf{C}_v^{-1} \cdot \mathbf{C}) \mathbf{C}_v \otimes \mathbf{C}_v^{-1} \right] (\mathbf{C}\mathbf{C}_v^{-1} \otimes \mathbf{C}\mathbf{C}_v^{-1})^{\text{T}_{23}} + \\ & \left. + \frac{1}{3} \exp(\alpha) ((\mathbf{C}_v \otimes \mathbf{C})(\mathbf{C}_v^{-1} \otimes \mathbf{C}_v^{-1})^{\text{T}_{23}} - (\mathbf{C}_v^{-1} \cdot \mathbf{C})\mathcal{I}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.82})$$

Für die definierten Abkürzungen gelten die Ausdrücke

$$\hat{\xi}_1 := \frac{\alpha}{\tau} \exp(\alpha), \quad \hat{\xi}_2 := \frac{r}{\|\mathbf{C}_v^{-1}\|_r} \alpha \exp(\alpha), \quad (\text{A.83})$$

mit α aus (A.77) und τ aus (A.79).

A.4. Auflistung der Rosenbrock-Verfahren

Im Folgenden ist eine Auflistung der untersuchten bzw. angewandten Rosenbrock Verfahren sowie DIRK Verfahren in Tabelle A.3 erstellt. Die zugehörigen Referenzen können der Tabelle entnommen werden.

Tabelle A.3.: Angewandte Rosenbrock und DIRK Verfahren im Rahmen der Untersuchungen

	Verfahren	Stufen s	Ord. p	Referenz	
ROSENBROCK	SET I	Linear-implizit Euler	1	1	Hairer and Wanner [1996]
		ROS2	2	2	Verwer et al. [1999]
		ROS3	3	3	Sandu et al. [1997]
		ROS3P	3	3	Lang and Verwer [2001]
		ROWDA3	3	3	Roche [1988]
		RODAS3	4	3	Sandu et al. [1997]
		ROWDAIND2	4	3	Lubich and Roche [1990]
		RODAS	6	4	Hairer and Wanner [1996]
		RODASP	6	4	Steinebach [1995]
	SET II	ROSI2P1	4	3	Rang and Angermann [2008]
		ROSI2P2	4	3	Rang and Angermann [2008]
		ROSI2Pw	4	3	Rang and Angermann [2008]
		ROSI2PW	4	3	Rang and Angermann [2008]
		ROS34PW2	4	3	Rang and Angermann [2005]
ROS34PW3		4	3	Rang and Angermann [2005]	
ROS2S		3	2	Hamkar et al. [2012]	
DIRK	Backward-Euler (BE)	1	1	Hairer and Wanner [1996]	
	Ellsiepen	2	2	Ellsiepen [1999]	
	Alexander/Cash	3	3	Alexander [1977], Cash [1979]	

A.5. Zusammenstellung der Materialparameter

Im Folgenden findet sich eine Zusammenstellung der Materialparameter des in Abschnitt 3.4 hergeleiteten Materialmodells. Die Werte des mechanischen Anteils ist aus der Arbeit von Hartmann and Neff [2003] entnommen. Der thermische Anteil der Materialparameter entstammt aus den Arbeiten von Lion [2000b] und Heimes [2005]. Alle Werte der Materialparameter die in den Beispielrechnungen für das Elastomer verwendet werden sind in Tabelle A.4 zusammengetragen.

Für die Beispielrechnungen bei rein isothermer Betrachtung wurde für das Elastomer eine spezifische Massendichte von $\varrho_R = 1.0 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ gewählt. Bei den weiteren Rechnungen wurde die Dichte nach [Heimes, 2005] von $\varrho_R = 1.12 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ gewählt. Die Materialparameter für das Thermo-Hyperelastizitätsmodell, das die Metallschichten des

Tabelle A.4.: Zusammenstellung der Materialparameter des Modells der finiten Thermo-Viskoelastizität

Mechanischer Anteil:			
Parameter	Einheit	Wert	
K	[MPa]	$1.000e + 03$	
c_{10}	[MPa]	$1.788e - 01$	
c_{01}	[MPa]	$1.958e - 01$	
α	[MPa]	$0.367e - 02$	
μ	[MPa]	$2.000e - 01$	
$\bar{\eta}_0$	[MPa s]	$0.180e + 03$	
s	[MPa ⁻¹]	$0.100e - 02$	
Thermischer Anteil:			
c_{p0}	[J/kg K]	$1.539e + 03$	
c_{pk}	[K ⁻¹]	$0.375e - 02$	
κ	[W/m K]	$2.595e - 01$	
α_{Θ}	[K ⁻¹]	$0.206e - 03$	
\varkappa	[K]	$0.800e + 04$	
\bar{s}_0	[MPa]	$0.200e - 02$	
s_{∞}	[MPa]	$0.150e - 02$	
ω	[K ⁻¹]	$0.800e - 01$	
r_0	[–]	$0.400e + 01$	

Elastomerlagers aus Abschnitt 6.4 beschreibt ist in Tabelle A.5 zusammengestellt. Die Massendichte der Metallschichten wird mit $7816[\text{kg}/\text{m}^3]$ nach [Quint, 2012] festgelegt.

Tabelle A.5.: Zusammenstellung der Materialparameter des Modells der finiten Thermo-Hyperelastizität

Mechanischer Anteil:			
	Parameter	Einheit	Wert
	K	[MPa]	$1.667e + 05$
	c_{10}	[MPa]	$2.014e + 04$
	c_{01}	[MPa]	$1.832e + 04$
Thermischer Anteil:			
	c_{p0}	[J/kg K]	$4.976e + 02$
	c_{pk}	[K ⁻¹]	$3.612e - 04$
	κ	[W/m K]	$4.700e + 01$
	α_{Θ}	[K ⁻¹]	$1.200e - 05$

Literaturverzeichnis

- R. Alexander. Diagonally implicit Runge-Kutta methods for stiff O.D.E.'s. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 14:1006–1021, 1977. 130, 178
- H. Altenbach, J. Altenbach, and C. J. Münch. Analyse des thermomechanischen Verhaltens von Festkörpern. *Archive of Applied Mechanics*, 61:245 – 258, 1991. 81
- J. Altenbach and H. Altenbach. *Einführung in die Kontinuumsmechanik*. Teubner Verlag, Stuttgart, 1st edition, 1994. 20, 33, 169
- J. H. Argyris, L. E. Vaz, and K. J. Willam. Integrated finite-element analysis of coupled thermoviscoplastic problems. *Journal of Thermal Stresses*, 4(2):121–153, 1981. 5
- F. Armero and J.C. Simo. A new unconditionally stable fractional step method for non-linear coupled thermomechanical problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 35:737–766, 1992. 5, 75
- F. Armero and J.C. Simo. A priori stability estimate and unconditionally stable product formula algorithms for nonlinear coupled thermoplasticity. *International Journal of Plasticity*, 9:749–782, 1993. 5
- E.M. Arruda and M.C. Boyce. A three-dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41:389–412, 1993. 3, 48
- J.M. Ball. Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity. *Archive of Rational Mechanics and Analysis*, 63:337–403, 1977. 48
- K. J. Bathe. *Finite-Elemente-Methoden*. Springer Verlag, Berlin, 2nd edition, 2002. 73
- K.J. Bathe. *Finite Element Procedures in Engineering Analysis*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1982. 66
- T. Belytschko, J. S.-J. Ong, W. K. Liu, and J. M. Kennedy. Hourglass control in linear and nonlinear problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 43:251–276, 1984. 77
- T. Belytschko, W.K. Liu, and B. Moran. *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. John Wiley and Sons, Chichester, 2000. 73

- D. Besdo and J. Ihlemann. A phenomenological constitutive model for rubberlike materials and its numerical applications. *International Journal of Plasticity*, 19(7):1019 – 1036, 2003. 3
- W. Bier. *A Constitutive Model for Metal Powder and its Numerical Treatment using Finite Elements*. PhD thesis, University of Kassel, 2008. 93
- W. Bier and S. Hartmann. A finite strain constitutive model for metal powder compaction using a unique and convex single surface yield function. *European Journal of Mechanics, Series A/Solids*, 25:1009 – 1030, 2006. 73
- T. Block. *Verdrehwiderstände bewehrter Elastomerlager*. PhD thesis, Fakultät für Bau- und Umweltingenieurwissenschaften, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, Deutschland, 2010. 152
- J. Bonet and R.D. Wood. *Nonlinear Continuum Mechanics for Finite Element Analysis*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000. 67
- Mary C. Boyce, David M. Parks, and Ali S. Argon. Plastic flow in oriented glassy polymers. *International Journal of Plasticity*, 5(6):593 – 615, 1989. 3, 4
- D. Braess. *Finite Elements: Theory, Fast Solvers, and Applications in Elasticity Theory*. Cambridge University Press, 2007. 78
- K.E. Brenan, S.L. Campbell, and L.R. Petzhold. *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations*. Classics in Applied Mathematics 14. SIAM Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1996. 93
- S.C. Brenner and R. Scott. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. Springer, 3rd edition, 2010. 78
- K. Burg, H. Haf, F. Wille, and A. Meister. *Höhere Mathematik für Ingenieure: Band I Analysis*. Teubner, Stuttgart, 2008. 84
- J.R. Cash. Diagonally implicit Runge-Kutta formulae with error estimates. *Journal of the Institute of Mathematics and its Applications*, 24:293–301, 1979. 178
- B. Chapman, G. Jost, and R. van der Pas. *Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming*. Scientific and Engineering Computation Series. The MIT Press, Cambridge, MA, 2008. 127
- P.G. Ciarlet. *Mathematical Elasticity, Vol.I: Three-Dimensional Elasticity*. North-Holland, Amsterdam, 1988. 48
- P.G. Ciarlet. *The finite element method for elliptic problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2002. 73

- B. D. Coleman and W. Noll. The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 13:167–178, 1963. 33, 44
- B.D. Coleman and M.E. Gurtin. Thermodynamics with internal state variables. *The Journal of Chemical Physics*, 47:597–613, 1967. 33
- B. Dacorogna. *Direct Methods in the Calculus of Variations*, volume 78 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer Verlag, Berlin, 1989. 48
- R. De Boer. *Vektor- und Tensorrechnung für Ingenieure*. Springer Verlag, Berlin, 1982. 49, 169
- K. Dekker and J.G. Verwer. *Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations*. CWI monograph. North-Holland, Amsterdam, 1984. 93
- P. Deuffhard and F. A. Bornemann. *Numerische Mathematik II: Gewöhnliche Differentialgleichungen*. de Gruyter, Berlin, 2008. 125
- G. Dhatt and G. Touzot. *The finite element method displayed*. Wiley and Sons, Chichester, 1985. 68, 84
- S. Diebels, P. Ellsiepen, and W. Ehlers. Error-controlled Runge-Kutta time integration of a viscoplastic hybrid two-phases model. *Technische Mechanik*, 19:19–27, 1999. 125
- A. Düster, A. Niggel, V. Nübel, and E. Rank. A numerical investigation of high-order finite elements for problems of elastoplasticity. *Journal of Scientific Computing*, 17:397–404, 2002. 77
- A. Düster, S. Hartmann, and E. Rank. p -FEM applied to finite isotropic hyperelastic bodies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192:5147 – 5166, 2003. 77
- S. Eckert, H. Baaser, D. Gross, and O. Scherf. A BDF2 integration method with stepsize control for elastoplasticity. *Computational Mechanics*, 34(5):377–386, 2004. 7, 93
- W. Ehlers and G. Eipper. The simple tension problem at large volumetric strains computed from finite hyperelastic material laws. *Acta Mechanica*, 130:17–27, 1998. 46
- W. Ehlers and P. Ellsiepen. Adaptive Zeitintegration-Verfahren für ein elastisch-viskoplastisches Zweiphasenmodell. *ZAMM Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 78:S361–S362, 1998. 125
- G. Eipper. *Theorie und Numerik finiter elastischer Deformationen in fluidgesättigten porösen Festkörpern*. Doctoral thesis, Institute of Mechanics II, University of Stuttgart, 1998. Report No. II-1. 46

- P. Ellsiepen. *Zeit- und ortsadaptive Verfahren angewandt auf Mehrphasenprobleme poröser Medien*. Doctoral thesis, Institute of Mechanics II, University of Stuttgart, 1999. Report No. II-3. 6, 93, 135, 136, 138, 178
- P. Ellsiepen and S. Hartmann. Remarks on the interpretation of current non-linear finite-element-analyses as differential-algebraic equations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 51:679–707, 2001. 6, 7, 61, 73, 93, 124, 166
- P. Erbts and A. Düster. Accelerated staggered coupling schemes for problems of thermoelasticity at finite strains. *Computers and Mathematics with Applications*, 64: 2408–2430, 2012. 76
- C. A. Felippa and K. C. Park. Staggered transient analysis procedures for coupled mechanical systems: Formulation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 24(1):61 – 111, 1980. 5, 75
- C. A. Felippa, K. C. Park, and C. Farhat. Partitioned analysis of coupled mechanical systems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(24–25): 3247–3270, 2001. 4, 74
- J.D. Ferry. *Viscoelastic Properties of Polymers*. Wiley, 1980. 4
- D. P. Flanagan and T. Belytschko. A uniform strain hexahedron and quadrilateral with orthogonal hourglass control. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 17(5):679–706, 1981. 77
- P.J. Flory. Thermodynamic relations for high elastic materials. *Transaction of the Faraday Society*, 57:829–838, 1961. 37
- W. Flügge. *Viscoelasticity*. Springer Verlag, Berlin, 1975. 34
- A. Fritsch. *Finite Thermoplastizität Materialmodellierung und Numerik thermoplastischer Werkstoffe bei finiten Deformationen*. PhD thesis, Institut für Mechanik der Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik der Universität der Bundeswehr München, 2004. 5
- P. Fritzen. *Numerische Behandlung nichtlinearer Probleme der Elastizitäts- und Plastizitätstheorie*. Doctoral thesis, Department of Mathematics, University of Darmstadt, 1997. 6, 62, 88, 93
- U. Gabbert. *Die Finite-Element-Methode in den Ingenieurwissenschaften unter dem Aspekt der rechentechnischen Realisierung im Rahmen universeller Programmsysteme*. PhD thesis, TU Magdeburg, 1987. 81
- C. W. Gear. Maintaining solution invariants in the numerical solution of odes. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 7:734–743, 1986. 89

- S. Glaser. Berechnung gekoppelter thermomechanischer Prozesse. Technical Report ISD Report No. 91/3, Institut für Statik und Dynamik der Luft- und Raumfahrtkonstruktionen, Universität Stuttgart, Stuttgart (Germany), 1991. 5
- S. Glaser and F. Armero. On the formulation of enhanced strain finite elements in finite deformations. *Engineering Computations*, 14(7):759–791, 1997. 78
- G. H. Golub and C. F. van Loan. *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 3rd edition, 1996. 104
- W. Gropp, E. Lusk, A. Skjellum, and H. Blaar. *MPI- eine Einführung: Portable parallele Programmierung mit dem Message-Passing Interface*. Scientific and engineering computation. Oldenbourg Verlag, 2007. 2
- C. Großmann and H.-G. Roos. *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Teubner Verlag, Stuttgart, 1994. 73
- K. Gustafsson. Control-theoretic techniques for stepsize selection in implicit Runge-Kutta methods. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 20:496 – 517, 1994. 123
- K. Gustafsson, M. Lundh, and G. Söderlind. A PI stepsize control for the numerical solution of ordinary differential equations. *BIT Numerical Mathematics*, 28:270 – 287, 1988. 123
- E. Hairer and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations II*. Springer, Berlin, 2nd revised edition, 1996. 6, 74, 88, 92, 93, 94, 97, 99, 123, 125, 129, 178
- E. Hairer, C. Lubich, and M. Roche. Error of Runge-Kutta methods for stiff problems studied via differential algebraic equations. *BIT Numerical Mathematics*, 28:678 – 700, 1988. 93
- E. Hairer, C. Lubich, and M. Roche. Error of Rosenbrock methods for stiff problems studied via differential algebraic equations. *BIT Numerical Mathematics*, 29:77–90, 1989a. 7
- E. Hairer, C. Lubich, and M. Roche. *The numerical solution of differential-algebraic systems by Runge-Kutta methods*. Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 1989b. 92, 93
- E. Hairer, S.P. Norsett, and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations I*. Springer, Berlin, 2nd revised edition, 1993. 74, 92, 125
- A.-W. Hamkar and S. Hartmann. Application of rosenbrock-type methods to a constitutive model of polymeric material. *PAMM Proceeding in Applied Mathematics and Mechanics*, 7(1):4060045–4060046, 2007. 7

- A.-W. Hamkar and S. Hartmann. Application of rosenbrock-type methods to a finite element formulation based on large strain viscoelasticity. *Proc. Appl. Math. Mech.*, 8 (1):10281–10282, 2008. 7, 102
- A.-W. Hamkar and S. Hartmann. Theoretical and numerical aspects in weak-compressible finite strain thermo-elasticity. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 50:3–20, 2012. 46
- A.-W. Hamkar, S. Hartmann, and J. Rang. A stiffly accurate rosenbrock-type method of order 2 applied to FE-analyses in finite strain viscoelasticity. *Applied Numerical Mathematics*, 62(12):1837 – 1848, 2012. 136, 178
- P. C. Hammer and A. H. Stroud. Numerical evaluation of multiple integrals ii. *Mathematical Tables and Other Aids to Computation*, 12:272–280, 1958. 85
- S. Hartmann. Nichtlineare Finite-Elemente-Berechnung angewendet auf ein Viskoplastizitätsmodell mit Überspannungen. In S. Hartmann and Ch. Tsakmakis, editors, *Aspekte der Kontinuumsmechanik und Materialtheorie*, pages 55–80, Kassel, 1998. Gesamthochschul-Bibliothek Verlag. 167, 168
- S. Hartmann. Parameter estimation of hyperelasticity relations of generalized polynomial-type with constraint conditions. *International Journal of Solids and Structures*, 38(44-45):7999–8018, 2001. 54
- S. Hartmann. Computation in finite strain viscoelasticity: finite elements based on the interpretation as differential-algebraic equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191(13-14):1439–1470, 2002. 7, 57, 73, 93, 133
- S. Hartmann. *Finite-Elemente Berechnung inelastischer Kontinua. Interpretation als Algebro-Differentialgleichungssysteme*. Habilitation, University of Kassel, Institute of Mechanics, 2003. Report No. 1/2003. 8, 46, 49, 67, 80, 81, 82, 86, 92, 114, 115, 128, 153, 166
- S. Hartmann. A remark on the application of the Newton-Raphson method in non-linear finite element analysis. *Computational Mechanics*, 36(2):100–116, 2005. 166, 168
- S. Hartmann. A thermomechanically consistent constitutive model for polyoxymethylene: Experiments, material modelling and computation. *Archive of Applied Mechanics*, 76(5-6):349–366, 11 2006a. 7, 102
- S. Hartmann. TASA-FEM: Ein Finite-Elemente Programm für raum-zeitadaptive gekoppelte Strukturberechnungen, Version 1.0. Mitteilung des Instituts für Mechanik 1/06, Institut für Mechanik, Universität Kassel, 2006b. 127

- S. Hartmann. Comparison of the multiplicative decompositions $\mathbf{F} = \mathbf{F}_\Theta \mathbf{F}_M$ and $\mathbf{F} = \mathbf{F}_M \mathbf{F}_\Theta$ in finite strain thermo-elasticity. Technical report, Faculty of Mathematics/Computer Science and Mechanical Engineering, Clausthal University of Technology, 2012. 36
- S. Hartmann and W. Bier. High-order time integration applied to metal powder. *International Journal of Plasticity*, 24(1):17–54, 2008. 7
- S. Hartmann and A.-W. Hamkar. Rosenbrock-type methods applied to finite element computations within finite strain viscoelasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199:1455 – 1470, 2010. 7, 102, 130, 135
- S. Hartmann and P. Neff. Polyconvexity of generalized polynomial-type hyperelastic strain energy functions for near-incompressibility. *International Journal of Solids and Structures*, 40(11):2767–2791, 2003. 46, 48, 128, 178
- S. Hartmann and J. Wensch. Finite element analysis of viscoelastic structures using Rosenbrock-type methods. *Computational Mechanics*, 40(2):383–398, 07 2006. 7
- S. Hartmann, G. Lührs, and P. Haupt. An efficient stress algorithm with applications in viscoplasticity and plasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40:991–1013, 1997. 133
- S. Hartmann, P. Haupt, and T. Tschöpe. Parameter identification with a direct search method using finite elements. In D. Besdo, R.H. Schuster, and J. Ihlemann, editors, *Constitutive Models of Rubber II*, pages 249–256, Lisse, 2001. Balkema. 31
- S. Hartmann, T. Tschöpe, L. Schreiber, and P. Haupt. Large deformations of a carbon black-filled rubber. Experiment, optical measurement and parameter identification using finite elements. *European Journal of Mechanics, Series A/Solids*, 22:309–324, 2003. 31, 46
- S. Hartmann, K. J. Quint, and M. Arnold. On plastic incompressibility within time-adaptive finite elements combined with projection techniques. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(2):178–193, 2008a. 7, 73, 93
- S. Hartmann, K. J. Quint, and A.-W. Hamkar. Displacement control in time-adaptive non-linear finite-element analysis. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 88(5):342–364, 2008b. 89, 131
- S. Hartmann, J. Duintjer Tebbens, K. J. Quint, and A. Meister. Iterative solvers within sequences of large linear systems in non-linear structural mechanics. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 89(9):711–728, 2009. 133, 134

- P. Haupt. *Viskoelastizität inkompressibler isotroper Stoffe: Approximation der Allgemeinen Materialgleichung und Anwendungen*. PhD thesis, Technische Universität Berlin, 1971. 4
- P. Haupt. *Continuum Mechanics and Theory of Materials*. Springer, Berlin, 2 edition, 2002. 4, 11, 15, 18, 20, 22, 25, 26, 29, 33, 43, 46, 57, 60, 63
- P. Haupt and A. Lion. Experimental identification and mathematical modelling of viscoplastic material behavior. *Journal of Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 7:73–96, 1995. 54, 167
- P. Haupt and K. Sedlan. Viscoplasticity of elastomeric materials. experimental facts and constitutive modelling. *Archive of Applied Mechanics*, 71:89–109, 2001. 35, 53, 54
- P. Haupt and C. Tsakmakis. On the application of dual variables in continuum mechanics. *Journal of Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 1:165–196, 1989. 26
- P. Haupt and C. Tsakmakis. Stress tensors associated with deformation tensors via duality. *Archive of Mechanics*, 48:347–384, 1996. 26
- T. Heimes. *Finite Thermoelastizität Experimente, Materialmodellierung und Implementierung in die FEM am Beispiel einer technischen Gummimischung*. PhD thesis, Institut für Mechanik, Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik, Universität der Bundeswehr München, München, 2005. 4, 9, 35, 42, 46, 53, 54, 59, 70, 141, 178
- U. Heisserer, S. Hartmann, Z. Yosibash, and A. Düster. On volumetric locking-free behavior of p-version finite elements under finite deformations. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 24:1019–1032, 2008. 66
- T. K. Hellen. Effective quadrature rules for quadratic solid isoparametric finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 4:597–599, 1972. 85
- G. A. Holzapfel. *Physikalische Modellierung und Finite Elemente Analyse von elastomeren Systemen unter Berücksichtigung von thermomechanisch gekoppelten Problemen*. Habilitationsschrift, Universität Wien, 1995. 3
- G. A. Holzapfel and J. C. Simo. Entropy elasticity of isotropic rubber-like solids at finite strains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 132:17–44, 1996a. 3
- G.A. Holzapfel. *Nonlinear Solid Mechanics*. Wiley & Sons, Chichester, 2000. 67
- G.A. Holzapfel and J.C. Simo. A new viscoelastic constitutive model for continuous media at finite thermomechanical changes. *International Journal of Solids and Structures*, 33(20-22):3019–3034, 1996b. 3, 4

- R. Houwink and H.K. De Decker. *Elasticity, Plasticity and Structure of Matter*. Cambridge University Press, 1971. 30
- W. Hoyer and J.W. Schmidt. Newton-type decomposition methods for equations arising in network analysis. *ZAMM Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 64:397–405, 1984. 6, 168
- G. Huber. *Universelle Eigenschaften gefüllter Elastomere*. PhD thesis, Fachbereich Physik, Johannes-Gutenberg Universität Mainz, 1997. 30
- T. J. R. Hughes. *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. Dover Publications, Mineola, NY, 2000. 73, 79, 80
- T.J.R. Hughes, J.A. Cottrell, and Y. Bazilevs. Isogeometric analysis: Cad, finite elements, nurbs, exact geometry and mesh refinement. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194:4135–4195, 2005. 77
- J. Ihlemann. *Kontinuumsmechanische Nachbildung hochbelasteter technischer Gummiverkstoffe*. PhD thesis, Institut für Mechanik, Universität Hannover, 2004. Fortschrittberichte VDI, Reihe 18, Nr. 288. 32
- N. Ilias. *Zur numerischen Behandlung gekoppelter thermoviskoelastischer Probleme*. PhD thesis, Institut für Luft- und Raumfahrttechnik, Technische Universität Berlin, 1994. 5
- F. P. Incropera, D. P. Dewitt, T. L. Bergman, and A. S. Lavine. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, 6th edition, 2007. 62, 145
- B. M. Irons. Quadrature rules for brick based finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 3:293–294, 1971. 85
- W. Jansohn. *Formulierung und Integration von Stoffgesetzen zur Beschreibung großer Deformationen in der Thermoplastizität und -viskoplastizität*. Dissertation, Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Materialforschung, 1997. 59
- R. Jeltsch-Fricker. Variationsrechnung. Skript zur Vorlesung in den Technikstudiengängen der Universität Kassel, 2007. 64
- A.R. Johnson, C.J. Quigley, and C.E. Freese. A viscohyperelastic finite element model for rubber. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 127(1–4):163–180, 1995. 3
- J. P. Joule. On some thermo-dynamic properties of solids. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 149:91–131, 1859. 144

- M. Kaliske. *Zur Theorie und Numerik von Polymerstrukturen unter statischen und dynamischen Einwirkungen*. PhD thesis, Institut für Statik, Universität Hannover, 1995. 30
- M. Kaliske and H. Rothert. Constitutive approach to rate-independent properties of filled elastomers. *International Journal of Solids and Structures*, 35(17):2057–2071, 1998. 3
- M. Kamlah. *Zur Modellierung des Verfestigungsverhaltens von Materialien mit statischer Hysterese im Rahmen der phänomenologischen Thermomechanik*. Report no. 3/1994, University of Kassel, Institute of Mechanics, 1994. 34
- P. Kaps and G. Wanner. A study of rosenbrock-type methods of high order. *Numerische Mathematik*, 38:279–298, 1981. 7, 99
- J. Korelc and P. Wriggers. Consistent gradient formulation for a stable enhanced strain method for large deformations. *Engineering Computations*, 13(1):103–123, 1996. 78
- A. Krawietz. *Materialtheorie: Mathematische Beschreibung des phänomenologischen thermomechanischen Verhaltens*. Springer Verlag, Berlin, 1986. 33, 34, 36
- J. Lang. *Adaptive Multilevel Solution of Nonlinear Parabolic PDE Systems, Theory, Algorithm, and Applications*, volume 16. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Springer Verlag, Berlin, 2001. 7, 94
- J. Lang and J. Verwer. ROS3P – An accurate third-order Rosenbrock solver designed for parabolic problems. *BIT Numerical Mathematics*, 41:731–738, 2001. 7, 178
- P. Le Tallec, C. Rahier, and A. Kaiss. Three-dimensional incompressible viscoelasticity in large strains: Formulation and numerical approximation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 109:233–258, 1993. 4
- E.H. Lee. Elastic-plastic deformation at finite strains. *Journal of Applied Mechanics*, 36:1–6, 1969. 36
- E.H. Lee and D.T. Liu. Finite-strain elastic-plastic theory of application to plane wave analysis. *Journal of Applied Physics*, 38:19–27, 1967. 36
- T. Lehmann. General frame for the definition of constitutive laws for large non-isothermic elastic–plastic and elastic–visco-plastic deformations. (retroactive coverage). In T. Lehmann, editor, *The Constitutive law in thermoplasticity*, Courses and lectures - International Centre for Mechanical Sciences, pages 379–463, Wien, 1984. Springer-Verlag. 34

- R.W. Lewis and B.A. Schrefler. *The finite element method in the deformation and consolidation of porous media*. Wiley series in numerical methods in engineering. Wiley, 1987. 5, 75
- W. Link. *Verallgemeinerte Rosenbrock-Wanner-Verfahren für Anfangswertprobleme bei partitionierten Differential-Algebraischen Systemen*. PhD thesis, UNI Mainz (Germany), 1991. 94
- A. Lion. A constitutive model for carbon black filled rubber: Experimental investigations and mathematical representation. *Journal of Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 8:153–169, 1996. 3, 4
- A. Lion. On the large deformation behaviour of reinforced rubber at different temperatures. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 45(11-12):1805–1834, 1997a. 3, 4, 32
- A. Lion. A physically based method to represent the thermomechanical behaviour of elastomers. *Acta Mechanica*, 123:1–26, 1997b. 3, 4
- A. Lion. Constitutive modelling in finite thermoviscoplasticity: a physical approach based on nonlinear rheological models. *International Journal of Plasticity*, 16:469–494, 2000a. 3, 144
- A. Lion. *Thermomechanik von Elastomeren. Experimente und Materialtheorie*. Habilitation, Institute of Mechanics, University of Kassel, 2000b. Report No. 1/2000. 4, 9, 32, 35, 36, 37, 42, 46, 48, 53, 141, 178
- C.H. Liu, G. Hofstetter, and H.A. Mang. 3d finite element analysis of rubber-like materials at finite strains. *Engineering Computations*, 11:111–128, 1994. 67
- S. C. H. Lu and K. S. Pister. Decomposition of deformation and representation of the free energy function for isotropic thermoelastic solids. *International Journal of Solids and Structures*, 11(7–8):927–934, 1975. 36
- C. Lübbing. *Zur Stabilität von gestaffelten Finite-Elemente Berechnungen*. PhD thesis, Institut für Statik und Dynamik der Luft- und Raumfahrtkonstruktionen, Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik, Universität Stuttgart, Stuttgart, 1997. 5, 75
- C. Lubich and M. Roche. Rosenbrock methods for differential-algebraic systems with solution-dependent singular matrix multiplying the derivative. *Computing*, 43:325–342, 1990. 7, 103, 178
- J. Lubliner. A model of rubber viscoelasticity. *Mechanics Research Communications*, 12:93–99, 1985. 36

- J. Mackerle. Rubber and rubber-like materials, finite-element analyses and simulations, an addendum: A bibliography (1997–2003). *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 12:1031–1053, 2004. 3
- D. S. Malkus and T. J. R. Hughes. Mixed finite element methods – reduced and selective integration techniques: A unification of concepts. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 15:63–81, 1978. 77
- J.E. Marsden and T.J.R. Hughes. *Mathematical Foundations of Elasticity*. Dover Publications, Inc., Mineola, N.Y., Mineola, NY, 1994. 62
- M. A. Mendelsohn, F. W. Navish, and D. Kim. Characteristics of a series of energy-absorbing polyurethane elastomers. *Rubber Chemistry and Technology*, 58:997–1013, 1985. 30
- P. Middendorf. *Viskoelastisches Verhalten von Polymersystemen*. Number 661 in Fortschritt-Bericht VDI Reihe 5. VDI-Verlag, 2002. 31
- C. Miehe. *Zur numerischen Behandlung thermomechanischer Prozesse*. Report No. F88/6, University of Hannover, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, 1988. 6, 36, 37, 68, 70
- C. Miehe. *Kanonische Modelle multiplikativer Elasto-Plastizität. Thermodynamische Formulierungen und numerische Implementation*. Habilitation, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik der Universität Hannover, 1993. Report No. F93/1. 36
- C. Miehe. Entropic thermoelasticity at finite strains. aspects of the formulation and numerical implementation. *Computer methods in Applied Mechanics and Engineering*, 120:243–269, 1995. 3
- C. Miehe and J. Keck. Superimposed finite elastic-viscoelastic-plastoelastic stress response with damage in filled rubber polymers. experiments, modeling and algorithmic implementation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48:323–365, 2000. 3
- L. Mullins and N. R. Tobin. Stress softening in rubber vulcanizates. part i. use of a strain amplification factor to describe the elastic behavior of filler-reinforced vulcanized rubber. *Journal of Applied Polymer Science*, 9(9):2993–3009, 1965. 30
- T. Netz, A. Düster, and S. Hartmann. High-order finite elements compared to low-order mixed element formulations. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 93:163–176, 2013a. 77

- T. Netz, A.-W. Hamkar, and S. Hartmann. High-order quasi-static finite element analysis in space and time with application to finite strain viscoelasticity. submitted to *Computers & Mathematics with Applications*, 2013b. 7, 77
- J.T. Oden. *Finite Elements of Nonlinear continua*. McGraw-Hill, New-York (etc.), 1972. 73, 79
- J.T. Oden and W.H. Armstrong. Analysis of nonlinear, dynamic coupled thermoviscoelasticity problems by the finite element method. *Computers & Structures*, 1(4):603 – 621, 1971. 4
- R.W. Ogden. Large deformation isotropic elasticity - on the correlation of theory and experiment for incompressible rubberlike solids. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A* 326:565–584, 1972. 48
- M. Pah, W. Gleissle, and H.-M. Laun. *Praktische Rheologie der Kunststoffe und Elastomere*. VDI-Verlag, 1995. 34
- P.C. Painter and M.M. Coleman. *Fundamentals of Polymer Science: An Introductory Text*. CRC Press, 2nd edition, 1998. 30
- H. Parisch. *Festkörper-Kontinuumsmechanik*. B.G. Teubner Verlag, Stuttgart (Germany), 2003. 5
- K. C. Park. Partitioned transient analysis procedures for coupled-field problems: Stability analysis. *Journal of Applied Mechanics*, 47(2):370–376, 1980. 4, 74
- K. C. Park and C. A. Felippa. Partitioned transient analysis procedures for coupled-field problems: Accuracy analysis. *Journal of Applied Mechanics*, 47(4):919–926, 1980. 4, 74
- R.W. Penn. Volume changes accompanying the extension of rubber. *Transactions of the Society of Rheology*, 14:509–517, 1970. 46
- A. Prothero and A. Robinson. On the stability and accuracy of one-step methods for solving stiff systems of ordinary differential equations. *Mathematics of Computation*, 28(125):145 – 162, 1974. 97
- K. J. Quint. *Thermomechanically Coupled Processes for Functionally Graded Materials: Experiments, Modelling, and Finite Element Analysis using High-Order DIRK-Methods*. PhD thesis, Institute of Applied Mechanics, Clausthal University of Technology, 2012. 7, 153, 179
- K. J. Quint, S. Hartmann, J. Duintjer Tebbens, and A. Meister. Efficient finite element analysis of inelastic structures with iterative solvers. *PAMM*, 8(1):10331–10332, 2008. 133

- N.B.G. Rabbat, A.L. Sangiovanni-Vincentelli, and H.Y. Hsieh. A multilevel Newton algorithm with macromodeling and latency for the analysis of large-scale nonlinear circuits in the time domain. *IEEE Transactions on Circuits and Systems*, 26:733–740, 1979. 6, 168
- J.N. Rabotnov and A.A. Iljushin. *Methoden der Viskoelastizitätstheorie*. Carl Hanser Verlag, München, 1970. 34
- J. Rang and L. Angermann. New Rosenbrock W-methods of order 3 for partial differential algebraic equations of index 1. *BIT Numerical Mathematics*, 45:761–787, 2005. 131, 178
- J. Rang and L. Angermann. New Rosenbrock methods of order 3 for PDAEs of index 2. *Advances in Differential Equations and Control Processes*, 1(2):193–217, 2008. 129, 154, 178
- T. Rauber and G. Rünger. *Parallel Programming: For Multicore and Cluster Systems*. Springer, 2010. 2
- S. Reese. *Thermomechanische Modellierung gummiartiger Polymer-Strukturen*. Habilitation, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover, 2001. Report No. F01/4. 4, 6, 59, 78, 149
- S. Reese. On a physically stabilized one point finite element formulation for three-dimensional finite elasto-plasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194:4685–4715, 2005. 77, 78
- S. Reese and S. Govindjee. A theory of finite viscoelasticity and numerical aspects. *International Journal of Solids and Structures*, 35(26-27):3455–3482, 1998a. 3, 4
- S. Reese and S. Govindjee. Theoretical and numerical aspects in the thermo-viscoelastic material behaviour of rubber-like polymers. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 1:357–396, 1998b. 3, 4, 5
- S. Reese and P. Wriggers. A material model for rubber-like polymers exhibiting plastic deformation: computational aspects and a comparison with experimental results. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 148(3–4):279 – 298, 1997. 3
- S. Reese and P. Wriggers. A new stabilization concept for finite elements in large deformation problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 48: 79–110, 2000. 77, 78
- S. Reese, P. Wriggers, and B. D. Reddy. A new locking-free brick element technique for large deformation problems in elasticity. *Computers & Structures*, 75(3):291–304, 2000. 77

- P. Rentrop, M. Roche, and G. Steinebach. The application of rosenbrock-wanner type methods with stepsize control in differential-algebraic equations. *Numerische Mathematik*, 55:545–563, 1989. 7
- A. Rieger. *Adaptive Algorithmen für thermomechanisch gekoppelte Kontaktprobleme*. PhD thesis, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover, Hannover, Deutschland, 2002. 5, 76
- A. Rieger and P. Wriggers. Adaptive methods for thermomechanical coupled contact problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 59:871–894, 2004. 5
- R.S. Rivlin and D.W. Saunders. Large elastic deformations of isotropic materials VII. Experiments on the deformation of rubber. *Philosophical Transaction of the Royal Society of London*, Series A 243:251–288, 1951. 48
- M. Roche. Rosenbrock methods for differential algebraic equations. *Numerische Mathematik*, 52:45–63, 1988. 7, 94, 178
- H.H. Rosenbrock. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations. *Computer Journal*, 5:329–331, 1963. 7, 94
- S. Rothe, A.-W. Hamkar, K. J. Quint, and S. Hartmann. Comparison of diagonal-implicit, linear-implicit and half-explicit Runge–Kutta methods in non-linear finite element analyses. *Archive of Applied Mechanics*, 82:1057–1074, 2012. 73
- A. Sandu, J. G. Verwer, J. G. Blom, E. J. Spee, G. R. Carmichael, and F. A. Potra. Benchmarking stiff ode solvers for atmospheric chemistry problems. II: Rosenbrock solvers. *Atmospheric Environment*, 31:3459 – 3472, 1997. 7, 178
- H. Schade and K. Neemann. *Tensoranalysis*. De Gruyter Lehrbuch. De Gruyter, Berlin, 2009. 169
- O. Schenk and K. Gärtner. Solving Unsymmetric Sparse Systems of Linear Equations with PARDISO. *Journal of Future Generation Computer Systems*, 20:475–487, 2004. 127
- O. Scherf. *Numerische Simulation inelastischer Körper*. Fortschritt-Berichte VDI, Reihe 20 (Rechnerunterstützte Verfahren) Nr.321. VDI-Verlag, Düsseldorf, 2000. 7
- W. E. Schiesser. *The Numerical Method of Lines: Integration of Partial Differential Equations*. Academic Press Inc, San Diego, CA, 1991. 73
- H. R. Schwarz and N. Köckler. *Numerische Mathematik*. Teubner, Stuttgart, 2004. 79, 84

- F.R. Schwarzl. *Polymermechanik: Struktur Und Mechanisches Verhalten Von Polymeren*. Springer-Verlag, 1990. 30
- K. Sedlan. *Viskoelastisches Materialverhalten von Elastomerwerkstoffen: Experimentelle Untersuchung und Modellbildung*. Doctoral thesis, Institute of Mechanics, University of Kassel, 2000. Report No. 2/2001. 31, 35, 46, 54, 129
- K. Sedlan and P. Haupt. Inelastisches Materialverhalten von gefüllten Elastomeren bei Finiten Deformationen. *Technische Mechanik*, 19:269–278, 1999. 32
- L. F. Shampine. Implementation of Rosenbrock methods. *ACM Trans. Math. Softw.*, 8: 93 – 113, 1982. 7, 99
- J. C. Simo and T. J. R. Hughes. General return mapping algorithms for rate-independent plasticity. In E. Desai, E. Krempl, P.D. Kioussis, and T. Kundu, editors, *Constitutive Laws for Engineering Materials: Theory and Applications*, pages 221–231. Elsevier Science Ltd, 1987. 5
- J. C. Simo and M. S. Rifai. A class of mixed assumed strain methods and the method of incompatible modes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 29(8):1595–1638, 1990. 77
- J. C. Simo and R.L. Taylor. Quasi-incompressible finite elasticity in principal stretches. continuum basis and numerical algorithms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 85:273–310, 1991. 66
- J. C. Simo, F. Armero, and R. L. Taylor. Improved versions of assumed enhanced strain tri-linear elements for 3d finite deformation problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 110(3-4):359 – 386, 1993. 77
- J.C. Simo. On a fully three-dimensional finite-strain viscoelastic damage model: Formulation and computational aspects. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 60:153–173, 1987. 3, 4
- J.C. Simo and F. Armero. Geometrically non-linear enhanced strain mixed methods and the method of incompatible modes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33:1413–1449, 1992. 77
- J.C. Simo and C. Miehe. Associative coupled thermoplasticity at finite strains: Formulation, numerical analysis and implementation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 98(1):41–104, 1992. 5, 75
- J.C. Simo and R.L. Taylor. Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 48:101–118, 1985. 6, 168

- J.C. Simo, R.L. Taylor, and K.S. Pister. Variational and projection methods for the volume constraint in finite deformation elasto-plasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 51:177–208, 1985. 66
- G. Steinebach. Order-reduction of ROW-methods for DAEs and method of lines applications. Preprint 1741, Technische Hochschule Darmstadt, Germany, 1995. 178
- M. Strauss. *Struktur gefüllter Vulkanisate und Mechanismen der Verstärkung*. PhD thesis, Abteilung Experimentelle Physik, Universität Ulm, 1992. 30
- K. Strehmel and R. Weiner. *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*. Teubner Verlag, Stuttgart, 1995. 74, 88, 92, 93, 94, 97, 101, 123
- R. L. Taylor, K. S. Pister, and G. L. Goudreau. Thermomechanical analysis of viscoelastic solids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2:45–59, 1970. 4
- R. L. Taylor, P. J. Beresford, and E. L. Wilson. A non-conforming element for stress analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 10(6):1211–1219, 1976. 77
- A. V. Tobolsky. *Mechanische Eigenschaften und Struktur von Polymeren*. Berliner Union, Stuttgart, 1967. 4, 36
- A.V. Tobolsky and H.F. Mark. *Polymer science and materials*. R. E. Krieger Pub. Co., 1980. 30, 32
- W. Törnig and P. Spellucci. *Numerische Mathematik für Ingenieure und Physiker*. Springer-Verlag, Berlin, 3 edition, 1990. 123
- L.R.G. Treloar. *The Physics of Rubber Elasticity*. Clarendon Press, Oxford, 3rd edition, 1975. 30, 31, 43, 144
- C. Truesdell and W. Noll. *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*, volume III/3 of *Encyclopedia of Physics*. Springer Verlag, Berlin, 1965. 23, 33, 44
- C. Truesdell and R. A. Toupin. *The Classical Field Theories*, volume III/1 of *Encyclopedia of Physics*. Springer Verlag, 1960. 33
- N.W. Tschoegl. *The Phenomenological Theory of Linear Viscoelastic Material Behaviour*. Springer Verlag, New York, 1989. 4, 34
- E. Turska and B.A. Schrefler. On convergence conditions of partitioned solution procedures for consolidation problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 106:51–63, 1993. 75

- J. G. Verwer, E. J. Spee, J. G. Blom, and W. Hundsdorfer. A second order Rosenbrock method applied to photochemical dispersion problems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20:1456–1480, 1999. 129, 136, 178
- K. Washizu. *Variational methods in elasticity and plasticity*. Pergamon Press, Oxford, 2nd edition, 1975. 78
- J. Wensch. *Beiträge zur geometrischen Integration und Anwendungen in der numerischen Simulation*. Habilitationsschrift, Martin-Luther Universität, Halle-Wittenberg, 2003. 94, 101
- J. Wensch, H. Podhaisky, and S. Hartmann. Time integration of index 1 DAEs with Rosenbrock methods using Krylov subspace techniques. *PAMM Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics*, 3:573–574, 2003. 101
- M. L. Williams. Structural analysis of viscoelastic materials. *AIAA Journal*, 2(5):785–808, 1964. 34
- E.L. Wilson, R.L. Taylor, W.P. Doherty, and J. Ghaboussi. Incompatible displacements models. In S. J. Fenves, N. Perrone, A. R. Robinson, and W. C. Schnobrich, editors, *Numerical and Computer Models in Structural Mechanics*, pages 43–57, New-York, 1973. Academic Press. 77
- J. Wittekindt. *Die numerische Lösung von Anfangs-Randwertproblemen zur Beschreibung inelastischen Werkstoffverhaltens*. Doctoral thesis, Department of Mathematics, University of Darmstadt, 1991. 6, 93, 94
- A. Wolfbrandt. *A Study of Rosenbrock Processes with Respect to Order Conditions and Stiff Stability*. PhD thesis, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden, 1977. 94
- P. Wriggers. *Nonlinear finite element methods*. Springer Verlag, Berlin (etc.), 2008. 65, 66, 67, 73, 77, 79, 80, 82, 90
- P. Wriggers and U. Hueck. A formulation of the qs6 element for large elastic deformations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 39(9):1437–1454, 1996. 77
- P. Wriggers and S. Reese. A note on enhanced strain methods for large deformations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 135:201–209, 1996. 78
- O. C. Zienkiewicz. Coupled problems and their numerical solution. In R.W. Lewis, P. Bettess, and E. Hinton, editors, *Numerical Methods in Coupled Systems*, pages 35–68, Chichester, 1984. John Wiley & Sons. 74

- O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor. *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. Butterworth-Heinemann, Burlington, MA, 6 edition, 2005a. 73, 79
- O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor. *The Finite Element Method for Solid and Structural Mechanics*. Butterworth-Heinemann, Burlington, MA, 6 edition, 2005b. 66, 73
- O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, and J. M. Too. Reduced integration technique in general analysis of plates and shells. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 3(2):275–290, 1971. 77

Liste der Publikationen

- [1] T. Netz, A.-W. Hamkar, S. Hartmann, *High-order quasi-static finite element analysis in space and time with application to finite strain viscoelasticity*, submitted to Computers & Mathematics with Applications, 2013
- [2] A.-W. Hamkar, S. Hartmann, J. Rang, *A stiffly accurate rosenbrock-type method of order 2 applied to FE-analyses in finite strain viscoelasticity*, Applied Numerical Mathematics, 2012
- [3] A.-W. Hamkar, S. Hartmann, *Theoretical and numerical aspects in weak-compressible finite strain thermo-elasticity*, Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2012
- [4] S. Rothe, A.-W. Hamkar, K. J. Quint, S. Hartmann, *Comparison of diagonal-implicit, linear-implicit and half-explicit Runge-Kutta methods in non-linear finite element analyses*, Archive of Applied Mechanics, 2012
- [5] S. Rothe, S. Hartmann, A.-W. Hamkar, K. J. Quint, *A comparison of time adaptive integration methods for small and large strain viscoelasticity*, Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics, 2011
- [6] S. Hartmann, A.-W. Hamkar, T. Netz, *Verfahren höherer Ordnung in Raum und Zeit mit Anwendung auf Gleitlagerberechnung*, In G. Brenner, T. Hanschke und M. Kolonko, (Eds.), Simulationswissenschaftliches Zentrum der Technischen Universität Clausthal. Bericht 2009 - 2010, Simulationswissenschaftliches Zentrum der TU Clausthal, 2009
- [7] T. Netz, S. Hartmann, A.-W. Hamkar, *Application of Rosenbrock-type methods to the p-version of finite elements*, Proceeding in Applied Mathematics and Mechanics, 2011
- [8] S. Hartmann and A.-W. Hamkar, *Rosenbrock-type methods applied to finite element computations within finite strain viscoelasticity*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2010

- [9] A.-W. Hamkar, S. Hartmann, *Finite Element Computations Based on Rosenbrock-Type Methods*, In B. Suárez and E. Oñate, (Eds.), *Computational Plasticity X: Fundamentals and Applications*; Proceedings of the X Int. Conf. on Computational Plasticity, CIMNE - International Center for Numerical Methods in Engineering, 2009
- [10] S. Hartmann, A.-W. Hamkar, *Übertragung von Rosenbrock-Verfahren auf Finite-Elemente Berechnungen für elastomere Strukturen*, In G. Brenner, T. Hanschke und M. Kolonko, (Eds.), *Simulationswissenschaftliches Zentrum der Technischen Universität Clausthal. Bericht 2007 - 2008*, Simulationswissenschaftliches Zentrum der TU Clausthal, 2009
- [11] S. Hartmann, K. J. Quint, A.-W. Hamkar, *Displacement control in time-adaptive non-linear finite-element analysis*, *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 2008
- [12] A.-W. Hamkar and S. Hartmann, *Application of Rosenbrock-type methods to a finite element formulation based on large strain viscoelasticity*, *Proceeding in Applied Mathematics and Mechanics*, 2008
- [13] A.-W. Hamkar, S. Hartmann, *Application of Rosenbrock-type methods to a constitutive model of polymeric material*, *Proceeding in Applied Mathematics and Mechanics*, 2007

Curriculum Vitae

Persönliche Daten

Name	Ahmad-Wahadj Hamkar
Geburtsdatum	12. Oktober 1977 in Kabul (Afghanistan)
Familienstand	verheiratet, ein Kind
Nationalität	deutsch

Schulbildung

08.1984 – 06.1987	Grundschule , Grundschule Brückenhof-Nordshausen, Kassel
08.1987 – 06.1993	Mittlere Reife , Georg-August-Zinn Schule, Kassel
08.1993 – 09.1996	Abitur , Georg-Christoph-Lichtenberg Gymnasium, Kassel

Zivildienst

12.1996 – 12.1997	Arbeiter-Samariter-Bund Deutschland e.V., Köln, Individuelle Betreuung von Schwerstbehinderten
-------------------	--

Studium

04.1999 – 06.2006	Diplomstudiengang Maschinenbau, Universität Kassel, Kassel
05.2005	Diplomprüfung I , Am Institut für Thermische Energietechnik, Angefertigt in der Abteilung Turbine des Instituts für Antriebstechnik, DLR Göttingen Diplomarbeit: Experimentelle Untersuchung des Strömungsfeldes im Wandbereich eines ebenen Turbinenschaufelgitters mittels der Particle Image Velocimetry, PIV
09.2006	Diplomprüfung II , Am Institut für Mechanik, FG Kontinuumsmechanik Diplomarbeit: Anwendung von Rosenbrock-Verfahren auf Materialmodelle vom Evolutionsgleichungstyp im Rahmen der Methode der finiten Elemente

Berufliche Tätigkeiten

- 05.2001 – 04.2004 **Werkstudent im Prüfungslabor**, Brooke-Edwards-Werkstoffprüfung, Kassel
Qualitätssicherung für Serienteile der Automobil- und Flugzeugindustrie
- 05.2004 – 09.2004 **Praktikum**, Abteilung Turbine, Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt, Göttingen,
Untersuchung der Aero- und Thermodynamik einer Gasturbinen Hochdruckstufe bei Plattformkühlung
- 07.2005 – 05.2006 **Studentischer Mitarbeiter**, Institut für Mechanik, Universität Kassel,
Untersuchungen zur Identifikation der thermomechanischen Materialeigenschaften von Formgedächtnislegierungen
- 09.2006 – 09.2008 **Wissenschaftlicher Mitarbeiter**, Institut für Mechanik, Universität Kassel
Forschungsprojekt: “Konsistente Raum-Zeitdiskretisierung thermomechanisch gekoppelter elastomerer Strukturen mit Hilfe von Rosenbrock-Verfahren”, gefördert von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)
- 09.2009 – 12.2010 **Wissenschaftlicher Mitarbeiter**, Institut für Technische Mechanik, TU Clausthal,
Weiterhin Betreuung des DFG-Forschungsprojekts
- seit 01.2011 **Berechnungsingenieur** in der Abteilung Fuel Assembly Dynamics der AREVA GmbH, Erlangen,
Entwicklung von Berechnungsprogrammen und Methoden für die mechanische Auslegung von Brennelementen