

*Christian Hesch*

# Mechanische Integratoren für Kontaktvorgänge deformierbarer Körper unter großen Verzerrungen

*Herausgeber: Peter Betsch*

Schriftenreihe des Lehrstuhls für  
Numerische Mechanik

**Band I**



# Mechanische Integratoren für Kontaktvorgänge deformierbarer Körper unter großen Verzerrungen

Dissertation  
zur Erlangung des akademischen Grades  
DOKTOR-INGENIEUR

vorgelegt von  
Dipl.-Ing. Christian Hesch  
aus Siegen

eingereicht dem  
Fachbereich Maschinenbau  
der Universität Siegen

Hauptreferent: Prof. Dr.-Ing. Peter Betsch  
Korreferenten: Prof. Dr. Barbara Wohlmuth  
Prof. Dr.-Ing. Peter Wriggers

Tag der mündlichen Prüfung:  
13. Dezember 2007



Schriftenreihe des Lehrstuhls für Numerische Mechanik  
Band I

Christian Hesch

Mechanische Integratoren für  
Kontaktvorgänge deformierbarer Körper  
unter großen Verzerrungen

Herausgeber: Peter Betsch  
Siegen 2008

**Impressum**

Prof. Dr.-Ing. habil. Peter Betsch  
Lehrstuhl für Numerische Mechanik  
Universität Siegen  
57068 Siegen  
ISSN 1866-1203

URN [urn:nbn:de:hbz:467-3156](https://nbn-resolving.org/urn:nbn:de:hbz:467-3156)

Zugl.: Siegen, Univ., Diss., 2007

# Zusammenfassung

Forschungsziel dieser Arbeit ist die Simulation von Kontakt-Vorgängen. Ein beispielhafter und konkreter Anwendungsfall ist die computerunterstützte Crash-Simulation von Fahrzeugen der Automobilindustrie. Die begriffliche Bestimmung von „Kontakt“ wird hierbei weitest definiert mit dem Ziel, das umfassende Feld der Gebietszerlegungsverfahren einbringen zu können. Diese notwendige Voraussetzung ergibt sich aus der Tatsache, dass ein Teil der Interface-Strukturen zur Beschreibung von Kontakt-Vorgängen ursprünglich für Gebietszerlegungsverfahren entwickelt wurde.

Die Entwicklung numerischer Methoden für die Zeitintegration ist damit das substanzielle Ziel der vorliegenden Untersuchung. Die Integratoren müssen für die algorithmische Erhaltung grundlegende Symmetrie-Eigenschaften des mechanischen Systems gewährleisten. Diese Zeitschrittverfahren sind unter der Bezeichnung „Mechanische Integratoren“ bekannt und wurden bislang ohne Erfolg auf die zur Beschreibung von Kontakt-Vorgängen notwendigen Zwangsbedingungen angewandt. Die mechanischen Integratoren bieten eine einheitliche Vorgehensweise zur Gewährleistung der fundamentalen physikalischen Eigenschaften sowohl für die nichtlineare Elastostatik als auch für allgemeine nichtlineare Zwangsbedingungen.

Die algorithmische Erhaltung zentraler Eigenschaften wie der Gesamtenergie und der Impulsabbildungen führen in der Praxis zu einer herausragenden numerischen Stabilität; insbesondere bei Kontakt-Vorgängen ist dies von qualitativ hohem Interesse. Auch die hieraus resultierende Möglichkeit der Wahl beliebiger Zeitschritte zeichnet dieses Verfahren aus. Jene Eigenschaften sowie die Konzeption der mechanischen Integratoren setzen ein exaktes Einfordern der holonomen Zwangsbedingungen voraus. Dies kann mithilfe zusätzlicher Freiheitsgrade, den Lagrangeschen Multiplikatoren, erfolgen. Die zugehörigen Bewegungsgleichungen können als ein differential-algebraisches Gleichungssystem geschrieben werden.

Eine spezifische Besonderheit in der Beschreibung von Kontakt-Vorgängen bei der Simulation großer Deformationen von vollständig nichtlinearen Systemen unter Einbindung beliebiger konstitutiver Gesetze liegt in der Verwendung der Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen. Sie bestimmen, ob und wann eine Zwangsbedingung aktiv ist oder nicht. Diese Klasse der Ungleichheits-Zwangsbedingungen erfordert ein entsprechendes Anpassen der mechanischen Integratoren.

In der vorliegenden Untersuchung werden alle notwendigen Formulierungen sowohl für die Elasto- als auch für die Kontaktmechanik detailliert hergeleitet. Das resultierende nichtlineare Gleichungssystem kann mit einem Newton-Raphson Verfahren gelöst werden. Nicht zuletzt werden mithilfe verschiedener numerischer Beispiele die Stärken der neu entwickelten Formulierungen nachvollziehbar demonstriert.

# Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand in der Zeit von 2003 bis 2007 im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Numerische Mechanik der Universität Siegen.

Mein besonderer, aufrichtiger Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. P. Betsch, der mir die Gelegenheit zur Erarbeitung dieser Dissertation einräumte und mich während der 4 Jahre in Siegen sowohl fachlich, aber auch persönlich umfassend unterstützte.

Zu danken habe ich Frau Prof. Dr. Barbara Wohlmuth und Herrn Prof. Dr.-Ing. Peter Wriggers für die bereitwillige Übernahme der Korreferate und das damit gezeigte Interesse an dieser Arbeit.

Allen Mitarbeitern und Mitarbeiterinnen des Lehrstuhls danke ich für die angenehme und freundliche Arbeitsatmosphäre und die freundliche Zusammenarbeit.

Die fachlichen Diskussionen mit Herrn Dr.-Ing. Michael Groß sowie Herrn Dipl.-Ing. Stefan Uhlar haben sehr wichtige Beiträge zum Erfolg dieser Arbeit geliefert.

Die Unterstützung durch Herrn Dipl.-Ing. Nicolas Sängler sowie Herrn Dipl.-Ing. Jürgen Beumelburg, sowie deren Offenheit und Hilfsbereitschaft verdient ebenfalls besonderen Dank.

Meinen Eltern danke ich für ihren starken Rückhalt und ihre großartige Unterstützung.

Siegen, im Januar 2008

Christian Hesch



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1. Motivation . . . . .	1
1.2. Hintergrund . . . . .	2
1.3. Gliederung . . . . .	3
<b>2. Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1. Dynamik . . . . .	5
2.1.1. Lagrangesche Mechanik . . . . .	5
2.1.2. Hamiltonsche Mechanik . . . . .	6
2.1.3. Erhaltungseigenschaften . . . . .	8
2.2. Kontinuumsmechanik . . . . .	14
2.2.1. Kinematik . . . . .	15
2.2.2. Bilanzgleichungen . . . . .	18
2.2.3. Konstitutive Gesetze . . . . .	23
2.3. Diskrete Systeme . . . . .	24
2.3.1. Diskretisierung im Raum . . . . .	24
2.3.2. Diskretisierung in der Zeit . . . . .	27
2.4. Mechanische Integratoren . . . . .	30
2.4.1. Impuls Update . . . . .	31
2.4.2. Diskreter Gradient . . . . .	32
<b>3. Zwangsbedingungen</b>	<b>37</b>
3.1. Eigenschaften von Zwangsbedingungen . . . . .	37
3.1.1. Penalty-Methode . . . . .	38
3.1.2. Lagrangesche Multiplikatoren . . . . .	39
3.1.3. Augmented-Lagrange-Methode . . . . .	39
3.1.4. Sattelpunktsysteme . . . . .	41
3.2. Zwangsbedingungen in diskreten Systemen . . . . .	44
3.2.1. Gleichheits-Zwangsbedingungen . . . . .	44
3.2.2. Algorithmische Energieerhaltung . . . . .	45
3.2.3. Ungleichheits-Zwangsbedingungen . . . . .	47
3.2.4. Algorithmische Energieerhaltung . . . . .	50

<b>4. Nichtkonforme Gebietszerlegungsmethoden</b>	<b>53</b>
4.1. NTS-Methode . . . . .	54
4.1.1. Zwangsbedingung . . . . .	54
4.1.2. Erhaltungseigenschaften . . . . .	57
4.2. Mortar-Methode . . . . .	58
4.2.1. Fehlerabschätzung . . . . .	58
4.2.2. Zwangsbedingung . . . . .	62
4.2.3. Erhaltungseigenschaften . . . . .	66
4.2.4. Nitsche-Methode . . . . .	67
<b>5. Kontakt</b>	<b>68</b>
5.1. NTS-Methode . . . . .	69
5.1.1. Zwangsbedingung . . . . .	69
5.1.2. G-äquivalente Darstellung . . . . .	70
5.1.3. Erhaltungseigenschaften . . . . .	70
5.2. Mortar-Methode . . . . .	72
5.2.1. Zwangsbedingung . . . . .	72
5.2.2. G-äquivalente Darstellung . . . . .	73
5.2.3. Erhaltungseigenschaften . . . . .	76
<b>6. Numerische Beispiele</b>	<b>77</b>
6.1. Simulation eines Lagers . . . . .	77
6.2. Nichtkonforme Gebietszerlegung . . . . .	81
6.3. Kollision zweier deformierbarer Körper . . . . .	84
<b>7. Zusammenfassung</b>	<b>90</b>
<b>A. Ergänzungen</b>	<b>93</b>
A.1. Aufblas-Studie . . . . .	93
A.2. Patch-Test . . . . .	95
A.3. Wirkung mechanischer Integratoren . . . . .	97
<b>B. Ableitungen</b>	<b>101</b>
B.1. Erste Ableitung eines NTS-Elementes . . . . .	101
B.2. Erste Ableitung eines Mortar-Elementes . . . . .	101
B.3. Zweite Ableitung eines Mortar-Elementes . . . . .	103
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>108</b>

# 1. Einleitung

Die vorliegende Arbeit thematisiert Gebietszerlegungsverfahren und reibungsfreie Kontaktvorgänge von deformierbaren Körpern, die im Rahmen der Finite-Element-Methode diskretisiert wurden. Die besonders betrachteten Interface-Strukturen sind dabei unabhängig von den kontinuumsmechanischen Vorgaben, so dass große Deformationen und plastische bzw. viskoelastische Vorgänge keinen Einfluss auf den Kern dieser Untersuchung haben. An die Konzeption der Zwangsbedingungen zur Beschreibung des Interfaces und deren Implementierung in ein geeignetes Integrationsverfahren sind hohe Anforderungen zu stellen, um die Stabilität des Systems zu gewährleisten. Daher wird im Folgenden vorab die Entwicklung mechanischer Integratoren für die Beschreibung von Kontaktvorgängen motiviert und entsprechende Literaturstellen der jüngeren Vergangenheit werden aufgelistet. Dem folgt eine Übersicht über die Struktur dieser Arbeit. Sie ermöglicht einen Einblick in die Grundlagen der Mechanik bis hin zur Implementierung komplexer Kontakt-Formulierungen und den an diese gestellten Forderungen.

## 1.1. Motivation

Nichtlineare Kontakt-Vorgänge finden in etlichen Sektoren Anwendung, u.a. in Crash-Simulationen, bei Tiefziehverfahren, in den Geo-Wissenschaften (Erdbeben-Forschung) sowie in militärischen Simulationen. Eng verwandt mit den Kontaktbeschreibungen sind die Gebietszerlegungsverfahren, die z.B. der Kopplung von unterschiedlich diskretisierten Gebieten, der Kopplung von verschiedenen physikalischen Modellen sowie zur Parallelisierung großer Systeme dienen.

Derzeit gängige Implementierungen von Kontakt-Zwangsbedingungen zeichnen sich bis heute durch ein relativ instabiles Verhalten aus. Dieses Verhalten liegt insbesondere in den verwendeten Verfahren zur numerischen Integration der nichtlinearen Differentialgleichungen (ODEs) sowie in der Implementierung der Ungleichheits-Bedingungen (den sog. Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen) begründet.

Diese Untersuchung zielt auf die Entwicklung robuster numerischer Verfahren für die Simulation nichtlinearer Kontakt-Vorgänge. Hierbei wird aufgezeigt, inwieweit sich beliebige Kontakt-Formulierungen systematisch als holonome Zwangsbedingungen in ein System Differential-Algebraischer Gleichungen (DAEs) ein-

binden lassen. Darauf aufbauend erfolgt die allgemeine Konstruktion numerischer Verfahren, die die algorithmische Erhaltung der fundamentalen Eigenschaften des mechanischen Systems, sowie die Anwendung dieser Konstruktion auf die Kontakt-Zwangsbedingungen gewährleisten. Die Erhaltung dieser Eigenschaften führt auf die für Kontakt-Simulationen extrem wichtige Stabilität der Verfahren unabhängig von der gewählten Zeitschrittweite. Daher ist es folgerichtig, dass mehrfach Arbeiten in der jüngeren Vergangenheit zur Entwicklung numerischer Verfahren mit den genannten Eigenschaften entstanden sind. Hierbei sind insbesondere die Arbeiten von Laursen & Chawla [60, 61], Armero & Petöcz [2, 3] Laursen & Love [62] sowie von Hauret & Le Tallec [39] zu nennen.

## 1.2. Hintergrund

Im Verlauf der 90er Jahre des vergangenen Jahrhunderts wurden erfolgreich numerische Verfahren für die Integration von ODEs entwickelt mit der Befähigung, die wichtigsten physikalischen Eigenschaften eines mechanischen Systems zu erhalten. Die theoretischen Grundlagen sind in den bemerkenswerten Werken von Marsden [65, 1, 66] zu finden. Die Entwicklung von sog. mechanischen Integratoren stellt die konsequente Umsetzung dieser theoretischen Grundlagen auf diskrete Systeme dar. Besonders wurden implizite Einschritt-Verfahren mit den genannten Eigenschaften entwickelt, siehe u.a. [89, 90, 28, 29, 32, 30, 31, 63]. Weiterführende Analysen und Anwendungen finden sich in [4, 5, 84] und [33], sowie in den Werken von Betsch [17, 16, 18, 19, 11, 13].

Die Grundlagen zur Konzeption von Zwangsbedingungen für den Kontakt nicht-konformer Netze entstanden in den 80er Jahren des 20ten Jahrhunderts, siehe u.a. in [36, 37, 91, 6, 107, 104, 74, 58, 44]. Aufgeführt werden hier nur Arbeiten zur Behandlung nichtlinearer Kontakt-Vorgänge unter großen Deformationen. Deshalb wird eine Vielzahl von Werken zum Kontakt linear-elastischer Körper mit kleinen Verzerrungen nicht erwähnt. Eine Übersicht über die Entwicklungen in beiden Bereichen findet sich in den Lehrbüchern von Wriggers [106] und Laursen [59]. Neuere Ansätze zur Minimierung des durch die Nichtkonformität resultierenden Fehlers (die sog. Mortar-Methode) sind in [91, 10, 99, 100, 102, 25] enthalten. Allerdings liegt der Schwerpunkt dieser Artikel im Bereich von Gebietszerlegungsmethoden. Eine Anwendung dieser Ansätze auf Kontakt-Vorgänge findet sich in [67, 38, 47, 23, 24]. Allgemein ist die Integration dieser Zwangsbedingungen in eine vollständig nichtlineare Umgebung erst in den letzten Jahren erwogen worden, siehe u.a. in [78, 108]. Allerdings hier nur unvollständig, so dass grundlegende Erhaltungseigenschaften sowie die zugehörigen Symmetrieeigenschaften verloren gegangen sind. Eine vollständige Umsetzung führt im Allgemeinen auf eine Verbesserung der Stabilität, zumal die Anwendung mechanischer Integratoren dieses Vorgehen erzwingt.

Die Einbindung von Ungleichheits-Zwangsbedingungen in diskrete Systeme findet sich in u.a. [45, 101] und ist unter dem Namen *Active-Set* Strategie bekannt. Hierbei ermöglicht eine Neudefinition der Zwangsbedingung diese als Gleichgewichts-Zwangsbedingung zu behandeln. Die Einforderung von Gleichgewichts-Zwangsbedingungen erfolgt wiederum häufig durch die Verwendung von Penalty-Verfahren. Diese Klasse von Verfahren aus der Optimierungstheorie (vgl. [80, 81]) reagieren allerdings sehr sensitiv auf Änderungen des willkürlich vorgegebenen Penalty-Faktors und bewirken eine nachteilige Konditionierung des Systems. Da des Weiteren die Mortar-Methode explizit auf die Verwendung Lagranger Multiplikatoren ausgelegt ist, werden aus der *Active-Set* Strategie resultierende holonome Zwangsbedingungen grundsätzlich unter Zuhilfenahme von Lagranger Multiplikatoren exakt eingefordert.

Der durch die Verwendung der Lagranger Multiplikatoren entstehende Satz Differential-Algebraischer Gleichungen (DAEs) kann zu weiteren numerischen Problemen führen. Es wird hier auf einen Übersichtsartikel zur Problematik von Sattelpunkt-Problemen von Benzi, Golub & Liesen [8] hingewiesen, in dem zum einen alle wesentlichen Aspekte zur numerischen Lösung von derartigen Problemen dargelegt sind und zum anderen eine Übersicht über die verfügbare Literatur zu dieser Thematik geboten wird. Letztlich führt diese Vorgehensweise zusammen mit den mechanischen Integratoren zu einer herausragenden Stabilität des Verfahrens. Dies wird über verschiedene numerischer Beispiele schlüssig demonstriert.

Zuletzt ist festzuhalten, dass die resultierenden DAEs als ODEs auf einer bestimmten Mannigfaltigkeit interpretiert werden können. Daraus ergibt sich wiederum die Möglichkeit zur Reduktion der DAEs zu ODEs, vgl. [8, 12, 15]. Die verschiedenen Verfahren werden aus Gründen der Vollständigkeit in dieser Arbeit vorgestellt.

### 1.3. Gliederung

Die Arbeit gliedert sich wie folgt auf: In Kapitel 2 werden die Grundlagen mechanischer Systeme und deren numerische Umsetzung erläutert. Hierbei wird in Kapitel 2.1 auf die grundlegenden Gleichungen der Dynamik eingegangen und in Kapitel 2.2 ein kurzer Abriss über die wichtigsten Begriffe der Kontinuumsmechanik festgehalten. Die numerische Umsetzung im Rahmen der Finite-Element-Methode ist aus Kapitel 2.3 ersichtlich. Das Grundlagen-Kapitel schließt mit der Herleitung mechanischer Integratoren in Kapitel 2.4.

Kapitel 3 befasst sich allgemein mit den Eigenschaften von Gleichheits- sowie von Ungleichheits-Zwangsbedingungen. Dafür werden in Kapitel 3.1 die Möglichkeiten zur Einforderung von Zwangsbedingungen und deren Auswirkungen erörtert. In

Kapitel 3.2 folgen die Bedingungen, unter denen eine algorithmische Erhaltung der fundamentalen physikalischen Eigenschaften möglich ist.

In Kapitel 4 folgen nichtkonforme Gebietszerlegungsmethoden. Die Herleitung erfolgt zunächst auf Basis der NTS-Methode in Kapitel 4.1, gefolgt von der Herleitung der Mortar-Methode sowie ein knapper Einblick in die Nitsche-Methode in Kapitel 4.2.

Im letzten theoretisch orientierten Kapitel 5 werden die Erweiterungen der gezeigten Methoden auf Kontakt-Vorgänge hergeleitet, gefolgt von den zum Einarbeiten der Zwangsbedingungen in die mechanischen Integratoren notwendigen Gruppenäquivalenten Reparametrisierungen. Dabei folgt wiederum zuerst in Kapitel 5.1 die Darstellung der NTS-Methode und in Kapitel 5.2 die Darstellung der Mortar-Methode.

In Kapitel 6 folgen eine Reihe von Beispielen zur Demonstration der vorgestellten Ansätze. Dabei werden insbesondere die Vorteile der Mortar-Methode bei Kontakt-Vorgängen am Beispiel eines Gleitlagers in Kapitel 6.1, sowie für Gebietszerlegungen in Kapitel 6.2 gezeigt. In Kapitel 6.3 werden zuletzt die Auswirkungen der Ungleichheits- Zwangsbedingungen am Beispiel eines Kollisionsvorgangs demonstriert.

Die Zusammenfassung folgt in Kapitel 7 unter Heraushebung der erzielten Ergebnisse sowie einem Ausblick auf künftige Forschungsvorhaben in diesem Gebiet. Am Schluss folgt der Anhang mit einigen ergänzenden Beispielen sowie die numerische Umsetzung der NTS- und der Mortar-Methode.

## 2. Grundlagen

### 2.1. Dynamik

#### 2.1.1. Lagrangesche Mechanik

Die geometrische Lage eines Teilchens oder einer Gruppe von Teilchen kann mit deren Koordinaten  $\mathbf{q}$  beschrieben werden. Dabei stellt der Vektor  $\mathbf{q}$  die  $n$ -dimensionalen Koordinaten des Konfigurationsraums  $\mathbb{V} = \mathbb{R}^n$  dar. Beispiel für ein Teilchen in der klassischen Mechanik ist die Lage des Massenzentrums eines idealisierten Starrkörpers. Des Weiteren kann die Position der Knoten eines Finite-Element-Netzes in dem Vektor  $\mathbf{q}$  dargestellt werden. Im Weiteren wird ein übergestellter Punkt als Ableitung nach der Zeit definiert. Es ist z.B.  $\dot{\mathbf{q}}$  als die Geschwindigkeit der Konfiguration  $\mathbf{q}$  definiert. Damit ist  $\dot{\mathbf{q}}$  im Tangentialraum von  $\mathbb{V}$  an der Stelle  $\mathbf{q}$ , also Element von  $T_{\mathbf{q}}\mathbb{V}$ .

Die Konfiguration  $\mathbf{q}$  und die Geschwindigkeit  $\dot{\mathbf{q}}$  bilden zusammen das Tangentenbündel oder auch den Geschwindigkeitsphasenraum  $T\mathbb{V} = \mathbb{V} \times T_{\mathbf{q}}\mathbb{V}$  (vgl. Marsden & Ratiu [66]). Innerhalb des Geschwindigkeitsphasenraums wird die kinetische Energie  $K : T\mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$  quadratisch in  $\dot{\mathbf{q}}$  definiert:

$$K(\dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{M} \dot{\mathbf{q}} \quad (2.1)$$

mit der nichtsingulären, blockstrukturierten Massenmatrix  $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Ferner soll eine Abbildung  $V : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$  existieren, die das Potential eines konservativen Kraftfeldes, das auf die Konfiguration wirkt, beschreibt. Die Lagrangefunktion wird mit den beiden Größen  $K$  und  $V$  definiert:

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = K - V \quad (2.2)$$

Die durch die Lagrangefunktion in dem geschlossenen Zeitintervall  $\mathcal{I} = [t_n, t_{n+1}]$  erzielte Wirkung wird mit der Funktion  $S$  beschrieben:

$$S = \int_{t_n}^{t_{n+1}} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) dt \quad (2.3)$$

Das hamiltonsche Prinzip besagt, dass ein bewegtes, mechanisches System immer dem Pfad stationärer Wirkung folgt:

$$\delta S = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[ \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \delta \mathbf{q} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \delta \dot{\mathbf{q}} \right] dt = 0 \quad (2.4)$$

Durch partielle Integration des zweiten Terms unter der Bedingung das  $\delta \mathbf{q}$  an den Ränder  $t_n$  und  $t_{n+1}$  gleich Null ist, folgt:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[ \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \right] \delta \mathbf{q} dt = 0 \quad (2.5)$$

Aufgrund der Beliebigkeit der Variation von  $\delta \mathbf{q}$  und aufgrund der einzigen Bedingung an die Integrationsgrenzen ( $t_n < t_{n+1}$ ), gilt:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = 0 \quad (2.6)$$

Dies sind die so genannten Euler-Lagrange Gleichungen. Ist die Massenmatrix  $\mathbf{M}$  konfigurationsunabhängig, reduzieren sich die Euler-Lagrange Gleichungen auf:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{q}} + \nabla V(\mathbf{q}) = \mathbf{0} \quad (2.7)$$

was dem 2. Newtonschen Axiom entspricht.

### 2.1.2. Hamiltonsche Mechanik

Der Übergang zur hamiltonschen Mechanik erfolgt durch eine Variablentransformation:

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \quad (2.8)$$

Ein wichtiges mathematisches Hilfsmittel zur Variablentransformation stellt die Legendre-Transformation dar. Soll die Abhängigkeit einer beliebigen Funktion  $f(\mathbf{x})$  durch die Variable  $\mathbf{y}$  mittels der Substitution

$$\mathbf{y} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \quad (2.9)$$

ersetzt werden, kann nachgewiesen werden, dass eine neue Funktion  $g$ :

$$g(\mathbf{y}) = \mathbf{y}\mathbf{x} - f(\mathbf{x}) \quad (2.10)$$

die Legendre-Transformierte von  $f$  ist. Für den Fall einer Lagrangefunktion gilt,

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \quad (2.11)$$

dass die Hamiltonfunktion die Legendre-Transformierte der Lagrangefunktion ist. Unter der Voraussetzung einer nichtsingulären Massenmatrix  $\mathbf{M}$  kann in Verbindung mit der Beziehung  $\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{p}$  die Hamiltonfunktion geschrieben werden als:

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2}\mathbf{p} \cdot \mathbf{M}^{-1}\mathbf{p} + V(\mathbf{q}) \quad (2.12)$$

Unter Berücksichtigung der Kettenregel und der vorgenommenen Legendre-Transformation können die Ableitungen der Hamiltonfunktion nach  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{q}$  bestimmt werden:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \end{aligned} \quad (2.13)$$

Die Gleichungen (2.13)<sub>1</sub> und (2.13)<sub>2</sub> werden als die hamiltonschen Gleichungen bezeichnet. Wird des Weiteren berücksichtigt, dass  $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = -\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}}$  gilt, zeigt sich die Äquivalenz der hamiltonschen Gleichungen zu den Euler-Lagrange Gleichungen (2.6) und dem 2. Newtonschen Axiom.

Die Legendre-Transformation wird auch als Faserableitung bezeichnet (vgl. Gross [33]). Die Beziehung  $\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{p}$  führt auf eine Abbildung des Tangentialraums  $T_{\mathbf{q}}\mathbb{V}$  auf den Ko-Tangentialraum  $T_{\mathbf{q}}^*\mathbb{V}$ . Entsprechend werden die Koordinaten  $(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$  des Tangentenbündels  $T\mathbb{V}$  auf den Phasenraum  $\mathbb{Z}$  mit den Koordinaten  $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  des Ko-Tangentenbündels  $T^*\mathbb{V}$  abgebildet. Die Hamiltonfunktion ist demzufolge eine Abbildung von  $H : T^*\mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$ . Die resultierenden hamiltonschen Gleichungen (2.13) sind gewöhnliche Differentialgleichungen (ODEs) erster Ordnung im Phasenraum  $\mathbf{z} = (\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in \mathbb{R}^{2n}$ .

Die Verwendung der Variable  $\mathbf{z}$  liefert eine kompakte Darstellung der Gleichung (2.13):

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbb{J}\nabla H(\mathbf{z}) = X_H(\mathbf{z}) \quad (2.14)$$

mit der Abbildung  $X_H : \mathbb{Z} \rightarrow T_{\mathbf{z}}\mathbb{Z}$  und der schief-symmetrischen, symplektischen Matrix  $\mathbb{J}$  mit der Blockstruktur:

$$\mathbb{J} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

Hierbei ist  $\mathbf{0}$  die  $n \times n$  Nullmatrix und  $\mathbf{I}$  die  $n \times n$  Einheitsmatrix.  $\mathbb{J}$  ist die zugehörige Matrix einer linearen Abbildung  $R : \mathbb{Z}^* \rightarrow \mathbb{Z}$ . Zur Komplettierung der Notation wird hier die zur inversen Linearform  $R^{-1} : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}^*$  assoziierte Bilinearform  $\Omega : \mathbb{Z} \times \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{R}$  eingeführt:

$$\Omega(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \mathbf{v} \cdot \mathbb{J}\mathbf{w} \quad \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^{2n} \quad (2.16)$$

Gleichung (2.14) wird mithilfe der Abbildung  $R$  vereinfacht geschrieben als:

$$\dot{\mathbf{z}} = R(\nabla H(\mathbf{z})) \quad (2.17)$$

Definition (Marsden & Ratiu [66]): *Eine symplektische Form  $\Omega$  auf einem Vektorraum  $\mathbb{Z}$  ist eine nichtausgeartete schiefssymmetrische Bilinearform auf  $\mathbb{Z}$ . Das Paar  $(\mathbb{Z}, \Omega)$  wird symplektischer Vektorraum genannt.*

Anmerkung: Die zur linearen Abbildung  $R$  assoziierte Bilinearform  $B$  wird auch Poissonform genannt. Sie ermöglicht eine kompakte Darstellung der häufig benötigten Poissonklammern  $\{D, E\}$  mit den Funktionen  $D(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  und  $E(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  (vgl. Betsch [11]):

$$\{D, E\} = \frac{\partial D}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial E}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial D}{\partial \mathbf{p}} = B(\nabla_{\mathbf{z}} D, \nabla_{\mathbf{z}} E) \quad (2.18)$$

### 2.1.3. Erhaltungseigenschaften

#### Lie-Gruppen

Aus der Menge aller Abbildungen werden bestimmte Gruppen mit definierten Eigenschaften verwendet. Diese Abbildungsgruppen  $\mathbb{G}$  werden Lie-Gruppen genannt, wenn sie der Struktur einer differenzierbaren Mannigfaltigkeit entsprechen. Dies bedeutet, dass eine duale Gruppen-Operation

$$\Psi : \mathbb{G} \times \mathbb{G} \rightarrow \mathbb{G} \quad (2.19)$$

eine glatte Abbildung in dem Sinne ist, dass an jedem Punkt  $\mathbf{g} \in \mathbb{G}$  ein definierter Tangentenraum  $T_{\mathbf{g}}\mathbb{G}$  existiert. Die Wirkung einer Gruppe  $\mathbf{g}$  auf den Konfigurationsraum  $\mathbb{Z}$  kann mit der Abbildung

$$\Phi : \mathbb{G} \times \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z} \quad (2.20)$$

beschrieben werden. Weiterhin sind die folgenden Eigenschaften von  $\Psi(\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2) \forall \mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2 \in \mathbb{G}$  gefordert (vgl. Gross [33], Gonzalez [28] und Marsden & Ratiu [66]):

1. Assoziativität:  $\Psi(\Psi(\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2), \mathbf{g}_3) = \Psi(\mathbf{g}_1, \Psi(\mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3)) \quad \forall \mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3 \in \mathbb{G}$   
Kommutativität wird nicht gefordert, da z.B. Rotationsabbildungen nicht kommutativ sind.
2. Existenz einer Identität  $\text{Id} : \mathbf{e} \in \mathbb{G}$ , d.h. für jedes  $\mathbf{g} \in \mathbb{G}$  folgt  $\mathbf{g}\mathbf{e} = \mathbf{e}\mathbf{g} = \mathbf{g}$ . In ihrer Wirkung bedeutet  $\mathbf{e}$ , dass ein Element von  $\mathbb{Z}$  auf sich selbst abgebildet wird.
3. Existenz einer Inversen  $\text{Inv}$ , d.h. für jedes  $\mathbf{g} \in \mathbb{G}$  existiert ein  $\mathbf{g}^{-1} \in \mathbb{G}$ , wobei gilt:  $\mathbf{g}^{-1}\mathbf{g} = \mathbf{e}$ . In ihrer Wirkung bedeutet die Existenz eines inversen Elements, dass jede Abbildung eineindeutig und zurückführbar ist.

Nach Gleichung 2.20 gilt daher für  $\Phi_{\mathbf{g}} : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z} \quad \forall \mathbf{g} \in \mathbb{G}$ , dass die inverse Abbildung mit  $\Phi_{\mathbf{g}}^{-1} = \Phi_{\mathbf{g}^{-1}}$  folgt. Zwei Beispiele für derartige Lie-Gruppen werden näher vorgestellt, da sie insbesondere für die Impuls- und die Drehimpulseigenschaften relevant sind:

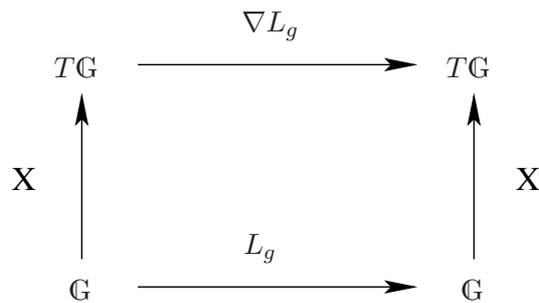


Abbildung 2.1.: Kommutatives Diagramm für ein linksinvariantes Vektorfeld

1. Vektoraddition:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2) &= \mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 \quad \mathbf{g} \in \mathbb{R}^n \\ \text{Id} : \mathbf{e} &= \mathbf{0} \\ \text{Inv} : \mathbf{g}^{-1} &= -\mathbf{g} \end{aligned} \tag{2.21}$$

2. Matrixmultiplikation

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2) &= \mathbf{g}_1 \mathbf{g}_2 \quad \mathbf{g} \in \mathbb{R}^{n \times n} \\ \text{Id} : \mathbf{e} &= \mathbf{I} \\ \text{Inv} : \mathbf{g}^{-1} &= \text{inv}(\mathbf{g}) \end{aligned} \tag{2.22}$$

Die geforderte Existenz einer inversen Abbildung schränkt die Menge aller linearen Abbildungsgruppen auf die generelle lineare Gruppe GL ein:

$$\text{GL}(n_{dim}, \mathbb{R}) = \{\mathbf{g} \in \mathbb{R}^{n \times n} \mid \det(\mathbf{g}) \neq 0\} \tag{2.23}$$

Ist eine Gruppenoperation  $\Psi \ni L_g(\mathbf{x}) : \mathbb{G} \rightarrow \mathbb{G}$  als linkseitige Matrixmultiplikation

$$L_g(\mathbf{x}) = \mathbf{g}\mathbf{x} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{G} \tag{2.24}$$

definiert, wird diese Linkstranslation genannt. Entsprechend wird  $R_g(\mathbf{x}) = \mathbf{x}\mathbf{g}$  als Rechtstranslation bezeichnet. Der Unterschied zwischen beiden Operationen ergibt sich aus der Nichtkommutativität von Matrixmultiplikationen. Die Ableitung der Linkstranslation ist eine Linearabbildung

$$\nabla L_g(\mathbf{x}) : T_x \mathbb{G} \rightarrow T_{\mathbf{g}\mathbf{x}} \mathbb{G} \tag{2.25}$$

der Tangentialräume. Zuletzt kann - basierend auf den Operationen 2.24 und 2.25 - ein linksinvariantes Vektorfeld  $X : \mathbb{G} \rightarrow T_h \mathbb{G}$  definiert werden. Linksinvariant ist ein Vektorfeld, das der Bedingung

$$\nabla L_g(\mathbf{h})X(\mathbf{h}) = X(\mathbf{g}\mathbf{h}) \quad \forall \mathbf{h} \in \mathbb{G} \tag{2.26}$$

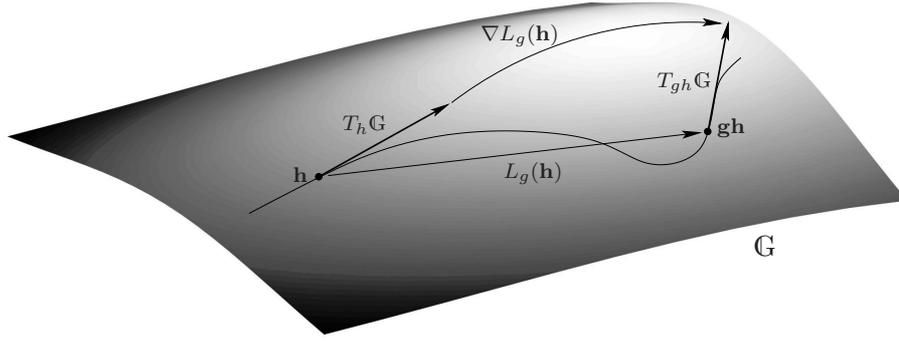


Abbildung 2.2.: Linksinvariantes Vektorfeld

genügt (vgl. Marsden & Ratiu [66]). Das kommutative Diagramm in Abbildung 2.1 zeigt die Abbildungen des linksinvarianten Vektorfeldes, dargestellt in Abbildung 2.2. Innerhalb der generellen linearen Gruppe  $\mathbb{G}\mathbb{L}$  kann eine Kurve  $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{G}$  als die Untergruppe  $\varphi(\epsilon)$  mit folgenden Restriktionen definiert werden:

$$\begin{aligned} \varphi(\epsilon) &: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{G} \\ \varphi(0) &: \mathbf{e} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Des Weiteren wird gefordert:

$$\varphi(\epsilon_1 + \epsilon_2) = \varphi(\epsilon_1)\varphi(\epsilon_2) = \Psi(\varphi(\epsilon_1), \varphi(\epsilon_2)) \quad \forall \epsilon_1, \epsilon_2 \in \mathbb{R}$$

Zu jeder dieser Ein-Parameter Gruppen  $\varphi(\epsilon)$  kann ein tangentialer Vektor  $\xi$  an der Identität assoziiert werden:

$$\xi = \left. \frac{d\varphi(\epsilon)}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} \in T_{\mathbf{e}}\mathbb{G} \quad (2.28)$$

bzw.  $\xi = X(\mathbf{e})$ . Um die allgemeine Ableitung  $\frac{d\varphi(\epsilon)}{d\epsilon} = X(\varphi(\epsilon))$  zu erhalten, lenken wir  $\epsilon$  um  $\eta$  aus:

$$\varphi(\epsilon + \eta) = \Psi(\varphi(\epsilon), \varphi(\eta)) = L_{\varphi(\epsilon)}(\varphi(\eta)) \quad (2.29)$$

und leiten nach der Kettenregel an der Stelle  $\eta = 0$  ab:

$$\frac{d\varphi(\epsilon)}{d\epsilon} = \nabla_{\varphi(\eta)} L_{\varphi(\epsilon)}(\varphi(\eta)) \left. \frac{d\varphi(\eta)}{d\eta} \right|_{\eta=0} = \nabla L_{\varphi(\epsilon)}(\mathbf{e})\xi = \varphi(\epsilon)\xi \quad (2.30)$$

Zusammen mit der Anfangsbedingung aus Gleichung (2.27)<sub>2</sub> existiert eine analytische Lösung für die gewöhnliche Differentialgleichung:  $\varphi(\epsilon) = \exp(\epsilon\xi)$  mit den Bedingungen für die Exponential-Abbildung:

$$\exp_G : T_{\mathbf{e}}\mathbb{G} \rightarrow \mathbb{G} \quad \text{mit} \quad \exp_G(\xi) = \varphi_\xi(1) \quad (2.31)$$

Ein Beispiel dafür ist eine Untergruppe von  $\mathbb{GL}(n_{\text{dim}}, \mathbb{R})$  im  $n$ -dimensionalen Raum  $n_{\text{dim}}$ : die *special orthogonal group*  $SO(n_{\text{dim}})$ :

$$SO(n_{\text{dim}}) = \{\mathbf{g} \in \mathbb{GL}(n_{\text{dim}}, \mathbb{R}) \mid \det(\mathbf{g}) = 1 \text{ und } \mathbf{g}^{-1} = \mathbf{g}^T\} \quad (2.32)$$

deren geschlossene Darstellung durch die Euler-Rodrigues-Formel gegeben ist. Die bisherigen Entwicklungen sind nicht auf Matrix-Gruppen im Rahmen von generellen linearen Abbildungen beschränkt, sondern können auf generelle Lie-Gruppen angewandt werden.

Die Wirkung von  $\varphi_{\xi}(\epsilon)$  beschreibt einen Fluss in  $\mathbb{Z}$ :  $\Phi(\varphi_{\xi}(\epsilon), \mathbf{z})$  der von  $\xi$  erzeugt wird. Das assoziierte Geschwindigkeitsfeld wird mit dem zu  $\xi$  assoziierten infinitesimalen Erzeuger bestimmt:

$$\xi_{\mathbb{Z}}(\mathbf{z}) = \left. \frac{d\Phi(\varphi_{\xi}(\epsilon), \mathbf{z})}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} \quad (2.33)$$

Die Wirkung beeinflusst dabei den gesamten Phasenraum  $\mathbb{Z}$  (vgl. Gonzalez [28]).

## Noether-Theorem

Das Noether-Theorem besagt, dass zu jeder kontinuierlichen Symmetrie eines mechanischen Systems eine Erhaltungsgröße existiert und umgekehrt. Kontinuierliche Symmetrie bedeutet, dass sich das hamiltonsche Prinzip unter Einwirkung einer Abbildung aus der Menge der Lie-Gruppen nicht verändert:  $S(\mathbf{z}) = S(\Phi_{\mathbf{g}}^{\epsilon}(\mathbf{z})) = S(\Phi_{\mathbf{g}}^{\epsilon, \text{kon}}(\mathbf{q}), \Phi_{\mathbf{g}}^{\epsilon, \text{imp}}(\mathbf{p}))$  mit  $\Phi_{\mathbf{g}}^{\epsilon}(\mathbf{z}) = \Phi_{\mathbf{g}}(\varphi_{\xi}(\epsilon), \mathbf{z})$ . Das heißt, das hamiltonsche Prinzip gilt auch nach der Abbildung:

$$S = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[ \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \right] dt \rightarrow \min \quad (2.34)$$

$$\Rightarrow S_{\epsilon} = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[ \Phi_{\mathbf{g}}^{\epsilon, \text{imp}}(\mathbf{p}) \frac{d}{dt} \Phi_{\mathbf{g}}^{\epsilon, \text{kon}}(\mathbf{q}) - H(\Phi_{\mathbf{g}}^{\epsilon, \text{kon}}(\mathbf{q}), \Phi_{\mathbf{g}}^{\epsilon, \text{imp}}(\mathbf{p})) \right] dt \rightarrow \min \quad (2.35)$$

Da  $\Phi_{\mathbf{g}}^{\epsilon}(\mathbf{z}) = \mathbf{z}$  für  $\epsilon = 0$  gilt (vgl. 2.27) und  $S_{\epsilon}$  nur noch eine Funktion von  $\epsilon$  ist, folgt für das Minimum von  $S_{\epsilon}$ :

$$\left. \frac{dS_{\epsilon}}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = 0 \quad (2.36)$$

Aufgrund der Kettenregel folgt für die Ableitung nach  $\epsilon$ :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[ \frac{d\Phi_g^{\epsilon, \text{imp}}(\mathbf{p})}{d\epsilon} \frac{d}{dt} \Phi_g^{\epsilon, \text{kon}}(\mathbf{q}) + \Phi_g^{\epsilon, \text{imp}}(\mathbf{p}) \frac{d}{dt} \frac{d\Phi_g^{\epsilon, \text{kon}}(\mathbf{q})}{d\epsilon} - \frac{\partial H}{\partial \Phi_g^{\epsilon, \text{kon}}(\mathbf{q})} \frac{d\Phi_g^{\epsilon, \text{kon}}(\mathbf{q})}{d\epsilon} - \frac{\partial H}{\partial \Phi_g^{\epsilon, \text{imp}}(\mathbf{p})} \frac{d\Phi_g^{\epsilon, \text{imp}}(\mathbf{p})}{d\epsilon} \right] dt \quad (2.37)$$

und der teilweisen Auswertung an der Stelle  $\epsilon = 0$  sowie dem Einsetzen von Gleichung (2.13):

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[ \frac{d\Phi_g^{\epsilon, \text{imp}}(\mathbf{p})}{d\epsilon} \dot{\mathbf{q}} + \mathbf{p} \frac{d}{dt} \frac{d\Phi_g^{\epsilon, \text{kon}}(\mathbf{q})}{d\epsilon} + \frac{d}{dt} \mathbf{p} \frac{d\Phi_g^{\epsilon, \text{kon}}(\mathbf{q})}{d\epsilon} - \dot{\mathbf{q}} \frac{d\Phi_g^{\epsilon, \text{imp}}(\mathbf{p})}{d\epsilon} \right] dt \quad (2.38)$$

Die Produktregel der Differentiation liefert:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[ \frac{d}{dt} \left( \mathbf{p} \frac{d\Phi_g^{\epsilon, \text{kon}}(\mathbf{q})}{d\epsilon} \right) \right] dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{dJ_\epsilon}{dt} dt \quad (2.39)$$

Unter Berücksichtigung von Gleichung (2.33) wird die Erhaltungsgröße  $J(\mathbf{q}, \mathbf{p}) : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{R}$  definiert als:

$$J(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = (\mathbf{p}, \mathbf{0}) \cdot \boldsymbol{\xi}_{\mathbb{Z}}(\mathbf{z}) \quad (2.40)$$

unter Verwendung des infinitesimalen Erzeugers  $\boldsymbol{\xi}_{\mathbb{Z}}(\mathbf{z}) : \mathbb{Z} \rightarrow T_{\mathbb{Z}}\mathbb{Z}$  (vgl. Gleichung (2.14)), der assoziierten Wirkung von  $\boldsymbol{\xi} \in T_e\mathbb{G}$ . Bewirkt die Abbildung  $\Phi_g : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}$  eine Wirkung von  $\mathbf{g} \in \mathbb{G}$  auf den symplektischen Vektorraum  $(\mathbb{Z}, \Omega)$ , so gilt für den infinitesimalen Erzeuger:

$$\boldsymbol{\xi}_{\mathbb{Z}}(\mathbf{z}) = \mathbb{J} \nabla J_\xi(\mathbf{z}) = R(\nabla J_\xi(\mathbf{z})) \quad (2.41)$$

Unter dieser Voraussetzung existiert ein Integral  $J_\xi = \mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\xi} \quad \forall \boldsymbol{\xi} \in T_e\mathbb{G}$  mit der Impulsabbildung  $\mathbf{J} : \mathbb{Z} \rightarrow T_e^*\mathbb{G}$ . Ist nun die Hamilton-Funktion  $H : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{R}$  invariant gegenüber einer Lie-Gruppen Abbildung, d.h.

$$H(\Phi_g(\mathbf{z})) = H(\mathbf{z}) \quad \forall \mathbf{z} \in \mathbb{Z}, \mathbf{g} \in \mathbb{G} \quad (2.42)$$

so ist die Impulsabbildung  $\mathbf{J}$  eine Erhaltungsgröße. Aus Gleichung (2.42) folgt:

$$0 = \frac{d}{d\epsilon} H(\Phi(\varphi_\xi(\epsilon), \mathbf{z}))|_{\epsilon=0} = \nabla H(\mathbf{z}) \cdot \boldsymbol{\xi}_{\mathbb{Z}}(\mathbf{z}) \quad (2.43)$$

und zusammen mit Gleichung (2.41), vgl. auch Betsch & Hesch [14]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} J_\xi(\mathbf{z}) &= \nabla J_\xi(\mathbf{z}) \cdot \dot{\mathbf{z}} \\ &= \nabla J_\xi(\mathbf{z}) \cdot \mathbb{J} \nabla H(\mathbf{z}) \\ &= \boldsymbol{\xi}_{\mathbb{Z}}(\mathbf{z}) \cdot \mathbb{J}^2 \nabla H(\mathbf{z}) \\ &= -\boldsymbol{\xi}_{\mathbb{Z}}(\mathbf{z}) \cdot \nabla H(\mathbf{z}) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.44)$$

Daraus ergibt sich, dass  $J_\xi(\mathbf{z})$  für jedes beliebige Liealgebraelement  $\xi$  eine Erhaltungsgröße ist. Aufgrund der Definition des infinitesimalen Erzeugers bedeutet dies, dass die Werte der assoziierten Impulsabbildung  $\mathbf{J}$  ebenfalls erhalten bleiben.

**Beispiel 1: Impulserhaltung** Nach dem Noether-Theorem soll als erste Symmetriegruppe eine Translation betrachtet werden. Eine zur Translation äquivalente Lie-Gruppe ist eine Gruppe  $\mathfrak{g} \in \mathbb{R}^n$  nach Gleichung (2.21):

$$\begin{aligned}\varphi_\xi(\epsilon) &= \epsilon\xi \\ \Phi(\varphi_\xi(\epsilon), \mathbf{z}) &= (\mathbf{q} + \epsilon\xi, \mathbf{p}) \\ \xi_{\mathbf{z}}(\mathbf{z}) &= (\xi, \mathbf{0})\end{aligned}\quad (2.45)$$

Nach Gleichung (2.41) folgt:

$$R^{-1}(\xi_{\mathbf{z}}(\mathbf{z})) = (\mathbf{0}, \xi) = \nabla_{\mathbf{z}} J_\xi(\mathbf{z}) \quad (2.46)$$

Das Integral kann bis auf eine Konstante für materielle Punkte  $\mathbf{q}^A \in n_{\text{dim}}$ ,  $A = 1, 2, \dots, n_{\text{node}}$  bestimmt werden:

$$J_\xi(\mathbf{z}) = \mathbf{p} \cdot \xi = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{p}^A \cdot \xi^A \quad (2.47)$$

mit  $\mathbf{p}^A, \xi^A \in n_{\text{dim}}$ . Gleichung (2.40) führt auf dasselbe Ergebnis:  $J_\xi(\mathbf{z}) = (\mathbf{p}, \mathbf{0}) \cdot (\xi, \mathbf{0}) = \mathbf{p} \cdot \xi$ . Damit kann die zur Translation zugehörige Impulsabbildung

$$\mathbf{J}(\mathbf{z}) = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{p}^A \quad (2.48)$$

als der Gesamtimpuls indentifiziert werden.

**Beispiel 2: Drehimpulserhaltung** Als zweite Symmetrie-Gruppe soll eine Rotation des Systems betrachtet werden. Die zur Rotation äquivalente Lie-Gruppe ist eine Gruppe  $\mathfrak{g} \in SO(n_{\text{dim}})$ . Unter Berücksichtigung von Gleichung (2.22) folgt für die Lie-Gruppe:

$$\begin{aligned}\varphi_\xi(\epsilon) &= \exp(\epsilon\hat{\xi}) \\ \Phi(\varphi_\xi(\epsilon), \mathbf{z}) &= (\exp(\epsilon\hat{\xi}) \circ \mathbf{z}) \\ \xi_{\mathbf{z}}(\mathbf{z}) &= (\hat{\xi} \circ \mathbf{q}, \hat{\xi} \circ \mathbf{p})\end{aligned}\quad (2.49)$$

und nach Gleichung (2.41):

$$R^{-1}(\xi_{\mathbf{z}}(\mathbf{z})) = (-\hat{\xi} \circ \mathbf{p}, \hat{\xi} \circ \mathbf{q}) = \nabla_{\mathbf{z}} J_\xi(\mathbf{z}) \quad (2.50)$$

Dabei ist  $\hat{\xi} \in \mathfrak{so}(n_{\text{dim}})$  eine schief-symmetrische Matrix; eine geschlossene Darstellung des Ausdrucks  $\exp(\epsilon\hat{\xi})$  ist durch die Rodrigues-Formel (vgl. Marsden &

Ratiu [66]) gegeben. Diese Gruppe wirkt auf jedes Element von  $\mathbf{q}_A, \mathbf{p}_A \in n_{\text{dim}}$ , d.h.

$$\exp(\epsilon \hat{\boldsymbol{\xi}}) \circ \mathbf{z} = \left( \exp(\epsilon \hat{\boldsymbol{\xi}}) \mathbf{q}_1, \dots, \exp(\epsilon \hat{\boldsymbol{\xi}}) \mathbf{q}_{n_{\text{node}}}, \exp(\epsilon \hat{\boldsymbol{\xi}}) \mathbf{p}_1, \dots, \exp(\epsilon \hat{\boldsymbol{\xi}}) \mathbf{p}_{n_{\text{node}}} \right) \quad (2.51)$$

Zur Bestimmung des Integrals  $J_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{z}) = \mathbf{J}(\mathbf{z}) \cdot \boldsymbol{\xi}$  wird  $\boldsymbol{\xi}$ , der axiale Vektor von  $\hat{\boldsymbol{\xi}}$ , d.h.  $\hat{\boldsymbol{\xi}} \mathbf{a} = \boldsymbol{\xi} \times \mathbf{a} \quad \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^{n_{\text{dim}}}$ , benötigt. Das System führt dabei eine Rotation um den Pseudorotationsvektor  $\boldsymbol{\xi}$  mit dem Winkel  $\epsilon \|\boldsymbol{\xi}\|$  aus. Die Integration von Gleichung (2.50) ergibt:

$$J_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{z}) = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} (\hat{\boldsymbol{\xi}} \mathbf{q}_A) \cdot \mathbf{p}_A = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} (\boldsymbol{\xi} \times \mathbf{q}_A) \cdot \mathbf{p}_A = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} (\mathbf{q}_A \times \mathbf{p}_A) \cdot \boldsymbol{\xi} \quad (2.52)$$

Als Impulsabbildung erhalten wir:

$$\mathbf{J}(\mathbf{z}) = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} (\mathbf{q}_A \times \mathbf{p}_A) \quad (2.53)$$

dies entspricht der üblichen Gleichung für den Drehimpuls.

**Beispiel 3: Energieerhaltung** Das Noether-Theorem lässt als Symmetrie-Gruppe auch eine Abbildung in der Zeit zu. Für die Abbildungsgruppe gilt:

$$\begin{aligned} \varphi_{\boldsymbol{\xi}}(\epsilon) &= t + \epsilon \\ \Phi(\varphi_{\boldsymbol{\xi}}(\epsilon), \mathbf{z}(t)) &= \mathbf{z}(t + \epsilon) \\ \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{z}}(\mathbf{z}(t)) &= \dot{\mathbf{z}} \end{aligned} \quad (2.54)$$

Wiederrum folgt nach Gleichung (2.41):

$$R^{-1}(\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{z}}(\mathbf{z})) = (-\dot{\mathbf{p}}, \dot{\mathbf{q}}) = \nabla_{\mathbf{z}} J_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{z}) \quad (2.55)$$

Ein Vergleich mit den Gleichungen (2.14) und (2.17) identifiziert als Erhaltungsgröße  $J_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{z})$  die Hamilton-Funktion  $H(\mathbf{z})$ , die die totale Energie des Systems repräsentiert.

## 2.2. Kontinuumsmechanik

Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass deformierbare Körper ein inneres Potential  $V_{\text{int}}$  besitzen. Andere Modelle sind möglich (vgl. z.B. Simo & Hughes [87]) und können unabhängig von den Kontaktalgorithmen Verwendung finden. Wir beginnen die Herleitung des inneren Potentials mit einem Überblick über die Kinematik, gefolgt von den Bilanzgleichungen. Ausführliche Darstellungen finden sich u.a. in Marsden & Hughes [65], Wriggers [105], Ogden [73], Holzapfel [46] und etlichen anderen Werken, die sich mit dieser Thematik intensiv auseinandersetzen.

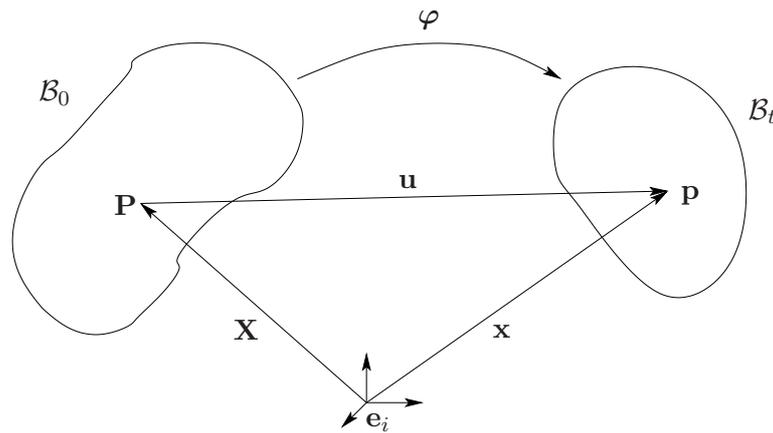


Abbildung 2.3.: Materielle Kinematik

### 2.2.1. Kinematik

Die Kinematik ist die Lehre von der Bewegung von Körpern im Raum, ohne die Ursachen der Bewegung zu betrachten. Die Position eines physikalischen Partikels in der räumlichen Konfiguration  $\mathcal{B}_t$  soll mit dem Ortsvektor  $\mathbf{x}$  beschrieben werden. Die Deformationsabbildung  $\varphi$  beschreibt die räumliche Position  $\mathbf{x}$  in Abhängigkeit des materiellen Punktes  $\mathbf{X}$ , der sich in der materiellen Konfiguration  $\mathcal{B}_0$  befindet, und der Zeit  $t$  (vgl. Abb. 2.3).

$$\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X}, t) \quad \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathcal{B}_t \quad (2.56)$$

Diese lagrangesche Betrachtungsweise beschreibt das Verhalten eines materiellen Punktes  $\mathbf{X}$ , wie es in der Festkörpermechanik üblich ist. Die Beschreibung eines räumlichen Punktes  $\mathbf{x}$  über die räumliche Deformationsabbildung  $\Phi$ :

$$\mathbf{X} = \Phi(\mathbf{x}, t) \quad \mathcal{B}_t \rightarrow \mathcal{B}_0 \quad (2.57)$$

ist die sog. Eulersche Betrachtungsweise, wie es in der Fluidodynamik üblich ist. Der materielle Deformationsgradient  $\mathbf{F}$  bildet den materiellen Tangentenraum  $T_{\mathbf{X}}\mathcal{B}_0$  auf den räumlichen Tangentenraum  $T_{\mathbf{x}}\mathcal{B}_t$  ab:

$$\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{X}}\varphi(\mathbf{X}, t) \quad T_{\mathbf{X}}\mathcal{B}_0 \rightarrow T_{\mathbf{x}}\mathcal{B}_t \quad (2.58)$$

Die zugehörige Jacobi-Determinante ist definiert als:  $J = \det(\mathbf{F})$ . Im Ausgangszustand ist  $\mathbf{F} = \mathbf{I}$ ,  $J = 1$ , so dass bei einer kontinuierlichen Deformation  $J > 0$  gelten muss. Eine polare Zerlegung des Deformationstensors liefert:

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R} \quad \mathbf{U}, \mathbf{V} \in \mathbb{L}_+^{\text{sym}}, \quad \mathbf{R} \in \mathbb{O}_+ \quad (2.59)$$

mit dem rechten Strecktensor  $\mathbf{U}$ , bzw. dem linken Strecktensor  $\mathbf{V}$ , die Elemente der Menge positiv definiten, symmetrischer Tensoren  $\mathbb{L}_+^{\text{sym}}$  sind und dem Rotationstensor  $\mathbf{R}$ , Element der positiv definiten, orthogonalen Menge  $\mathbb{O}_+$ .

**Abbildung von Linienelementen** Für ein infinitesimales Linienelement folgt:

$$d\mathbf{x} = \frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{X}}d\mathbf{X} = \mathbf{F}d\mathbf{X} \quad (2.60)$$

Damit berechnet sich der Betrag eines räumlichen Linienelementes zu:

$$\|d\mathbf{x}\|^2 = (\mathbf{F}d\mathbf{X}) \cdot (\mathbf{F}d\mathbf{X}) = d\mathbf{X} \cdot \mathbf{F}^T \mathbf{F} d\mathbf{X} = d\mathbf{X} \cdot \mathbf{C} d\mathbf{X} \quad (2.61)$$

mit dem rechten Cauchy-Green-Tensor  $\mathbf{C} = \mathbf{U}^2$ . Für die Änderung der quadratischen Beträge eines Linienelementes folgt:

$$\|d\mathbf{x}\|^2 - \|d\mathbf{X}\|^2 = d\mathbf{X} \cdot \mathbf{C} d\mathbf{X} - d\mathbf{X} \cdot \mathbf{I} d\mathbf{X} = d\mathbf{X} \cdot [\mathbf{C} - \mathbf{I}] d\mathbf{X} \quad (2.62)$$

Die Änderung der quadratischen Beträge kann als materielles Verzerrungsmaß verwendet werden:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}[\mathbf{C} - \mathbf{I}] = \frac{1}{2}[\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}}^T \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}}^T \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}] \quad (2.63)$$

Dies ist der sog. Green-Lagrange-Verzerrungstensor  $\mathbf{E}$ . Der Vorfaktor von  $\frac{1}{2}$  wird eingeführt, um im Grenzfall einen konsistenten Übergang zur geometrisch linearen Theorie ( $\epsilon = \frac{1}{2}[\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}}^T \mathbf{u}]$ ) zu erhalten. Zu bemerken gilt, dass der Cauchy-Green-Tensor  $\mathbf{C}$  invariant gegenüber Translationsgruppen entsprechend Gleichung (2.45) als auch gegenüber Rotationsgruppen entsprechend Gleichung (2.49) ist:

$$\mathbf{C}^* = \frac{d(\mathbf{x} + \epsilon \boldsymbol{\xi})}{d\mathbf{X}} \cdot \frac{d(\mathbf{x} + \epsilon \boldsymbol{\xi})}{d\mathbf{X}} = \frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{X}} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{X}} = \mathbf{C} \quad (2.64)$$

Die Translationsinvarianz des Cauchy-Green-Tensors folgt aus der Translationsinvarianz des Deformationstensors. Für die Rotationsinvarianz folgt mithilfe der Rotationsmatrix  $\mathbf{Q} = \exp(\epsilon \boldsymbol{\xi}) \in SO(n_{\text{dim}})$ :

$$\mathbf{C}^* = \frac{d\mathbf{Q}\mathbf{x}}{d\mathbf{X}} \cdot \frac{d\mathbf{Q}\mathbf{x}}{d\mathbf{X}} = \frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{X}} \cdot \mathbf{Q}^T \mathbf{Q} \frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{X}} = \frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{X}} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{X}} = \mathbf{C} \quad (2.65)$$

**Abbildung von Flächen- und Volumenelementen** Für die Transformation von Größen zwischen der materiellen Konfiguration  $\{\bullet\}_0$  und der räumlichen Konfiguration  $\{\bullet\}_t$  soll zwischen skalarwertigen und vektor-/tensorwertigen Größen unterschieden werden. Die Integration einer skalarwertigen Größe weist folgenden Zusammenhang auf (vgl. Kuhl [56]):

$$\int_{\mathcal{B}_0} \{\bullet\}_0 dV = \int_{\mathcal{B}_t} \{\bullet\}_t dv = \int_{\mathcal{B}_t} \frac{1}{J} \{\bullet\}_0 dv \quad (2.66)$$

Daraus kann die Transformation eines infinitesimalen Volumenelementes  $\mathcal{B}_0 \ni dV \rightarrow dv \in \mathcal{B}_t$  hergeleitet werden:

$$dv = JdV \quad (2.67)$$

Alternativ erfolgt die Herleitung über die Definition des Spat-Produktes:

$$\begin{aligned} dv &= |[\mathbf{dx}_1, \mathbf{dx}_2, \mathbf{dx}_3]| \\ &= |[\mathbf{F}d\mathbf{X}_1, \mathbf{F}d\mathbf{X}_2, \mathbf{F}d\mathbf{X}_3]| \\ &= |\det(\mathbf{F})[d\mathbf{X}_1, d\mathbf{X}_2, d\mathbf{X}_3]| = JdV \end{aligned} \quad (2.68)$$

Für vektor-/tensorwertige Größen wird die Piola-Transformation angewandt:

$$\int_{\mathcal{B}_0} \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \{\bullet\}_0 dV = \int_{\mathcal{B}_t} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \{\bullet\}_t dv = \int_{\mathcal{B}_t} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \frac{1}{J} \{\bullet\}_0 \mathbf{F}^T dv \quad (2.69)$$

Mithilfe des Gaußschen Divergenztheorems folgt:

$$\int_{\partial\mathcal{B}_0} \{\bullet\}_0 d\mathbf{A} = \int_{\partial\mathcal{B}_t} \{\bullet\}_t d\mathbf{a} = \int_{\partial\mathcal{B}_t} \frac{1}{J} \{\bullet\}_0 \mathbf{F}^T d\mathbf{a} \quad (2.70)$$

womit sich die bekannte Nansonsche Formel zur Flächentransformation ergibt:

$$d\mathbf{a} = J\mathbf{F}^{-T} d\mathbf{A} = \text{cof}(\mathbf{F})d\mathbf{A} \quad (2.71)$$

Der Nachweis der Piola-Transformation erfolgt über die Piola-Identität:

$$\nabla_{\mathbf{X}} \cdot (\text{cof}(\mathbf{F})) = \mathbf{0} \quad (2.72)$$

Zusammen mit Gleichung (2.69) resultiert:

$$\nabla_{\mathbf{X}} \cdot \{\bullet\}_0 = \nabla_{\mathbf{X}} \cdot [\{\bullet\}_t \text{cof}(\mathbf{F})] = \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \{\bullet\}_t J\mathbf{F}^{-T} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \{\bullet\}_t J \quad (2.73)$$

**Zeitableitungen** Für ein materielles Feld  $\varphi(\mathbf{X}, t)$  ist die materielle Zeitableitung auf die räumlichen Geschwindigkeits- und Beschleunigungsfelder  $\mathbf{v}$  und  $\mathbf{a}$  definiert als:

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}, t) = \frac{D\varphi}{Dt} = \frac{\partial\varphi}{\partial t} \Big|_{\mathbf{X}} \quad (2.74)$$

$$\mathbf{a}(\mathbf{X}, t) = \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} \Big|_{\mathbf{X}} = \frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} \Big|_{\mathbf{X}} \quad (2.75)$$

Wird eine Euler-Parametrisierung verwendet, folgt für die Beschleunigung:

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{Y}\mathbf{v}_t \quad (2.76)$$

mit dem räumlichen Geschwindigkeitsgradienten  $\mathbf{Y} = \nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{v}$ . Für die Rate des Deformationsgradienten gilt:

$$\frac{D\mathbf{F}}{Dt} = \frac{\partial^2\varphi}{\partial\mathbf{X}\partial t} \Big|_{\mathbf{X}} = \frac{\partial^2\varphi}{\partial\mathbf{x}\partial t} \cdot \frac{\partial\mathbf{x}}{\partial t} = \mathbf{Y}\mathbf{F} \quad (2.77)$$

Die Verzerrungsrate des Green-Lagrange-Tensors ergibt sich mit

$$\begin{aligned}\frac{D\mathbf{E}}{Dt} &= \frac{1}{2} \left[ \frac{D\mathbf{F}^T}{Dt} \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \frac{D\mathbf{F}}{Dt} \right] \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{F}^T [\mathbf{Y}^T + \mathbf{Y}] \mathbf{F} = \mathbf{F}^T \mathbf{D} \mathbf{F}\end{aligned}\quad (2.78)$$

mit  $\mathbf{D} = \frac{1}{2}[\mathbf{Y}^T + \mathbf{Y}]$ , dem symmetrischen Anteil von  $\mathbf{Y}$ .

### 2.2.2. Bilanzgleichungen

Nachdem in Abschnitt 2.2.1 die möglichen Bewegungen eines Körper beschrieben wurden, werden nun deren mögliche Ursachen dargestellt. In der klassischen Mechanik beruhen die Ursachen auf der Erfüllung von Bilanzgleichungen:

- Massenbilanz
- Impuls-/Drehimpulsbilanz
- Energiebilanz

Diese Bilanzaussagen müssen zu jedem Zeitpunkt sowie für jeden beliebigen Teilkörper eines Kontinuums gültig sein. Allgemeine Bilanzierungsregeln für Felder werden durch Anwendung des Reynoldsschen Transporttheorems hergeleitet (vgl. Kuhl [56]). Für die lokale, räumliche Form gilt:

$$\frac{1}{J} \frac{D}{Dt} \{\bullet\}_0 = \frac{d}{dt} \{\bullet\}_t + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\{\bullet\}_t \otimes \mathbf{v}) \quad (2.79)$$

mit dem Tensorprodukt  $\otimes$ . Im Spezialfall eines Tensorproduktes  $\mathbf{W}$  zweier Vektoren  $\{\hat{\bullet}\}$  und  $\{\bar{\bullet}\}$  wird das Tensorprodukt definiert als:

$$\mathbf{W} = \{\hat{\bullet}\} \otimes \{\bar{\bullet}\} = W_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (2.80)$$

mit den Basisvektoren  $\mathbf{e}_i$  und  $\mathbf{e}_j$ . Für die lokale, materielle Form des Transporttheorems gilt:

$$J \frac{d}{dt} \{\bullet\}_t = \frac{D}{Dt} \{\bullet\}_0 + \nabla_{\mathbf{X}} \cdot (\{\bullet\}_0 \otimes \mathbf{v}) \quad (2.81)$$

mit der materiellen Ableitung  $\frac{D}{Dt}$ , definiert als:

$$\frac{D}{Dt} = \left. \frac{\partial \{\bullet\}}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}} \quad (2.82)$$

und der räumlichen Ableitung  $\frac{d}{dt}$ , definiert als:

$$\frac{d}{dt} = \left. \frac{\partial \{\bullet\}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} \quad (2.83)$$

Integration von Gleichung (2.79) über das räumliche Gebiet ergibt:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{B}_t} \{\bullet\}_t dv = \int_{\mathcal{B}_t} \frac{d}{dt} \{\bullet\}_t dv + \int_{\mathcal{B}_t} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\{\bullet\}_t \otimes \mathbf{v}) dv \quad (2.84)$$

Entsprechend liefert die Integration von Gleichung (2.81) über das materielle Gebiet:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}_0} \{\bullet\}_0 dV = \int_{\mathcal{B}_0} \frac{D}{Dt} \{\bullet\}_0 dV + \int_{\mathcal{B}_0} \nabla_{\mathbf{X}} \cdot (\{\bullet\}_0 \otimes \mathbf{v}) dV \quad (2.85)$$

Nach Anwendung des Divergenztheorems auf Gleichung (2.84) folgt:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{B}_t} \{\bullet\}_t dv = \int_{\mathcal{B}_t} \frac{d}{dt} \{\bullet\}_t dv + \int_{\partial \mathcal{B}_t} (\{\bullet\}_t \otimes \mathbf{v}) \mathbf{n} da \quad (2.86)$$

respektiv nach Anwendung auf Gleichung (2.85):

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}_0} \{\bullet\}_0 dV = \int_{\mathcal{B}_0} \frac{D}{Dt} \{\bullet\}_0 dV + \int_{\partial \mathcal{B}_0} (\{\bullet\}_0 \otimes \mathbf{v}) \mathbf{N} dA \quad (2.87)$$

Die Veränderung einer Größe  $f = f(\mathbf{x}, t)$  (z.B. Massendichte, Energiedichte, aber auch Impuls und Drehimpuls) kann nun durch ein allgemeines Bilanzierungs-Prinzip (vgl. Holzapfel [46]) ausgedrückt werden

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{B}_t} f(\mathbf{x}, t) dv = \int_{\mathcal{B}_t} \Sigma(\mathbf{x}, t) dv + \int_{\partial \mathcal{B}_t} \Phi(\mathbf{x}, t, \mathbf{n}) dv \quad (2.88)$$

Der erste Term auf der rechten Seite  $\Sigma(\mathbf{x}, t)$  stellt dabei eine Produktionsdichte im Gebiet dar. Der zweite Term  $\Phi(\mathbf{x}, t, \mathbf{n})$  besitzt die Charakteristik einer durch die Normale gerichteten Flußdichte auf der Oberfläche.

**Massenbilanz** In einem geschlossenen System kann sich das Volumen ändern, wogegen die Gesamtmasse eine Erhaltungsgröße darstellt. Über die Oberfläche hinweg findet damit kein Austausch von Masse statt, des Weiteren soll keine Masse im Gebiet produziert werden. Im Gegensatz dazu beschreiben offene Systeme ein bestimmtes Volumen, über dessen Oberfläche Masse und Energie ausgetauscht werden kann. Die Massendichte in einem System wird definiert als:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \lim_{\Delta v \rightarrow 0} \frac{\Delta m}{\Delta v} \quad (2.89)$$

Nach dem ersten Reynoldsen Transporttheorem sind unter den gegebenen Beschränkungen eines geschlossenen Systems in Gleichung (2.88) die Terme  $\Sigma$  und  $\Phi$  gleich Null, woraus die Massenerhaltung folgt:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{B}_t} \rho_t dv = \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 dV = 0 \quad (2.90)$$

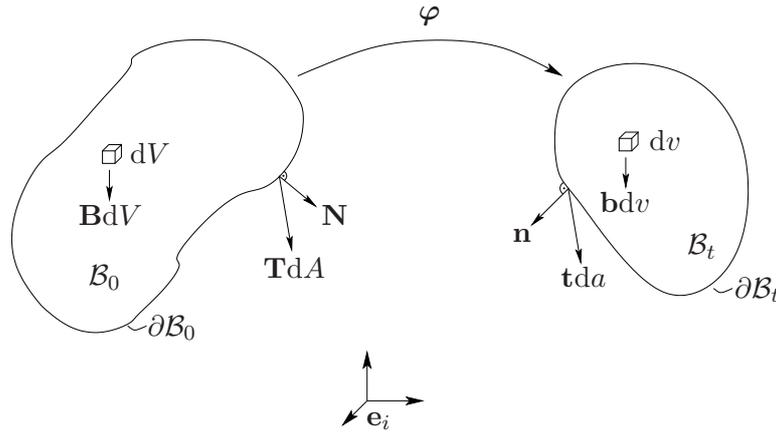


Abbildung 2.4.: Einwirkende Kräfte in beiden Konfigurationen

Da die Bilanzaussage des betrachteten geschlossenen Systems für jeden möglichen Teilkörper Gültigkeit besitzen muss, gilt auch die lokale Form

$$\rho_0(\mathbf{X}) = \rho_t(\mathbf{x}, t)J \quad (2.91)$$

Unter Verwendung der Massenbilanz folgt das 2. Reynoldssche Transporttheorem:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{B}_t} \rho_t \{\bullet\}_t dv = \int_{\mathcal{B}_t} \rho_t \frac{D}{Dt} \{\bullet\}_t dv \quad (2.92)$$

**Impulsbilanz** Der Impulsbilanz liegen die Postulate des Cauchy-Theorems zugrunde:

- Es existiert ein differenzierbares Tensorfeld mit den Cauchy-Spannungen  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)$

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, t, \mathbf{n}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)\mathbf{n} \quad (2.93)$$

mit dem Spannungsvektor  $\mathbf{t}$  und der Oberflächennormalen  $\mathbf{n}$  (vgl. Abb. 2.4).

- Die Cauchy-Spannungen genügen der Bewegungsgleichung

$$\rho_t \frac{Dv}{Dt} = \nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} \quad (2.94)$$

mit den eingepägten volumenbezogenen Kräften  $\mathbf{b}$  (vgl. Abb. 2.4). Der Gesamtimpuls eines Systems ist definiert als:

$$\mathbf{L} = \int_{\mathcal{B}_t} \rho_t \mathbf{v} dv \quad (2.95)$$

Die Impulsbilanz wird unter Verwendung des ersten und zweiten Reynoldischen Transporttheorems aufgestellt:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{L} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{B}_t} \rho_t \mathbf{v} dv = \int_{\mathcal{B}_t} \rho_t \frac{D\mathbf{v}}{Dt} dv = \int_{\mathcal{B}_t} \mathbf{b} dv + \int_{\mathcal{B}_t} \nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma} dv \quad (2.96)$$

Mit dem Divergenzansatz in Verbindung mit Gleichung (2.93) folgt:

$$\int_{\mathcal{B}_t} \nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma} dv = \int_{\partial \mathcal{B}_t} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} da = \int_{\partial \mathcal{B}_t} \mathbf{t} da \quad (2.97)$$

Damit entspricht  $\mathbf{b}$  dem Produktionsterm  $\Sigma(\mathbf{x}, t)$  und  $\mathbf{t}$  dem Flussterm  $\Phi(\mathbf{x}, t, \mathbf{n})$  aus Gleichung (2.88). Ein *push-back* der Cauchy-Spannungen auf Basis der Piola-Transformation auf die materielle Konfiguration ergibt:

$$\mathbf{P}(\mathbf{X}, t) = J \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) \mathbf{F}^{-T} = \boldsymbol{\sigma} \operatorname{cof}(\mathbf{F}) \quad (2.98)$$

mit dem 1. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor  $\mathbf{P}$ . Dieser Spannungstensor ist ein unsymmetrischer Zweifeldtensor, da er die Beziehung zwischen einem räumlichen Kraftelement  $d\mathbf{p}$  und dem materiellen Flächenelement  $d\mathbf{A}$  liefert. Der 2. Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor  $\mathbf{S}$  wird vollständig auf die materielle Konfiguration bezogen:

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{P} = J \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-T} \quad (2.99)$$

Die lokale Impulsbilanz bezüglich der materiellen Konfiguration lautet damit:

$$\rho_0 \frac{D\mathbf{V}}{Dt} = \nabla_X \cdot \mathbf{P} + \mathbf{B} \quad (2.100)$$

und unter Einbeziehung des ersten und zweiten Reynoldischen Transporttheorems:

$$\int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 \frac{D\mathbf{V}}{Dt} dV = \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{B} dV + \int_{\mathcal{B}_0} \nabla_X \cdot \mathbf{P} dV \quad (2.101)$$

Die Anwendung des Divergenztheorems liefert wiederum:

$$\int_{\mathcal{B}_0} \nabla_X \cdot \mathbf{P} dV = \int_{\partial \mathcal{B}_0} \mathbf{P} \mathbf{N} dA = \int_{\partial \mathcal{B}_0} \mathbf{T} dA \quad (2.102)$$

mit den eingepägten materiellen volumenbezogenen Kräften  $\mathbf{B} = J\mathbf{b}$  und dem ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungsvektor  $\mathbf{T}$ .

**Drehimpulsbilanz** Der Drehimpuls eines Systems ist definiert als

$$\mathbf{J} = \int_{\mathcal{B}_t} \mathbf{q} \times \rho_t \mathbf{v} dv \quad (2.103)$$

Die Drehimpulsbilanz folgt unter Verwendung des ersten und zweiten Reynold-schen Transporttheorems:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{J} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{B}_t} \mathbf{q} \times \rho_t \mathbf{v} \, dv = \int_{\mathcal{B}_t} \rho_t \frac{D[\mathbf{q} \times \mathbf{v}]}{Dt} \, dv = \int_{\mathcal{B}_t} \mathbf{q} \times \rho_t \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \, dv \quad (2.104)$$

Einsetzen von Gleichung (2.94) liefert:

$$\int_{\mathcal{B}_t} \mathbf{q} \times \rho_t \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \, dv = \int_{\mathcal{B}_t} \mathbf{q} \times \nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dv + \int_{\mathcal{B}_t} \mathbf{q} \times \mathbf{b} \, dv \quad (2.105)$$

und unter Verwendung des Divergenzsatzes und Gleichung (2.93):

$$\int_{\mathcal{B}_t} \mathbf{q} \times \nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dv = \int_{\partial \mathcal{B}_t} \mathbf{q} \times \mathbf{t} \, da \quad (2.106)$$

Ein *push-back* Äquivalent zur Vorgehensweise in Gleichung (2.98) führt auf die materielle Darstellung der Drehimpulsbilanz:

$$\int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{q} \times \rho_0 \frac{D\mathbf{V}}{Dt} \, dV = \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{q} \times \mathbf{B} \, dV + \int_{\partial \mathcal{B}_0} \mathbf{q} \times \mathbf{T} \, dA \quad (2.107)$$

**Energiebilanz** Die Bilanz der Energie eines Systems kann aus der Impulsbilanz hergeleitet werden. Dabei bilanzieren wir an dieser Stelle ausschließlich die Anteile der mechanischen Energie, d.h. wir erstellen eine Bilanz der kinetischen, potentiellen und externen Energie. Weitere Komponenten aus dem 1. Hauptsatz der Thermodynamik, wie z.B. Beiträge durch Wärme oder innerer Energie werden hier nicht berücksichtigt. Multiplikation der lokalen Impulsbilanz (Gleichung (2.94)) mit  $\mathbf{v}$  liefert die lokale Energiebilanz:

$$\rho_t \mathbf{v} \cdot \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \mathbf{v} \cdot (\nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \quad (2.108)$$

$$\Leftrightarrow \rho_t \frac{D}{Dt} \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{2} = \nabla_x \cdot (\boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{v}) - \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \quad (2.109)$$

Eine Integration über  $\mathcal{B}_t$  und Anwendung des Divergenztheorems liefert in Verbindung mit dem zweiten Reynold-schen Transporttheorem

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{B}_t} \rho_t \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{2} \, dv}_{\frac{d}{dt} K} + \underbrace{\int_{\mathcal{B}_t} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} \, dv}_{P_{\text{int}}} = \underbrace{\int_{\mathcal{B}_t} \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \, dv + \int_{\partial \mathcal{B}_t} \mathbf{v} \cdot \mathbf{t} \, da}_{P_{\text{ext}}} \quad (2.110)$$

$$\frac{d}{dt} K + P_{\text{int}} = P_{\text{ext}} \quad (2.111)$$

mit der kinetischen Energie  $K$ , der inneren Leistung  $P_{\text{int}}$  und der externen Leistung  $P_{\text{ext}}$ .

### 2.2.3. Konstitutive Gesetze

Um den Satz von Bilanz-Gleichungen mit der Kinematik in Verbindung zu bringen, sind konstitutive Gesetze notwendig. Für ein einfaches St.Venant-Kirchhoff Material gilt z.B.:

$$\mathbf{S}(\mathbf{E}) = \lambda \operatorname{tr}(\mathbf{E})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E} = \mathbb{E} : \mathbf{E} \quad (2.112)$$

Hier stellt der Term  $\mathbb{E} : \mathbf{E}$  ein doppeltes Skalarprodukt und  $\mathbb{E}$  den vierstufigen Tensor

$$\mathbb{E} = \lambda\mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \mu[\mathbf{I} \overline{\otimes} \mathbf{I} + \mathbf{I} \underline{\otimes} \mathbf{I}] = \lambda\mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \mu\mathbb{I} \quad (2.113)$$

und den Materialparametern  $\lambda$  und  $\mu$  dar. Die komponentenweise Darstellung der nicht standartmäßigen Tensorprodukte  $\overline{\otimes}$  und  $\underline{\otimes}$  wird wie folgt definiert:

$$[\{\hat{\bullet}\} \overline{\otimes} \{\bar{\bullet}\}]_{ijkl} = \{\hat{\bullet}\}_{ik} \otimes \{\bar{\bullet}\}_{jl} \quad \text{und} \quad [\{\hat{\bullet}\} \underline{\otimes} \{\bar{\bullet}\}]_{ijkl} = \{\hat{\bullet}\}_{il} \otimes \{\bar{\bullet}\}_{jk} \quad (2.114)$$

Existiert eine Verzerrungsenergie  $W$ , so dass

$$\mathbf{P}(\mathbf{X}, \mathbf{F}) = \frac{\partial W(\mathbf{X}, \mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} \quad \forall \mathbf{X} \in \mathcal{B}_0 \quad (2.115)$$

bzw.

$$\mathbf{S}(\mathbf{X}, \mathbf{C}) = 2 \frac{\partial W(\mathbf{X}, \mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} \quad (2.116)$$

gilt, wird das Material Hyperelastisch genannt. Für das St.Venant-Kirchhoff Material ist die Verzerrungsenergiefunktion definiert als

$$W(\mathbf{C}) = \frac{1}{2} \mathbf{E} : \mathbb{E} : \mathbf{E} \quad (2.117)$$

Andere Verzerrungsenergiefunktionen werden häufig in den Invarianten von  $\mathbf{F}$  definiert, wie z.B. das kompressible Neo-Hooke Material:

$$W(\mathbf{C}) = \frac{\mu}{2}[I_1 - 3] - \mu \ln(\sqrt{I_3}) + \frac{\lambda}{2} \ln^2(\sqrt{I_3}) \quad (2.118)$$

wobei  $I_1$  die Spur und  $I_3$  die Determinante der Matrix  $\mathbf{C}$  ist. Gilt des Weiteren

$$W(\mathbf{X}, \mathbf{F}) = W(\mathbf{X}, \mathbf{F}\mathbf{Q}) \quad \forall \mathbf{Q} \in \mathbb{O}_+ \quad (2.119)$$

wird von isotroper Hyperelastizität gesprochen. Das innere Potential  $V_{\text{int}}$  aus der lagrangeschen bzw. der hamiltonschen Formulierung (vgl. Kapitel 2.1) berechnet sich in der materiellen Konfiguration als

$$V_{\text{int}} = \int_{\mathcal{B}_0} W(\mathbf{C}) \, dV \quad (2.120)$$

## 2.3. Diskrete Systeme

Für die bisher betrachteten kontinuierlichen Systeme - sowohl zeitlich kontinuierlich (vgl. Kapitel 2.1) als auch räumlich kontinuierlich (vgl. Kapitel 2.2) - existieren im Allgemeinen keine geschlossenen analytischen Lösungen. Approximative Verfahren wie die Anwendung finiter Elemente im Raum und in der Zeit ermöglichen eine näherungsweise Lösung der Systeme (vgl. Zienkiewicz et al. [111], Wriggers [105], Reddy [83], Hughes [48] und vielen anderen).

### 2.3.1. Diskretisierung im Raum

Betrachten wir eine Zerlegung des materiellen Gebietes  $\mathcal{B}_0$  in einen finiten Satz von Elementen  $\mathcal{E}^h$ :

$$\mathcal{B}_0^h = \bigcup_{\forall e \in \mathcal{E}^h} \mathcal{B}_0^e \quad (2.121)$$

Ein auf Verschiebungselementen basierender Ansatz ist aus kinematischer Sicht eine Approximation der Deformationsabbildung aus Gleichung 2.56

$$\varphi^h(\mathbf{X}, t) = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} N_A(\mathbf{X}) \mathbf{q}^A(t) \quad (2.122)$$

mit  $\mathbf{X} \in \mathcal{B}_0$ ,  $t \in \mathcal{I} = [0, T]$  und dem Positionsvektor  $\mathbf{q}^A : \mathcal{I} \rightarrow \mathbb{R}^{n_{\text{dim}}}$ . Der Vektor  $\mathbf{q}$  beinhaltet die Ortsfreiheitsgrade aller Knoten mit  $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{n_{\text{node}}}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{dim}} \cdot n_{\text{node}}}$ . Der endlich-dimensionale Teilraum einer Bewegung  $\varphi^h(\mathbf{X}, t)$  wird definiert als (vgl. Laursen [59]):

$$\mathcal{C} = \left\{ \begin{array}{l} \varphi^h : \mathcal{B}_0^h \times \mathcal{I} \rightarrow \mathbb{R}^{n_{\text{dim}}} \mid \varphi^h \in C^0(\mathcal{B}_0^h), \\ \varphi^h(\mathcal{B}_0^e) \in \mathbb{P}_N, \varphi^h = \bar{\varphi}^h \text{ auf } \partial \mathcal{B}_{0u}^h \end{array} \right\} \quad \forall e \in \mathcal{E}^h \quad (2.123)$$

mit dem Satz polynomialer Ansatzfunktionen  $\mathbb{P}_N$  mit der Ordnung  $\leq N$  und dem Dirichlet Rand  $\partial \mathcal{B}_{0u}^h$ . Die approximierte, materielle Geschwindigkeit ergibt sich damit zu

$$\mathbf{V}(\mathbf{X}, t) = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} N_A(\mathbf{X}) \dot{\mathbf{q}}^A(t) \quad (2.124)$$

Aus Gleichung (2.122) folgt die Herleitung des diskreten Deformationsgradienten und des diskreten rechten Cauchy-Green-Tensors (vgl. Betsch & Steinmann [18]). Für den Deformationsgradient in der diskreten Form gilt:

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{X}} = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{q}_A \otimes \nabla_{\mathbf{X}} N_A(\mathbf{X}) \quad (2.125)$$

Entsprechend gilt für den diskreten Cauchy-Green-Tensor mit  $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ :

$$\mathbf{C} = \sum_{A,B=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{q}_A \cdot \mathbf{q}_B \nabla_X N_A \otimes \nabla_X N_B \quad (2.126)$$

Damit liegen alle für die Kinematik notwendigen Größen in der diskreten Form vor. Zur vollständigen Beschreibung der Hamiltonfunktion in Gleichung (2.12) muss die diskrete Form der kinetischen Energie  $K$ , der extern zugeführten Energie  $V_{\text{ext}}$  und des inneren Potentials  $V_{\text{int}}$  erstellt werden. Für die kinetische Energie folgt nach Gleichung (2.1) und (2.124) in der materiellen Formulierung:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{A,B=1}^{n_{\text{node}}} \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 N_A \dot{\mathbf{q}}^A \cdot N_B \dot{\mathbf{q}}^B dV = \frac{1}{2} \sum_{A,B=1}^{n_{\text{node}}} M_{AB} \dot{\mathbf{q}}^A \cdot \dot{\mathbf{q}}^B \quad (2.127)$$

bzw. nach einer Legendre-Transformation:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{A,B=1}^{n_{\text{node}}} M_{AB}^{-1} \mathbf{p}^A \cdot \mathbf{p}^B \quad \text{mit} \quad \mathbf{p}^A = \sum_{B=1}^{n_{\text{node}}} M_{AB} \dot{\mathbf{q}}^B \quad (2.128)$$

Ebenfalls materiell wird die externe Energie formuliert:

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, t) = - \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{q}^A \int_{\mathcal{B}_0} N_A \mathbf{B} dV - \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{q}^A \int_{\partial \mathcal{B}_{0\sigma}} N_A \mathbf{T} dA \quad (2.129)$$

woraus sich die auf den Knoten  $A$  einwirkende, externe Kraft  $\mathbf{F}_{\text{ext}}^A$  herleitet:

$$\mathbf{F}_{\text{ext}}^A(\mathbf{q}, t) = \nabla_{\mathbf{q}} V_{\text{ext}}^A(\mathbf{q}, t) = - \int_{\mathcal{B}_0} N_A \mathbf{B} dV - \int_{\partial \mathcal{B}_{0\sigma}} N_A \mathbf{T} dA \quad (2.130)$$

Das innere Potential hängt vom verwendeten konstitutiven Gesetz (vgl. Abschnitt 2.2.3) und damit von der diskreten Form der Verzerrungsenergiefunktion  $W$  ab:

$$V_{\text{int}}(\mathbf{q}) = \int_{\mathcal{B}_0} W(\mathbf{C}) dV \quad (2.131)$$

Die auf den Knoten  $A$  einwirkende, aus der Verzerrung resultierende innere Kraft  $\mathbf{F}_{\text{int}}^A$  wird aus der Verzerrungsenergiefunktion abgeleitet:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\text{int}}^A(\mathbf{q}) &= \nabla_{\mathbf{q}} V_{\text{int}}^A(\mathbf{q}) = \int_{\mathcal{B}_0} \frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{q}^A} dV = \int_{\mathcal{B}_0} \frac{1}{2} \mathbf{S} : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{q}^A} dV \\ &= \sum_{B=1}^{n_{\text{node}}} \int_{\mathcal{B}_0} \nabla_X N_A \cdot \mathbf{S} \nabla_X N_B dV \mathbf{q}^B \end{aligned} \quad (2.132)$$

Die hamiltonschen Bewegungsgleichungen (2.13) lauten damit in der semidiskreten Form für einen Knoten  $A$ :

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{q}}^A &= \sum_{B=1}^{n_{\text{node}}} M_{AB}^{-1} \mathbf{p}^B \\ \dot{\mathbf{p}}^A &= -(\mathbf{F}_{\text{ext}}^A + \mathbf{F}_{\text{int}}^A)\end{aligned}\quad (2.133)$$

**Erhaltungseigenschaften** Das semi-diskrete System (Gleichungen (2.133)) ist impuls-/drehimpuls- und energierhaltend, unter der Voraussetzung dass  $\mathbf{F}_{\text{ext}}^A = \mathbf{0}$  gilt. Der Nachweis erfolgte bereits in Abschnitt 2.1.3 mittels des diskreten Phasenraumvektor  $\mathbf{z} = (\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in \mathbb{R}^{2n}$ . Eine äquivalente Darstellung der Erhaltungseigenschaften semi-diskreter Systeme ist in Betsch & Steinmann [18] gegeben und wird hier vorgestellt.

**Impulsbilanz** Der Gesamtimpuls des semi-diskreten Systems ist nach Gleichung (2.95) und (2.127) in Verbindung mit Gleichung (2.128) definiert als

$$\mathbf{L} = \int_{\mathcal{B}_t} \rho_t \mathbf{v} \, dv = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{p}^A \quad (2.134)$$

Die zeitliche Änderung des Impulses liefert unter Berücksichtigung von Gleichung (2.133)<sub>2</sub>:

$$\dot{\mathbf{L}} = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \dot{\mathbf{p}}^A = - \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} (\mathbf{F}_{\text{ext}}^A + \mathbf{F}_{\text{int}}^A) \quad (2.135)$$

Da die internen Kräfte in ihrer Summe nach außen keine Wirkung entfalten, d.h.

$$\sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{F}_{\text{int}}^A = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \sum_{B=1}^{n_{\text{node}}} \int_{\mathcal{B}_0} \nabla_X N_A \cdot \mathbf{S} \nabla_X N_B \mathbf{q}^B \, dV = \mathbf{0} \quad (2.136)$$

entspricht die zeitliche Änderung des Gesamtimpulses der Summe der einwirkenden externen Kräfte:

$$\dot{\mathbf{L}} = - \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{F}_{\text{ext}}^A \quad (2.137)$$

**Drehimpulsbilanz** Der Drehimpuls ist nach Gleichung (2.103) definiert als:

$$\mathbf{J} = \int_{\mathcal{B}_t} \mathbf{q} \times \rho_t \mathbf{v} \, dv = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{q}^A \times \mathbf{p}^A \quad (2.138)$$

Für die zeitlichen Änderung des Drehimpulses gilt in Verbindung mit den Gleichungen (2.133)<sub>1,2</sub>:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{J}} &= \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} [\dot{\mathbf{q}}^A \times \mathbf{p}^A + \mathbf{q}^A \times \dot{\mathbf{p}}^A] = \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \left[ \sum_{B=1}^{n_{\text{node}}} M_{AB}^{-1} \mathbf{p}^B \times \mathbf{p}^A - \mathbf{q}^A \times (\mathbf{F}_{\text{ext}}^A + \mathbf{F}_{\text{int}}^A) \right] \\ &= \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \left[ \sum_{B=1}^{n_{\text{node}}} M_{AB}^{-1} \mathbf{p}^B \times \mathbf{p}^A + \sum_{B=1}^{n_{\text{node}}} \int_{\mathcal{B}_0} \nabla_{\mathbf{x}} N_A \cdot \mathbf{S} \nabla_{\mathbf{x}} N_B dV \mathbf{q}^B \times \mathbf{q}^A - \mathbf{q}^A \times \mathbf{F}_{\text{ext}}^A \right] \end{aligned} \quad (2.139)$$

Aufgrund der Symmetrieeigenschaften von  $M_{AB}^{-1}$  und  $\int_{\mathcal{B}_0} \nabla_{\mathbf{x}} N_A \cdot \mathbf{S} \nabla_{\mathbf{x}} N_B dV$  und der Schiefsymmetrieeigenschaften von  $\mathbf{p}^B \times \mathbf{p}^A$  und  $\mathbf{q}^B \times \mathbf{q}^A$  verschwinden die beiden ersten Terme und es gilt:

$$\dot{\mathbf{J}} = - \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{q}^A \times \mathbf{F}_{\text{ext}}^A \quad (2.140)$$

**Energiebilanz** Die zeitliche Änderung der Energie entspricht der zeitlichen Änderung der Hamiltonfunktion:

$$\dot{H}(\mathbf{z}) = \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}) \cdot \dot{\mathbf{z}} = \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}) \cdot \mathbb{J} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}) = \Omega(\nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}), \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z})) = 0 \quad (2.141)$$

Die Energieerhaltung ist daher eine Folge der Schiefsymmetrie von  $\mathbb{J}$ .

### 2.3.2. Diskretisierung in der Zeit

Das Anfangswertproblem ist durch die Bewegungsgleichungen (2.14), in einem Zeitintervall  $\mathcal{I} = [0, T]$  mit den Anfangswerten  $\mathbf{z}_0 = \mathbf{z}(t_0)$  gegeben. In einem Teilabschnitt  $[t_n, t_{n+1}] \in \mathcal{I}$ ,  $t_{n+1} - t_n = \Delta t > 0$  besteht die Problemstellung darin,  $\mathbf{z}_{n+1}$  aus den gegebenen Daten  $\mathbf{z}_n \in \mathcal{Z}$  zu bestimmen; im Weiteren werden die Definitionen  $\mathbf{z}_{n+1} \approx \mathbf{z}(t_{n+1})$ ,  $\mathbf{z}_n \approx \mathbf{z}(t_n)$  und  $\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\mathbf{z}_n + \mathbf{z}_{n+1})$  verwendet.

Die Integration von Gleichung (2.14) liefert nach dem Hauptsatz der Integralrechnung folgenden Ausdruck:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \dot{\mathbf{z}} dt = \mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n = \mathbb{J} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}) dt \quad (2.142)$$

Eine Mittelpunkregel approximiert Gleichung (2.142) zu:

$$\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n \approx \Delta t \mathbb{J} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) \quad (2.143)$$

In Verbindung mit Gleichung (2.133) lautet demzufolge das zu lösende Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{n+1}^A - \mathbf{q}_n^A - \frac{\Delta t}{2} \sum_{B=1}^{n_{\text{node}}} M_{AB}^{-1} [\mathbf{p}_{n+1}^B + \mathbf{p}_n^B] &= \mathbf{0} \\ \mathbf{p}_{n+1}^A - \mathbf{p}_n^A + \Delta t [\mathbf{F}_{\text{ext}}^A(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathbf{F}_{\text{int}}^A(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}})] &= \mathbf{0} \end{aligned} \quad (2.144)$$

mit den analog zu  $\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}$  definierten Mittelpunktskonfigurationen  $t_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(t_n + t_{n+1})$  und  $\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\mathbf{q}_n + \mathbf{q}_{n+1})$ . Durch Einsetzen von Gleichung (2.144)<sub>1</sub> in Gleichung (2.144)<sub>2</sub> erhalten wir die für die Implementierung verwendete reduzierte Form der diskreten hamiltonschen Gleichungen:

$$\frac{2}{\Delta t} \sum_{B=1}^{n_{\text{node}}} M_{AB} [\mathbf{q}_{n+1}^B - \mathbf{q}_n^B] - 2\mathbf{p}_n^A + \Delta t [\mathbf{F}_{\text{ext}}^A(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathbf{F}_{\text{int}}^A(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}})] = \mathbf{0} \quad (2.145)$$

**Erhaltungseigenschaften** Unter der Voraussetzung, dass keine externen Kräfte und Momente einwirken, muss für einen diskreten Zeitschritt  $t_n \rightarrow t_{n+1}$  sowohl für den Impuls als auch für den Drehimpuls folgende Bedingung gelten (vgl. Simo et al. [90] und Simo & Tarnow [89]):

$$\mathbf{L}_{n+1} = \mathbf{L}_n \quad \text{und} \quad \mathbf{J}_{n+1} = \mathbf{J}_n \quad (2.146)$$

Das verwendete Integrationsverfahren wird im Allgemeinen keine algorithmische Energieerhaltung in dem Sinn gewährleisten, so dass

$$E_{n+1} = E_n \quad (2.147)$$

für einen beliebigen Zeitschritt  $t_n \rightarrow t_{n+1}$  Gültigkeit besitzt. Im Folgenden werden daher die notwendigen Bedingungen, die für eine algorithmische Energieerhaltung des diskreten Systems erfüllt sein müssen, vorgestellt.

Ausgehend von Noethers Theorem, nachdem  $J_\xi(\mathbf{z})$  für jedes beliebige Liealgebraelement  $\xi$  eine Erhaltungsgröße darstellt, übertragen wir Gleichung (2.44) auf den zeitlich diskreten Fall:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} J_\xi(\mathbf{z}) &= \nabla_{\mathbf{z}} J_\xi(\mathbf{z}) \cdot \dot{\mathbf{z}} \\ \Leftrightarrow \int_{t_n}^{t_{n+1}} \dot{J}_\xi(\mathbf{z}) dt &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \nabla_{\mathbf{z}} J_\xi(\mathbf{z}) \cdot \dot{\mathbf{z}} dt \\ \Leftrightarrow J_\xi(\mathbf{z}_{n+1}) - J_\xi(\mathbf{z}_n) &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \xi_{\mathbf{z}}(\mathbf{z}) \cdot \mathbb{J} \dot{\mathbf{z}} dt \\ \Leftrightarrow J_\xi(\mathbf{z}_{n+1}) - J_\xi(\mathbf{z}_n) &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \xi_{\mathbf{z}}(\mathbf{z}) \cdot \mathbb{J}^2 \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}) dt \\ \Leftrightarrow J_\xi(\mathbf{z}_{n+1}) - J_\xi(\mathbf{z}_n) &= - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \xi_{\mathbf{z}}(\mathbf{z}) \cdot \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}) dt \end{aligned} \quad (2.148)$$

Zum Nachweis der einzelnen Erhaltungseigenschaften setzen wir nach Abschnitt 2.1.3 die entsprechenden Symmetriegruppen ein.

**Impulserhaltung** Einsetzen von Gleichung (2.45)<sub>3</sub> für den infinitesimalen Erzeuger liefert:

$$\begin{aligned} J_{\xi}(\mathbf{z}_{n+1}) - J_{\xi}(\mathbf{z}_n) &= - \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\xi, \mathbf{0}) \cdot \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}) dt \\ &= \xi \cdot \int_{t_n}^{t_{n+1}} \dot{\mathbf{p}} dt \\ &= \xi \cdot (\mathbf{p}_{n+1} - \mathbf{p}_n) \end{aligned} \quad (2.149)$$

Unter der Voraussetzung, dass keine externen Kräfte einwirken, gilt in Verbindung mit Gleichung (2.144)<sub>2</sub>:

$$J_{\xi}(\mathbf{z}_{n+1}) - J_{\xi}(\mathbf{z}_n) = \xi \cdot \Delta t \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}) \quad (2.150)$$

Ein Vergleich mit Gleichung (2.47) und (2.136) zeigt, dass

$$\mathbf{J}(\mathbf{z}_{n+1}) - \mathbf{J}(\mathbf{z}_n) = \Delta t \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{F}_{\text{int}}^A(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}) = 0 \quad (2.151)$$

der Gesamtimpuls unabhängig von der Zeitschrittweite erhalten bleibt.

**Drehimpulserhaltung** Einsetzen von Gleichung (2.49)<sub>3</sub> für den infinitesimalen Erzeuger in Gleichung (2.148)<sub>5</sub> liefert:

$$\begin{aligned} J_{\xi}(\mathbf{z}_{n+1}) - J_{\xi}(\mathbf{z}_n) &= - \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\hat{\xi} \circ \mathbf{q}, \hat{\xi} \circ \mathbf{p}) \cdot \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}) dt \\ &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\hat{\xi} \circ \mathbf{q}) \cdot \dot{\mathbf{p}} - (\hat{\xi} \circ \mathbf{p}) \cdot \dot{\mathbf{q}} dt \end{aligned} \quad (2.152)$$

Es ergibt sich wiederum unter der Voraussetzung, dass keine externen Kräfte wirken, in Verbindung mit Gleichung (2.52) folgendes:

$$J_{\xi}(\mathbf{z}_{n+1}) - J_{\xi}(\mathbf{z}_n) = \xi \cdot \int_{t_n}^{t_{n+1}} \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} [\dot{\mathbf{q}}^A \times \mathbf{p}^A + \mathbf{q}^A \times \dot{\mathbf{p}}^A] dt \quad (2.153)$$

Damit folgt für den Drehimpuls:

$$\mathbf{J}_{n+1} - \mathbf{J}_n = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} [\dot{\mathbf{q}}^A \times \mathbf{p}^A + \mathbf{q}^A \times \dot{\mathbf{p}}^A] dt \quad (2.154)$$

Einsetzen von Gleichung (2.133) und Berücksichtigung von Gleichung (2.144) ergibt für die Drehimpulsbilanz:

$$\mathbf{J}_{n+1} - \mathbf{J}_n = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \left[ \sum_{B=1}^{n_{\text{node}}} M_{AB}^{-1} \mathbf{p}^B \times \mathbf{p}^A - \mathbf{q}^A \times \dot{\mathbf{p}}^A \right] dt \quad (2.155)$$

$$= - \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{q}^A \times \mathbf{F}_{\text{int}}^A(\mathbf{q}) dt \quad (2.156)$$

Die Abwesenheit externer Kräfte und Momente wurde wiederum vorausgesetzt. Ein Vergleich mit Gleichung (2.132) zeigt, dass der Drehimpuls für die Mittelpunktsregel eine Erhaltungsgröße darstellt.

**Bedingungen für die Energieerhaltung** Einsetzen von Gleichung (2.54)<sub>3</sub> für den infinitesimalen Erzeuger in Gleichung (2.148)<sub>5</sub> liefert:

$$J(\mathbf{z}_{n+1}) - J(\mathbf{z}_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}) \cdot \dot{\mathbf{z}} dt \quad (2.157)$$

Die Erhaltungsgröße  $J$  entspricht der Gesamtenergie, repräsentiert durch die Hamiltonfunktion  $H$ . Für die nach Gleichung (2.143) approximierten Größe folgt

$$H(\mathbf{z}_{n+1}) - H(\mathbf{z}_n) \approx \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) \quad (2.158)$$

Die Gesamtenergie des Systems ist damit eine von der Approximationsgüte abhängige Größe.

## 2.4. Mechanische Integratoren

*Aside from their physical and mathematical significance, from a numerical analysis standpoint conserved quantities often lead to enhanced numerical stability.*

Simo et al. [90], Introduction

Die gezeigte Mittelpunktsregel besitzt algorithmische Impuls- und Drehimpulserhaltungseigenschaften, versagt aber im Allgemeinen für das Energiekriterium. Da die kinetische Energie quadratisch im Phasenraum  $\mathbb{Z}$  definiert ist, wird unter der Voraussetzung einer konfigurationsunabhängigen Massenmatrix, Gleichung (2.144)<sub>1</sub> exakt integriert, so dass der Integrationsfehler der Mittelpunktsregel aus der Integration des Gradienten der potentiellen Energie in Gleichung (2.144)<sub>2</sub> resultiert. Korrekturen können prinzipiell sowohl auf Gleichung (2.144)<sub>1</sub> als auch auf

Gleichung (2.144)<sub>2</sub> angewandt werden. Da sich das Gleichungssystem (2.144) aufgrund der konfigurationsunabhängigen Massenmatrix reduzieren läßt (vgl. Gleichung (2.145)) und damit der Impuls zum Zeitpunkt  $t_{n+1}$  erst in einem Nachlaufschritt bestimmt wird, entspricht eine Korrektur der Gleichung (2.144)<sub>1</sub> einer Predictor/Korrektor Vorgehensweise (vgl. Simo et al. [90]). Eine Korrektur der Gleichung (2.144)<sub>2</sub> wurde u.a. in Gonzalez [28, 29, 31], Gonzalez & Simo [32] und Betsch & Steinmann [17, 18] vorgestellt. Dabei erfolgt eine Modifikation des den Integrationsfehler verursachenden Gradienten, der im Weiteren in der modifizierten Form „diskreter Gradient“ genannt wird.

### 2.4.1. Impuls Update

Das Verfahren nach Simo et al. [90] stellt eine explizite Projektion des Phasenraums  $\mathbb{Z}$  auf die Ebene konstanter Energie dar. Im Predictor-Schritt wird eine unmodifizierte Mittelpunktsregel angewendet, die konstruktionsbedingt Impuls- und Drehimpulserhaltende Ergebnisse, gekennzeichnet mit  $\{\tilde{\bullet}\}$  liefert. Der Impuls berechnet sich nach der Auswertung von Gleichung (2.145) mit:

$$\tilde{\mathbf{p}}_{n+1} = \frac{2}{\Delta t} \mathbf{M}(\tilde{\mathbf{q}}_{n+1} - \mathbf{q}_n) - \mathbf{p}_n \quad (2.159)$$

Im Korrektor Schritt wird ein zusätzlicher Term  $\mathbf{p}_c$  eingeführt:

$$\mathbf{p}_{n+1} = \tilde{\mathbf{p}}_{n+1} + \mathbf{p}_c, \quad \mathbf{q}_{n+1} = \tilde{\mathbf{q}}_{n+1} \quad (2.160)$$

Eine algorithmische Erhaltung des Impulses respektive Drehimpulses erfolgt unter den Bedingungen:

$$\sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{p}_c^A = \mathbf{0}, \quad \sum_{A=1}^{n_{\text{node}}} \mathbf{q}_{n+1}^A \times \mathbf{p}_c^A = \mathbf{0} \quad (2.161)$$

Für die Energiebilanz betrachten wir die Auswirkungen von  $\mathbf{p}_c$  auf den kinetischen Anteil der Energie  $K$ :

$$\begin{aligned} K_{n+1} &= \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{p}}_{n+1} + \mathbf{p}_c) \cdot \mathbf{M}^{-1} (\tilde{\mathbf{p}}_{n+1} + \mathbf{p}_c) \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{p}_c \cdot \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p}_c + \tilde{\mathbf{p}}_{n+1} \cdot \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p}_c + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{p}}_{n+1} \cdot \mathbf{M}^{-1} \tilde{\mathbf{p}}_{n+1} \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{p}_c \cdot \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p}_c + \tilde{\mathbf{p}}_{n+1} \cdot \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p}_c + \tilde{K}_{n+1} \end{aligned} \quad (2.162)$$

Unter der Annahme, dass keine externen Kräfte einwirken, lautet die Bedingung für Energieerhaltung:

$$H_{n+1} - H_n = K_{n+1} - K_n + V_{\text{int } n+1} - V_{\text{int } n} = 0 \quad (2.163)$$

Eingesetzt in Gleichung (2.162) folgt:

$$0.5\mathbf{p}_c \cdot \mathbf{M}^{-1}\mathbf{p}_c + \tilde{\mathbf{p}}_{n+1} \cdot \mathbf{M}^{-1}\mathbf{p}_c + (\tilde{H}_{n+1} - H_n) = 0 \quad (2.164)$$

Da die Gesamtenergie des Systems ein Skalarwert ist, reicht ein skalarwertiger Korrekturfaktor  $\kappa$  aus. In Simo et al. [90] wird der Gradient des inneren Potentials zur Konstruktion von  $\mathbf{p}_c$  verwendet:

$$\mathbf{p}_c = \kappa \nabla_{\mathbf{q}} \tilde{V}_{\text{int } n+1} \quad (2.165)$$

da dieser nach Gleichung (2.136) und (2.140) die Bedingungen nach Gleichung (2.161)<sub>1</sub> und (2.161)<sub>2</sub> erfüllt. Es folgt das quadratische Gleichungssystem

$$\frac{1}{2}(\nabla_{\mathbf{q}} \tilde{V}_{\text{int } n+1} \cdot \mathbf{M}^{-1} \nabla_{\mathbf{q}} \tilde{V}_{\text{int } n+1}) \kappa^2 + (\tilde{\mathbf{p}}_{n+1} \cdot \mathbf{M}^{-1} \nabla_{\mathbf{q}} \tilde{V}_{\text{int } n+1}) \kappa + (\tilde{H}_{n+1} - H_n) = 0 \quad (2.166)$$

Diese quadratische Gleichung besitzt reelle Lösungen, wenn die Diskriminante größer oder gleich Null ist. Dabei signalisiert eine Diskriminante kleiner Null ein Ansteigen der Energie, was durch die gezeigte explizite Projektion nicht korrigiert werden kann. Die Mittelpunktsregel ist ein Verfahren mit einer Genauigkeit von zweiter Ordnung in der Zeit. Die Projektion verändert die Genauigkeit der im Prediktorschritt durchgeführte Mittelpunktsregel auf ein Verfahren erster Ordnung, wie in Simo et al. [90] und in Laursen & Love [62] dargelegt ist.

## 2.4.2. Diskreter Gradient

Ausgehend von der hamiltonschen Gleichung (2.14):  $\dot{\mathbf{z}} = X_H(\mathbf{z})$  wurde in Abschnitt 2.1.3 gezeigt, dass die Hamiltonfunktion eine Erhaltungsgröße und damit ein erstes Integral von Gleichung (2.14) ist, d.h.

$$H(\mathbf{z}(t)) = H(\mathbf{z}(0)) \quad \forall t \in [0, T] \quad (2.167)$$

Gleichung (2.167) entspricht der Orthogonalitätsbedingung

$$\dot{H} = \nabla_{\mathbf{z}} H \cdot \dot{\mathbf{z}} = \nabla_{\mathbf{z}} H \cdot X_H(\mathbf{z}) = 0 \quad (2.168)$$

Die Integration von Gleichung (2.14) liefert:

$$\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n = \Delta t X_H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) = \Delta t \mathbb{J} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \quad (2.169)$$

Eingesetzt in die integrale Form von Gleichung (2.168) folgt als Bedingung für die Energieerhaltung in Verbindung mit Gleichung (2.158):

$$H(\mathbf{z}_{n+1}) - H(\mathbf{z}_n) = \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1})(\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) = 0 \quad (2.170)$$

Der diskrete Gradient - zur besseren Kennzeichnung im Folgenden mit  $\bar{\nabla}$  dargestellt, wird nach Gonzalez [28] definiert als:

$$\begin{aligned} \bar{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) &= \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) \\ &+ \frac{H(\mathbf{z}_{n+1}) - H(\mathbf{z}_n) - \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n)}{\|(\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n)\|^2} (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) \end{aligned} \quad (2.171)$$

Die Äquivalenz zur Aussage in Gleichung (2.170) kann durch Multiplikation des diskreten Gradienten mit  $(\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n)$  nachgewiesen werden:

$$\begin{aligned} \bar{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1})(\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) &= \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}})(\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) \\ &+ \frac{H(\mathbf{z}_{n+1}) - H(\mathbf{z}_n) - \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n)}{\|(\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n)\|^2} (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n)^2 \\ &= H(\mathbf{z}_{n+1}) - H(\mathbf{z}_n) \end{aligned} \quad (2.172)$$

und

$$\bar{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1})(\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) = \Delta t \bar{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \mathbb{J} \bar{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) = 0 \quad (2.173)$$

Der diskrete Gradient, definiert nach Gleichung (2.171), erhält somit algorithmisch die Hamiltonfunktion. Im Allgemeinen verliert das System durch den diskreten Gradienten die Drehimpulserhaltung, da der Term  $(\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n)$  nicht invariant gegen die Einwirkung einer Rotationsgruppe ist. Daher definieren wir als nächstes den diskreten Gradienten für Lie-Gruppen invariante Funktionen.

**G-äquivarianter diskreter Gradient** Ein G-äquivarianter diskreter Gradient einer glatten Funktion  $f : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{R}$  ist eine Abbildung  $\bar{\nabla} f : \mathbb{Z} \times \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{R}^n$  der unter einer Wirkung  $\Phi$  (vgl. Gleichung (2.20)) folgende Eigenschaften aufweist:

1. Äquivarianz

$$\bar{\nabla}_{\Phi} f(\Phi(\mathbf{z}_n), \Phi(\mathbf{z}_{n+1})) = [\nabla_{\mathbf{z}} \Phi_{\mathbf{g}}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}})]^{-T} \cdot \bar{\nabla}_{\mathbf{z}} f(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \quad \forall \Phi_{\mathbf{g}} \in \mathbf{G} \quad (2.174)$$

2. Orthogonalität

$$\bar{\nabla}_{\mathbf{z}} f(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \cdot \boldsymbol{\xi}_{\mathbb{Z}}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) = 0 \quad (2.175)$$

Der Nachweis und die Auswirkungen der beiden Eigenschaften sind in Gonzalez [28, 29] ausführlich dargelegt und sollen hier am konkreten Beispiel für die Konstruktion eines G-äquivarianten diskreten Gradientens durchgeführt werden. Dazu erfolgt eine Reparametrisierung von  $H$  mithilfe maximal quadratischer Invarianten  $\pi_i : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{R}$ , die aus Elementen der Mengen

$$\mathbb{S}(\mathbf{z}) = \{\|\mathbf{y}_A \cdot \mathbf{y}_B\|^2, 1 \leq A \leq B \leq n_{node}, \mathbf{y}_A \in [\mathbf{q}_A, \mathbf{p}_A]\} \quad (2.176)$$

$$\mathbb{T}(\mathbf{z}) = \{\det(\mathbf{y}_A, \mathbf{y}_B), 1 \leq A \leq B \leq n_{node}, \mathbf{y}_A \in [\mathbf{q}_A, \mathbf{p}_A]\} \quad (2.177)$$

in Übereinstimmung mit dem Cauchyschen Darstellungstheorem aufgebaut sind (vgl. Betsch & Hesch [14], Truesdell & Noll [97]). Gleichung (2.177) ist gültig für  $n_{\text{dim}} = 2$ , die Darstellung in höher dimensionalen Räumen erfordert eine entsprechende Anpassung des Argumentes der Determinante. Die Reparametrisierung der Hamiltonfunktion erfolgt mithilfe des Vektors der Invarianten  $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}) = [\pi_1(\mathbf{z}), \dots, \pi_d(\mathbf{z})]^T$ :

$$H(\mathbf{z}) = \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{z})) \quad (2.178)$$

Entsprechend der Kettenregel erfolgt nun die Definition eines G-äquivarianten diskreten Gradienten:

$$\overline{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) = \nabla_{\mathbf{z}} \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}})^T \overline{\nabla}_{\boldsymbol{\pi}} \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_n), \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_{n+1})) \quad (2.179)$$

mit

$$\begin{aligned} \overline{\nabla}_{\boldsymbol{\pi}} \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}_n, \boldsymbol{\pi}_{n+1}) &= \nabla_{\boldsymbol{\pi}} \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) \\ &+ \frac{\tilde{H}(\boldsymbol{\pi}_{n+1}) - \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}_n) - \nabla_{\boldsymbol{\pi}} \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)}{\|(\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)\|^2} (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n) \end{aligned} \quad (2.180)$$

und

$$\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\pi}_{n+1} + \boldsymbol{\pi}_n) \quad (2.181)$$

Definitionsbedingt sind die Invarianten maximal quadratisch und es gilt:

$$\overline{\nabla}_{\mathbf{z}} \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) = \nabla_{\mathbf{z}} \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) \quad (2.182)$$

Die Äquivarianz des diskreten Gradienten nach Gleichung (2.179) ist eine Folge der Invarianz von  $\boldsymbol{\pi}$ , d.h.  $\boldsymbol{\pi}(\Phi_{\mathbf{g}}(\mathbf{z})) = \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z})$ , hieraus folgt:

$$\nabla \boldsymbol{\pi}(\Phi_{\mathbf{g}}(\mathbf{z})) = \nabla_{\mathbf{z}} \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}) \cdot [\nabla_{\mathbf{z}} \Phi_{\mathbf{g}}(\mathbf{z})]^{-1} \quad (2.183)$$

Eingesetzt in Gleichung (2.179) zeigt die Äquivarianz im Sinne von Gleichung (2.174):

$$\begin{aligned} \overline{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\Phi_{\mathbf{g}}(\mathbf{z}_n), \Phi_{\mathbf{g}}(\mathbf{z}_{n+1})) &= \overline{\nabla}_{\boldsymbol{\pi}} \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}(\Phi_{\mathbf{g}}(\mathbf{z}_n)), \boldsymbol{\pi}(\Phi_{\mathbf{g}}(\mathbf{z}_{n+1}))) \cdot \nabla \boldsymbol{\pi}(\Phi_{\mathbf{g}}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}})) \\ &= \overline{\nabla}_{\boldsymbol{\pi}} \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_n), \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_{n+1})) \cdot \nabla_{\mathbf{z}} \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot [\nabla_{\mathbf{z}} \Phi_{\mathbf{g}}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}})]^{-1} \\ &= [\nabla_{\mathbf{z}} \Phi_{\mathbf{g}}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}})]^{-T} \overline{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \end{aligned} \quad (2.184)$$

Zum Nachweis der Orthogonalitätsbedingung (Gleichung (2.175)) wird wiederum die Invarianz von  $\boldsymbol{\pi}$  ausgenutzt:

$$0 = \frac{d}{d\epsilon} \boldsymbol{\pi}(\Phi_{\mathbf{g}}(\varphi_{\dot{\xi}}(\epsilon), \mathbf{z}))|_{\epsilon=0} = \nabla_{\mathbf{z}} \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}) \cdot \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{z}}(\mathbf{z}) \quad (2.185)$$

**Impuls-/Drehimpulserhaltung** Die Anwendung des Hauptsatzes der Integralrechnung auf eine Impulsabbildung zeigt

$$\begin{aligned}
J_\xi(\mathbf{z}_{n+1}) - J_\xi(\mathbf{z}_n) &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \nabla_{\mathbf{z}} J_\xi(\mathbf{z}) \cdot \dot{\mathbf{z}} \, dt \\
&= \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{Z}}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot \mathbb{J}(\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) \\
&= \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{Z}}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot \mathbb{J}^2 \Delta t \overline{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \\
&= -\Delta t \overline{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \cdot \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{Z}}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) \\
&= -\Delta t \overline{\nabla}_{\boldsymbol{\pi}} \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_n), \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_{n+1})) \cdot \nabla_{\mathbf{z}} \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{Z}}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) \\
&= 0
\end{aligned} \tag{2.186}$$

Das Einsetzen der Symmetriegruppen nach Gleichung (2.45) und (2.49) zeigt sowohl die algorithmische Erhaltung des Impulses als auch die algorithmische Erhaltung des Drehimpulses.

**Energieerhaltung** Nach Gleichung (2.170) erhalten wir (vgl. Betsch & Hesch [14]):

$$\begin{aligned}
\overline{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \cdot (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) &= \overline{\nabla}_{\boldsymbol{\pi}} \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_n), \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_{n+1})) \cdot \nabla_{\mathbf{z}} \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) \\
&= \overline{\nabla}_{\boldsymbol{\pi}} \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_n), \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_{n+1})) \cdot (\boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_{n+1}) - \boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_n)) \\
&= \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_{n+1})) - \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{z}_n)) \\
&= H(\mathbf{z}_{n+1}) - H(\mathbf{z}_n)
\end{aligned} \tag{2.187}$$

Durch Einsetzen von Gleichung (2.169) folgt aufgrund der Schiefsymmetrie von  $\mathbb{J}$ :

$$\overline{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \cdot (\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n) = \Delta t \overline{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \cdot \mathbb{J} \overline{\nabla}_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) = 0 \tag{2.188}$$

Ein Vergleich von Gleichung (2.187) und (2.188) liefert  $H(\mathbf{z}_{n+1}) = H(\mathbf{z}_n)$ , woraus die algorithmische Erhaltung der Energie folgt.

**Algorithmische Spannungsberechnung** Als Beispiel einer G-äquivarianter Darstellung soll die algorithmische Spannungsberechnung dienen. Für den Gradienten der diskreten Verzerrungsenergiefunktion gilt nach Gleichung (2.132):

$$\nabla_{\mathbf{q}} V_{\text{int}}^A(\mathbf{q}) = \int_{\mathcal{B}_0} \frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{q}^A} \, dV \tag{2.189}$$

mit dem 2.Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor  $\mathbf{S}$ :

$$\mathbf{S}(\mathbf{C}) = 2 \frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} \tag{2.190}$$

Wie in den Gleichungen (2.64) und (2.64) dargelegt, sind die Komponenten des Cauchy-Green-Tensors  $\mathbf{C}$  sowohl translations- als auch rotationsinvariant. Zur Darstellung des Invariantenvektor  $\boldsymbol{\pi}$  in der Mittelpunktskonfiguration eignet sich die Voigtsche Notation:

$$W(\mathbf{C}(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}})) = \widetilde{W}(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}})), \quad \boldsymbol{\pi}(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^A) = \begin{bmatrix} C_{11}(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^A) \\ C_{22}(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^A) \\ 2C_{12}(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^A) \end{bmatrix} \quad (2.191)$$

Durch die Einführung des diskreten Gradientens nach Gleichung (2.180) erhält man:

$$\boldsymbol{\Xi} = 2\nabla_{\boldsymbol{\pi}} \widetilde{W}(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) + 2 \frac{\widetilde{W}(\boldsymbol{\pi}_{n+1}) - \widetilde{W}(\boldsymbol{\pi}_n) - \nabla_{\boldsymbol{\pi}} \widetilde{W}(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)}{\|(\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)\|^2} (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n) \quad (2.192)$$

mit den algorithmischen Spannungen  $\boldsymbol{\Xi}$  (vgl. Gonzalez [31]).

## 3. Zwangsbedingungen

### 3.1. Eigenschaften von Zwangsbedingungen

Mechanische Systeme, die Zwangsbedingungen beinhalten, erfahren eine Einschränkung ihrer Dimensionen (Marsden & Ratiu [66]). Zwangsbedingungen gliedern sich allgemein in 2 Klassen: Holonome Zwangsbedingungen stellen Bedingungen an den Konfigurationsraum  $\mathbb{V}$ , nichtholonome Zwangsbedingungen stellen Bedingungen an den Geschwindigkeitsphasenraum  $T\mathbb{V}$ . Kontakt-Zwangsbedingungen können als geometrische Einschränkung des Konfigurationsraums interpretiert werden und gehören damit zu den holonomen Zwangsbedingungen der Form

$$\Phi(\mathbf{q}) = \mathbf{0}, \quad \Phi_A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \quad (3.1)$$

Sie schränken einen  $n$ -dimensionalen Konfigurationsraum  $\mathbb{V} = \mathbb{R}^n$  bei einer Anzahl von  $m$  Zwangsbedingungen auf einen  $n-m$  dimensionalen Unterraum  $\mathbb{Q} \subset \mathbb{V}$ , mit  $\mathbb{Q} = \mathbb{R}^{n-m}$  ein (vgl. Betsch [11]). Die damit erfolgte Einschränkung des Tangentenbündels  $T\mathbb{Q} \subset T\mathbb{V}$  schränkt demzufolge die Lagrange-Funktion  $L : T\mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$  auf  $L_N : T\mathbb{Q} \rightarrow \mathbb{R}$  bzw. die Hamiltonfunktion  $H : T^*\mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$  auf  $H : T^*\mathbb{Q} \rightarrow \mathbb{R}$  ein.

Zwangsbedingungen werden in der Regel auf zwei unterschiedlichen Wegen eingefordert: Entweder durch eine Regularisierung, im Folgenden anhand der Penalty-Methode dargelegt, oder durch die Einführung von lagrangeschen Multiplikatoren. Diverse Mischformen beider Methoden sind ebenfalls bekannt, exemplarisch wird die *augmented* Lagrange Formulierung vorgestellt, da sie häufig in der Kontakt-Mechanik Anwendung findet (vgl. Laursen [58]). Für ein konservatives System gilt die Annahme der Energieerhaltung auch für das um holonome Zwangsbedingungen erweiterte System, da die Zwangskräfte im skleronomen Fall keine Arbeit leisten. Daher betrachten wir den Einfluß der verschiedenen Verfahren auf die Energiebilanz. Impuls- und Drehimpulserhaltung hängen von der jeweiligen Zwangsbedingung ab. Sofern die Zwangsbedingungen weder den Impuls noch den Drehimpuls beeinflussen, stellen sie eine einfache Erweiterung des Potentials dar. Damit hängen die Erhaltungseigenschaften wiederum von dem eingesetzten Verfahren zur Diskretisierung des Systems ab (vgl. Kapitel 2.3). In Abschnitt 3.1.4 werden verschiedene Möglichkeiten eingebracht, das um die lagrangeschen Multiplikatoren erweiterte Sattelpunktsystem nachträglich auf ein Minimierungsproblem

zu reduzieren. In Kapitel 3.2 werden schließlich impuls- respektiv drehimpuls- sowie energieerhaltende Verfahren für allgemeine, nichtlineare Zwangsbedingungen vorgestellt.

### 3.1.1. Penalty-Methode

Für die um Zwangsbedingungen erweiterte Hamiltonfunktion gilt:

$$\mathcal{H}_\epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) + \frac{\epsilon}{2} \|\Phi(\mathbf{q})\|^2 \quad (3.2)$$

Dabei ist  $\epsilon$  ein vorgegebener Penalty-Parameter. Die Herleitung der hamiltonschen Gleichungen (vgl. Abschnitt 2.1.2) findet äquivalente Anwendung:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) - \epsilon_k \Phi(\mathbf{q}) \cdot \nabla_{\mathbf{q}} \Phi(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3.3)$$

Der Einsatz eines direkten Gleichungslösers zur Lösung des aus dem Newton-Verfahren resultierenden Gleichungssystems ist möglich, obwohl häufig die Zwangsbedingung iterativ bis zur Erfüllung eines vordefinierten Konvergenzkriteriums angenähert wird. Der Iterationsparameter  $\epsilon_k$  ist dabei eine monoton wachsende Folge positiver Penalty-Parameter, wobei  $\epsilon \rightarrow \infty$  für  $k \rightarrow \infty$  gilt. Es gilt dabei zu beachten, dass die Konditionszahl der Systemmatrix mit einem Vielfachen von  $\epsilon$  wächst (vgl. Benzi et al. [8]). Zur Gewährleistung der Energieerhaltung muss die zeitliche Änderung der Hamiltonfunktion gleich Null sein:

$$\frac{d}{dt} H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = 0 \quad (3.4)$$

Hierbei stellt

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2} \mathbf{p} \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{p} + V(\mathbf{q}) \quad (3.5)$$

die totale Energie des Systems mit Zwangsbedingungen dar. Mithilfe der Kettenregel folgt für die zeitliche Änderung der erweiterte Hamilton-Funktion:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{H}_\epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{p}) &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \dot{\mathbf{q}} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \dot{\mathbf{p}} + \epsilon_k \Phi(\mathbf{q}) \cdot \nabla_{\mathbf{q}} \Phi(\mathbf{q}) \dot{\mathbf{q}} \\ &= \frac{d}{dt} H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) + \epsilon_k \Phi(\mathbf{q}) \cdot \nabla_{\mathbf{q}} \Phi(\mathbf{q}) \dot{\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Energieerhaltung ist daher nur im Grenzfall für  $\Phi(\mathbf{q}) = \mathbf{0}$  korrelierend mit der Bedingung  $\epsilon \rightarrow \infty$  gewährleistet. Somit erhält das Penalty-Verfahren im Allgemeinen nicht die Energie.

### 3.1.2. Lagrangesche Multiplikatoren

Die Einführung von lagrangeschen Multiplikatoren  $\boldsymbol{\lambda}$  als eigenständige Variablen des Systems wird durch die erweiterte Hamilton-Funktion beschrieben:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathcal{H}_\lambda(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) + \boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{q}) \quad (3.7)$$

Die Herleitung der Bewegungsgleichungen in Abhängigkeit von holonomen Zwangsbedingungen führt auf einen Satz von differential-algebraischen Gleichungen (sog. DAEs) mit einem Differential-Index 3 (vgl. Eich-Soellner & Führer [22]):

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) - \boldsymbol{\lambda} \cdot \nabla_{\mathbf{q}} \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{q}) \\ \mathbf{0} &= \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3.8)$$

Das resultierende Sattelpunktproblem ist im Allgemeinen sehr schlecht konditioniert (vgl. Benzi et al. [8], Abschnitt 3.1.4). Die Verwendung eines direkten Gleichungslösers ist möglich; zudem werden die Zwangsbedingungen im Rahmen des Abbruchkriteriums des Newton-Verfahrens exakt erfüllt.

Die totale Energie von konservativen Systemen mit holonomen Zwangsbedingungen ändert sich nicht mit der Zeit:

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \dot{\mathbf{q}} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \dot{\mathbf{p}} + \boldsymbol{\lambda} \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}}{\partial \mathbf{q}} \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{0} \quad (3.9)$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) + \boldsymbol{\lambda} \frac{d}{dt} \boldsymbol{\Phi} = 0 \quad (3.10)$$

Da die Zwangsbedingungen nach Gleichung (3.8) exakt erfüllt werden, ist auch deren zeitliche Änderung gleich null. Die Erhaltung der totalen Energie im kontinuierlichen ist daher eine Folge der Konsistenzforderung an Zwangsbedingungen.

### 3.1.3. Augmented-Lagrange-Methode

Als Beispiel für eine Mischform zwischen Penalty-Verfahren und der Methode der lagrangeschen Multiplikatoren (vgl. Wriggers [106]) wird hier die *augmented* Lagrange Methode unter Verwendung des Algorithmus von Uzawa vorgestellt. Diese Vorgehensweise findet u.a. im Bereich der Fluid-Dynamik (vgl. Benzi et al. [8]), aber auch in der Kontaktmechanik (vgl. Laursen & Chawla [60], Laursen & Love [62]) häufig Verwendung. Die erweiterte Hamiltonfunktion wird definiert als:

$$\mathcal{H}_\epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) + \frac{\epsilon}{2} \|\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{q})\|^2 + \boldsymbol{\lambda}_k \cdot \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{q}) \quad (3.11)$$

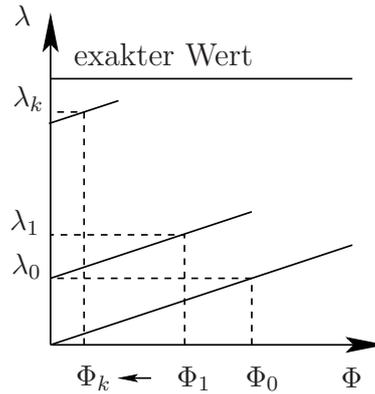


Abbildung 3.1.: Update des lagrangeschen Multiplikators

Ein Zwei-Schritt Algorithmus zur Lösung dieser, im Allgemeinen nichtlinearen Problemstellung ist in Nour-Omid & Wriggers [72] zu finden. Da das nichtlineare Gleichungssystem mithilfe eines Newton-Verfahrens iterativ gelöst wird,  $\lambda_k$  aber ebenfalls iterativ, im Gegensatz zur Vorgehensweise in Abschnitt 3.1.2 aber nicht innerhalb des gleichen Newton-Verfahrens, bestimmt wird, müssen zwei iterative Verfahren gekoppelt werden. Beide Iterationen können entweder gleichzeitig ausgeführt werden, oder es erfolgt zuerst die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems, gefolgt von einem Update der lagrangeschen Multiplikatoren (vgl. Simo & Laursen [88]):

1) Initialisiere  $\lambda_0$

2) Iterations-Schleife:

I) Zu lösen ist das nichtlineare System in einer inneren Schleife bis das zugehörige Konvergenzkriterium erreicht wurde:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) - \epsilon_k \Phi(\mathbf{q}) \nabla_{\mathbf{q}} \Phi(\mathbf{q}) - \lambda_k \cdot \nabla_{\mathbf{q}} \Phi(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3.12)$$

II) Iterationsupdate, bis das Konvergenzkriterium  $\|\Phi\| < \text{TOL}$  erreicht wurde:

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + \epsilon \Phi_{k+1} \quad (3.13)$$

Der Parameter  $\epsilon$  hat eine doppelte Funktion: Zum Einen als Penalty Parameter in Gleichung (3.12), zum anderen stellt er den Relaxationsparameter des iterativen Lösungsverfahrens dar. Der schematische Iterationsprozess des lagrangeschen Multiplikators folgt dem in Bild 3.1 gezeigten Verlauf (vgl. Wriggers [106]). Der Vorteil des Verfahrens liegt in der Entkopplung des algebraischen Anteils des Sattelpunktproblems, das bei der Verwendung lagrangescher Multiplikatoren entsteht

(vgl. Abschnitt 3.1.4). Die Zwangsbedingungen werden im Rahmen des Konvergenzkriteriums des iterativen Verfahrens erfüllt. Der verwendete Penalty Parameter muss dabei zwei Forderungen aufgrund seiner doppelten Funktion genügen:

- Er darf die Konditionszahl der Systemmatrix nicht soweit verschlechtern, dass das System nicht mehr lösbar ist,
- er darf die Konvergenz des iterativen Verfahrens nicht gefährden.

Die Konvergenzkriterien für den Algorithmus von Uzawa können für ein lineares System einfach hergeleitet werden, da der Algorithmus in diesem Fall einem stationären Richardson-Verfahren entspricht (vgl. Benzi et al. [8]). Das Richardson-Verfahren konvergiert, wenn für den Relaxationsparameter  $\epsilon \in [0, 2/\rho]$  gilt, wobei  $\rho$  der größte Eigenwert des Schur-Komplements darstellt (vgl. Quarteroni et al. [80]). Für die Wahl des Penalty Parameters muss demzufolge zwischen der Kondition der Systemmatrix und der Konvergenz-Rate abgewogen werden. Die Einordnung des Algorithmus von Uzawa in eine Reihe von iterativen Verfahren ist in Li et al. [64] untersucht worden, detaillierte Informationen und Konvergenzstudien finden sich in Golub et al. [27].

### 3.1.4. Sattelpunktsysteme

Das Gleichungssystem, das in jedem Iterationsschritt des Newton-Verfahrens gelöst wird, hat die Struktur

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{C} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{q} \\ \Delta \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R} \\ \boldsymbol{\Phi} \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

mit

$$\mathbf{A} = \nabla_{\mathbf{q}} \mathbf{R}; \quad \mathbf{B} = \nabla_{\boldsymbol{\lambda}} \mathbf{R}; \quad \mathbf{C} = \nabla_{\mathbf{q}} \boldsymbol{\Phi} \quad (3.15)$$

und dem zu lösenden Residuum  $\mathbf{R}$ , entsprechend der diskreten Form der Gleichungen (3.8)<sub>1</sub> und (3.8)<sub>2</sub> nach Abschnitt 2.3.2 bzw. Kapitel 3.2. Die Matrix in Gleichung (3.14) ist symmetrisch, d.h.  $\mathbf{B} = \mathbf{C}$ , falls  $\mathbf{R}$  und  $\boldsymbol{\Phi}$  nach der vollständigen Diskretisierung zum gleichen Zeitpunkt ausgewertet werden. Der Begriff des Sattelpunktes erklärt sich dadurch, dass für jede Lösung  $\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*, \boldsymbol{\lambda}^*$  der Gleichungen (3.8) folgende Bedingung erfüllt sein muss (vgl. Benzi et al. [8]):

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) \leq \mathcal{H}(\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) \leq \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}^*) \quad (3.16)$$

Zusätzlich wird gefordert, dass  $\Phi_1 \dots \Phi_m$  nicht ineinander überführbar sind, bzw.  $\mathbf{B} = \nabla_{\mathbf{q}} \boldsymbol{\Phi}$  vollen (Spalten-) Rang hat:

$$\text{rank}(\mathbf{B}) = m \quad (3.17)$$

Ist  $\mathbf{A}$  symmetrisch und positiv definit und hat mindestens den Rang  $n - m$  gilt: Die Matrix ist nicht-singulär, wenn

$$\ker(\mathbf{A}) \cap \ker(\mathbf{B}) = \{\mathbf{0}\} \quad (3.18)$$

gilt. Ist die Matrix nicht singulär, kann unter Umständen die numerische Lösung des linearen Gleichungssystems dennoch nicht möglich sein. Zur Abschätzung der Lösbarkeit eines Problems dient die Konditionszahl. Die Konditionszahl ist dabei ein Maß für die Sensitivität einer Matrix gegenüber Rundungsfehlern (vgl. Strang [93]). Die allgemein sehr schlechte Konditionszahl von Sattelpunktsproblemen beeinflusst das Konvergenzverhalten iterativer Gleichungslöser negativ, da die Konvergenzgeschwindigkeit durch den Spektralradius  $|\rho|_{\max}$  der Iterationsmatrix bestimmt wird.

Holonome Zwangsbedingungen, die unter Verwendung lagrangescher Multiplikatoren eingebunden werden, erzeugen Abhängigkeiten zwischen einzelnen Freiheitsgraden. In der analytischen Mechanik ist es dabei üblich, mit einem minimalen Satz von  $(n - m)$  generalisierter Koordinaten zu arbeiten (vgl. u.a. Meirovitch [68], Laursen [59]). Da die Einführung sinnvoller generalisierter Koordinaten nur für verhältnismäßig einfache Systeme möglich ist, muss für allgemeine Mechanische Systeme mit Zwangsbedingungen das Sattelpunktproblem mit  $(m + n)$  Koordinaten aufgestellt werden. Eine nachträgliche Reduktion der redundanten Koordinaten kann entweder durch eine Kondensation (vgl. Simo & Armero [85], Kasper & Taylor [50], Wriggers [106], Wohlmuth & Krause [102], Wohlmuth & Lamichhane [103]) oder mithilfe einer diskreten Nullraummatrix (vgl. Betsch [12], Betsch [13], Betsch & Leyendecker [15], Benzi et al. [8]) erfolgen.

**Nullraum-Methode** Ausgehend von der diskreten Gleichung (3.14) wird eine  $n \times (n - m)$  Matrix  $\mathbf{P}$  gesucht, die der Bedingung

$$\text{range}(\mathbf{P}) = \text{null}(\mathbf{B}) \quad (3.19)$$

genügt. Damit folgt:

$$\mathbf{B}\mathbf{P} = \mathbf{0} \quad (3.20)$$

womit  $\mathbf{P}$  die diskrete Nullraummatrix zu  $\mathbf{B}$  ist. Aus der Forderung nach zeitlicher Konsistenz der Zwangsbedingungen folgt, dass die Zeitableitung der Zwangsbedingung null ist, bzw. nach der Kettenregel

$$\mathbf{B}(\mathbf{q})\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{0} \quad (3.21)$$

Da der Geschwindigkeitsvektor  $\dot{\mathbf{q}}$  auf den Tangentenraum  $T_q\mathbb{V} \subset \mathbb{R}^n$  beschränkt ist, gilt

$$T_q\mathbb{V} = \text{null}(\mathbf{B}) \quad (3.22)$$

Gleichung (3.21) ist ein möglicher Ausgangspunkt für die Herleitung einer explizit berechneten Nullraummatrix (vgl. Betsch [12]). Ist eine explizite Darstellung nicht

möglich, kann  $\mathbf{P}$  auch numerisch entweder mittels einer QR-Zerlegung oder durch eine Eigenwert-Zerlegung von  $\mathbf{B}$  erzeugt werden. Vormultiplizieren von  $\mathbf{P}^T$  auf Gleichung (3.14)<sub>1</sub> liefert:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{P}^T \mathbf{A} \\ \mathbf{C} \end{bmatrix} \Delta \mathbf{q} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}^T \mathbf{R} \\ \Phi \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

Eine weitere Reduktion des Systems kann mithilfe generalisierter Koordinaten  $\mathbf{u}$  erfolgen. Dabei wird die Existenz der Abbildung  $\mathbf{F} : \mathbb{R}^{n-m} \rightarrow \mathbb{R}^n$  unter der Bedingung vorausgesetzt, dass

$$\mathbf{q} = \mathbf{F}(\mathbf{u}) \quad \forall \mathbf{q} \in \mathbb{V}, \mathbf{u} \in \mathbb{Q} \quad (3.24)$$

Die Ableitung  $\nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{F}(\mathbf{u})$  ist wiederum eine diskrete Nullraummatrix, die gegebenenfalls auch numerisch bestimmt werden muss. Numerisch bestimmte generalisierte Koordinaten besitzen allerdings keinen physikalischen Bezug mehr. Daher ist für eine Interpretation der Ergebnisse eine Nachlaufrechnung zur Bestimmung der ursprünglichen Freiheitsgrade notwendig.

**Kondensation** Die hier verwendeten holonomen Zwangsbedingungen beschreiben geometrische Abhängigkeiten zwischen den verschiedenen Freiheitsgraden; z.B. werden im Kontaktfall die Oberflächenfreiheitsgrade eines Körpers  $\mathbf{q}_m$  in Abhängigkeit von den Oberflächenfreiheitsgraden der am Kontakt beteiligten Körpers  $\mathbf{q}_s$  gebracht. Bezeichnen des Weiteren  $\mathbf{q}_i$  alle Freiheitsgrade, die nicht in die Zwangsbedingungen eingebunden sind, kann das Sattelpunktproblem aus Gleichung (3.14) wie folgt aufgeschlüsselt werden:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{ii} & \mathbf{A}_{im} & \mathbf{A}_{is} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_{mi} & \mathbf{A}_{mm} & \mathbf{A}_{ms} & \mathbf{M} \\ \mathbf{A}_{si} & \mathbf{A}_{sm} & \mathbf{A}_{ss} & \mathbf{D} \\ \mathbf{0} & \mathbf{T} & \mathbf{K} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{q}_i \\ \Delta \mathbf{q}_m \\ \Delta \mathbf{q}_s \\ \Delta \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_i \\ \mathbf{R}_m \\ \mathbf{R}_s \\ \Phi \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

Prinzipiell können  $\mathbf{q}_m$  und  $\mathbf{q}_s$  beliebig aus der Menge aller von den Zwangsbedingungen eingebundenen Freiheitsgrade gewählt werden, vorausgesetzt die Matrix  $\mathbf{D}$  ist quadratisch und hat vollen Rang:

$$\text{rank}(\mathbf{D}) = \text{rank}(\mathbf{B}) = m \quad (3.26)$$

Die dritte Zeile aus Gleichung (3.25) kann zur expliziten Darstellung der lagrangeschen Multiplikatoren genutzt werden:

$$\Delta \lambda = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{R}_s - \mathbf{A}_{si} \Delta \mathbf{q}_i - \mathbf{A}_{sm} \Delta \mathbf{q}_m - \mathbf{A}_{ss} \Delta \mathbf{q}_s) \quad (3.27)$$

Dies setzt die geforderte Invertierbarkeit von  $\mathbf{D}$  voraussetzt. Um zur ursprünglichen Darstellung aus Gleichung (3.14) zurückzukehren, wird die Matrix  $\mathbf{W} = [\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{D}^{-1}]$  eingeführt:

$$\Delta \lambda = \mathbf{W}(\mathbf{R} - \mathbf{A} \Delta \mathbf{q}) \quad (3.28)$$

Das Einsetzen von Gleichung (3.28) in Gleichung (3.14) führt nach kurzem Umformen zu folgender Gleichung:

$$\begin{bmatrix} (\mathbf{I} - \mathbf{B}^T \mathbf{W}^T) \mathbf{A} \\ \mathbf{C} \end{bmatrix} \Delta \mathbf{q} = \begin{bmatrix} (\mathbf{I} - \mathbf{B}^T \mathbf{W}^T) \mathbf{R} \\ \Phi \end{bmatrix} \quad (3.29)$$

wobei  $\mathbf{I}$  eine Einheitsmatrix ist. Ein Vergleich von Gleichung (3.29) und (3.14) zeigt, dass  $(\mathbf{I} - \mathbf{B}^T \mathbf{W}^T) \mathbf{B}^T = \mathbf{0}$  gilt, und damit  $(\mathbf{I} - \mathbf{B}^T \mathbf{W}^T) = \mathbf{P}^T$  ein Element von  $\ker(\mathbf{B}^T)$  ist.  $\mathbf{P}$  entspricht damit der Definition einer diskreten Nullraummatrix. Das Gleichungssystem (3.29) ist überbestimmt, daher ist eine weitere Reduktion notwendig. Dies kann durch Vormultiplikation mit der Matrix  $[\mathbf{I}, -\mathbf{A}\mathbf{W}]^T$  erfolgen. Im Terminus der FEM (vgl. Jung & Langer [49]) entspricht dies einer Einschränkung der Testfunktionen. Es folgt für eine symmetrische Systemmatrix (d.h.  $\mathbf{B} = \mathbf{C}$ ):

$$[\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{P}^T - \mathbf{B}^T \mathbf{W}^T \mathbf{A} \mathbf{W} \mathbf{B}] \Delta \mathbf{q} = [\mathbf{P}\mathbf{R} - \mathbf{A}\mathbf{W}\Phi] \quad (3.30)$$

Ist die Systemmatrix nicht symmetrisch, folgt:

$$[\mathbf{P}^T \mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{W}\mathbf{C}] \Delta \mathbf{q} = [\mathbf{P}^T \mathbf{R} - \mathbf{A}\mathbf{W}\Phi] \quad (3.31)$$

Die statische Kondensation der *enhanced modes*, wie sie von Simo et al. [86] bzw. von Kasper & Taylor [51] beschrieben ist, folgt dem gleichen Prinzip.

## 3.2. Zwangsbedingungen in diskreten Systemen

### 3.2.1. Gleichheits-Zwangsbedingungen

Für die zeitliche Diskretisierung von Gleichung (3.8):

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{z}} &= \mathbb{J} \nabla_{\mathbf{z}} \mathcal{H}_\lambda \\ \mathbf{0} &= \Phi \end{aligned} \quad (3.32)$$

wird ein von Betsch & Steinmann [19] entwickelter, Galerkin basierter Ansatz verwendet. In einem charakteristischen Zeitschritt  $\Delta t = t_{n+1} - t_n$  wird eine lineare Approximation der Zeit mit:

$$\mathbf{z}^h(\alpha) = (1 - \alpha) \mathbf{z}_n - \alpha \mathbf{z}_{n+1} \quad \forall \alpha \in [0, 1] \quad (3.33)$$

vorgenommen und an der Stelle  $\alpha = \frac{1}{2}$  ausgewertet. Im Gegensatz zur kontinuierlichen Approximation des Phasenraums  $T\mathbb{V}$  werden die lagrangeschen Multiplikatoren als konstant in jedem Zeitschritt angenommen:

$$\lambda^h = \lambda_{n+1} \quad (3.34)$$

Zusammengefasst ergibt sich die sogenannte *mixed Galerkin* (mG(1)) Methode:

$$\begin{aligned} \mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n &= \Delta t \mathbb{J} \nabla_{\mathbf{z}} \mathcal{H}_\lambda(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}) \\ \mathbf{0} &= \Phi(\mathbf{q}_{n+1}) \end{aligned} \quad (3.35)$$

Für die um den Term  $\lambda \cdot \Phi$  erweiterte Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}_\lambda$  gelten die gleichen Erhaltungseigenschaften für den Impuls und den Drehimpuls, analog zur Darstellung in Abschnitt 2.3.2. Die Bedingungen für die Erhaltung der Gesamtenergie werden entsprechend auf das um die Zwangsbedingungen erweiterte System angewandt, wobei die Systematik zur Konstruktion Mechanischer Integratoren (Kapitel 2.4) weiterhin Verwendung findet. Korrekturen können demzufolge für die Gleichung (3.8)<sub>1</sub> bzw. für die Gleichung (3.8)<sub>2</sub> eingeführt werden. Zusätzlich besteht die Möglichkeit, Modifikationen an der Zwangsbedingung an sich (Gleichung (3.8)<sub>3</sub>) durchzuführen.

### 3.2.2. Algorithmische Energieerhaltung

Im Folgenden werden verschiedene Möglichkeiten zur Konstruktion energieerhaltender Verfahren vorgestellt. Die Auswirkungen auf ein einfaches System bestehend aus 2 Massepunkten und einer Feder, die einer nichtlinearen Zwangsbedingung unterliegen, ist im Anhang (Abschnitt A.3) dargelegt.

**Modifikation der Zwangsbedingung** Die Konstruktion eines Verfahrens zur algorithmischen Erhaltung der Energie durch Modifikation der Zwangsbedingung wurde erstmalig für den Fall reibungsfreien Kontaktes von Laursen & Chawla [60] vorgestellt. Zeitgleich erschien die Arbeit von Armero & Petöcz [2], in der die gleiche Vorgehensweise anhand einer Penalty-Formulierung eingeführt wurde. Die Anwendung auf Kontaktvorgänge mit Reibung ist in Laursen & Chawla [61] beschrieben. Das Verfahren ist unabhängig von kontaktspezifischen Algorithmen und wird im Folgenden für allgemeine, nichtlineare und holonome Zwangsbedingungen beschrieben.

Ein mit der mG(1) Methode ausgewerteter Gradient einer Zwangsbedingung  $\Phi^A$  führt zu folgender Änderung in der Energiebilanz:

$$\Delta H^A = \lambda_{n+1} \nabla_{\mathbf{q}} \Phi^A(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n) \quad (3.36)$$

d.h. Energieerhaltung folgt unter der Bedingung, dass

$$\nabla_{\mathbf{q}} \Phi^A(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n) = 0 \quad (3.37)$$

erfüllt wird. Daraus wird eine neue Zwangsbedingung formuliert mit:

$$\tilde{\Phi}^A = \nabla_{\mathbf{q}} \Phi^A(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n) \quad (3.38)$$

Da sich der in Gleichung (3.35)<sub>1</sub> einwirkende Gradient nicht verändert, sondern nur durch eine Veränderung in  $\lambda_{n+1}$  skaliert wird, bleiben die Impuls- bzw. Drehimpulseigenschaften erhalten. Festzuhalten ist allerdings, dass die ursprüngliche Forderung  $\Phi^A = 0$  nur im Grenzfall für  $\Delta t \rightarrow 0$  erfüllt wird.

**Impuls-Update** Eine explizite Projektion des Phasenraums auf die Ebene konstanter Energie entsprechend der Vorgehensweise in Abschnitt 2.4.1 kann äquivalent auf Systeme mit Zwangsbedingungen Anwendung finden. In der Arbeit von Laursen & Love [62] wird die Vorgehensweise für spezielle Kontakt-Elemente im Rahmen der NTS-Methode beschrieben. Prinzipiell ist ein einzelner, skalarwertiger Korrekturfaktor für die Energiebilanz ausreichend, üblicherweise wird aber für jede Zwangsbedingung  $\Phi^A$  ein separater Korrekturfaktor  $\kappa^A$  für die von der jeweiligen Zwangsbedingung verursachte Änderung in der Energiebilanz berechnet. Für den Korrektor-Schritt (vgl. Gleichung (2.160)) folgt:

$$\mathbf{p}_{n+1} = \tilde{\mathbf{p}}_{n+1} + \sum_{A=1}^m \mathbf{p}_c^A, \quad \mathbf{q}_{n+1} = \tilde{\mathbf{q}}_{n+1} \quad (3.39)$$

Zur Erhaltung der ursprünglichen Impuls- bzw. Drehimpulseigenschaften kann der Gradient der Zwangsbedingung verwendet werden:

$$\mathbf{p}_c^A = \kappa^A \nabla_{\mathbf{q}} \Phi^A(\mathbf{q}_{n+1}) \quad (3.40)$$

Eingesetzt in die Energiebilanz ergibt sich äquivalent zu Gleichung (2.164) eine quadratische Gleichung:

$$\frac{1}{2} \kappa^A \nabla_{\mathbf{q}} \Phi^A(\mathbf{q}_{n+1}) \cdot \mathbf{M}^{-1} \kappa^A \nabla_{\mathbf{q}} \Phi^A(\mathbf{q}_{n+1}) + \tilde{\mathbf{p}}_{n+1} \cdot \mathbf{M}^{-1} \kappa^A \nabla_{\mathbf{q}} \Phi^A(\mathbf{q}_{n+1}) + (\tilde{H}_{n+1} - H_n) = 0 \quad (3.41)$$

Wie bereits in Abschnitt 2.4.1 gezeigt, ist das Vorhandensein einer reellen Lösung abhängig von der Diskriminante der quadratischen Gleichung. In Laursen & Love [59] folgt für die verwendeten Kontaktelemente, dass eine reelle Lösung vom Vorzeichen der Relativgeschwindigkeit beider sich im Kontakt befindlichen Körper, ausgewertet zur Mittelpunktskonfiguration, abhängt.

**G-äquivarianter diskreter Gradient** Die G-äquivalente Darstellung von Zwangsbedingungen wird u.a. in Betsch & Steinmann [19] und Betsch [13] verwendet. Erste Arbeiten zur Anwendung der Methodik auf spezifische Kontakt-Zwangsbedingungen (NTS-Methode) finden sich in Hauret & Tallec [39]; aufgrund der unvollständigen Äquivarianten-Darstellung allerdings ohne Erhaltung der Drehimpulseigenschaften.

Wie in Abschnitt 2.4.2 gezeigt, ist eine Reparametrisierung der erweiterten Hamiltonfunktion für eine G-äquivalente Darstellung notwendig:

$$\mathcal{H}_\lambda(\mathbf{z}) = \tilde{\mathcal{H}}_\lambda(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{z})) \quad (3.42)$$

Da sich die erweiterte Hamiltonfunktion additiv zusammensetzt, d.h.

$$\mathcal{H}_\lambda(\mathbf{z}) = \frac{1}{2}\mathbf{p} \cdot \mathbf{M}^{-1}\mathbf{p} + V(\mathbf{q}) + \boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{q}) \quad (3.43)$$

ist ebenfalls die Reparametrisierung der holonomen Zwangsbedingungen notwendig:

$$\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{q}) = \tilde{\boldsymbol{\Phi}}(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{q})) \quad (3.44)$$

wobei die Invarianten  $\pi_i : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$  wiederum aus den Elementen der Mengen  $\mathbb{S}$  und  $\mathbb{T}$  (vgl. Gleichung (2.176) und (2.177)) aufgebaut werden. Damit folgt für den G-äquivalenten, diskreten Gradienten einer Zwangsbedingung  $\Phi^A$ :

$$\overline{\nabla}_{\mathbf{q}}\Phi^A(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1}) = \nabla_{\mathbf{q}}\boldsymbol{\pi}(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}})^T \overline{\nabla}_{\boldsymbol{\pi}}\tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{q}_n), \boldsymbol{\pi}(\mathbf{q}_{n+1})) \quad (3.45)$$

mit

$$\begin{aligned} \overline{\nabla}_{\boldsymbol{\pi}}\tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_n, \boldsymbol{\pi}_{n+1}) &= \nabla_{\boldsymbol{\pi}}\tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) \\ &+ \frac{\tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+1}) - \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_n) - \nabla_{\boldsymbol{\pi}}\tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)}{\|(\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)\|^2} (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n) \end{aligned} \quad (3.46)$$

Die Auswirkungen der drei hier vorgestellten Modifikationen zur Konstruktion energieerhaltender Verfahren auf ein einfaches Beispiel mit nichtlinearen Zwangsbedingungen wird in Anhang A gezeigt.

### 3.2.3. Ungleichheits-Zwangsbedingungen

Einer der anspruchsvollsten Vorgänge bei Kontakt von nichtlinearen, stark deformierbaren Körpern ist - sowohl von mathematischen Aspekten als auch von der technischen Implementierung her - die Suche nach der aktuellen Kontaktzone. Die Suchkriterien für aktive Kontakt-Zwangsbedingungen können als Ungleichheits-Zwangsbedingungen, den sog. Karush-Kuhn-Tucker (vgl. Kuhn & Tucker [57]) Bedingungen, ausgedrückt werden. Derartig gelagerte Ungleichheits-Bedingungen können unter Zuhilfenahme von *active-set* Strategien (vgl. Bergounioux et al. [9] und Hintermüller et al. [45]) eingebunden werden. Eine Anwendung dieser Strategien auf Kontakt-Zwangsbedingungen ist in Wohlmuth & Hüeber [101] bzw. in Hartmann et al. [38] beschrieben.

Die Zwangsbedingungen in Normalenrichtung  $\Phi_N^A$  gehen direkt in die Karush-Kuhn-Tucker Bedingung ein:

$$\Phi_N^A \geq 0; \quad \lambda^A \leq 0; \quad \lambda^A \Phi_N^A = 0 \quad (3.47)$$

Angewandt auf einen Kontaktvorgang wird die Forderung  $\lambda^A \leq 0$  dahingehend interpretiert, dass im Kontaktfall Druck zwischen den beiden Oberflächen bestehen muss. Eine Ausdehnung der Grenze in den positiven Bereich kann z.B. zur

Beschreibung von Adhäsionsvorgängen benutzt werden. Die Forderung  $\Phi_N^A \geq 0$  wird geometrisch interpretiert: Es besteht kein Kontakt, falls zwischen beiden Oberflächen ein Abstand besteht.

Die Problemstellung nach Gleichung (3.47) kann äquivalent als Gleichgewichtsbedingung ausgedrückt werden:

$$C(\Phi_N^A, \lambda^A) = 0 \quad (3.48)$$

mit

$$C(\Phi_N^A, \lambda^A) = \lambda^A - \max(0, \lambda^A + c \cdot \Phi_N^A) \quad (3.49)$$

wobei  $c > 0$  und angemessen hoch ist. Für die reformulierte erweiterte Hamiltonfunktion folgt:

$$\mathcal{H}_\lambda(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) + \sum_{A=1}^m \lambda^A C(\Phi_N^A, \lambda^A) \quad (3.50)$$

Hieraus werden wiederum entsprechend der Vorgehensweise in Gleichung (3.8) die hamiltonschen Gleichungen hergeleitet:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) - \nabla_{\mathbf{q}} \sum_{A=1}^m \lambda^A C(\Phi_N^A, \lambda^A) \\ \mathbf{0} &= \nabla_{\lambda} \sum_{A=1}^m \lambda^A C(\Phi_N^A, \lambda^A) \end{aligned} \quad (3.51)$$

Voraussetzung für die Reformulierung in Gleichung (3.48) ist die (komponentenweise) Differenzierbarkeit der max-Funktion und die Konvergenz des Verfahrens (vgl. Chen et al. [21]). Für eine beliebige Funktion  $\mathbf{v} \rightarrow \max(0, \mathbf{v})$  hat der Gradient  $\nabla_{\mathbf{v}}(\max(0, \mathbf{v})) = \mathbf{G}(\mathbf{v})$  nur Einträge auf der Hauptdiagonalen:

$$G_{ii} = \begin{cases} 1 & \text{if } v_i \geq 0 \\ 0 & \text{if } v_i < 0 \end{cases} \quad (3.52)$$

Gleichung (3.52) entspricht dabei einer Heavisidefunktion oder Sprungfunktion von  $\mathbf{v}$  auf der Hauptdiagonalen. Für den Gradienten von  $C(\Phi_N^A, \lambda^A)$  nach  $\mathbf{q}$  und  $\lambda$  können abhängig vom Vorzeichen des Argumentes der max-Funktion zwei verschiedene Aussagen definiert werden: Falls das Argument  $\geq 0$  ist folgt:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{q}}(\lambda^A C(\Phi_N^A, \lambda^A)) &= \nabla_{\mathbf{q}}(\lambda^A [\lambda^A - (\lambda^A + c\Phi_N^A)]) = -c\lambda^A \cdot \nabla_{\mathbf{q}} \Phi_N^A \\ \nabla_{\lambda}(\lambda^A C(\Phi_N^A, \lambda^A)) &= -c\Phi_N^A \end{aligned} \quad (3.53)$$

oder, falls das Argument  $< 0$  ist:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{q}}(\lambda^A C(\Phi_N^A, \lambda^A)) &= \nabla_{\mathbf{q}}(\lambda^A [\lambda^A - 0]) = 0 \\ \nabla_{\lambda}(\lambda^A C(\Phi_N^A, \lambda^A)) &= 2\lambda^A \end{aligned} \quad (3.54)$$

Der erste Fall beschreibt die ursprüngliche Zwangsbedingung, skaliert um einen Faktor  $c$ . Der zweite Fall entspricht mit der Forderung

$$\lambda^A = 0 \quad (3.55)$$

von der Struktur her einer Dirichlet- bzw. essentiellen Randbedingung, angewendet auf den lagrangeschen Multiplikator. Die Zwangsbedingung aus Gleichung (3.48) zerlegt damit die Gruppe aller möglich Zwangsbedingungen  $\mathcal{S}$  in zwei Untergruppen, einer Aktiven Gruppe  $\mathcal{A}$  und eine Inaktive Gruppe  $\mathcal{T}$ :

$$\mathcal{A} = \{i \in \mathcal{S} : \lambda_i + c \cdot \Phi_i < 0\}; \quad \mathcal{T} = \{i \in \mathcal{S} : \lambda_i + c \cdot \Phi_i \geq 0\} \quad (3.56)$$

Zur Implementierung kann die *primal-dual active set* Methode verwendet werden, deren Algorithmus im Folgenden dargestellt ist:

1. Initialisiere  $\mathcal{A}_k$  und  $\mathcal{T}_k$
2. Lösung des Systems nach den Unbekannten  $\mathbf{q}$  und  $\boldsymbol{\lambda}$
3. Setze  $\mathcal{A}_{k+1}$  und  $\mathcal{T}_{k+1}$  auf

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{k+1} &= \{i \in \mathcal{S} : \lambda_i + c \cdot \Phi_i < 0\} \\ \mathcal{T}_{k+1} &= \{i \in \mathcal{S} : \lambda_i + c \cdot \Phi_i \geq 0\} \end{aligned}$$

4. Abbruch unter der Bedingung  $\mathcal{A}_k = \mathcal{A}_{k+1}$  und  $\mathcal{T}_k = \mathcal{T}_{k+1}$ , anderenfalls Initialisierung einer Schleife beginnend mit Schritt 2

Beschreibt nun die Menge  $\mathcal{N}$  alle Freiheitsgrade, die nicht in den Zwangsbedingungen eingebunden sind, kann das Sattelpunktsproblem aus Gleichung (3.14) wie folgt aufgeschlüsselt werden:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{\mathcal{N}\mathcal{N}} & \mathbf{A}_{\mathcal{N}\mathcal{T}_k} & \mathbf{A}_{\mathcal{N}\mathcal{A}_k} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_{\mathcal{T}_k\mathcal{N}} & \mathbf{A}_{\mathcal{T}_k\mathcal{T}_k} & \mathbf{A}_{\mathcal{T}_k\mathcal{A}_k} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_{\mathcal{A}_k\mathcal{N}} & \mathbf{A}_{\mathcal{A}_k\mathcal{T}_k} & \mathbf{A}_{\mathcal{A}_k\mathcal{A}_k} & \mathbf{0} & \mathbf{B}_{\mathcal{A}_k} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_{\mathcal{T}_k} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{C}_{\mathcal{A}_k} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{q}_{\mathcal{N}} \\ \Delta \mathbf{q}_{\mathcal{T}_k} \\ \Delta \mathbf{q}_{\mathcal{A}_k} \\ \Delta \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{T}_k} \\ \Delta \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{A}_k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{\mathcal{N}} \\ \mathbf{R}_{\mathcal{T}_k} \\ \mathbf{R}_{\mathcal{A}_k} \\ \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{T}_k} \\ \boldsymbol{\Phi}_{\mathcal{A}_k} \end{bmatrix} \quad (3.57)$$

Die *primal-dual active set* Methode wurde bisher für Kontakt-Probleme mit linearer Elastizität und damit max. quadratischen Potentialen und allgemein nichtlinearen Zwangsbedingungen angewendet (vgl. Wohlmuth & Hübner [101]). Unter diesen Voraussetzungen ist es möglich, den Update der aktiven und inaktiven Sets nach jedem Iterations-Schritt eines iterativen Gleichungslösers anzuwenden, was unter der Bezeichnung *inexact active-set* Strategie bekannt ist.

Bei allgemein nichtlinearen Problemen zeigen sich Instabilitäten, die eine Konvergenz der *active-set* Strategie verhindern. Eine Interpretation der Zwischenergebnisse des Newton-Verfahrens durch die *active-set* Strategie zeigte in Einzelfällen

ein periodisches Springen einzelner Elemente zwischen dem aktiven und dem inaktiven Set, so dass sich keine Konvergenz des Verfahrens einstellte. Alternativ dazu kann vor jedem Update das nichtlineare System vollständig gelöst werden. Dies führt zu einem deutlich höheren Rechenaufwand, da das nichtlineare System mindestens zweimal in jedem Zeitschritt durchlaufen werden muss, dafür ist das Konvergenzverhalten jedoch stabil.

Die Diskretisierung von Gleichung (3.51) mit der mG(1) Methode entsprechend Gleichung (3.35) liefert in Verbindung mit einer G-äquivalenten Beschreibung des diskreten Gradientens nach Gleichung (2.179) und (3.45):

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n &= \Delta t \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} \\ \mathbf{p}_{n+1} - \mathbf{p}_n &= \Delta t (-\bar{\nabla}_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1}) - \bar{\nabla}_{\mathbf{q}} \sum_{A=1}^m \lambda^A C(\Phi_N^A(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1}), \lambda^A)) \\ \mathbf{0} &= \bar{\nabla}_{\lambda} \sum_{A=1}^m \lambda^A C(\Phi_N^A(\mathbf{q}_{n+1}), \lambda^A) \end{aligned} \quad (3.58)$$

Der Algorithmus der *active-set* Strategie führt die Zerlegung der Menge aller Zwangsbedingungen  $\mathcal{S}$  in eine aktive Menge  $\mathcal{A}$  und eine inaktive Menge  $\mathcal{T}$  aufgrund der Auswertung des Terms  $C(\Phi_N^A(\mathbf{q}_{n+1}), \lambda^A)$  zum Zeitpunkt  $t_{n+1}$  durch. Wird eine Zwangsbedingung  $\Phi_N^A$  von der inaktiven Gruppe  $\mathcal{T}$  in die aktive Gruppe  $\mathcal{A}$  verlegt, ist die Zwangsbedingung zum Zeitpunkt  $t_n$  im Allgemeinen nicht erfüllt. Diese Verletzung der Konsistenzforderung führt nach Gleichung (3.10) zu einer Änderung in der Energiebilanz. Eine Korrektur ist, wie schon in Abschnitt 3.2.1 gezeigt, wiederum durch Modifikationen in den Gleichungen (3.58)<sub>1</sub>, (3.58)<sub>2</sub> oder (3.58)<sub>3</sub> möglich.

### 3.2.4. Algorithmische Energieerhaltung

**Modifikation der Zwangsbedingung** Wird eine Modifikation der Zwangsbedingung, wie in Abschnitt 3.2.2 beschrieben, vorgenommen, ist eine weitere Korrektur nicht notwendig. Die Änderung in der Energie berechnet sich auch für inkonsistente Zwangsbedingungen nach Gleichung (3.36), so dass die neue Zwangsbedingung nach Gleichung (3.38) wiederum die Erhaltung der Gesamtenergie erzwingt. Eine weitere Möglichkeit zur Modifikation besteht darin, die inkonsistente Zwangsbedingung in eine konsistente umzuwandeln:

$$\tilde{\Phi}^A(\mathbf{q}_{n+1}) = \Phi^A(\mathbf{q}_{n+1}) - \Phi^A(\mathbf{q}_n) \quad (3.59)$$

Da  $\Phi_n^A$  eine Konstante für den Zeitschritt  $t_n \rightarrow t_{n+1}$  darstellt, bleiben der Gradient und damit die Impuls- und Drehimpulseigenschaften des ursprünglichen Systems erhalten.

**Impuls-Update** Wird ein Impuls-Update Verfahren, wie in Abschnitt 3.2.2 beschrieben, eingesetzt, ist ebenfalls keine weitere Korrektur notwendig. Der mit Gleichung (3.41) berechnete Korrekturfaktor  $\kappa^A$  berücksichtigt auch die durch die Inkonsistenz verursachte Änderung in der Energiebilanz, da diese in dem Term  $\tilde{H}_{n+1} - H_n$  bereits enthalten ist. Das Impuls-Update Verfahren projiziert unabhängig von der Ursache das System auf die Ebene konstanter Energie, sofern die resultierende quadratische Gleichung eine reelle Lösung besitzt.

**Modifizierter G-äquivarianter diskreter Gradient** Eine G-äquivalente Darstellung des diskreten Gradienten kann dazu verwendet werden, gezielte Änderungen in der Energiebilanz vorzunehmen, ohne in die Impuls- bzw. in die Drehimpulsbilanz einzugreifen. In den Arbeiten von Armero & Romero [4, 5] wird eine entsprechende Formulierung mit dem Ziel, ein dissipatives Zeit-Schrittverfahren zur stabilen Lösung numerisch steifer Systeme mit hoch-frequenterem Verhalten, entwickelt. Ein die Dissipation repräsentierender Term  $D_w$  wird hierfür in den diskreten Gradienten aus Gleichung (2.180) eingebaut:

$$\begin{aligned} \overline{\nabla}_\pi \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}_n, \boldsymbol{\pi}_{n+1}) &= \nabla_\pi \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) \\ &+ \frac{\tilde{H}(\boldsymbol{\pi}_{n+1}) - \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}_n) - D_w - \nabla_\pi \tilde{H}(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)}{\|(\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)\|^2} (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n) \end{aligned} \quad (3.60)$$

Eine äquivalente Übertragung auf den Gradienten der Zwangsbedingungen ergibt:

$$\begin{aligned} \overline{\nabla}_\pi \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_n, \boldsymbol{\pi}_{n+1}) &= \nabla_\pi \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) \\ &+ \frac{\tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+1}) - \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_n) - D_w - \nabla_\pi \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)}{\|(\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)\|^2} (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n) \end{aligned} \quad (3.61)$$

Ein Anpassen des Terms  $D_w$  an die durch die Inkonsistenz verursachte Änderung in der Energiebilanz mit

$$D_w = \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_n) \quad (3.62)$$

ergibt folgenden modifizierten G-äquivalenten diskreten Gradienten:

$$\begin{aligned} \overline{\nabla}_\pi \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_n, \boldsymbol{\pi}_{n+1}) &= \nabla_\pi \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) \\ &+ \frac{\tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+1}) - \nabla_\pi \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)}{\|(\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)\|^2} (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n) \end{aligned} \quad (3.63)$$

Anzumerken ist, dass diese Darstellung zu mangelhaft konditionierten Systemen führen kann. Als Beispiel dient hier ein System, das von einer einzigen Invarianten

$\pi$  abhängt:

$$\overline{\overline{\nabla}}_{\pi} \tilde{\Phi}^A(\pi_n, \pi_{n+1}) = \frac{\tilde{\Phi}^A(\pi_{n+1}) - \tilde{\Phi}^A(\pi_n)}{\pi_{n+1} - \pi_n} \quad (3.64)$$

Eine Modifikation des Differenzen-Terms  $\Delta \tilde{\Phi}^A / \Delta \pi$  hin zu  $\tilde{\Phi}^A(\pi_{n+1}) / \Delta \pi$  zeigt, dass insbesondere in den ersten Schritten des Newton-Verfahrens, d.h.  $\pi_{n+1} - \pi_n \ll \tilde{\Phi}^A(\pi_{n+1})$  der diskrete Gradient sehr hohe Werte annehmen kann.

## 4. Nichtkonforme Gebietszerlegungsmethoden

In diesem Kapitel werden Zwangsbedingungen eingeführt, die der Zerlegung eines globalen Gebietes in verschiedene Teilgebiete dienen. Die Bedeutung des Begriffs der Gebietszerlegung (*domain decomposition*) hängt dabei wesentlich von dessen Anwendung ab. Gebietszerlegungen werden zur Optimierung der Diskretisierung, z.B. durch die Verwendung unterschiedlicher Elementtypen oder zur Kopplung physikalischer Gebiete, deren zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen unterschiedlich strukturiert sind, z.B. bei Fluid/Solid-Interaktionen, eingesetzt. Des Weiteren finden sie Einsatz im Zusammenhang mit hocheffizienten, iterativen Gleichungslösern (Mehrgitter-Verfahren, vgl. Hackbusch [34] und Wohlmuth [99, 100]) und Methoden zur Parallelisierung. Im Rahmen von Kontaktvorgängen können Gebietszerlegungen zur Beschreibung von Haftvorgängen zwischen den beiden in Kontakt stehenden Oberflächen verwendet werden.

Im einfachsten Fall wird die Diskretisierung dergestalt vorgenommen, dass die jeweiligen Randknoten der Teilgebiete übereinstimmen. Ist eine solche konforme Zerlegung nicht möglich, wird der Einsatz nichtkonformer Gebietszerlegungsmethoden notwendig. Im Folgenden wird in Kapitel 4.1 eine auf Gebietszerlegungen

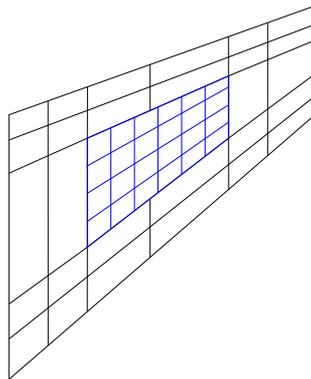


Abbildung 4.1.: Beispiel für eine nichtkonforme Gebietszerlegung

abgestimmte *node-to-segment* (NTS) Methode vorgestellt. In Kapitel 4.2 folgt die Mortar Methode, einer integralen Formulierung der Interface-Bedingungen.

Die Mortar Methode besteht den Patch-Test (Veubeke [98], Zienkiewicz & Taylor [110], Taylor et al. [96] und Zienkiewicz et al. [109]) und erfüllt die LBB-Stabilitätsbedingung (Yang et al. [108]).

## 4.1. NTS-Methode

### 4.1.1. Zwangsbedingung

Die am häufigsten implementierte Kontakt-Formulierung ist die NTS-Methode (siehe u.a. Hallquist [36], Hallquist et al. [37] und Wriggers et al. [107]). Diese Methode beruht auf der Projektion eines Knotens der diskretisierten Oberfläche des ersten Körpers (sog. Slave-Seite) auf die diskretisierte Oberfläche des zweiten Körpers (Master-Seite). Dabei wird im Zusammenhang mit 2D-Problemen von der *node-to-segment* und im Zusammenhang mit 3D-Problemen von der *node-to-surface* Methode gesprochen (siehe Wriggers [106]). Die Projektion erfolgt dabei orthogonal auf die gegenüberliegende Master-Seite. In Abb. 4.2 ist ein repräsen-

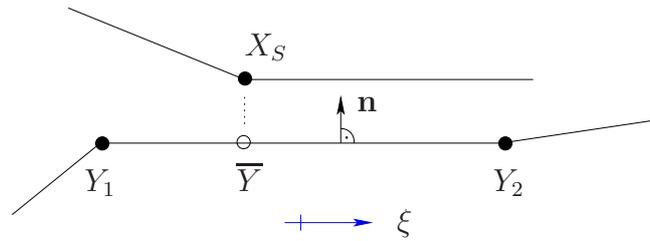


Abbildung 4.2.: Repräsentatives NTS-Element

tatives NTS Kontakt-Element dargestellt. Befindet sich der Slave-Knoten  $X_S$  in Kontakt mit dem Master-Segment  $\overline{Y_1 Y_2}$ , kann die Position von  $\overline{Y}$  mithilfe von zur Diskretisierung der unterliegenden Körper konformen Ansatzfunktionen beschrieben werden:

$$\mathbf{y}(\xi) = \frac{1}{2}(1 - \xi)\mathbf{y}_1 + \frac{1}{2}(1 + \xi)\mathbf{y}_2 = \sum_A N_A \mathbf{y}_A \quad (4.1)$$

Orientiert sich die Ordnung der Ansatzfunktionen  $N_A$  an der Ordnung der darunterliegenden Elemente, wird der Kontaktpunkt auf dem Master-Segment  $\overline{Y_1 Y_2}$  - bezeichnet mit  $\bar{\mathbf{y}} = \mathbf{y}(\bar{\xi})$  - durch die Minimierung der Funktion  $f(\xi) = \|\mathbf{x}_s - \mathbf{y}(\xi)\|$  unter Zuhilfenahme der Orthogonalitätsbedingung

$$(\mathbf{x}_s - \mathbf{y}(\bar{\xi})) \cdot \mathbf{y}' = 0 \quad (4.2)$$

mit dem Tangentenvektor  $\mathbf{y}' = \frac{1}{2}(\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1)$ , bestimmt. Einsetzen von Gleichung (4.1) in Gleichung (4.2) liefert:

$$\bar{\xi} = \frac{(\mathbf{x}_s - \frac{1}{2}(\mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_2)) \cdot \frac{1}{2}(\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1)}{\|\frac{1}{2}(\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1)\|^2} \quad (4.3)$$

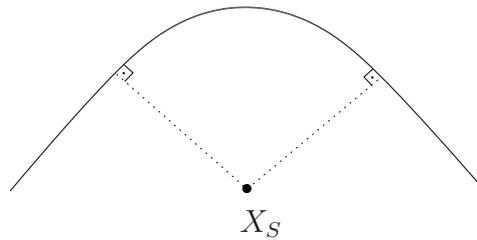


Abbildung 4.3.: Projektion auf eine nichtkonvexe Oberfläche

Aus der Definition der Orthogonalitätsbedingung in Gleichung (4.2) resultieren zwei geometrische Probleme:

- a) Ist die Oberfläche nichtkonvex, ist die Projektion unter Umständen nicht eindeutig, wie Abb. 4.3 zeigt. In der Praxis entstehen daraus im Allgemeinen keine Probleme (vgl. Laursen [58]), da zum einen nur lokale Konvexitäten bei der Evaluierung des aktiven Sets entsprechend Abschnitt 3.2.3 berücksichtigt werden müssen. Dies führt zu einer erheblichen Reduzierung derartiger Vorfälle, zum anderen ist die Orthogonalität für jeden lokalen Minimierer der Funktion  $f(\xi)$  gewährleistet.
- b) Ist die Oberfläche konvex, existiert unter Umständen keine gültige Projektion auf den diskreten Rand der Master-Seite, wie Abb. 4.4 zeigt. Derartige Si-

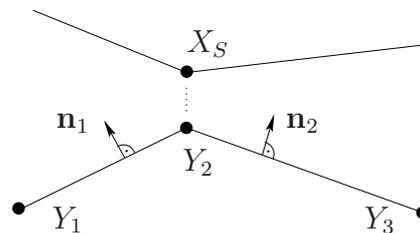


Abbildung 4.4.: Projektion auf eine konvexe Oberfläche

tuationen treten erfahrungsgemäß häufig auf. Verhindert werden können diese Zustände durch eine Glättung der Oberfläche wie sie z.B. in Wriggers [106] beschrieben sind. Dabei wird eine künstliche Oberfläche z.B. mit Hilfe  $C^1$  stetiger Hermite Polynome konstruiert, auf der alle für den Kontakt relevanten Größen definiert werden. Soll die Projektion auf die diskrete Master-Oberfläche durchgeführt werden, genügt es, während der Evaluierung des aktiven Sets eine Interpolation des Normalenvektors mit Hilfe der Ansatzfunktionen  $N_A$  nach Yang et al. [108] vorzunehmen, um die Eindeutigkeit der Projektion sicherzustellen.

Die NTS-Methode ist dergestalt konzipiert, dass ein Knoten der diskreten Oberfläche der Slave-Seite nicht durch die diskrete Oberfläche der Master-Seite dringen

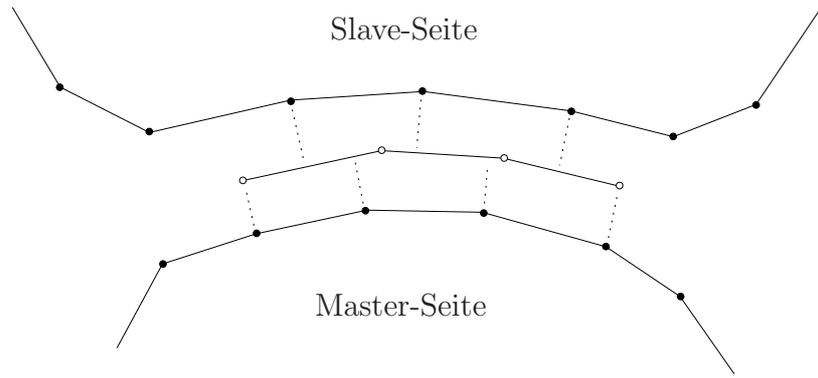


Abbildung 4.5.: Diskretisierung einer künstlichen Oberfläche

darf, d.h. für einen aktiven Knoten gilt die Zwangsbedingung:

$$\Phi(\bar{\mathbf{q}}) = \mathbf{x}_S - \mathbf{y}(\bar{\xi}) = \mathbf{x}_S - \sum_A N_A(\bar{\xi}) \mathbf{y}_A = \mathbf{0} \quad (4.4)$$

mit

$$\bar{\mathbf{q}} = (\mathbf{x}_S, \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2) \in \mathbb{R}^6 \quad (4.5)$$

Wird zusätzlich gefordert, dass die Knoten der diskreten Oberfläche der Master-Seite nicht durch die diskrete Oberfläche der Slave-Seite dringen dürfen, wird von einer 2-Pass NTS-Methode gesprochen. Dies führt allerdings häufig auf ein *over-constrained* System, das ein Verriegeln (*locking effect*) der Oberfläche zur Folge hat.

Wie beschrieben, können die Projektionen auf künstlich generierte Oberflächen durchgeführt werden (siehe u.a. McDevitt & Laursen [67], Miyazaki & Park [70], Park & Felippa [75], Park et al. [76] and Rebel et al. [82]). In den Arbeiten von Park zur Lokalisierung der lagrangeschen Multiplikatoren wird diese künstliche Oberfläche (*intermediate line*) mit eigenen Verschiebungsfreiheitsgraden versehen und mit 1-dimensionalen, masselosen Elementen approximiert. Die Zwangsbedingungen werden wie in Abb. 4.5 gezeigt, zwischen den Knotenpunkten der beiden Oberflächen der Körper und der künstlichen Oberfläche eingebunden. Die auf die künstliche Oberfläche einwirkenden Kräfte, repräsentiert durch die lagrange-schen Multiplikatoren  $\lambda_S$  und  $\lambda_M$ , erzeugen die in Abb. 4.6 dargestellte Verteilung der Kräfte und Momente

$$M(x) = \sum_A \lambda_S^A \chi^A(x) - \sum_B \lambda_M^B \chi^B(x) \quad (4.6)$$

mit den Abschnitten

$$\chi^{A/B}(x) = \begin{cases} x - x^{A/B} & \text{wenn } x \geq x^{A/B} \\ 0 & \text{wenn } x < x^{A/B} \end{cases} \quad (4.7)$$

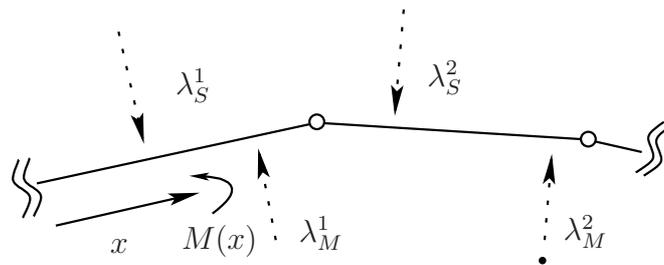


Abbildung 4.6.: Einfluß der lagrangeschen Multiplikatoren auf die künstliche Oberfläche

Die Knotenpunkte der diskreten künstlichen Oberfläche werden an den Stellen  $\bar{x}$ , unter der Bedingung  $M(\bar{x}) = 0$ , positioniert. Diese Konstruktion ermöglicht das Bestehen des Patch-Tests, wie in Rebel et al. [82] nachgewiesen wurde.

### 4.1.2. Erhaltungseigenschaften

Die Zwangsbedingungen in Gleichung (4.4) sind unter der Voraussetzung objektiv, dass die Zwangsbedingung schon während der Netzgenerierung erfüllt werden (vgl. Puso [77]). In Kontaktsituationen, in denen das genannte Kriterium zwangsläufig nicht erfüllt ist, wird die Rotationsinvarianz der Zwangsbedingung durch eine Zerlegung in einen normalen und einen tangentialen Anteil hergestellt. Im Weiteren wird gezeigt, unter welchen Bedingungen die Erhaltung insbesondere des Drehimpulses gewährleistet ist.

**Impulserhaltung** Für die Veränderung des Gesamtimpulses infolge der Einwirkungen einer Zwangsbedingung gilt:

$$\dot{\mathbf{L}}_k = \sum_i \lambda_k \nabla_{\mathbf{q}} \Phi_k^i \quad (4.8)$$

mit den zur  $k$ -ten NTS-Element gehörenden lagrangeschen Multiplikatoren  $\lambda_k$ . Da die lokale Parametrisierung  $\bar{\xi}$  keine Veränderung in der Zeit erfährt, ist die Zwangsbedingung linear in der Konfiguration. Es folgt:

$$\dot{\mathbf{L}}_k = \lambda_k (1 - \sum_A N_A) \mathbf{I} = \mathbf{0} \quad (4.9)$$

mit dem Einheitsmatrix  $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{n_{\text{dim}} \times n_{\text{dim}}}$ . Die Erhaltung des Gesamtimpulses ist damit gewährleistet. Die Impulserhaltung ist assoziiert mit der Invarianz der Zwangsbedingungen gegenüber Translationen  $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^6$ :

$$\Phi(\bar{\mathbf{q}} + \mathbf{c}) = (\mathbf{x}_S + \mathbf{c}) - \sum_A N_A (\mathbf{y}_A + \mathbf{c}) = \Phi(\bar{\mathbf{q}}) \quad (4.10)$$

**Drehimpulserhaltung** Für die Veränderung des Drehimpulses infolge der Einwirkung der Zwangsbedingung aus Gleichung (4.4) gilt:

$$\dot{\mathbf{J}}_k = \sum_i (\boldsymbol{\lambda}_k \nabla_{\mathbf{q}} \Phi_k)^i \times \bar{\mathbf{q}}^i \quad (4.11)$$

Einsetzen des Gradienten der Zwangsbedingung liefert:

$$\dot{\mathbf{J}}_k = \boldsymbol{\lambda}_k \times \mathbf{x}_S - \sum_A \boldsymbol{\lambda}_k N_A \times \mathbf{y}_A \quad (4.12)$$

Da die Drehimpulsbilanz für beliebige lagrangesche Multiplikatoren erfüllt werden soll, folgt:

$$\mathbf{x}_S - \sum_A N_A \mathbf{y}_A = \Phi_k(\bar{\mathbf{q}}) = \mathbf{0} \quad (4.13)$$

Der Drehimpuls stellt eine Erhaltungsgröße dar, solange die Zwangsbedingungen exakt erfüllt werden. Insbesondere gilt dieser Zusammenhang für die Referenzkonfiguration (vgl. Puso [77]) und ist somit eine Konstruktionsbedingung für die Generierung des FE-Netzes. Die Erhaltung des Drehimpulses ist assoziiert mit der Objektivität der Zwangsbedingungen:

$$\Phi(\mathbf{Q} \circ \bar{\mathbf{q}}) = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{x}_S - \sum_A N_A \mathbf{Q} \cdot \mathbf{y}_A = \mathbf{Q} \cdot \Phi(\bar{\mathbf{q}}) \quad \forall \mathbf{Q} \in \text{SO}(n_{\text{dim}}) \quad (4.14)$$

Auch hier zeigt sich als Bedingung zur Erhaltung des Drehimpulses, dass die Zwangsbedingungen in allen Konfigurationen exakt erhalten werden müssen.

**Energieerhaltung** Für die Energieerhaltung gelten die in Kapitel 3.2.1 dargelegten Bedingungen:

$$\nabla_{\mathbf{q}} \Phi^A(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n) = 0 \quad (4.15)$$

Die in Gleichung (4.4) vorgestellte Zwangsbedingung ist linear in der Konfiguration definiert, ihr Gradient ist somit konstant. Es gilt:

$$\nabla_{\mathbf{q}} \Phi^A(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}) \cdot (\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n) = \Phi_{n+1}^A - \Phi_n^A = 0 \quad (4.16)$$

Damit weisen die in der Konfiguration linearen Zwangsbedingungen aus Gleichung (4.4) unter Verwendung eines Mittelpunktverfahrens nach Gleichung (3.35) eine algorithmische Energieerhaltung auf.

## 4.2. Mortar-Methode

### 4.2.1. Fehlerabschätzung

Die in Abschnitt 2.2.2, Gleichung (2.96) bzw. (2.101) beschriebene Impulsbilanz kann für ausreichend glatte Funktionen als variationelles Problem aufgefasst werden (vgl. Hughes [48]):

$$A(\mathbf{w}, \mathbf{q}) = (\mathbf{w}, \mathbf{f}) \quad (4.17)$$

wobei  $\mathbf{w}$  die klassische Testfunktion einer Variationsformulierung und  $\mathbf{q}$  die exakte Lösung des Problems in Gleichung (4.17) darstellt und wie folgt definiert wird:

$$\mathbb{V} = \{ \mathbf{q} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n \mid \mathbf{q} \in H^1(\Omega), \mathbf{q} = \bar{\mathbf{q}} \text{ auf } \partial\Omega_u \} \quad (4.18)$$

$$\mathbb{Q} = \{ \mathbf{w} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n \mid \mathbf{w} \in H^1(\Omega), \mathbf{w} = 0 \text{ auf } \partial\Omega_u \} \quad (4.19)$$

$H^1(\Omega)$  kennzeichnet hier einen Sobolev-Raum. Die vektorwertige Größe  $\mathbf{f}$  fasst alle äußeren Lasten zusammen,  $A(\bullet, \bullet)$  ist eine symmetrische Bilinearform auf dem Raum  $\mathbb{V} \times \mathbb{V}$  und  $(\bullet, \bullet)$  eine Linearform auf  $\mathbb{V}$ . Exemplarisch folgt für die lineare Theorie:

$$A(\mathbf{w}, \mathbf{q}) = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{w} : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q}) \, dV \quad (4.20)$$

$$(\mathbf{w}, \mathbf{f}) = \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \mathbf{t} \, dA + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \mathbf{b} \, dV \quad (4.21)$$

Das diskrete Problem wird folgendermaßen definiert: Finde  $\mathbf{q}^h \in \mathcal{V} \subset \mathbb{V}$ , so dass:

$$A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^h) = (\mathbf{w}^h, \mathbf{f}) \quad (4.22)$$

Hierbei ist  $\mathcal{V}$  entsprechend Gleichung (2.123) definiert; analog folgt die Definition der Testfunktionen  $\mathbf{w}^h \in \mathcal{Q}$ :

$$\mathcal{V} = \{ \mathbf{q}^h : \Omega^h \rightarrow \mathbb{R}^{n_{\text{dim}}} \mid \mathbf{q}^h \in C^0(\Omega^h) \, \forall e \in \mathcal{E}^h, \mathbf{q}^h|_{(\Omega^e)} \in \mathbb{P}_N, \mathbf{q}^h = \bar{\mathbf{q}}^h \text{ auf } \partial\Omega_u^h \} \quad (4.23)$$

$$\mathcal{Q} = \{ \mathbf{w}^h : \Omega^h \rightarrow \mathbb{R}^{n_{\text{dim}}} \mid \mathbf{w}^h \in C^0(\Omega^h) \, \forall e \in \mathcal{E}^h, \mathbf{w}^h|_{(\Omega^e)} \in \mathbb{P}_N, \mathbf{w}^h = 0 \text{ auf } \partial\Omega_u^h \} \quad (4.24)$$

Wird das Gebiet  $\Omega$  im Rahmen eines Gebietszerlegungsverfahrens in  $K$  Teilgebiete  $\Omega^{(k)}$  mit  $k = [1, K]$  zerlegt, gilt:

$$\bigcup_{k=1}^K \Omega^{(k)} = \Omega \quad \text{und} \quad \partial\Omega^{(k)} \cap \partial\Omega^{(l)} = \Gamma^{k,l} \quad \text{mit} \quad l = [1, K], k \neq l \quad (4.25)$$

Unter der Voraussetzung, dass die Teilgebiete unabhängig voneinander diskretisiert werden, sind die Grenzflächen auf den diskreten Teilgebieten nicht konform zueinander. Die Bilinearform in Gleichung (4.22) setzt sich additiv über alle Teilgebiete zusammen:

$$A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^h) = \sum_{k=1}^K a_k^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^h) \quad (4.26)$$

Die Testfunktion  $\mathbf{w}^h$  wird ebenfalls in den Teilgebieten definiert:

$$\mathbf{w}^h \Big|_{\Omega^{(k)}} = \mathbf{w}^{(k)h} \quad (4.27)$$

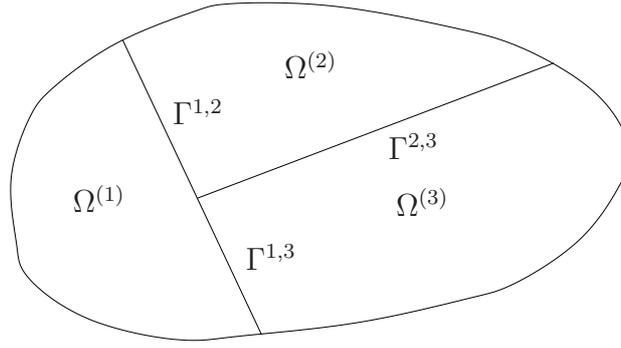


Abbildung 4.7.: Zerlegung eines Gebietes in drei Teilgebiete

Wird eine Lösung  $\mathbf{q}^{*h}$  unter der Bedingung

$$\mathbf{q}^{*h} : \inf_{\mathbf{w}^h \in \mathcal{Q}} A^h(\mathbf{q} - \mathbf{w}^h, \mathbf{q} - \mathbf{w}^h) \quad (4.28)$$

gesucht, entspricht  $\mathbf{q}^{*h}$  unter Berücksichtigung einer konformen Diskretisierung im Rahmen eines Galerkin-Verfahrens der Lösung  $\mathbf{q}^h$ , was einer Projektion von  $\mathbf{q} \in \mathbb{V}$  in den Raum  $\mathcal{V}$  entspricht (vgl. Hughes [48]). Infolge der aus Gleichung (4.26) resultierenden Nichtkonformität der Testfunktionen auf dem Rand  $\Gamma^{k,l}$  stimmen die Lösungen  $\mathbf{q}^{*h}$  und  $\mathbf{q}^h$  im Allgemeinen nicht überein. Des Weiteren erfüllt in diesem Fall die exakte Lösung  $\mathbf{q}$  Gleichung (4.22) nicht:

$$A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}) \neq (\mathbf{w}^h, \mathbf{f}) \quad (4.29)$$

Dies führt zusätzlich zu den bekannten Approximationsfehlern zu einem Konsistenzfehler. Der Diskretisierungsfehler  $\|\mathbf{q} - \mathbf{q}^h\|_{A^h}$ , abhängig von der Norm:

$$\|\bullet\|_{A^h} = [A^h(\bullet, \bullet)]^{\frac{1}{2}} \quad (4.30)$$

wird beschränkt durch die Gleichung:

$$\|\mathbf{q} - \mathbf{q}^h\|_{A^h} = \inf_{\mathbf{w}^h \in \mathcal{Q}} \|\mathbf{q} - \mathbf{w}^h\|_{A^h} + \sup_{\mathbf{w}^h \in \mathcal{Q}, \mathbf{w}^h \neq 0} \frac{|A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}) - A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^h)|}{\|\mathbf{w}^h\|_{A^h}} \quad (4.31)$$

wobei der erste Term auf der rechten Seite aus der Dreiecksungleichung wird, und, basierend auf dem Ergebnis dieser Ungleichungsbeziehung, mithilfe der Cauchy-Schwarz-Ungleichung der zweite Term der rechten Seite hergeleitet werden kann (siehe Laursen [59]):

$$\begin{aligned} \|\mathbf{q} - \mathbf{q}^h\|_{A^h} &\leq \|\mathbf{q} - \mathbf{q}^{*h}\|_{A^h} + \|\mathbf{q}^{*h} - \mathbf{q}^h\|_{A^h} \\ &\leq \inf_{\mathbf{w}^h \in \mathcal{Q}} \|\mathbf{q} - \mathbf{w}^h\|_{A^h} + \|\mathbf{q}^{*h} - \mathbf{q}^h\|_{A^h} \end{aligned} \quad (4.32)$$

Die zweite Zeile ist gültig, da  $\mathbf{q}^h \in \mathcal{V}$ , gemessen in der Energie-Norm  $\|\bullet\|_{A^h}$ , am nächsten zu  $\mathbf{q}$  liegt und  $\mathbf{w}^h$  ein Element von  $\mathcal{Q}$  ist. Für den zweiten Term folgt:

$$|A^h(\mathbf{q}^{*h} - \mathbf{q}^h, \mathbf{w}^h)| \leq \|\mathbf{q}^{*h} - \mathbf{q}^h\|_{A^h} \cdot \|\mathbf{w}^h\|_{A^h} \quad (4.33)$$

und da  $\mathbf{q}^{*h}$  die Projektion von  $\mathbf{q} \in \mathbb{V}$  nach  $\mathcal{V}$  ist, gilt:  $A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^{*h}) = A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q})$ , woraus zusammen mit den Eigenschaften einer Bilinearform folgt:

$$\|\mathbf{q}^{*h} - \mathbf{q}^h\|_{A^h} = \sup_{\mathbf{w}^h \in \mathcal{Q}, \mathbf{w}^h \neq 0} \frac{|A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}) - A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^h)|}{\|\mathbf{w}^h\|_{A^h}} \quad (4.34)$$

Unter Verwendung einer  $H_1$  Norm  $|||\bullet|||$  mit

$$|||\bullet||| = \sum_{k=1}^K \int_{\Omega^{(k)}} [\bullet \cdot \bullet] + [\nabla \bullet \cdot \nabla \bullet] \, dV \quad (4.35)$$

kann Gleichung (4.31) entsprechend *Strangs lemma* (vgl. Strang & Fix [94]) geschrieben werden als:

$$|||\mathbf{q} - \mathbf{q}^h||| = \underbrace{\inf_{\mathbf{w}^h \in \mathcal{Q}} |||\mathbf{q} - \mathbf{w}^h|||}_{\text{Approximationsfehler}} + \underbrace{\sup_{\mathbf{w}^h \in \mathcal{Q}, \mathbf{w}^h \neq 0} \frac{|A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}) - A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^h)|}{|||\mathbf{w}^h|||}}_{\text{Konsistenzfehler}} \quad (4.36)$$

Daraus folgt, dass der absolute Wert des Konsistenzfehlers maßgeblich von der Differenz  $|A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}) - A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^h)|$  und die Konvergenzrate von dem Verhältnis dieser Differenz zu  $|||\mathbf{w}^h|||$  beeinflusst wird. Für die Differenz folgt

$$\begin{aligned} A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}) - A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^h) &= \sum_{k=1}^K \left[ \int_{\Omega^{(k)}} \nabla \mathbf{w}^h : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q}) \, dV - a_k^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^h) \right] \\ &= \sum_{k=1}^K \left[ \int_{\Omega^{(k)}} -\mathbf{w}^h \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q}) \, dV - a_k^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^h) \right. \\ &\quad \left. + \int_{\partial\Omega^{(k)}} \mathbf{w}^h \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q}) \mathbf{n} \, d\Gamma + \int_{\partial\Omega^{(k)}} \mathbf{w}^h \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q}) \mathbf{n} \, dA \right] \\ &= \sum_{k=1}^K \left[ \int_{\Omega^{(k)}} \mathbf{w}^h \mathbf{f} \, dV - a_k^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^h) + \int_{\partial\Omega^{(k)}} \mathbf{w}^h \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q}) \mathbf{n} \, d\Gamma \right] \\ &= \sum_{k=1}^K \int_{\partial\Omega^{(k)}} \mathbf{w}^h \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q}) \mathbf{n} \, d\Gamma \end{aligned} \quad (4.37)$$

Jede Grenzfläche kann eindeutig diskretisiert werden:

$$\partial\Omega^{(k)h} = \bigcup_{l \in \bar{M}(k)} \Gamma^{k,l^h} \quad (4.38)$$

mit  $\bar{M}(k) \subset [1, K] \quad \forall \partial\Omega^{(l)} \cap \Omega^{(k)}$ . Die Grenzfläche kann mit einer Menge  $\mathbb{K}$  eindeutig beschrieben werden (Wohlmuth [100]):

$$\mathbb{K} = \bigcup_{k=1}^K \bigcup_{l \in M(k)} \Gamma^{k,l^h} \quad (4.39)$$

mit  $M(k) \subset \bar{M}(k)$ . Zusammen mit einer neu definierten Sprung-Funktion  $[\mathbf{w}^h] = \mathbf{w}^{(k)}|_{k,l} - \mathbf{w}^{(k)}|_{l,k}$  folgt:

$$A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}) - A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^h) = \int_{\mathbb{K}} \mathbf{t} \cdot [\mathbf{w}^h] \, d\Gamma \quad (4.40)$$

Gleichung (4.40) verdeutlicht in Verbindung mit Gleichung (4.4) den Konsistenzfehler, der durch die Verwendung der NTS-Methode entsteht, da anstelle einer integralen Formulierung eine Punktweise Auswertung in  $\mathbb{K}$  vorgenommen wird.

### 4.2.2. Zwangsbedingung

Basierend auf der in Abschnitt 4.2.1 gezeigten Fehlerabschätzung ist die sog. Mortar-Methode entwickelt worden. Die Zwangsbedingung dieser Methode leitet sich direkt aus Gleichung (4.40) her, wie es u.a. in Bernadi et al. [10] und in Wohlmuth [99] gezeigt ist. Die integrale Formulierung in Gleichung (4.40) stellt einen Teil der Impulsbilanz dar, also nach Gleichung (3.8) den Gradienten der erweiterten Hamilton Formulierung in Gleichung (3.7). Werden des Weiteren die einwirkenden Oberflächenkräfte  $\mathbf{PN} = \mathbf{t}$  als lagrangesche Multiplikatoren  $\boldsymbol{\lambda}$  interpretiert, kann die diskrete Zwangsbedingung  $\Phi$  definiert werden als:

$$\boldsymbol{\lambda} \cdot \Phi(\mathbf{q}) = \int_{\mathbb{K}} \boldsymbol{\lambda}^h \cdot [\mathbf{x}^{(2)h} - \mathbf{x}^{(1)h}] \, d\Gamma \quad (4.41)$$

Auf der Seite  $\Gamma^{k,l}$ , oft auch als *non-Mortar*-Seite bezeichnet, werden sowohl die Geometrie  $\mathbf{x}^{(1)h}$ , als auch die lagrangeschen Multiplikatoren definiert. Auf der Seite  $\Gamma^{l,k}$ , der sog. *Mortar*-Seite, wird die Geometrie  $\mathbf{x}^{(2)h}$  definiert, wobei  $(\bullet)^{(1,2)}$  die entsprechende Seite angibt. Die Diskretisierung der Größen erfolgt konform

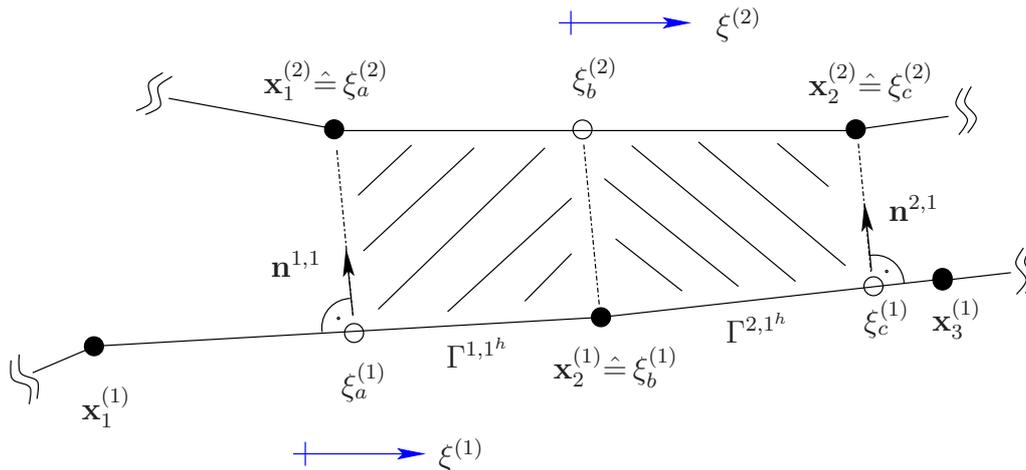


Abbildung 4.8.: Repräsentative Mortar-Segmente

mit der Diskretisierung der Oberfläche der Teilgebiete  $\Omega^{(k)}$ :

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\lambda}^h &= \sum_A N_A(\xi^{(1)}) \boldsymbol{\lambda}_A \\
 \mathbf{x}^{(1)h} &= \sum_B N_B(\xi^{(1)}) \mathbf{x}_B^{(1)} \\
 \mathbf{x}^{(2)h} &= \sum_C N_C(\xi^{(2)}) \mathbf{x}_C^{(2)}
 \end{aligned} \tag{4.42}$$

Im Allgemeinen gilt dabei  $N_A = N_B$ ; Anwendungen, in denen der Grad der Ansatzfunktionen der lagrangeschen Multiplikatoren gegenüber dem Grad der Ansatzfunktionen der Geometrie um eins erniedrigt wurde, finden sich z.B. in Puso et al. [79]. Da die Parametrisierungen  $\xi^{(1)}$  und  $\xi^{(2)}$  auf nichtkonformen Oberflächen ausgeführt werden, ist eine Segmentierung entsprechend Abb. 4.8 vorzunehmen, wie sie in ähnlicher Form von Simo et al. [91] vorgeschlagen wurde. Modifizierte Formen der Segmentierung sind u.a. in Taylor & Papadopoulos [95], McDevitt & Laursen [67] und Yang et al. [108] zu finden. Der zur orthogonalen Projektion der Knotenpunkte auf die gegenüberliegenden Flächen verwendete Normalenvektor soll im Folgenden grundsätzlich auf der *non-Mortar* Seite definiert werden. Die hier verwendete Definition ermöglicht es, die Integration über ein Segment mit einem konstant bleibenden Normalenvektor durchzuführen, was insbesondere im Kontakt-Fall von Bedeutung ist. Andere Definitionen des Normalenvektors sind möglich (u.a. Wriggers [106], Laursen [59] and Yang et al. [108]), werden im Weiteren aber nur zur Sicherstellung der Eindeutigkeit der Projektionen (vgl. Abschnitt 4.1.1) verwendet.

Zunächst betrachten wir ein repräsentatives Mortar-Segment  $\Gamma^{1,1}$ . Die für dieses Segment relevanten Knotenpunkte an den Rändern der Elemente können in einem

Vektor zusammengefasst werden:

$$\bar{\mathbf{q}}^{\text{seg}} = (\mathbf{x}_1^{(1)}, \mathbf{x}_2^{(1)}, \mathbf{x}_1^{(2)}, \mathbf{x}_2^{(2)}) \in \mathbb{R}^8 \quad (4.43)$$

Das Mortar-Segment wird dabei begrenzt durch die lokalen Parameter  $\xi_a^{(1)}, \xi_b^{(1)}, \xi_a^{(2)}, \xi_b^{(2)}$ . Da die lokalen Parameter  $\xi_b^{(1)}$  und  $\xi_a^{(2)}$  (gefüllte Kreise in Abb. 4.8) nicht konfigurationsabhängig sind, müssen nur die Parameter  $\xi_a^{(1)}$  und  $\xi_b^{(2)}$  für dieses Segment bestimmt werden:

$$\begin{aligned} \xi_a^{(1)} &= \frac{2(\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)}) \cdot (\mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(1)})}{\|\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)}\|^2} - 1 & \xi_b^{(1)} &= 1 \\ \xi_b^{(2)} &= \frac{(2\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_2^{(2)}) \cdot (\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)})}{(\mathbf{x}_2^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(2)}) \cdot (\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)})} & \xi_a^{(2)} &= -1 \end{aligned} \quad (4.44)$$

Da die Projektionen vom aktuellen Mortar-Segment abhängig sind, gilt z.B. für das Mortar-Segment  $\Gamma^{2,1}$ :

$$\bar{\mathbf{q}}^{\text{seg}} = (\mathbf{x}_2^{(1)}, \mathbf{x}_3^{(1)}, \mathbf{x}_1^{(2)}, \mathbf{x}_2^{(2)}) \in \mathbb{R}^8 \quad (4.45)$$

und für die lokale Parametrisierung:

$$\begin{aligned} \xi_b^{(1)} &= -1 & \xi_c^{(1)} &= \frac{2(\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)}) \cdot (\mathbf{x}_2^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(1)})}{\|\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)}\|^2} - 1 \\ \xi_c^{(2)} &= 1 & \xi_b^{(2)} &= \frac{(2\mathbf{x}_1^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_2^{(2)}) \cdot (\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)})}{(\mathbf{x}_2^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(2)}) \cdot (\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)})} \end{aligned} \quad (4.46)$$

Zwei weitere Kombinationen (Projektion beider Knoten der *non-Mortar* auf die *Mortar* Seite bzw. umgekehrt) sind möglich und setzen sich entsprechend aus Gleichung (4.44) und (4.46) zusammen. Die numerische Integration über das repräsentative Mortar-Segment  $\Gamma^{1,1}$  wird unter Zuhilfenahme einer isoparametrischen Transformation, hier am Beispiel einer linearen Abbildung  $[-1, 1] \ni \eta \rightarrow \xi^{(\alpha)}$  gezeigt, ausgeführt:

$$\xi^{(\alpha)} = \frac{1}{2}(1 - \eta)\xi_a^{(\alpha)} + \frac{1}{2}(1 + \eta)\xi_b^{(\alpha)} \quad (4.47)$$

Damit folgt für die diskreten Größen:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\lambda}^h &= \sum_A N_A(\xi^{(1)}(\eta)) \boldsymbol{\lambda}_A \\ \mathbf{x}^{(1)h} &= \sum_B N_B(\xi^{(1)}(\eta)) \mathbf{x}_B^{(1)} \\ \mathbf{x}^{(2)h} &= \sum_C N_C(\xi^{(2)}(\eta)) \mathbf{x}_C^{(2)} \end{aligned} \quad (4.48)$$

Das Einsetzen der Beziehungen aus den Gleichungen (4.48) in Gleichung (4.41) liefert die diskreten Zwangsbedingungen der Mortar-Methode:

$$\Phi_A(\mathbf{q}) = \bigcup_{\text{seg}} \Phi_A^{\text{seg}}(\bar{\mathbf{q}}) \quad (4.49)$$

mit den Segment-Beiträgen:

$$\Phi_A^{\text{seg}}(\bar{\mathbf{q}}) = \sum_B n_{AB}^{\text{seg},(1)} \mathbf{x}_B^{(1)} - \sum_C n_{AC}^{\text{seg},(2)} \mathbf{x}_C^{(2)} \quad (4.50)$$

und den zugehörigen Mortar-Integralen:

$$\begin{aligned} n_{AB}^{\text{seg},(1)} &= \int_{\Gamma^{\text{seg}}} N_A^{(1)}(\xi^{(1)}(\eta)) N_B^{(1)}(\xi^{(1)}(\eta)) \, d\Gamma \\ n_{AC}^{\text{seg},(2)} &= \int_{\Gamma^{\text{seg}}} N_A^{(1)}(\xi^{(1)}(\eta)) N_C^{(2)}(\xi^{(2)}(\eta)) \, d\Gamma \end{aligned} \quad (4.51)$$

Die Tangente entlang des Segments  $\Gamma^{\text{seg}}$  wird in der Referenzkonfiguration beschrieben mit:

$$\frac{d\mathbf{X}^{(1)h}}{d\eta} = \frac{1}{4}(\mathbf{X}_2^{(1)} - \mathbf{X}_1^{(1)})(\xi_b^{(1)} - \xi_a^{(1)}) \quad (4.52)$$

Konsistent damit folgt:

$$d\Gamma = \frac{1}{4} \|\mathbf{X}_2^{(1)} - \mathbf{X}_1^{(1)}\| (\xi_b^{(1)} - \xi_a^{(1)}) \quad (4.53)$$

Die Vorgehensweise für 3-dimensionale Strukturen ist äquivalent (vgl. Puso [77] und Puso & Laursen [78]). Anstelle von ein-dimensionalen Segmenten entstehen zwei-dimensionale Polygonzüge, über die integriert werden muss. Vertiefende Analysen insbesondere des Einflusses der Ansatzfunktionen der lagrangeschen Multiplikatoren finden sich in Kim et al. [52], Flemisch et al. [25] und in Wohlmuth [99]. In der zuletzt genannten Arbeit finden sich spezielle Ansatzfunktionen  $\hat{N}_A$  für die lagrangeschen Multiplikatoren mit der Eigenschaft:

$$\int_{\mathbb{K}} \hat{N}_A N_B \, d\Gamma = \delta_{AB} \int_{\mathbb{K}} N_A \, d\Gamma \quad (4.54)$$

Bedingt durch diese Orthogonalitätsbedingung wird die in Gleichung (3.25) aufgeführte Matrix  $\mathbf{D}$  diagonal besetzt, was die zur Kondensation der lagrangeschen Multiplikatoren notwendige Invertierung von  $\mathbf{D}$  (vgl. Gleichung (3.27)) erheblich vereinfacht (siehe u.a. Wohlmuth & Krause [102] und Wohlmuth & Lamichhane [103]).

### 4.2.3. Erhaltungseigenschaften

Für die segmentweise definierten Zwangsbedingungen der Mortar-Methode in Gleichung (4.50) gelten für die Erhaltungseigenschaften die gleichen Bedingungen wie sie schon für die NTS-Methode hergeleitet wurden.

**Impulserhaltung** Die Mortarintegrale aus Gleichung (4.51) werden in der Referenzkonfiguration ausgewertet und sind damit nicht von der aktuellen Konfiguration abhängig. Daher folgt für die Impulsbilanz entsprechend Gleichung (4.8):

$$\dot{\mathbf{L}}_A = \bigcup_{\text{seg}} \lambda_A \left[ \sum_B n_{AB}^{\text{seq},(1)} - \sum_C n_{AC}^{\text{seq},(2)} \right] \quad (4.55)$$

aufgrund der fundamentalen Eigenschaft von Ansatzfunktionen

$$\sum_B N_B = \sum_C N_C = 1 \quad (4.56)$$

folgt für beliebige Werte von  $\lambda_A$ :

$$\sum_{B,C} [n_{AB}^{\text{seq},(1)} - n_{AC}^{\text{seq},(2)}] = 0 \quad (4.57)$$

Die Translationsinvarianz, wie sie schon in Gleichung (4.10) verwendet wurde, liefert das gleiche Ergebnis:

$$\Phi_A(\mathbf{q} + \mathbf{c}) = \bigcup_{\text{seg}} \left[ \sum_B n_{AB}^{\text{seq},(1)}(\mathbf{x}_B^{(1)} + \mathbf{c}) - \sum_C n_{AC}^{\text{seq},(2)}(\mathbf{x}_C^{(2)} + \mathbf{c}) \right] = \Phi_A(\mathbf{q}) \quad (4.58)$$

**Drehimpulserhaltung** Für die Drehimpulsbilanz folgt nach Gleichung (4.11):

$$\dot{\mathbf{J}}_A = \bigcup_{\text{seg}} \lambda_A \times \left[ \sum_B n_{AB}^{\text{seq},(1)} \mathbf{x}_B^{(1)} - \sum_C n_{AC}^{\text{seq},(2)} \mathbf{x}_C^{(2)} \right] \quad (4.59)$$

womit wiederum aufgrund der Beliebigkeit der lagrangeschen Multiplikatoren folgt:

$$\bigcup_{\text{seg}} \sum_B n_{AB}^{\text{seq},(1)} \mathbf{x}_B^{(1)} - \sum_C n_{AC}^{\text{seq},(2)} \mathbf{x}_C^{(2)} = \Phi(\mathbf{q}) = 0 \quad (4.60)$$

Für die Drehimpulserhaltung gelten daher die gleichen Forderungen, die schon für die NTS-Methode formuliert wurden: Der Drehimpuls stellt eine Erhaltungsgröße

dar, solange die Zwangsbedingungen exakt erfüllt werden, insbesondere in der Referenzkonfiguration (Puso [77]). Die Prüfung auf Rotationsinvarianz entsprechend Gleichung (4.14) liefert die gleiche Aussage:

$$\begin{aligned} \Phi_A(\mathbf{Q} \circ \bar{\mathbf{q}}) &= \bigcup_{\text{seg}} \left[ \sum_B n_{AB}^{\text{seq},(1)} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{x}_B^{(1)} - \sum_C n_{AC}^{\text{seq},(2)} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{x}_C^{(2)} \right] \\ &= \mathbf{Q} \cdot \Phi_A(\mathbf{q}) \quad \forall \mathbf{Q} \in \text{SO}(2) \end{aligned} \quad (4.61)$$

**Energieerhaltung** Für den Einfluß der Zwangsbedingung auf die Energiebilanz gelten die gleichen Aussagen wie in Abschnitt 4.1.2: Da die Zwangsbedingung linear in der Konfiguration definiert ist, ist deren Gradient konstant. Dies führt nach Gleichung (4.16) dazu, dass die Energiebilanz unabhängig von der Zwangsbedingung ist.

#### 4.2.4. Nitsche-Methode

Interessant ist des Weiteren die zur Mortar-Methode eng verwandte Nitsche-Methode (siehe u.a. Nitsche [71], Stenberg [92], Becker et al. [7], Heinrich & Poenitz [41], Heinrich & Jung [40] und Fritz [26]), die anstelle der Einführung zusätzlicher Freiheitsgrade in der Form von lagrangeschen Multiplikatoren auf einer Erweiterung der Bilinearform für geometrisch lineare Probleme beruht (vgl. Mergheim et al. [69]):

$$\begin{aligned} A^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{q}^h) &= \int_{\Omega} \nabla^{\text{sym}} \mathbf{w}^h : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q}^h) \, dV - \int_{\partial\Omega} \{\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q}^h)\} \mathbf{n}[\mathbf{w}^h] \, d\Gamma \\ &\quad - \int_{\partial\Omega} \{\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{w}^h)\} \mathbf{n}[\mathbf{q}^h] \, d\Gamma + \frac{\Theta}{h} \int_{\partial\Omega} [\mathbf{q}^h][\mathbf{w}^h] \, d\Gamma \end{aligned} \quad (4.62)$$

mit der Durchschnittsbildung  $\{\bullet\} = \frac{1}{2}(\bullet_1 + \bullet_2)$ , dem Sprung  $[\bullet] = (\bullet_1 - \bullet_2)$ , der Elementlänge  $h$  und einer Penalty-Konstanten  $\Theta$ . Auch wenn die Nitsche-Methode hier nicht vertiefend betrachtet werden soll, stellt sie aufgrund ihrer Flexibilität durch die Verwendung eines Penalty-Terms eine interessante Ergänzung dar.

## 5. Kontakt

Allgemeine Kontakt-Zwangsbedingungen sind im Unterschied zu den im vorherigen Kapitel vorgestellten Gebietszerlegungsverfahren als Ungleichheits-Zwangsbedingungen

(Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen, Gleichung (3.47)) definiert. Da diese Bedingungen normal zur Oberfläche definiert werden, ist eine Ausrichtung der Zwangsbedingungen in einen normalen und einen tangentialen Anteil notwendig. Die Implementierung der Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen erfolgt mithilfe der *Active-Set* Strategie, wie sie schon in Abschnitt 3.2.3 für allgemeine Zwangsbedingungen vorgestellt wurde. Die diskrete Form dieser Strategie beinhaltet eine Verletzung der Konsistenzforderung mit zweierlei Auswirkungen: Zum einen wird die Energiebilanz verletzt, zum anderen entstehen starke Oszillationen in den lagrangeschen Multiplikatoren. Diese Oszillationen können durch eine Modifikation der Massenmatrix, erzeugt durch eine gezielte Veränderung der Quadratur-Formel, wie es in Hager et al. [35] und Brunssen et al. [20] gezeigt wird, verhindert werden. Die mechanischen Eigenschaften der Körper bleiben dabei erhalten.

Wie folgend gezeigt wird, gewährleistet die Zerlegung der Zwangsbedingung in einen normalen und in einen tangentialen Anteil die Objektivität der Zwangsbedingungen und damit deren Erhaltungseigenschaften. Die orthogonale Projektion der Geometrie ist abhängig von der aktuellen Konfiguration, so dass u.a. die Mortar-Integrale (Gleichung (4.51)<sub>1</sub> und (4.51)<sub>2</sub>) ebenfalls in der aktuellen Konfiguration ausgewertet werden müssen.

Neben zahlreichen Werken zur NTS-Methode (siehe u.a. Hallquist [37], Wriggers [106] und Laursen [59]), existieren eine Reihe von Abhandlungen zur Anwendung der Mortar-Methode auf den Kontakt-Fall, u.a. McDevitt & Laursen [67], Puso & Laursen [78], Hieber & Wohlmuth [47], Fischer & Wriggers [23] und Fischer & Wriggers [24].

Weiter wird in Kapitel 5.1 die NTS-Methode, in Kapitel 5.2 die Mortar-Methode, angewandt auf den reibungsfreien Kontakt, sowie die G-äquivalente Darstellung beider Methoden hergeleitet.

## 5.1. NTS-Methode

### 5.1.1. Zwangsbedingung

Die NTS-Methode basiert auf der Projektion von diskreten Knoten einer Slave-Oberfläche auf eine Master-Oberfläche, wie in Abb. 4.2 gezeigt. Für die Zwangsbedingung in Normalenrichtung folgt nach Gleichung (4.4):

$$\Phi_N(\bar{\mathbf{q}}) = (\mathbf{x}_S - \sum_A N_A \mathbf{y}_A) \cdot \mathbf{n} \quad (5.1)$$

mit dem normierten und normal zur Oberfläche stehenden Vektor  $\mathbf{n}$ :

$$\mathbf{n} = -\mathbf{\Lambda}(\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) / \|\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1\| \quad (5.2)$$

und der konstanten Matrix  $\mathbf{\Lambda}$ :

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.3)$$

Für lineare Elemente folgt:

$$\Phi_n(\bar{\mathbf{q}}) = (\mathbf{x}_S - \frac{1}{2}(1 - \bar{\xi})\mathbf{y}_1 - \frac{1}{2}(1 + \bar{\xi})\mathbf{y}_2) \cdot \mathbf{n} \quad (5.4)$$

Das Einsetzen von Gleichung (5.2) in Gleichung (5.4) liefert unter Zuhilfenahme der Eigenschaften der schiefsymmetrischen Matrix  $\mathbf{\Lambda}$ , mit

$$\mathbf{\Lambda}^T = \mathbf{\Lambda}^{-1} = -\mathbf{\Lambda} \quad \text{und} \quad \mathbf{\Lambda}^2 = -\mathbf{I} \quad (5.5)$$

die folgende, vereinfachte Form der Zwangsbedingung:

$$\Phi_N = \frac{(\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) \cdot \mathbf{\Lambda}(\mathbf{x}_S - \frac{1}{2}(\mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_2))}{\|\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1\|} \quad (5.6)$$

Die orthogonale Projektion von  $\mathbf{x}_S$  auf die Master-Oberfläche mithilfe des lokalen Parameters  $\bar{\xi}$  (Gleichung (4.3)) ist dabei nicht konstant, da sie sich mit der jeweils aktuellen Konfiguration ändert. Dennoch ist der Gradient von Gleichung (5.4) aufgrund von Orthogonalitätsbedingungen relativ einfach strukturiert:

$$\nabla_{\bar{\mathbf{q}}} \Phi(\bar{\mathbf{q}}) = \begin{bmatrix} \mathbf{n} \\ -\frac{1}{2}(1 - \bar{\xi})\mathbf{n} \\ \frac{1}{2}(1 + \bar{\xi})\mathbf{n} \end{bmatrix} \quad (5.7)$$

### 5.1.2. G-äquivalente Darstellung

Zur Reparametrisierung der Zwangsbedingung aus Gleichung (5.6) werden 2 quadratische Invarianten definiert:

$$\pi_1(\bar{\mathbf{q}}) = (\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) \cdot \mathbf{\Lambda} \left( \mathbf{x}_S - \frac{1}{2} (\mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_2) \right) \quad (5.8)$$

$$\pi_2(\bar{\mathbf{q}}) = (\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) \cdot (\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) \quad (5.9)$$

Für die Zwangsbedingung folgt damit:

$$\Phi_N(\bar{\mathbf{q}}) = \tilde{\Phi}_N(\boldsymbol{\pi}(\bar{\mathbf{q}})) = \frac{\pi_1(\bar{\mathbf{q}})}{\sqrt{\pi_2(\bar{\mathbf{q}})}} \quad (5.10)$$

Die Invariante  $\pi_2(\bar{\mathbf{q}})$  ist dabei ein Element der Menge  $\mathbb{S}$  (vgl. Gleichung (2.176)). Die Invariante  $\pi_1(\bar{\mathbf{q}})$  kann reformuliert werden als:

$$\pi_1(\bar{\mathbf{q}}) = \mathbf{y}_2 \cdot \mathbf{\Lambda} \mathbf{x}_S + \mathbf{y}_1 \cdot \mathbf{\Lambda} \mathbf{y}_2 + \mathbf{x}_S \cdot \mathbf{\Lambda} \mathbf{y}_1 \quad (5.11)$$

Da die Beziehung  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{\Lambda} \mathbf{b} = \det([\mathbf{a}, \mathbf{b}])$  gilt, ist  $\pi_1(\bar{\mathbf{q}})$  ein Element der Menge  $\mathbb{T}$  (vgl. Gleichung (2.177))

### 5.1.3. Erhaltungseigenschaften

Aufgrund ihrer Definition sind Invarianten und alle Zwangsbedingungen, die ausschließlich von Invarianten abhängig sind, objektiv. Unterliegen die Invarianten und damit auch den in den Invarianten definierten Zwangsbedingungen einer kontinuierlichen Symmetrie, so existiert nach dem Noether-Theorem (vgl. Abschnitt 2.1.3) eine Erhaltungsgröße und umgekehrt. Im Folgenden wird, wie schon in Abschnitt 4.1.2 als auch im Abschnitt 4.2.3, als Symmetriegruppe eine Translationsgruppe zum Nachweis der Impulserhaltung und eine Rotationsgruppe zum Nachweis der Drehimpulserhaltung verwendet.

**Impulserhaltung** Für den Nachweis der Impulserhaltung genügt es, die Translationsinvarianz der Invarianten zu zeigen, da

$$\Phi_N(\bar{\mathbf{q}} + \mathbf{c}) = \tilde{\Phi}_N(\boldsymbol{\pi}(\bar{\mathbf{q}} + \mathbf{c})) = \tilde{\Phi}_N(\boldsymbol{\pi}(\bar{\mathbf{q}})) = \Phi_N(\bar{\mathbf{q}}) \quad (5.12)$$

gelten muss. Es folgt für die Invariante  $\pi_1$ :

$$\begin{aligned} \pi_1(\bar{\mathbf{q}} + \mathbf{c}) &= ((\mathbf{y}_2 + \mathbf{c}) - (\mathbf{y}_1 + \mathbf{c})) \cdot \mathbf{\Lambda} \left( (\mathbf{x}_S + \mathbf{c}) - \frac{1}{2} (\mathbf{y}_1 + \mathbf{c} + \mathbf{y}_2 + \mathbf{c}) \right) \\ &= (\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) \cdot \mathbf{\Lambda} \left( \mathbf{x}_S - \frac{1}{2} (\mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_2) \right) = \pi_1(\bar{\mathbf{q}}) \end{aligned} \quad (5.13)$$

und für die Invariante  $\pi_2$ :

$$\begin{aligned} \pi_2(\bar{\mathbf{q}} + \mathbf{c}) &= ((\mathbf{y}_2 + \mathbf{c}) - (\mathbf{y}_1 + \mathbf{c})) \cdot ((\mathbf{y}_2 + \mathbf{c}) - (\mathbf{y}_1 + \mathbf{c})) \\ &= (\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) \cdot (\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) = \pi_2(\bar{\mathbf{q}}) \end{aligned} \quad (5.14)$$

Zurückkommend auf die ursprüngliche Definition der Erhaltungseigenschaft als Änderung des Impulses in der Zeit (Gleichung (4.8)) folgt:

$$\dot{\mathbf{L}}_k = \lambda_k \left(1 - \sum_A N_A\right) \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad (5.15)$$

Dies weist wiederum die Impulserhaltung nach.

**Drehimpulserhaltung** Auch der Nachweis der Drehimpulserhaltung hat hier, entsprechend dem Abschnitt über die Impulserhaltung, über die Rotationsinvarianz der Invarianten  $\pi_1$  und  $\pi_2$  zu erfolgen:

$$\begin{aligned} \pi_1(\mathbf{Q} \circ \bar{\mathbf{q}}) &= (\mathbf{Q}\mathbf{y}_2 - \mathbf{Q}\mathbf{y}_1) \cdot \Lambda(\mathbf{Q}\mathbf{x}_S - \frac{1}{2}(\mathbf{Q}\mathbf{y}_1 + \mathbf{Q}\mathbf{y}_2)) \\ &= (\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) \cdot \mathbf{Q}^T \cdot \Lambda \mathbf{Q}(\mathbf{x}_S - \frac{1}{2}(\mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_2)) \\ &= (\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) \cdot \Lambda(\mathbf{x}_S - \frac{1}{2}(\mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_2)) \\ &= \pi_1(\bar{\mathbf{q}}) \quad \forall \quad \mathbf{Q} \in \text{SO}(2) \end{aligned} \quad (5.16)$$

Für die zweite Invariante folgt:

$$\begin{aligned} \pi_2(\mathbf{Q} \circ \bar{\mathbf{q}}) &= (\mathbf{Q}\mathbf{y}_2 - \mathbf{Q}\mathbf{y}_1) \cdot (\mathbf{Q}\mathbf{y}_2 - \mathbf{Q}\mathbf{y}_1) \\ &= (\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) \cdot \mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{Q}(\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) = \pi_2(\bar{\mathbf{q}}) \end{aligned} \quad (5.17)$$

Das gleiche Ergebnis folgt aus der Definition der Determinanten für beliebige Invarianten der Menge  $\mathbb{T}$ :

$$\pi(\mathbf{Q}\mathbf{a}, \mathbf{Q}\mathbf{b}) = \mathbf{Q}\mathbf{a} \cdot \Lambda \mathbf{Q}\mathbf{b} = \det(\mathbf{Q}[\mathbf{a}, \mathbf{b}]) = \det([\mathbf{a}, \mathbf{b}]) = \pi(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \quad (5.18)$$

Die Definition der Erhaltungseigenschaft als Änderung des Drehimpulses in der Zeit (Gleichung (4.11)) liefert:

$$\dot{\mathbf{J}}_k = \lambda_k \mathbf{n} \times \left(\mathbf{x}_S - \sum_A N_A \mathbf{y}_A\right) = \mathbf{0} \quad (5.19)$$

Der letzte Schritt in Gleichung (5.19) folgt aus der orthogonalen Projektion des Slave-Knotens  $\mathbf{x}_S$  auf die Master-Oberfläche, die somit parallel zu dem Normalenvektor  $\mathbf{n}$  erfolgt. Hieraus begründet sich auch der Verlust der Erhaltungseigenschaft, der häufig bei der Verwendung nicht standardgemäßer Normalenvektoren eintritt.

**Energieerhaltung** Die NTS-Methode besteht aus nichtlinearen Ungleichheits-Zwangsbedingungen und ist daher nicht energieerhaltend (vgl. Abschnitt 3.2.3,

Armero & Petöcz [2, 3] und Laursen & Love [62]). Eine Anwendung des diskreten Gradienten nach Abschnitt 3.2.2 liefert:

$$\begin{aligned} \overline{\nabla}_{\pi} \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_n, \boldsymbol{\pi}_{n+1}) &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{\pi_2}} \\ \frac{\pi_1}{2\sqrt{\pi_2^3}} \end{bmatrix} \\ &+ \frac{\Phi^A(\boldsymbol{\pi}_{n+1}) - \Phi^A(\boldsymbol{\pi}_n) - \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{\pi_2}} \\ \frac{\pi_1}{2\sqrt{\pi_2^3}} \end{bmatrix} \cdot [\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n]}{\|\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n\|^2} [\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n] \end{aligned} \quad (5.20)$$

mit dem Vektor  $\boldsymbol{\pi} = [\pi_1 \ \pi_2]^T$ . Damit folgt für den Gradienten:

$$\overline{\nabla}_{\mathbf{q}} \Phi^A(\bar{\mathbf{q}}_n, \bar{\mathbf{q}}_{n+1}) = D\boldsymbol{\pi}(\bar{\mathbf{q}}_{n+\frac{1}{2}})^T \overline{\nabla}_{\pi} \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_n, \boldsymbol{\pi}_{n+1}) \quad (5.21)$$

mit

$$D\boldsymbol{\pi}(\bar{\mathbf{q}}_{n+\frac{1}{2}}) = \begin{bmatrix} (\mathbf{y}_2^T - \mathbf{y}_1^T)\boldsymbol{\Lambda} & (\mathbf{x}_S^T - \mathbf{y}_2^T)\boldsymbol{\Lambda} & (\mathbf{y}_1^T - \mathbf{x}_S^T)\boldsymbol{\Lambda} \\ \mathbf{0} & 2(\mathbf{y}_1^T - \mathbf{y}_2^T) & 2(\mathbf{y}_2^T - \mathbf{y}_1^T) \end{bmatrix} \quad (5.22)$$

Durch die Anwendung des diskreten Gradienten nach Abschnitt 3.2.2 respektive unter Beachtung der Modifikationen nach Abschnitt 3.2.4 folgt die Energieerhaltung für die Zwangsbedingung.

## 5.2. Mortar-Methode

### 5.2.1. Zwangsbedingung

Eine Anwendung der Mortar-Methode, wie sie in Kapitel 4.2 hergeleitet wurde, auf den Kontaktfall, u.a. beschrieben in Yang et al. [108], Puso & Laursen [78] und Wohlmuth & Hieber [101], liefert, äquivalent zur Vorgehensweise für die NTS-Methode (vgl. Hesch & Betsch [42]), folgende Zwangsbedingung in Normalenrichtung:

$$\boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{q}) = \int_{\gamma^c} (\boldsymbol{\lambda}\mathbf{n})^{(h)} \cdot (\mathbf{x}^{(1)h} - \mathbf{x}^{(2)h}) \, d\gamma \quad (5.23)$$

Hierbei ist eine Auswertung der resultierenden Mortar-Integrale (Gleichung (4.51)<sub>1</sub> und (4.51)<sub>2</sub>) in der aktuellen Konfiguration notwendig. Dies erfolgt sowohl aufgrund der sich permanent ändernden Segmentgrenzen, als auch aufgrund der durch die Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen verursachte Änderung der Integrationsgrenzen. Daher müssen die 4 lokalen Koordinaten eines Mortar-Segmentes  $\xi_a^{(1)}$ ,  $\xi_b^{(1)}$ ,  $\xi_a^{(2)}$  und  $\xi_b^{(2)}$  in jedem Iterationsschritt des Newtonverfahrens neu bestimmt werden und beeinflussen damit sowohl die erste als auch die zweite Ableitung. Für die diskreten Größen folgt nach Gleichung (4.48) wiederum aufgrund

der Reparametrisierung nach Gleichung (4.47):

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\lambda}^h &= \sum_A N_A(\xi^{(1)}(\eta)) \boldsymbol{\lambda}_A \\ \mathbf{x}^{(1)h} &= \sum_B N_B(\xi^{(1)}(\eta)) \mathbf{x}_B^{(1)} \\ \mathbf{x}^{(2)h} &= \sum_C N_C(\xi^{(2)}(\eta)) \mathbf{x}_C^{(2)}\end{aligned}\quad (5.24)$$

Bedingt durch die segmentweise Definition des Integrationsbereiches folgt für die Zwangsbedingung  $\Phi_A$ :

$$\Phi_A(\mathbf{q}) = \bigcup_{\text{seg}} \Phi_A^{\text{seg}}(\bar{\mathbf{q}}) \quad (5.25)$$

mit

$$\Phi_A^{\text{seg}}(\bar{\mathbf{q}}) = \mathbf{n}^{\text{seg}} \cdot \left\{ \sum_B n_{AB}^{\text{seg},(1)} \mathbf{x}_B^{(1)} - \sum_C n_{AC}^{\text{seg},(2)} \mathbf{x}_C^{(2)} \right\} \quad (5.26)$$

und den Mortar-Integralen:

$$\begin{aligned}n_{AB}^{\text{seg},(1)} &= \int_{\gamma^{\text{seg}}} N_A^{(1)}(\xi^{(1)}(\eta)) N_B^{(1)}(\xi^{(1)}(\eta)) \, d\gamma \\ n_{AC}^{\text{seg},(2)} &= \int_{\gamma^{\text{seg}}} N_A^{(1)}(\xi^{(1)}(\eta)) N_C^{(2)}(\xi^{(2)}(\eta)) \, d\gamma\end{aligned}\quad (5.27)$$

### 5.2.2. G-äquivariante Darstellung

Eine mögliche Reparametrisierung der segmentweise definierten Mortar-Zwangsbedingungen

$$\Phi_A^{\text{seg}}(\bar{\mathbf{q}}) = \tilde{\Phi}_A^{\text{seg}}(\boldsymbol{\pi}(\bar{\mathbf{q}})) \quad (5.28)$$

wird hier anhand linearer Formfunktionen

$$\begin{aligned}N_1^{(\alpha)}(\xi^{(\alpha)}) &= \frac{1}{2}(1 - \xi^{(\alpha)}) \\ N_2^{(\alpha)}(\xi^{(\alpha)}) &= \frac{1}{2}(1 + \xi^{(\alpha)})\end{aligned}\quad (5.29)$$

vorge stellt. Hierbei beschränken wir uns auf einen minimalen Satz von 5 Invarianten (vgl. Hesch & Betsch [43]); andere Darstellungen mit mehr Invarianten sind möglich. Ausgehend von den repräsentativen Mortar-Segmenten in Bild 4.8 lassen sich für die Reparametrisierung der lokalen Parameter des ersten Segmentes:

$$\begin{aligned}\xi_a^{(1)} &= \frac{2(\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)}) \cdot (\mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(1)})}{\|\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)}\|^2} - 1 & \xi_b^{(1)} &= 1 \\ \xi_b^{(2)} &= \frac{(2\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_2^{(2)}) \cdot (\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)})}{(\mathbf{x}_2^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(2)}) \cdot (\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)})} & \xi_a^{(2)} &= -1\end{aligned}\quad (5.30)$$

bzw. für das zweite Segment:

$$\begin{aligned} \xi_b^{(1)} = -1 & & \xi_c^{(1)} &= \frac{2(\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)}) \cdot (\mathbf{x}_2^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(1)})}{\|\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)}\|^2} - 1 \\ \xi_c^{(2)} = 1 & & \xi_b^{(2)} &= \frac{(2\mathbf{x}_1^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_2^{(2)}) \cdot (\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)})}{(\mathbf{x}_2^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(2)}) \cdot (\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)})} \end{aligned} \quad (5.31)$$

drei quadratische Invarianten aus der Menge  $\mathcal{S}$  bestimmen:

$$\pi_1(\bar{\mathbf{q}}) = (\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)}) \cdot (\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)}) \quad (5.32)$$

$$\pi_2(\bar{\mathbf{q}}) = (\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)}) \cdot (\mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(1)}) \quad (5.33)$$

$$\pi_3(\bar{\mathbf{q}}) = (\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)}) \cdot (\mathbf{x}_2^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(1)}) \quad (5.34)$$

Damit folgt für das erste Segment:

$$\begin{aligned} \tilde{\xi}_a^{(1)} &= \frac{2\pi_2}{\pi_1} - 1 & \tilde{\xi}_b^{(1)} &= 1 \\ \tilde{\xi}_b^{(2)} &= \frac{2\pi_1 - \pi_3 - \pi_2}{\pi_3 - \pi_2} & \tilde{\xi}_a^{(2)} &= -1 \end{aligned} \quad (5.35)$$

und für das zweite Segment:

$$\begin{aligned} \tilde{\xi}_b^{(1)} &= -1 & \tilde{\xi}_c^{(1)} &= \frac{2\pi_3}{\pi_1} - 1 \\ \tilde{\xi}_c^{(2)} &= 1 & \tilde{\xi}_b^{(2)} &= \frac{-\pi_3 - \pi_2}{\pi_3 - \pi_2} \end{aligned} \quad (5.36)$$

Alle weiteren möglichen Segmente ergeben sich wiederum als Kombination der beiden vorgestellten, repräsentativen Segmente. Gleichung (4.47) kann nun ebenfalls in den Invarianten definiert werden:

$$\tilde{\xi}^{(\alpha)} = \frac{1}{2}(1 - \eta)\tilde{\xi}_a^{(\alpha)} + \frac{1}{2}(1 + \eta)\tilde{\xi}_b^{(\alpha)} \quad (5.37)$$

Für einen Segmentbeitrag  $\Phi_1^{\text{seg}}$  folgt für lineare Ansatzfunktionen:

$$\Phi_1^{\text{seg}} = \mathbf{n}^{\text{seg}} \cdot \left\{ n_{11}^{\text{seg},(1)} \mathbf{x}_1^{(1)} + n_{12}^{\text{seg},(1)} \mathbf{x}_2^{(1)} - \left( n_{11}^{\text{seg},(2)} \mathbf{x}_1^{(2)} + n_{12}^{\text{seg},(2)} \mathbf{x}_2^{(2)} \right) \right\} \quad (5.38)$$

Einsetzen der Gleichungen (5.27) zusammen mit der Gleichung (5.29) und (5.37) liefert:

$$\begin{aligned}
\Phi_1^{\text{seg}} = \frac{1}{4} \mathbf{n}^{\text{seg}} \cdot & \left\{ \left( \mathbf{x}_1^{(1)} + \mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_2^{(2)} \right) \int_{\gamma^{\text{seg}}} d\gamma \right. \\
& + \left( -2\mathbf{x}_1^{(1)} + \mathbf{x}_1^{(2)} + \mathbf{x}_2^{(2)} \right) \int_{\gamma^{\text{seg}}} \tilde{\xi}^{(1)} d\gamma \\
& + \left( \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_2^{(2)} \right) \int_{\gamma^{\text{seg}}} \tilde{\xi}^{(2)} d\gamma \\
& - \left( \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_2^{(2)} \right) \int_{\gamma^{\text{seg}}} \tilde{\xi}^{(1)} \tilde{\xi}^{(2)} d\gamma \\
& \left. - \left( \mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \int_{\gamma^{\text{seg}}} \left( \tilde{\xi}^{(1)} \right)^2 d\gamma \right\}
\end{aligned} \tag{5.39}$$

Auch hier ist der Normalenvektor definiert als (vgl. Gleichung (5.2)):

$$\mathbf{n} = -\mathbf{\Lambda}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) / \|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\| \tag{5.40}$$

Zusammen mit der Beziehung (vgl. Gleichung (4.53)):

$$d\gamma = \frac{1}{4} \|\mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)}\| (\xi_b^{(1)} - \xi_a^{(1)}) \tag{5.41}$$

folgt unter Verwendung der beiden zusätzlichen Invarianten aus der Menge  $\mathbb{T}$ :

$$\pi_4(\bar{\mathbf{q}}) = \left( \mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \cdot \mathbf{\Lambda} \left( -2\mathbf{x}_1^{(1)} + \mathbf{x}_1^{(2)} + \mathbf{x}_2^{(2)} \right) \tag{5.42}$$

$$\pi_5(\bar{\mathbf{q}}) = \left( \mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \cdot \mathbf{\Lambda} \left( \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_2^{(2)} \right) \tag{5.43}$$

für die reparametrisierte Zwangsbedingung:

$$\tilde{\Phi}_1^{\text{seg}}(\boldsymbol{\pi}(\bar{\mathbf{q}})) = \frac{1}{16} \left( \tilde{\xi}_b^{(1)} - \tilde{\xi}_a^{(1)} \right) \left\{ \pi_4 \int_{-1}^1 \left( \tilde{\xi}^{(1)} - 1 \right) d\eta + \pi_5 \int_{-1}^1 \left( \tilde{\xi}^{(2)} - \tilde{\xi}^{(1)} \tilde{\xi}^{(2)} \right) d\eta \right\} \tag{5.44}$$

Die Integrale sind in der Integrationsvariablen  $\eta$  maximal quadratisch, daher können sie mithilfe einer 2-Punkt Gaussintegration exakt bestimmt werden. Für die Zwangsbedingung  $\Phi_2^{\text{seg}}$  folgt entsprechend:

$$\tilde{\Phi}_2^{\text{seg}}(\boldsymbol{\pi}(\bar{\mathbf{q}})) = \frac{1}{16} \left( \tilde{\xi}_b^{(1)} - \tilde{\xi}_a^{(1)} \right) \left\{ \pi_5 \int_{-1}^1 \left( \tilde{\xi}^{(2)} + \tilde{\xi}^{(1)} \tilde{\xi}^{(2)} \right) d\eta - \pi_4 \int_{-1}^1 \left( \tilde{\xi}^{(1)} + 1 \right) d\eta \right\} \tag{5.45}$$

Damit ist die Reparametrisierung der Mortar-Methode vollständig. Zu beachten gilt, dass nach jedem Lauf des Newton-Verfahrens bis Erreichen der Konvergenzkriterien, nicht nur der aktive Set, sondern auch die Zusammenstellung der Segmente geprüft und gegebenenfalls das Newton-Verfahren auch bei unverändertem aktiven Set neu gestartet werden muss.

### 5.2.3. Erhaltungseigenschaften

Wie schon für die NTS-Methode gezeigt wurde, ist die Translationsinvarianz der Hamilton-Funktion assoziiert mit der Erhaltung des Impulses. Des Weiteren ist die Rotationsinvarianz mit der Erhaltung des Drehimpulses assoziiert. Daraus folgt, dass für jede Zwangsbedingung, die sich vollständig in (sowohl translatorische als auch rotatorische) Invarianten zerlegen lässt, sowohl der Impuls als auch der Drehimpuls eine Erhaltungsgröße darstellt.

**Impulserhaltung** Für die vorgestellten 5 Invarianten kann die Translationsinvarianz in der Form:

$$\pi_i(\mathbf{x}_1^{(1)} + \mathbf{c}, \mathbf{x}_2^{(1)} + \mathbf{c}, \mathbf{x}_1^{(2)} + \mathbf{c}, \mathbf{x}_2^{(2)} + \mathbf{c}) = \pi_i(\mathbf{x}_1^{(1)}, \mathbf{x}_2^{(1)}, \mathbf{x}_1^{(2)}, \mathbf{x}_2^{(2)}) \quad (5.46)$$

einfach geprüft werden. Damit ist sowohl die Grundform als auch die in einer G-äquivalenten Form des diskreten Gradientens (siehe Gleichung (3.45)) geschriebene Mortar-Methode impulserhaltend.

**Drehimpulserhaltung** Für die Rotationsinvarianz gilt:

$$\pi_i(\mathbf{Q} \circ \bar{\mathbf{q}}) = \pi_i(\bar{\mathbf{q}}) \quad \forall \quad \mathbf{Q} \in \text{SO}(n_{\text{dim}}) \quad (5.47)$$

Der Nachweis auf Rotationsinvarianz für Invarianten aus den Mengen  $\mathcal{S}$  und  $\mathcal{T}$  ist bereits in Gleichung (5.17) respektive in Gleichung (5.18) vorgenommen worden. Damit ist wiederum sowohl die Grundform als auch die reparametrisierte und mithilfe des diskreten Gradientens geschriebene Form der Mortar-Methode drehimpulserhaltend.

**Energieerhaltung** Sowohl aufgrund des nichtlinearen Charakters der Zwangsbedingung der Mortar-Methode als auch der Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen ist die Mortar-Methode angewandt auf einen Kontakt-Vorgang nicht energieerhaltend. Dies folgt erst mit der Verwendung des diskreten Gradientens nach Abschnitt 3.2.2 und unter Berücksichtigung der durch die diskrete Form der *Active-Set* Methode inkonsistenten Zwangsbedingungen nach Abschnitt 3.2.4.

## 6. Numerische Beispiele

### 6.1. Simulation eines Lagers

Das erste numerische Beispiel simuliert die reibungsfreie Rotationsbewegung eines 2-dimensionalen Gleitlagers, wie es in Bild 6.1 dargestellt ist: Die äußere Lager-

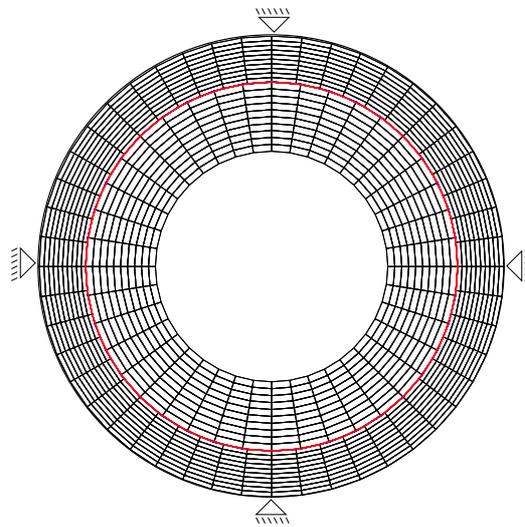


Abbildung 6.1.: Referenzkonfiguration der Lagerschalen

schale mit einem Radius von 100 ist an ihrem äußeren Rand fest eingespannt; zudem ist der innere Radius (80) der äußeren Lagerschale in der Referenzkonfiguration kleiner als der äußere Radius (80.1) der inneren Lagerschale. Diese verfügt über einen Innenradius von 50. Damit muß in einem ersten, rein statischen Schritt der Kontakt zwischen beiden Bauteilen etabliert werden (vgl. Bild 6.2). In einem zweiten Schritt startet die Zeitintegration mit einer Zeitschrittweite von  $t = 0.001$ . Im Bereich von  $t = [0, 0,5]$  wird die innere Lagerschale mit einem Drehmoment von

$$\mathbf{M}(t) = 2500f(t) \quad \text{mit} \quad f(t) = \begin{cases} \sin(\frac{\pi}{2}t) & \text{für } 0 \leq t \leq 0,5 \\ 0 & \text{für } 0,5 < t \leq 2 \end{cases} \quad (6.1)$$

dergestalt belastet, wie in Bild 6.3 dargestellt. Im Folgenden Bereich  $t = [0.5, 2]$  rotiert die innere Lagerschale reibungsfrei. Dieses innere Bauteil ist mit  $10 \times 40$

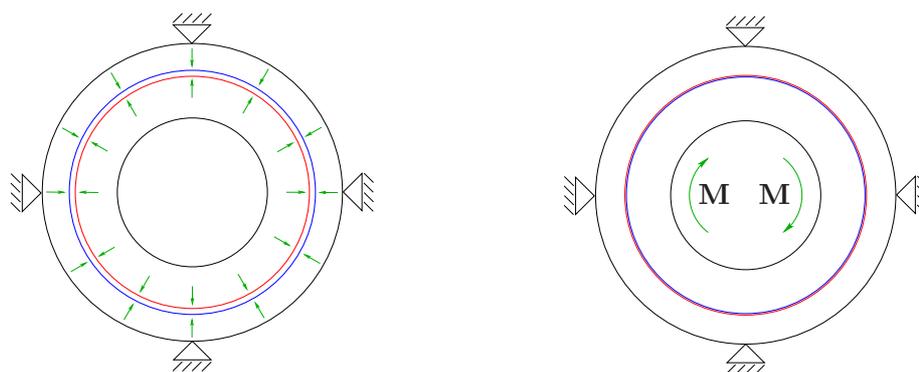


Abbildung 6.2.: Statischer Kontakt der Lagerschalen

Abbildung 6.3.: Belastung des inneren Bauteils

(Anzahl der Ringe mal Anzahl der Segmente auf der Schale), das äußere Bauteil mit  $10 \times 48$  nichtlinearen 4-Knoten Kontinuumelementen diskretisiert. Das konstitutive Gesetz beider Schalen entspricht einem St.Venant-Kirchhoff Gesetz mit einem E-Modul von  $E = 10^5$  und einer Querkontraktionszahl von  $\nu = 0.1$  sowie einer Dichte von  $\rho = 0.001$ .

**NTS-Methode** Die erste Gruppe von Abbildungen (Abb. 6.4) zeigt die Ergebnisse der NTS-Methode. Die Hamiltonfunktion sowie der Impuls und der Drehimpuls stellen eine Erhaltungsgröße dar. Dabei bleibt die Veränderung der drei genannten Größen je Zeitschritt unabhängig von der gewählten Zeitschrittweite unterhalb der Toleranzgrenze des Newton-Verfahrens durch die Verwendung des G-äquivalenten diskreten Gradientens nach Abschnitt 5.1.2.

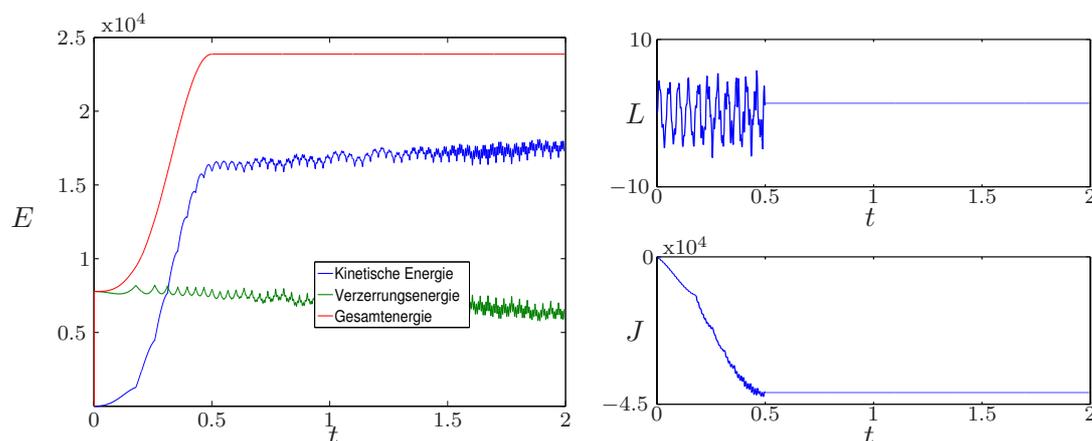


Abbildung 6.4.: NTS-Methode, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit, Zeitschrittweite: 0.001

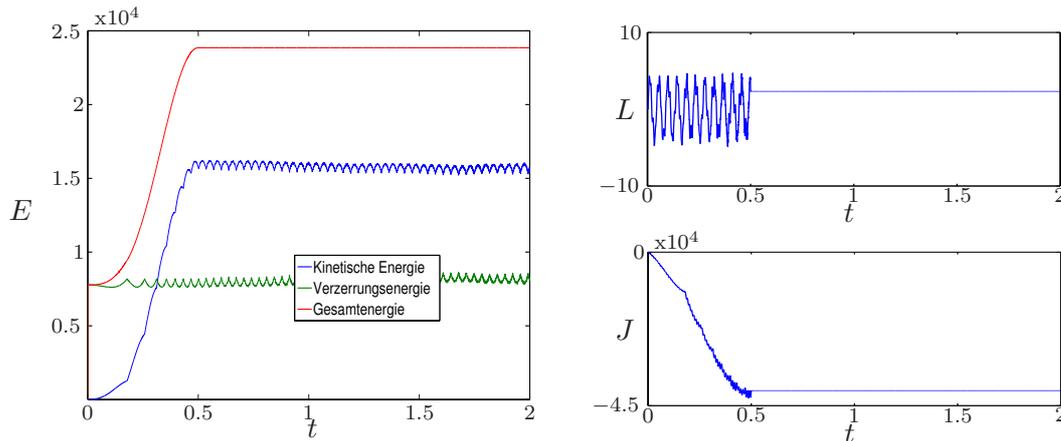


Abbildung 6.5.: NTS-Methode, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit, Zeitschrittweite: 0.0001

Zur Bestimmung der Impuls- und der Drehimpulsdiagramme wurden die Dirichlet Randbedingungen zum Zeitpunkt  $t = 0.5$  entfernt, um externe Einflüsse zu unterbinden. Dargestellt ist die Summe aller Komponenten. Die potenzielle und die kinetische Energie zeigen eine für die NTS-Methode charakteristische Schwingung. Dieser Konsistenzfehler konvergiert nicht mit kleiner werdenden Zeitschrittweite, wie es in Abb. 6.5 demonstriert ist. Hierbei wurde die Zeitschrittweite gegenüber der Simulation, deren Resultate in Abb. 6.4 gezeigt sind, um den Faktor 10 auf  $\Delta t = 0.0001$  verringert.

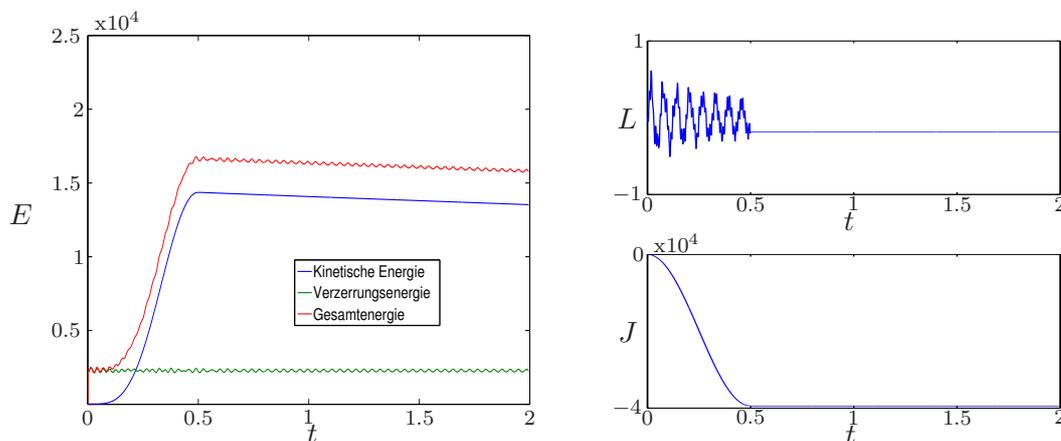


Abbildung 6.6.: NTS-Methode, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit, Penalty-Methode nach Abschnitt 3.1.1

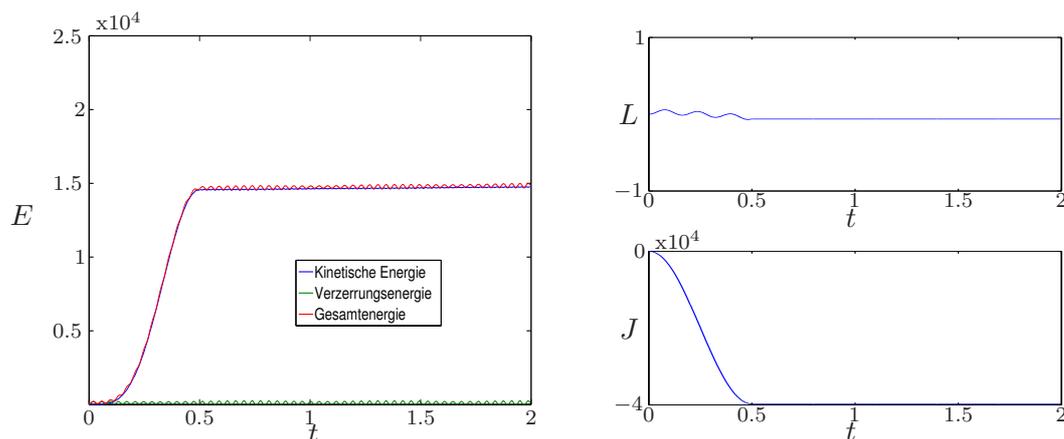


Abbildung 6.7.: NTS-Methode, Newmark-Verfahren, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit

Für die nächste Gruppe von Abbildungen (Abb. 6.6) wurden die Zwangsbedingungen durch einen Penalty-Faktor von  $\epsilon = 10^4$  entsprechend Abschnitt 3.1.1 eingefordert. Die verwendete Mittelpunktsregel erhält dabei weiterhin sowohl den Impuls als auch den Drehimpuls. Die letzte Gruppe von Abbildungen (Abb. 6.7) im Rahmen der NTS-Methode zeigt die Resultate eines Newmark-Verfahrens. Der Penalty-Faktor beträgt  $\epsilon = 10^3$ . Festzuhalten ist, dass das Newmark-Verfahren den Drehimpuls nicht erhält, auch wenn die Abweichungen in diesem Beispiel relativ gering sind.

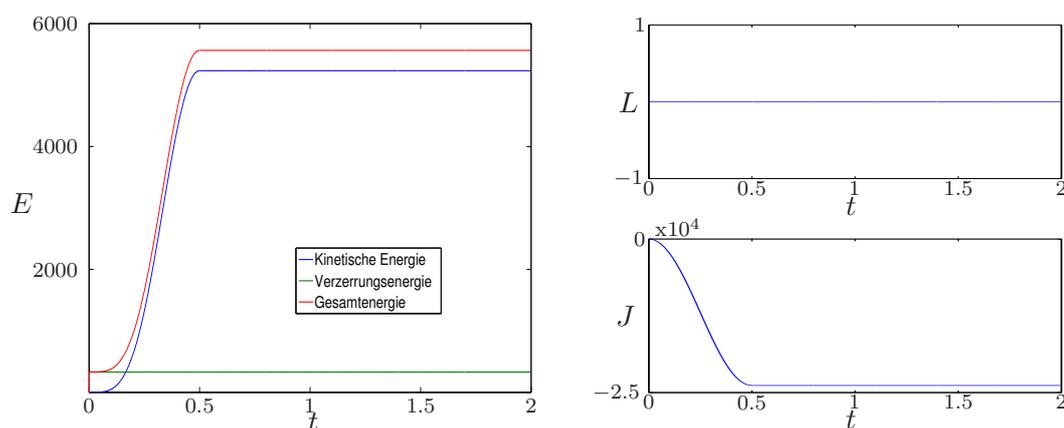


Abbildung 6.8.: Mortar-Methode, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit

**Mortar-Methode** Die Ergebnisse der Mortar-Methode sind in Abb. 6.8 dargestellt. Für die Simulation wurde der diskrete Gradient entsprechend Abschnitt 5.2.2 verwendet; damit bleiben sowohl die Energie, als auch der Impuls und der Drehimpuls erhalten. Im Gegensatz zur NTS-Methode (vgl. Abb. 6.4 und Abb. 6.5) wird der Konsistenzfehler und die daraus resultierenden Schwingungen minimiert.

## 6.2. Nichtkonforme Gebietszerlegung

In diesem numerischen Beispiel wird, ausgehend von dem Beispiel eines Gleitlagers aus Kapitel 6.1, eine Gebietszerlegung durchgeführt. Eine mögliche und sinnvolle Anwendung einer Gebietszerlegung im Rahmen eines Kontaktvorgangs besteht darin, die Kontaktfläche  $\gamma_c$  deutlich feiner als die eigentlichen Körper zu diskretisieren. Hierzu wurden zwei Ringe mit  $512 \times 1$  Element auf die beiden

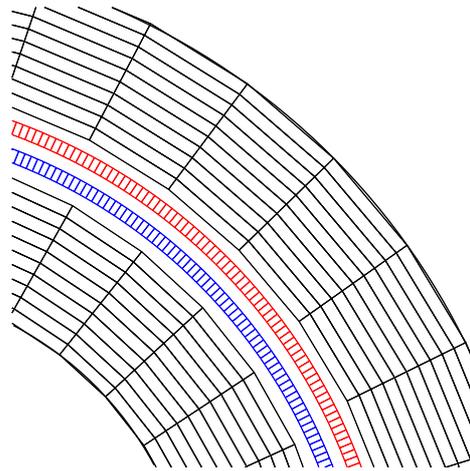


Abbildung 6.9.: Ausschnittsvergrößerung der Gebietszerlegung

Kontaktflächen aufgebracht, wie es ausschnittsweise in Abb. 6.9 zu sehen ist. Der Durchmesser beider Ringe wurde um die Breite einer Elementreihe verringert, damit sich die beiden zusätzlichen Ringe, die ebenfalls die Breite einer Elementreihe aufweisen, einfügen lassen. Alle weiteren Rahmendaten wie Einspannung, Lastaufbringung und Diskretisierung der Körper entsprechen den Daten aus Abschnitt 6.1.

**NTS-Methode** Für die erste Gruppe von Abbildungen (Abb. 6.10) wurden sowohl für die Gebietszerlegung als auch für den Kontakt die NTS-Methode ange-

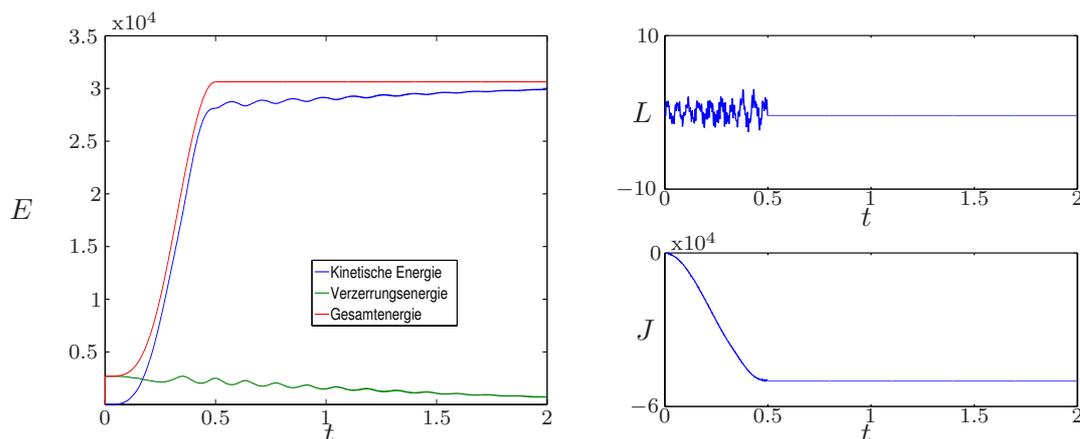


Abbildung 6.10.: Gebietszerlegung: NTS-Methode, Kontakt: NTS-Methode, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit

wandelt. Für die Auswertung des Impulses sowie des Drehimpulses wurden wiederum zum Zeitpunkt  $t = 0.5$  alle Dirichlet-Randbedingungen entfernt. Für den Bereich von  $t = [0.5, 2]$  führt das System somit eine freie Bewegung im Raum durch. Aufgrund des verwendeten diskreten Gradientens nach Abschnitt 5.1.2 bleiben die drei Größen Energie, Impuls und Drehimpuls erhalten. Als Slave-Seite wurden die grob diskretisierten, äußeren Ringe gewählt, so dass zwischen den Ringen 40 bzw. 48 Zwangsbedingungen aktiviert wurden.

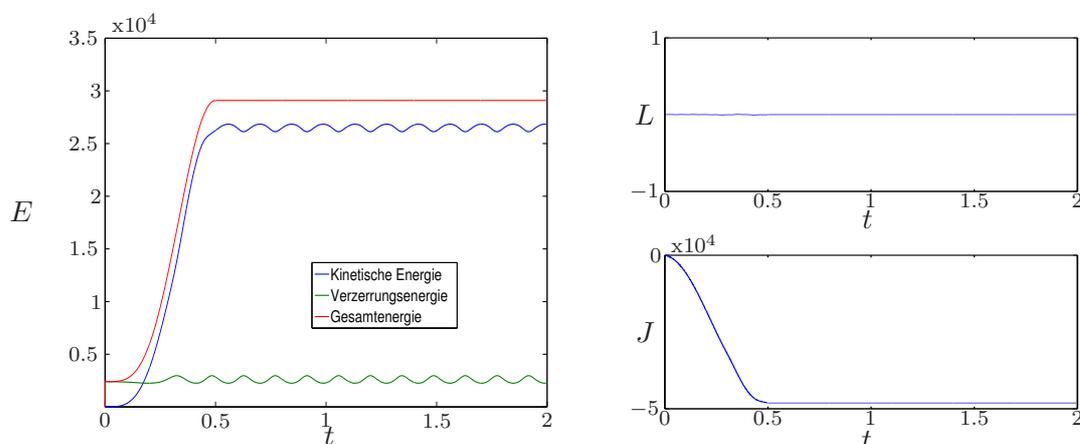


Abbildung 6.11.: Gebietszerlegung: NTS-Methode, Kontakt: Mortar-Methode, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit

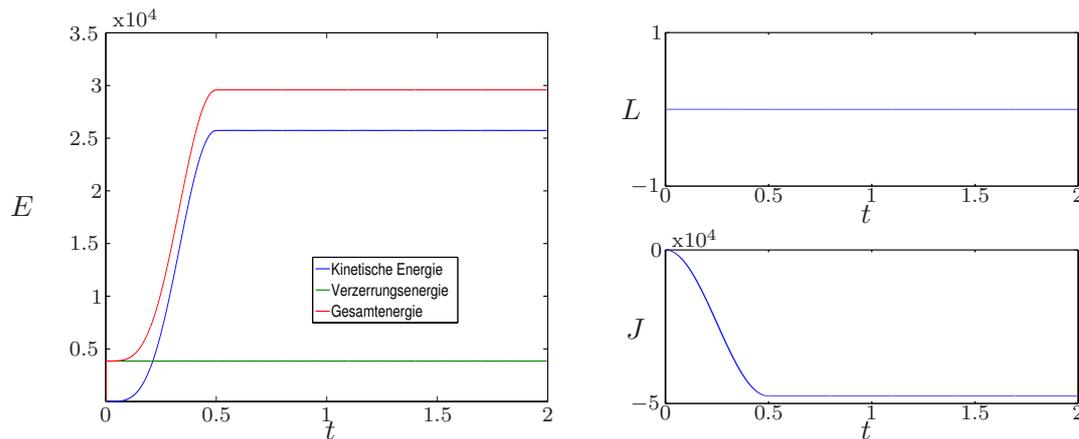


Abbildung 6.12.: Gebietszerlegung: Mortar-Methode, Kontakt: Mortar-Methode, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit

Wird anstelle der NTS-Methode zur Beschreibung der Kontakt-Zwangsbedingungen die Mortar-Methode verwendet und die NTS-Methode weiterhin für die Gebietszerlegung angewandt, ergeben sich die in Abb. 6.11 dargestellten Resultate. Auch hier bleiben die drei Größen Energie, Impuls und Drehimpuls im Bereich  $t = [0.5, 2]$  erhalten.

**Mortar-Methode** Die Verwendung der Mortar-Methode sowohl für den Kontaktbereich als auch für die Gebietszerlegung minimiert wiederum den bei der NTS-Methode demonstrierten Konsistenzfehler. Ein Vergleich von Abb. 6.12 mit Abb. 6.8 zeigt keinen qualitativen Unterschied in der Energieverteilung, quantitative Unterschiede sind auf Änderungen in der Referenzkonfiguration zurückzuführen. Die drei Größen Energie, Impuls und Drehimpuls werden algorithmisch erhalten. Für die Ergebnisse in Abb. 6.13 wurde die Mortar-Methode als Zwangsbedingung im Kontakt-Bereich durch die NTS-Methode ersetzt. Für die Gebietszerlegung wurde weiterhin die Mortar-Methode verwendet. Der Konsistenzfehler wurde aufgrund der besseren räumlichen Approximation im Vergleich zu Abb. 6.4 deutlich verringert, ist aber weiterhin vorhanden. Energie, Impuls und Drehimpuls werden weiterhin in Folge des verwendeten diskreten Gradientens algorithmisch erhalten.

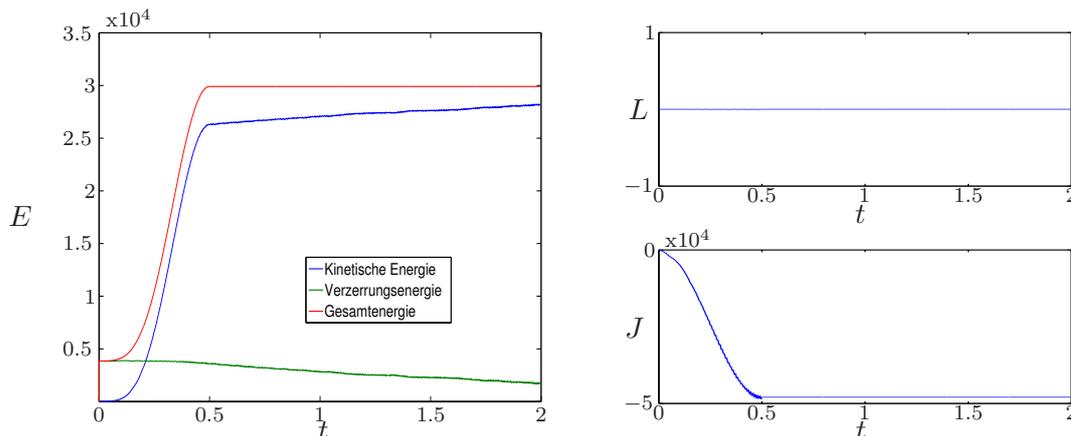


Abbildung 6.13.: Gebietszerlegung: Mortar-Methode, Kontakt: NTS-Methode, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit

### 6.3. Kollision zweier deformierbarer Körper

Im Gegensatz zur Lagersimulation müssen für die Simulation einer Kollision zweier deformierbarer Körper die Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen aller in Frage kommenden Zwangsbedingungen im Rahmen der *Active-Set* Strategie nach Abschnitt 3.2.3, ausgewertet werden. Angeregt wurde dieses Beispiel ursprünglich von Wriggers et al. [107] und ist von Laursen & Chawla [60, 61] aufgegriffen worden. Zur Demonstration der hier gezeigten Algorithmen wurde dieses Beispiel weiter modifiziert. Zwei elastische Ringe bewegen sich mit einer Anfangsgeschwindigkeit  $\mathbf{v}_0 = [10, 10]$  versetzt in einem  $45^\circ$  Winkel so aufeinander zu, dass der in Abb. 6.14 dargestellte Bewegungsablauf entsteht. Beide Ringe sind jeweils aus 64 nichtlinearen 4-Knoten Kontinuums-elementen aufgebaut worden, deren konstitutives Gesetz wiederum einem St. Venant-Kirchhoff Gesetz entspricht. Als Materialparameter wurden ein Elastizitätsmodul von  $E = 100$ , eine Dichte von  $\rho = 0.001$  und eine Querkontraktionszahl von  $\nu = 0.1$  verwendet, um entsprechend starke Deformationen zu gewährleisten. Die Zeitschrittweite beträgt  $\Delta t = 0.01$ . Wie später noch gezeigt wird, ist der Unterschied zwischen der NTS- und der Mortar-Methode in dieser Kollisions-Simulation marginal. Aufgrund der starken Ausrichtung der Mortar-Methode auf lagrangesche Multiplikatoren sind Betrachtungen weiterer Ansätze wie eine Penalty-Formulierung nicht sinnvoll. Daher werden hier zuerst die Ergebnisse der NTS-Methode in den verschiedenen Formulierungen gezeigt, gefolgt von den Ergebnissen der Mortar-Methode.

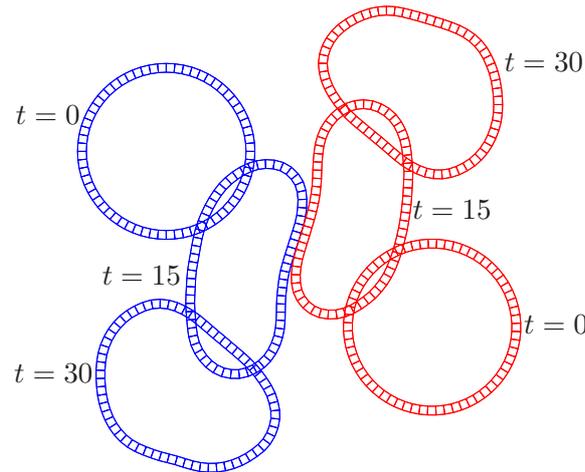
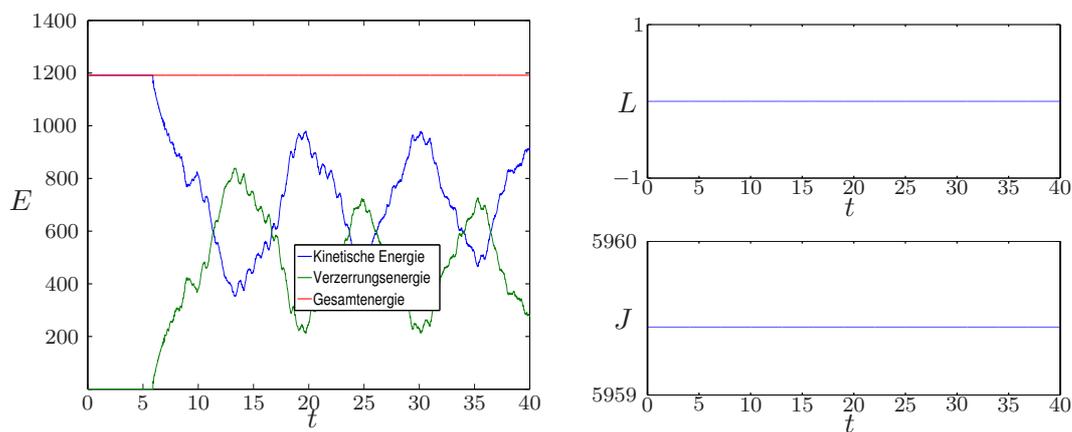


Abbildung 6.14.: Bewegungsablauf bei der Kollision zweier Ringe


 Abbildung 6.15.: NTS-Methode, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit

**NTS-Methode** Nach Abschnitt 3.2.4 muss zusätzlich zur Korrektur der durch die Nichtlinearität der Zwangsbedingungen verursachten Verletzung der Energieerhaltung eine Korrektur der inkonsistenten Zwangsbedingungen erfolgen. Eine Modifikation der Zwangsbedingung nach Gleichung (3.59) führt zu den in Abb. 6.15 gezeigten Ergebnissen. Zur Demonstration der Robustheit dieser Vorgehensweise wurde die Simulation mit einer Zeitschrittweite von  $\Delta t = 1$  durchgeführt; die entsprechenden Ergebnisse sind in Abb. 6.16 dargestellt. Auch hier werden, wie bereits die Ergebnisse in Abb. 6.15 zeigen, sowohl die Energie als auch der

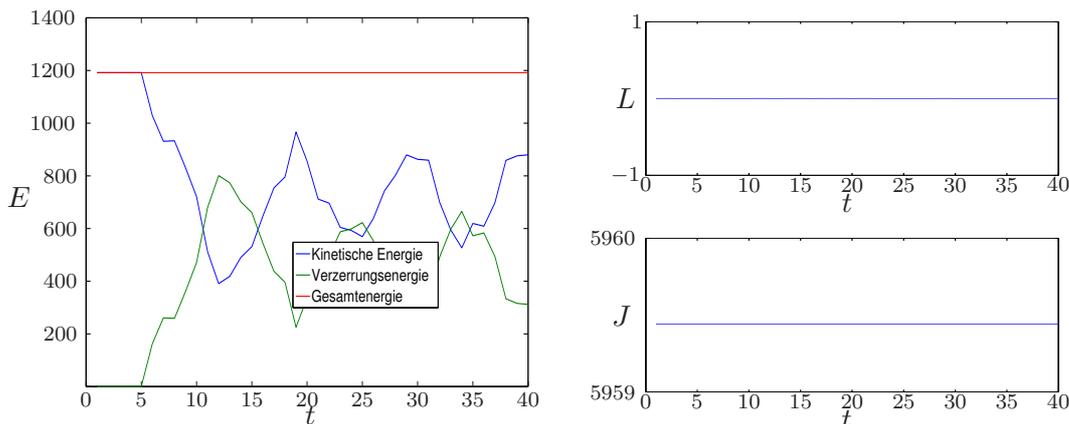


Abbildung 6.16.: NTS-Methode, Zeitschrittweite: 1, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit

Gesamtimpuls respektive der Gesamtdrehimpuls unabhängig von der Zeitschrittweite erhalten. Als nächstes sind in Abb. 6.17 die Ergebnisse des modifizierten diskreten Gradienten nach Gleichung (3.63) dargestellt. Auch hier werden sowohl die Gesamtenergie als auch der Gesamtimpuls und der Gesamtdrehimpuls algorithmisch erhalten. Der dritte Vorschlag aus Abschnitt 3.2.4 beruht auf einer

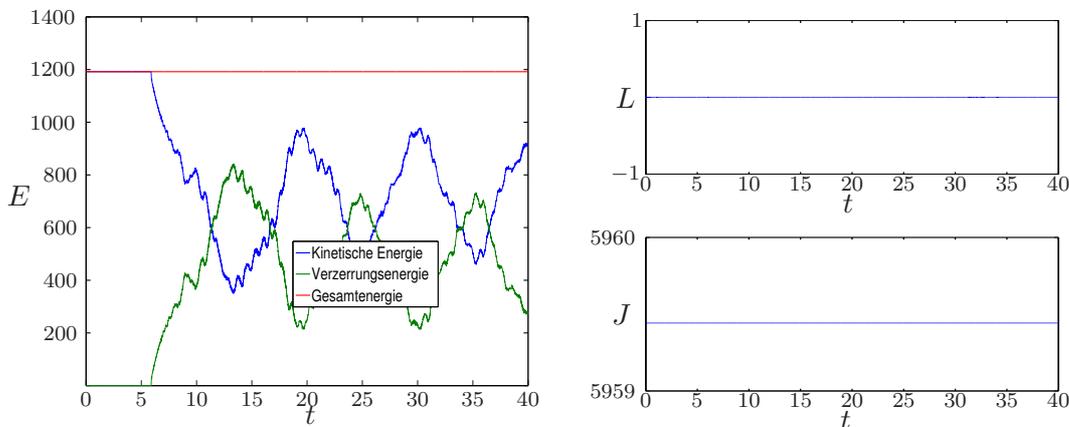


Abbildung 6.17.: NTS-Methode, modifizierter diskreter Gradient, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit

nachträglichen Änderung des Impulses zusätzlich zu dem eingesetzten diskreten Gradienten. Die zu lösende quadratische Gleichung ist nach Laursen & Love [59] abhängig von dem Vorzeichen der relativen Geschwindigkeit beider Körper zueinander, ausgewertet in der Mittelpunktskonfiguration, (*algorithmic gap rate*) eine

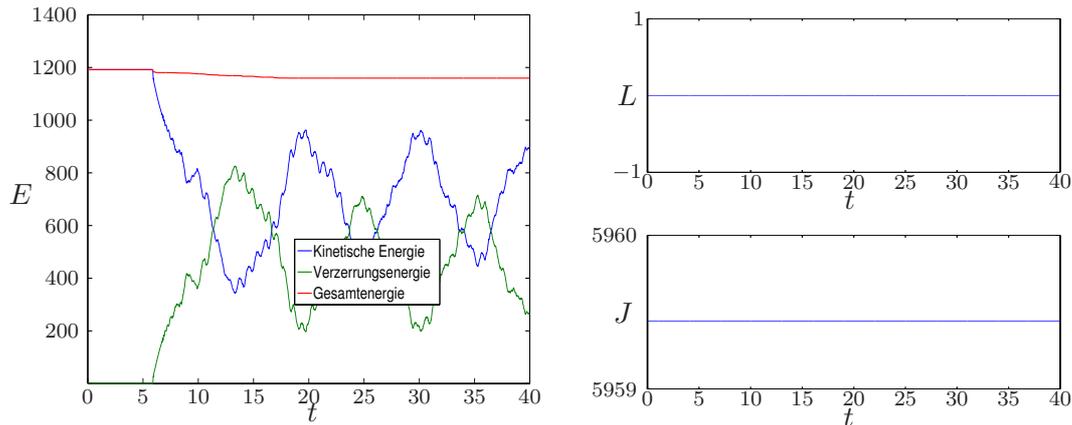


Abbildung 6.18.: NTS-Methode, Impuls-Update Algorithmus, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit

reelle Lösung. Wie in Abb. 6.18 zu sehen, kann die quadratische Gleichung nicht immer gelöst werden. In diesem Fall wurde die Veränderung in der Gesamtenergie des Systems zur Dokumentation zugelassen. Eine Änderung der Menge an aktiven Zwangsbedingungen entsprechend den Vorgaben aus Laursen & Love [59] ist notwendig, um reelle Lösungen des Problems zu gewährleisten. Letzlich impliziert

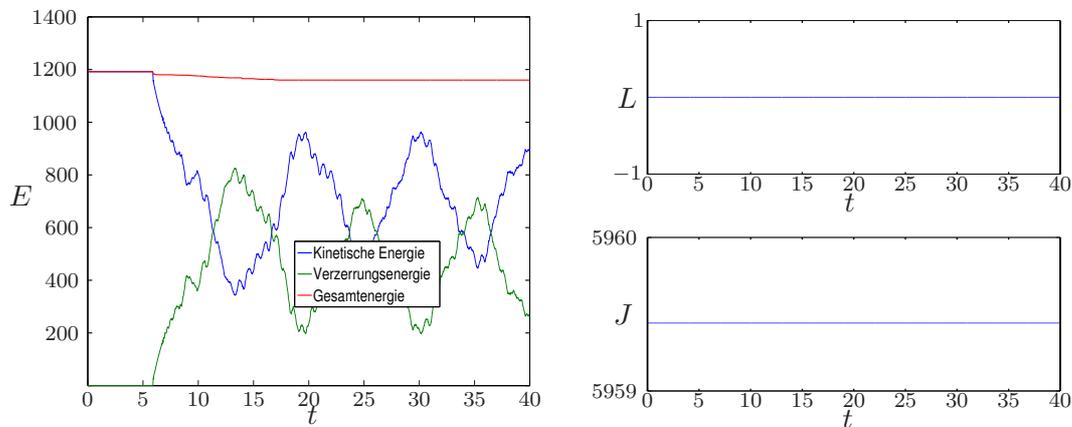


Abbildung 6.19.: NTS-Methode, Penalty-Formulierung nach Abschnitt 3.1.1, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit

diese Vorgehensweise, dass die Entscheidung, ob eine Zwangsbedingung aktiviert wird oder nicht, davon beeinflusst wird, inwieweit die quadratische Gleichung des Verfahrens eine Lösung hat. Ein derartiger Eingriff in die *Active-Set* Strategie kann daher zu einer Verletzung der Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen führen.

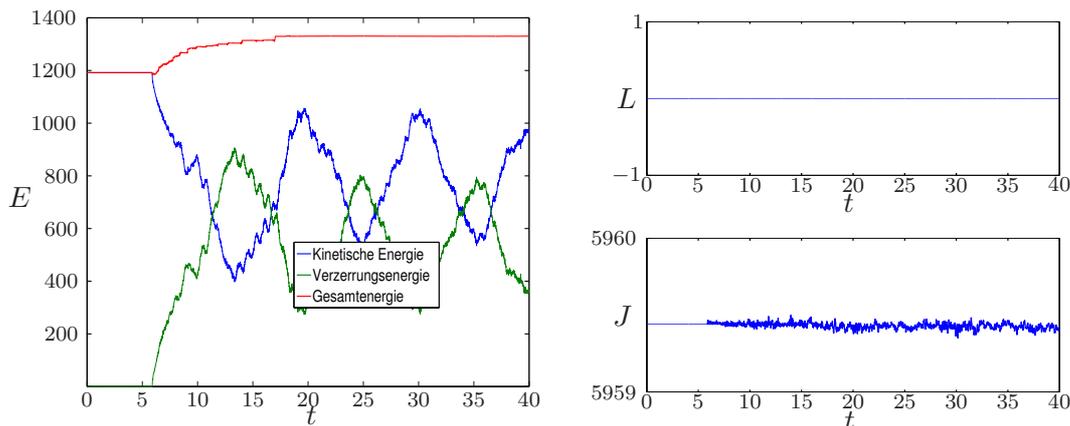


Abbildung 6.20.: NTS-Methode, Newmark-Verfahren, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit

Die Auswirkungen einer Penalty-Formulierung zur Einbindung der Zwangsbedingungen nach Abschnitt 3.1.1 sind in Abb. 6.19 dargestellt. Im Gegensatz zu dem Gesamtimpuls und dem Gesamtdrehimpuls stellt die Energie keine Erhaltungsgröße dar. Noch gravierender zeigt sich der Unterschied bei der Verwendung eines Newmark-Verfahrens ( $\gamma = 0.5$ ,  $\beta = 0.25$ ), dessen Ergebnisse in Abb. 6.20 dargestellt sind. Die einzig verbliebene Erhaltungsgröße ist hierbei der Gesamtimpuls, weder die Energie noch der Gesamtdrehimpuls stellen Erhaltungsgrößen dar.

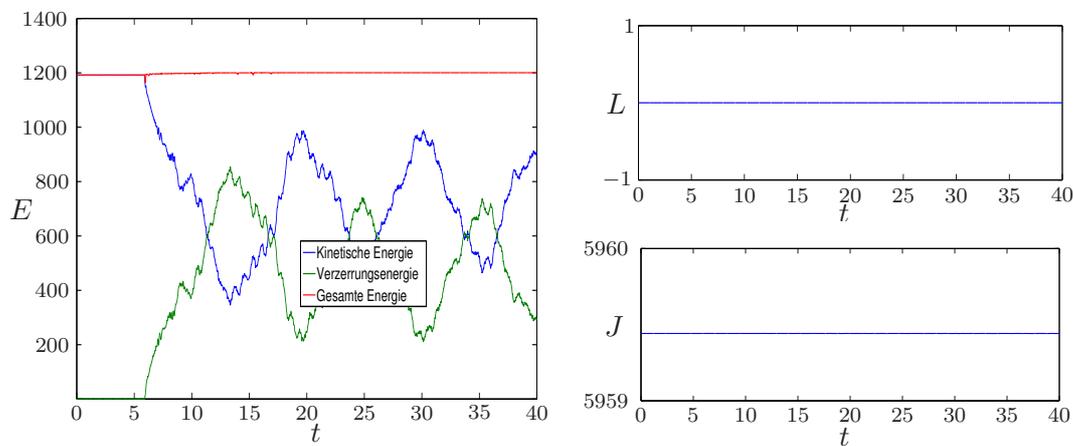


Abbildung 6.21.: NTS-Methode, zentrales Differenzenverfahren, Linkes Bild: Energieverteilung  $E$  über die Zeit, rechte Bilder: Gesamtimpuls  $L$  und Gesamtdrehimpuls  $J$  über die Zeit

Aufgrund der bei Kontaktvorgängen notwendigen kleinen Zeitschrittweiten werden häufig explizite Verfahren wie das zentrale Differenzenverfahren eingesetzt.

Die Zwangsbedingungen werden dabei in der Regel mithilfe eines Penalty-Verfahrens eingefordert. Für das hier vorgestellte Beispiel wurde ein Penalty-Faktor von 50 und eine Zeitschrittweite von 0.001 verwendet. Ein größerer Penalty-Faktor bzw. eine größere Zeitschrittweite waren für diesen Beispielfall nicht möglich. Wie schon beim Newmark-Verfahren stellt der Gesamtimpuls die einzige Erhaltungsgröße dar.

## 7. Zusammenfassung

Diese Dissertation umfasst die Herleitung und Analyse von Zwangsbedingungen für den Kontakt diskreter, deformierbarer hyperelastischer Körper. Explizit wurde auf die Auswirkungen dieser Zwangsbedingungen auf die Integration in der Zeit eingegangen. Dabei wird mit der Verwendung mechanischer Integratoren eine exzellente numerische Stabilität angestrebt.

Es kann gezeigt werden, dass eine algorithmische Erhaltung sowohl der Energie als auch der Impulsabbildungen möglich ist. Dies erscheint nicht nur von der numerischen Seite sondern auch von der physikalischen Seite her sinnvoll, da Zwangskräfte im Allgemeinen keine Arbeit leisten sollen. Die Einforderung der Zwangsbedingungen erfolgt mithilfe lagrangescher Multiplikatoren. Das Verhalten der aus dieser Vorgehensweise resultierenden Sattelpunktsprobleme in diskreten Systemen wurde in Kapitel 3.2 sowohl für Gleichheits- als auch für Ungleichheitsbedingungen dargelegt. In diesem Zusammenhang fand auch die Herleitung mechanischer Integratoren für beide Klassen von Zwangsbedingungen statt.

Der favorisierte G-äquivalente diskrete Gradient konnte in der Vergangenheit erfolgreich auf Gleichheits-Zwangsbedingungen angewendet werden (siehe Gonzalez [28] und Betsch [11]). Die Erweiterung dieses Ansatzes auf Ungleichheits-Zwangsbedingungen erfordert die hier gezeigten Änderungen. Die notwendige Reparametrisierung der Zwangsbedingung zeigte dabei den unerwarteten Nebeneffekt, dass sich sowohl die für den Hamilton-Formalismus notwendige erste Ableitung als auch die für das Newton-Verfahren notwendige zweite Ableitung, insbesondere der sehr komplexen Mortar-Methode, deutlich vereinfachten. Die gewählte Reparametrisierung ist somit - selbst wenn die Erweiterung durch den diskreten Gradienten nicht angewandt wird - sinnvoll.

Im Gegensatz zu bisherigen Arbeiten auf diesem Gebiet in denen die Zwangsbedingungen an sich verändert bzw. ein Eingriff in die Impulsbilanz vorgenommen wurde, ist durch die Anwendung des diskreten Gradienten nicht nur die Erhaltung der fundamentalen Eigenschaften sondern auch die Erhaltung der ursprünglichen Zwangsbedingungen sowie der Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen möglich. Die Auswirkungen der verschiedenen energie- und dreimpulserhaltenden Verfahren auf ein mechanisches System mit Zwangsbedingungen ist in Anhang A.3 veranschaulicht worden. Auch hierbei zeigen sich deutlich die Vorteile der hier vorgeschlagenen Verfahren.

Die durchgeführte vollständige Ableitung der Mortar-Methode zeigt ein perfektes Verhalten besonders hinsichtlich des Drehimpulses. Bisherige Ansätze (vgl. [78, 108]) zeigen dagegen erhebliche Defizite in der Erhaltung der Impulsabbildungen. Dies ist insbesondere im Hinblick auf die Langzeitstabilität von enormer Bedeutung. Zur Charakteristik der Mortar-Methode gehört das Bestehen des Patch-Test (vgl. Anhang A.2). Insbesondere bei der Simulation eines Gleitlagers (vgl. Kapitel 6.1) zeigen sich die Vorteile dieser variationell konsistenten Beschreibung gegenüber etablierten Verfahren wie der NTS-Methode. Das Gleiten über gekrümmte Oberflächen führt bei der NTS-Methode zu erheblichen Konsistenzfehlern. Die aus der Minimierung dieser Fehler hergeleitete Mortar-Methode führt in derartigen Situationen zu bedeutend besseren Ergebnissen, deren Güte bei Verwendung der NTS-Methode nicht einmal durch eine drastische Verfeinerung der Kontakt-Oberfläche erzielt werden kann, wie das Beispiel aus Kapitel 6.2 zeigt.

In dieser Arbeit wurden einige Bereiche der Kontakt-Mechanik nicht mit angesprochen und sollten in zukünftigen Werken geprüft werden. Dazu zählen insbesondere:

- Eine Erweiterung auf reibungsbehaftete Vorgänge führt auf einen weiteren Satz von Ungleichheits-Zwangsbedingungen, die in das System mit eingebunden werden müssen. Dabei existieren bereits eine Reihe von Arbeiten zu diesem Thema (u.a. von Armero & Petöcz [3], Laursen & Chawla [61], Fischer & Wriggers [24] sowie die Arbeiten von Konyukhov & Schweizerhof [53, 54, 55]). Die Erweiterung mechanischer Integratoren auf dissipative Systeme ist Gegenstand aktueller Forschungsprojekte und sollte auf dissipative Funktionen wie einem Coulombschen Reibungsgesetz angewandt werden können.
- Eine Erweiterung auf 3-dimensionale Körper ist eine mehr technische Frage. Im Rahmen der Mortar-Methode müssen dazu in jedem Zeitschritt mehrfach die aktuellen Segmente (im 3-dimensionalen Fall handelt es sich dabei um Flächenelemente) gesucht werden; dies ist allerdings extrem schwierig von der programmtechnischen Seite her darzustellen. Der grundlegende Algorithmus hierzu ist in einem Artikel von Puso [77] vorgestellt worden. Des Weiteren muss ein neuer Satz von Invarianten gesucht werden.
- Durch die Verwendung lagrangescher Multiplikatoren bei Kontakt-Vorgängen werden hochfrequente Schwingungen in ihnen erzeugt. Diese Schwingungen sind nur zum Teil physikalischer Natur. Dieser Anteil kann durch sehr kleine Zeitschrittweiten (kleiner  $10^{-5}$ ) erfasst werden. Ein anderer Teil der Schwingungen wird durch die Numerik erzeugt. Aktuelle Arbeiten zur Unterdrückung dieser Schwingungen basieren auf einer gezielten Veränderung der Quadratur-Formel, die bei der Erzeugung der Massenmatrix verwendet wird (vgl. Hager et al. [35]). Die Veränderung erfolgt dabei unter

Berücksichtigung aller mechanischer Eigenschaften des Systems. Eine weitere Untersuchung dieser Vorgehensweise, insbesondere auf die Auswirkungen auf den physikalisch bedingten Anteil der Schwingungen, erscheint sinnvoll.

# A. Ergänzungen

In diesem Kapitel werden weitere Eigenschaften sowohl der NTS- als auch der Mortar-Methode behandelt. Diese werden anhand zweier statischer Beispiele dargestellt; ein drittes Beispiel dient zur Analyse des Verhaltens holonomer Zwangsbedingungen bei Anwendung energieerhaltender Verfahren entsprechend Kapitel 3.2.2.

## A.1. Aufblas-Studie

Für das erste Beispiel wird ein 2-dimensionaler Ballon, dessen Oberfläche mithilfe nichtlinearer 2-Knoten Seilelemente mit einem E-Modul von  $E = 200000$  und einer konstanten Querschnittsfläche von  $A = 4 \cdot 10^{-4}$  diskretisiert wurde, solange mit einer normal zur Oberfläche wirkenden Drucklast  $p$  aufgeblasen, bis er in Kontakt mit der in Bild A.1 dargestellten, fest eingespannten Oberfläche, tritt. Der zweite Körper, in Bild A.1 als Kissen bezeichnet, wurde hierbei mit nichtlinearen 4-Knoten Kontinuumelementen diskretisiert. Das konstitutive Gesetz entspricht einem St.Venant-Kirchhoff Gesetz mit einem E-Modul von  $E = 40$  und einer Querkontraktionszahl von  $\nu = 0.1$ .

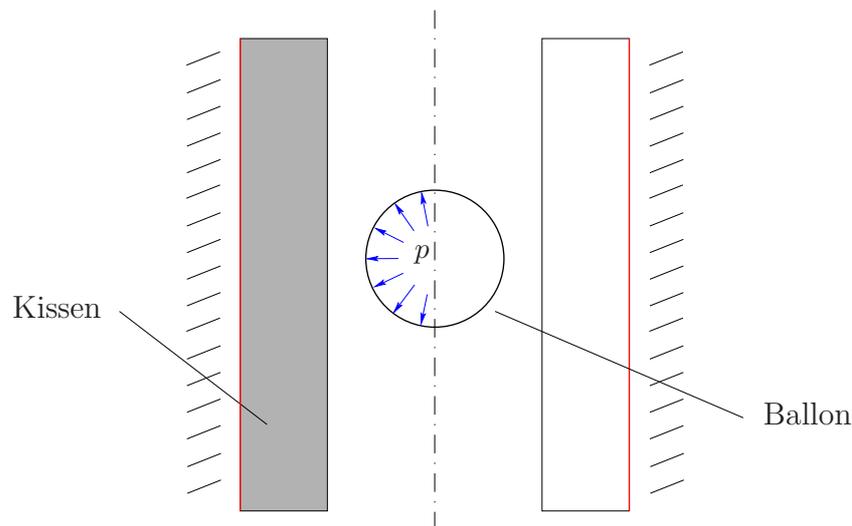


Abbildung A.1.: Aufblas-Studie

Bild A.2 und A.3 zeigen die Referenzkonfiguration und die deformierte Konfiguration des Beispiels. Für den Kontakt wurde ein reibungsfreies Verhalten ange-

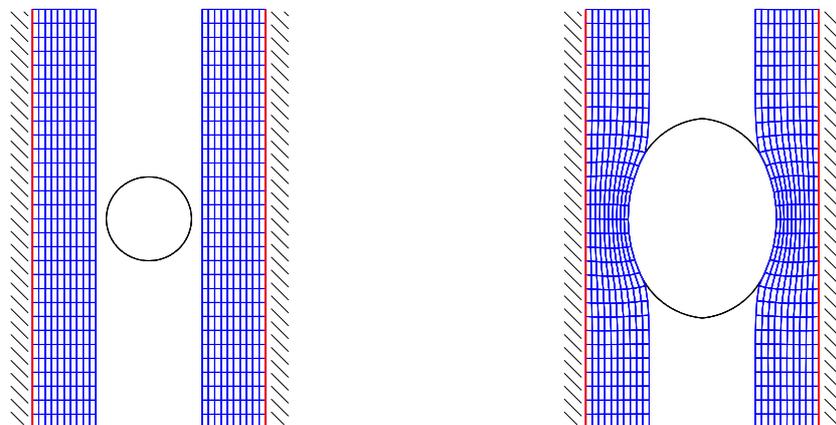


Abbildung A.2.: Aufblas-Studie, Referenzkonfiguration

Abbildung A.3.: Aufblas-Studie, Momentankonfiguration

nommen. In Bild A.4 ist eine Ausschnittsvergrößerung des Kontaktbereiches bei Verwendung einer sog. *1-pass* NTS-Methode dargestellt. Die Knotenpunkte der

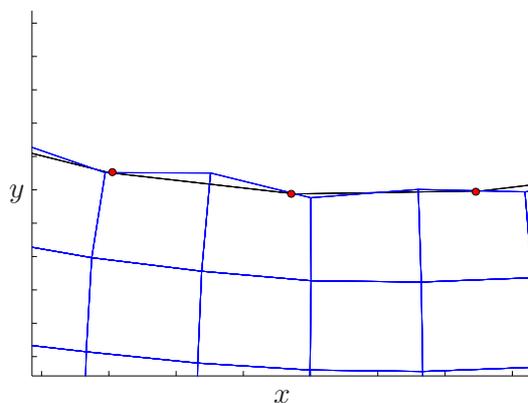


Abbildung A.4.: *1-pass* NTS-Methode - Ausschnitt

Slave-Seite sind dabei auf die Oberfläche der Master-Seite projiziert worden. Deutlich sind hierbei die Unregelmäßigkeiten der Oberfläche auf der Master-Seite zu erkennen. In Bild A.5 wurde die gleiche Simulation unter Zuhilfenahme einer *2-pass* NTS-Methode durchgeführt. Dabei wird sowohl das Durchdringen der Knoten der

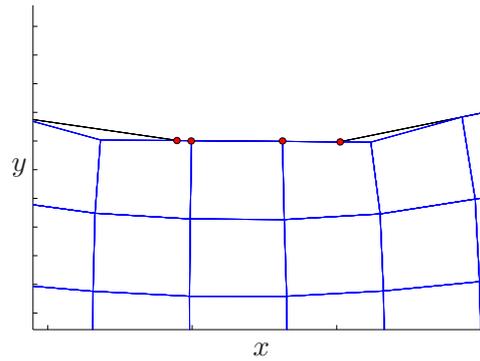


Abbildung A.5.: 2-pass NTS-Methode - Ausschnitt

Slave-Seite durch die Oberfläche der Master-Seite, als auch das Durchdringen der Knoten der Master-Seite durch die Oberfläche der Slave-Seite verhindert. In diesem Ausschnitt zeigt sich exemplarisch der bei dieser Vorgehensweise resultierende *Locking*-Effekt. Die dritte Ausschnittsvergrößerung in Bild A.6 zeigt das Ergebnis der Simulation bei Verwendung der Mortar-Methode. Die integrale Formulierung

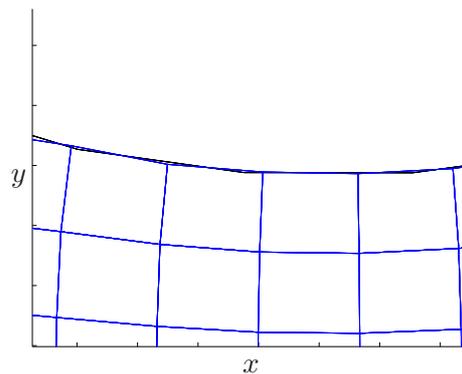


Abbildung A.6.: Mortar-Methode - Ausschnitt

führt zu einer Glättung der sich in Kontakt befindlichen Oberflächen.

## A.2. Patch-Test

Unter der Bedingung, dass die Kontakt-Oberflächen zweier sich in Kontakt befindlichen Körper einem konstanten Spannungsfeld unterliegen, wird dieses Feld exakt von einem Körper auf den anderen übertragen. Patch Tests höherer Ordnung (vgl. Taylor et al. [96]) können ebenfalls verwendet werden. Diese Testmethode, wie sie ursprünglich in Simo et al. [91] zu finden ist, kann hier als Benchmark

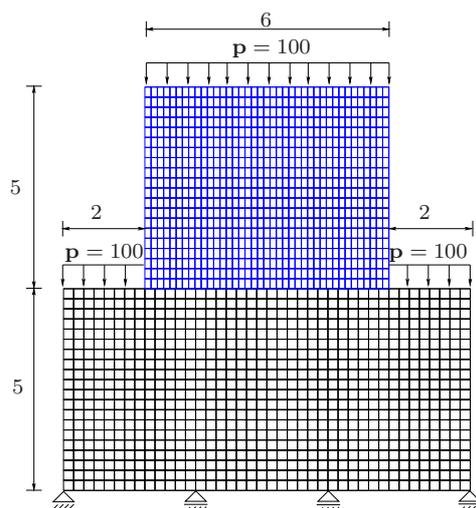


Abbildung A.7.: Referenzkonfiguration des Patch-Tests

für Kontakt-Probleme dienen. Die Konfiguration ist in Bild A.7 dargestellt. Eine gleichmäßig verteilte Flächenlast von  $\mathbf{p} = 100$  ist auf der Oberseite angelegt. Die Diskretisierung des oberen Körpers erfolgte mit  $39 \times 20$ , die des unteren Körpers mit  $40 \times 20$  Elementen, so dass die Nichtkonformität des Kontaktbereiches gewährleistet ist. Beide Körper sind mit nichtlinearen 4-Knoten Elementen diskretisiert

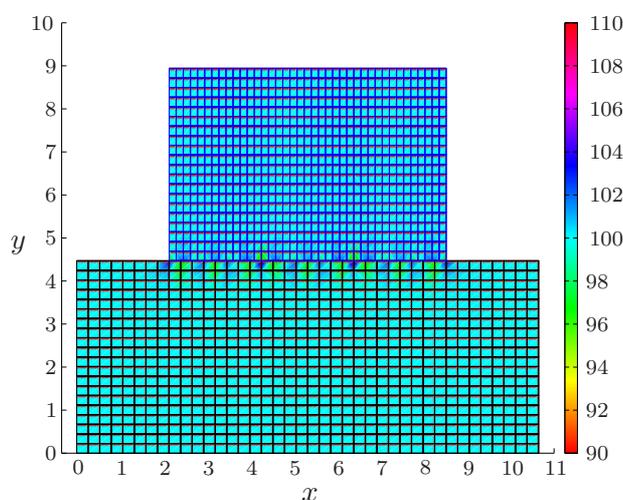


Abbildung A.8.: Patch-Test der NTS-Methode

worden. Das konstitutive Gesetz entspricht einem St.Venant-Kirchhoff Gesetz mit einem E-Modul von  $E = 1000$  und einer Querkontraktionszahl von  $\nu = 0.4$ . In Bild A.8 sind die Ergebnisse der NTS-Methode gezeigt, die Farben repräsentieren dabei von-Mises Vergleichsspannungen. Aufgrund der Unregelmäßigkeiten im Kontaktbereich besteht die NTS-Methode den Patch-Test nicht. Demgegenüber

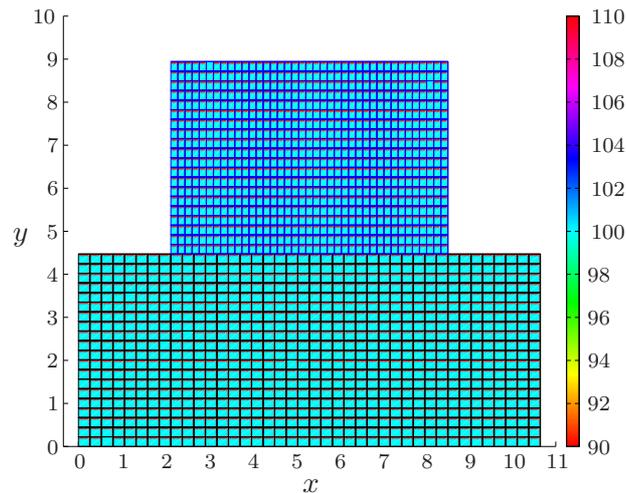


Abbildung A.9.: Patch-Test der Mortar-Methode

zeigt die Darstellung in Bild A.9 das Ergebnis der Mortar-Methode. Das konstante Spannungsfeld wird exakt von einem Körper auf den nächsten Körper weitergegeben.

### A.3. Wirkung mechanischer Integratoren

Die Auswirkungen der verschiedenen, in Abschnitt 3.2.2 behandelten Ansätze für energieerhaltende Verfahren, angewandt auf Systeme mit holonomen Zwangsbedingungen, werden hier anhand eines einfachen Beispiels vorgestellt. Zwei Massenpunkte  $M_1$  und  $M_2$  unterliegen einer Gravitationslast  $m_i g$  mit  $m_i = 1$  und  $g = 9.81$ . Zwischen beiden Massenpunkten ist eine Feder mit einer Federsteifigkeit von  $c = 5000$  gespannt. Der Gradient der in der Feder gespeicherten potenti-

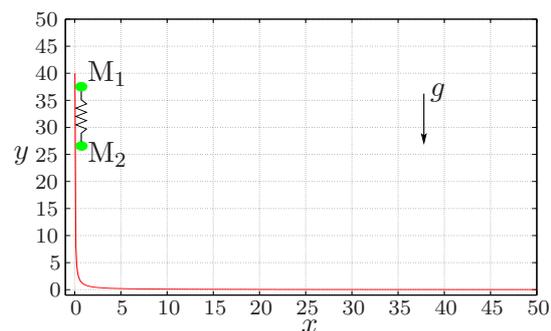


Abbildung A.10.: System mit holonomer Zwangsbedingung

ellen Energie wurde äquivalent zu einem Beispiel aus Gonzalez [30] als diskreter

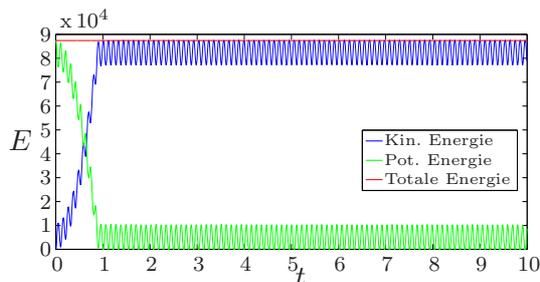


Abbildung A.11.: Energieverteilung der Referenzlösung

Gradient ausgeführt. Beide Massenpunkte unterliegen einer nichtlinearen Zwangsbedingung mit

$$y(x) = \frac{1}{x} \quad \text{bzw.} \quad \Phi(\mathbf{q}) = y - \frac{1}{x} \quad (\text{A.1})$$

mit deren Hilfe  $M_1$  und  $M_2$  auf die in Abbildung A.10 rot dargestellte Kurve gezwungen werden. Die Impuls- und Drehimpulseigenschaften werden im Folgenden nicht weiter untersucht, da beide Größen für diese Zwangsbedingung keine Erhaltungsgrößen darstellen.

Eine Referenzlösung wurde ermittelt, indem die Zeitschrittweite iterativ solange verkleinert wurde, bis die Änderung der Energie pro Zeitschritt ein vorgegebenes Kriterium unterschritten hat. Abbildung A.11 zeigt die Gesamtenergie des Systems über die Zeit und die Energieverteilung in potentielle und kinetische Energie. Wird die Zeitschrittweite auf  $\Delta t = 0.01$  vergrößert, zeigt sich eine deutliche Änderung in der Energiebilanz zum Zeitpunkt  $t = 1$  (vgl. Abb. A.12), da hier der nichtlineare Charakter der Zwangsbedingung am stärksten zum Tragen kommt. Alle weiteren Ergebnisse in diesem Abschnitt wurden mit der Zeitschrittweite  $\Delta t = 0.01$  berechnet. Eine Modifikation der Zwangsbedingung nach Ab-

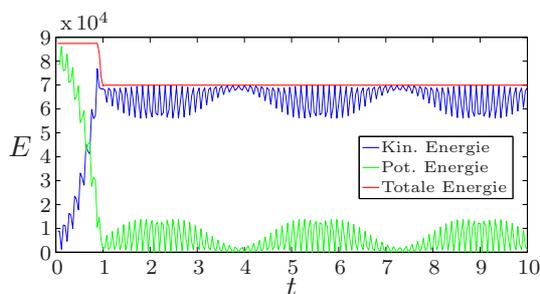


Abbildung A.12.: Energieverteilung der mG(1) Methode

schnitt 3.2.2 führt dazu, dass die ursprünglichen Zwangsbedingungen nicht erfüllt werden. In Abbildung A.13 sind die beiden aus der Modifikation resultierenden Bahnkurven der Massenpunkte und die Referenzkurve der Zwangsbedingung dargestellt. Deutlich zu sehen ist die Veränderung in den Bahnkurven. Entsprechend verändert sich auch die Energieverteilung (vgl. Abb. A.14). Die Gesamtenergie bleibt unabhängig von der Zeitschrittweite eine Erhaltungsgröße. Das Impuls-

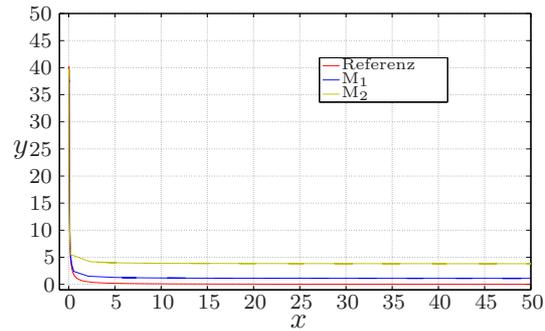


Abbildung A.13.: Bahnkurven nach der Modifikation der Zwangsbedingung

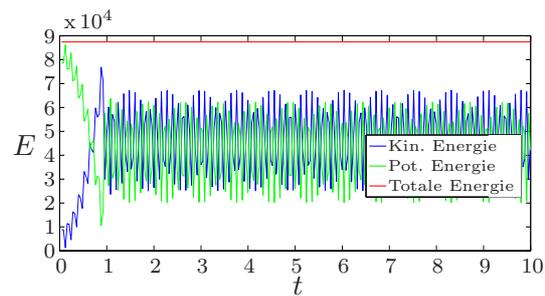


Abbildung A.14.: Energieverteilung nach der Modifikation der Zwangsbedingung

Update Verfahren erfüllt die geometrisch zu interpretierende Zwangsbedingung exakt (vgl. Abb. A.15).

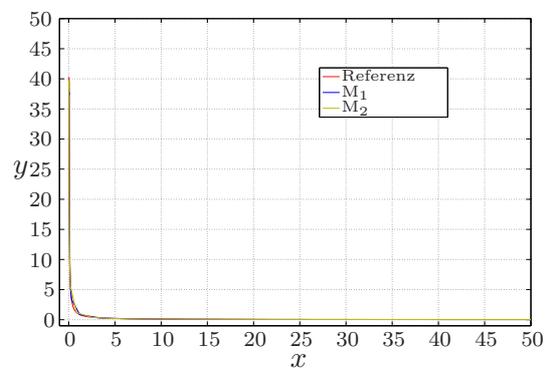


Abbildung A.15.: Bahnkurven des Impuls-Update Verfahrens

In der Energieverteilung (vgl. Abb. A.16) zeigt sich der Einfluß der Impulsänderung auf die Schwingungsmuster. Anzumerken ist, dass die Auswirkungen sehr stark von den Anfangsbedingungen abhängig sind.

Unabhängig von den Anfangsbedingungen stellt die Gesamtenergie eine Erhaltungsgröße dar.

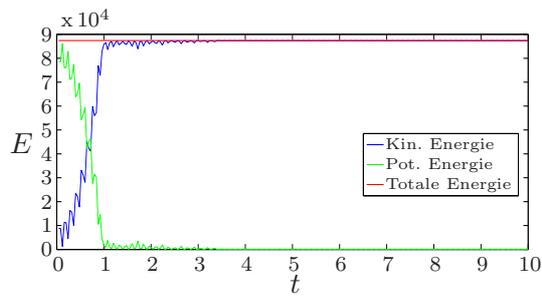


Abbildung A.16.: Energieverteilung des Impuls-Update Verfahrens

Zuletzt wurde das Beispiel mit dem diskreten Gradienten entsprechend Kapitel 3.2.2 simuliert. Abbildung A.17 zeigt, dass die Zwangsbedingung exakt erfüllt wird.

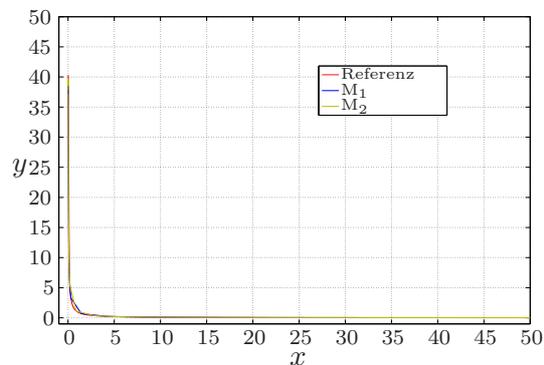


Abbildung A.17.: Bahnkurve des diskreten Gradienten

Die Energieverteilung und die Schwingungsmuster entsprechen den Ergebnissen der Mittelpunktsregel, zusätzlich wird die Gesamtenergie erhalten.

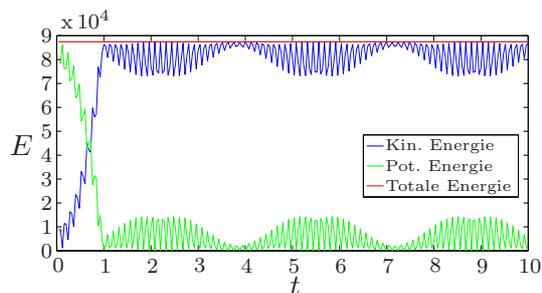


Abbildung A.18.: Energieverteilung des diskreten Gradienten

## B. Ableitungen

### B.1. Erste Ableitung eines NTS-Elementes

Die Zwangsbedingung der NTS-Methode in Normalen-Richtung lautet nach Gleichung (5.10):

$$\Phi_N(\bar{\mathbf{q}}) = \tilde{\Phi}_N(\boldsymbol{\pi}(\bar{\mathbf{q}})) = \frac{\pi_1(\bar{\mathbf{q}})}{\sqrt{\pi_2(\bar{\mathbf{q}})}} \quad (\text{B.1})$$

mit den Invarianten

$$\pi_1(\bar{\mathbf{q}}) = \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\Lambda} \left( \mathbf{x}_S - \frac{1}{2} (\mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_2) \right) \quad (\text{B.2})$$

$$\pi_2(\bar{\mathbf{q}}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{a} \quad (\text{B.3})$$

mit  $\mathbf{a} = \mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1$ . Der Gradient der Zwangsbedingung folgt unter Zuhilfenahme der Kettenregel:

$$\nabla_{\mathbf{q}} \tilde{\Phi}_N = \underbrace{\nabla_{\boldsymbol{\pi}} \tilde{\Phi}_N}_A \cdot \underbrace{\nabla_{\mathbf{q}} \boldsymbol{\pi}}_B \quad (\text{B.4})$$

Für den Term  $A$  folgt:

$$\nabla_{\boldsymbol{\pi}} \tilde{\Phi}_N = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{\pi_2}} & -\frac{1}{2} \frac{\pi_1}{\sqrt{\pi_2^3}} \end{bmatrix} \quad (\text{B.5})$$

Für den Term  $B$  folgt:

$$\nabla_{\mathbf{q}} \boldsymbol{\pi} = \begin{bmatrix} (\boldsymbol{\Lambda} \mathbf{a})^T & (\boldsymbol{\Lambda}(-0.5\mathbf{a} + \mathbf{x}_S - 0.5(\mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_2)))^T & (\boldsymbol{\Lambda}(-0.5\mathbf{a} - \mathbf{x}_S + 0.5(\mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_2)))^T \\ \mathbf{0} & -2\mathbf{a} & 2\mathbf{a} \end{bmatrix} \quad (\text{B.6})$$

### B.2. Erste Ableitung eines Mortar-Elementes

Die Zwangsbedingung der Mortar-Methode in Normalen-Richtung lautet nach Gleichung (5.44):

$$\tilde{\Phi}_1^{\text{seg}}(\boldsymbol{\pi}(\bar{\mathbf{q}})) = \frac{1}{16} \left( \tilde{\xi}_b^{(1)} - \tilde{\xi}_a^{(1)} \right) \left\{ \pi_4 \int_{-1}^1 \left( \tilde{\xi}^{(1)} - 1 \right) d\eta + \pi_5 \int_{-1}^1 \left( \tilde{\xi}^{(2)} - \tilde{\xi}^{(1)} \tilde{\xi}^{(2)} \right) d\eta \right\} \quad (\text{B.7})$$

mit den Invarianten:

$$\pi_1(\bar{\mathbf{q}}) = \left( \mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \cdot \left( \mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \quad (\text{B.8})$$

$$\pi_2(\bar{\mathbf{q}}) = \left( \mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \cdot \left( \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \quad (\text{B.9})$$

$$\pi_3(\bar{\mathbf{q}}) = \left( \mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \cdot \left( \mathbf{x}_2^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \quad (\text{B.10})$$

$$\pi_4(\bar{\mathbf{q}}) = \left( \mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \cdot \mathbf{\Lambda} \left( -2\mathbf{x}_1^{(1)} + \mathbf{x}_1^{(2)} + \mathbf{x}_2^{(2)} \right) \quad (\text{B.11})$$

$$\pi_5(\bar{\mathbf{q}}) = \left( \mathbf{x}_2^{(1)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \cdot \mathbf{\Lambda} \left( \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_2^{(2)} \right) \quad (\text{B.12})$$

Für die Ableitung der lokalen Koordinaten  $\xi_a^{(1)}, \xi_b^{(1)}, \xi_a^{(2)}$  und  $\xi_b^{(2)}$  folgt soweit sie ungleich  $-1$  bzw.  $1$  sind:

$$\begin{aligned} \nabla_\pi \xi_a^{(1)} &= \begin{bmatrix} -\frac{2\pi_2}{\pi_1^2} & \frac{2}{\pi_1} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \nabla_\pi \xi_b^{(1)} &= \begin{bmatrix} -\frac{2\pi_3}{\pi_1^2} & 0 & \frac{2}{\pi_1} & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \nabla_\pi \xi_a^{(2)} &= \begin{bmatrix} 0 & \frac{-\pi_3 - \pi_2}{(\pi_3 - \pi_2)^2} - \frac{1}{\pi_3 - \pi_2} & -\frac{-\pi_3 - \pi_2}{(\pi_3 - \pi_2)^2} - \frac{1}{\pi_3 - \pi_2} & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \nabla_\pi \xi_b^{(2)} &= \begin{bmatrix} \frac{2}{\pi_3 - \pi_2} & \frac{2\pi_1 - \pi_3 - \pi_2}{(\pi_3 - \pi_2)^2} - \frac{1}{\pi_3 - \pi_2} & -\frac{2\pi_1 - \pi_3 - \pi_2}{(\pi_3 - \pi_2)^2} - \frac{1}{\pi_3 - \pi_2} & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Die Ableitung der Transformationsvorschrift aus Gleichung (5.37) folgt direkt aus den vorherigen Ergebnissen:

$$\nabla_\pi \tilde{\xi}^{(\alpha)}(\eta_{gp}) = \frac{1}{2}(1 - \eta_{gp}) \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(\alpha)} + \frac{1}{2}(1 + \eta_{gp}) \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(\alpha)} \quad (\text{B.14})$$

mit den Gauss-Stützstellen  $\eta_{gp}$ . Die Ableitung der Transformation fließt direkt in die Ableitung von Gleichung (B.7) ein:

$$\begin{aligned} \nabla_\pi \tilde{\Phi}_1^{\text{seg}} &= \frac{1}{16} \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(2)}(\eta_{gp}) - \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \times \\ &\quad \left( \left( \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) - 1 \right) \pi_4 + \left( \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \pi_5 \right) w_p + \\ &\quad \frac{1}{16} \left( \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \times \\ &\quad \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \pi_4 + \right. \\ &\quad \left. \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \pi_5 \right) w_p \\ &\quad \frac{1}{16} \left( \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \times \\ &\quad \left[ 0 \ 0 \ 0 \ \left( \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) - 1 \right) \ \left( \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \right] w_p \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

mit den zu den Gauss-Stützstellen  $\eta_{gp}$  gehörenden Gauss-Gewichten  $w_p$ . Für die Ableitung von  $\nabla_\pi \tilde{\Phi}_2^{seg}$  folgt:

$$\begin{aligned}
 \nabla_\pi \tilde{\Phi}_2^{seg} = & \frac{1}{16} \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(2)}(\eta_{gp}) - \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \times \\
 & \left( - \left( \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) + 1 \right) \pi_4 + \left( \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \pi_5 \right) w_p + \\
 & \frac{1}{16} \left( \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \times \\
 & \left( -\nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \pi_4 + \right. \\
 & \left. \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \pi_5 \right) w_p \\
 & \frac{1}{16} \left( \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \times \\
 & \left[ 0 \ 0 \ 0 \ - \left( \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) + 1 \right) \left( \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \right] w_p
 \end{aligned} \tag{B.16}$$

und für die Ableitung der Invarianten:

$$\begin{aligned}
 \nabla_q \pi_1 = \begin{bmatrix} -2\mathbf{a} \\ 2\mathbf{a} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad \nabla_q \pi_2 = \begin{bmatrix} -\mathbf{a} - \left( \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \\ \left( \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \\ \mathbf{a} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad \nabla_q \pi_3 = \begin{bmatrix} -\mathbf{a} - \left( \mathbf{x}_2^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \\ \left( \mathbf{x}_2^{(2)} - \mathbf{x}_1^{(1)} \right) \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{a} \end{bmatrix} \\
 \nabla_q \pi_4 = \begin{bmatrix} \Lambda \left( -2\mathbf{a} - 2\mathbf{x}_1^{(1)} + \mathbf{x}_1^{(2)} + \mathbf{x}_2^{(2)} \right) \\ \Lambda \left( -2\mathbf{x}_1^{(1)} + \mathbf{x}_1^{(2)} + \mathbf{x}_2^{(2)} \right) \\ -\Lambda \mathbf{a} \\ -\Lambda \mathbf{a} \end{bmatrix} \quad \nabla_q \pi_5 = \begin{bmatrix} \Lambda \left( \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_2^{(2)} \right) \\ -\Lambda \left( \mathbf{x}_1^{(2)} - \mathbf{x}_2^{(2)} \right) \\ \Lambda \mathbf{a} \\ -\Lambda \mathbf{a} \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{B.17}$$

### B.3. Zweite Ableitung eines Mortar-Elementes

Die zweite Ableitung des reparametrisierten Mortar-Elementes

$$\Delta \left( \bigcup_{seg} \bar{\nabla}_q \Phi_A^{seg} \right) \tag{B.18}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \bar{\nabla}_q \Phi_1^{seg} &= \bar{\bar{\nabla}}_\pi \tilde{\Phi}_1^{seg} \cdot \nabla_q \pi \\
 \bar{\nabla}_q \Phi_2^{seg} &= \bar{\bar{\nabla}}_\pi \tilde{\Phi}_2^{seg} \cdot \nabla_q \pi
 \end{aligned} \tag{B.19}$$

führt unter Zuhilfenahme der Kettenregel auf folgenden Ausdruck für ein entsprechendes Mortar-Segment:

$$\begin{aligned}
\Delta \left( \overline{\nabla}_q \tilde{\Phi}_1^{seg} \right) &= \Delta \left( \overline{\overline{\nabla}}_\pi \Phi_1^{seg} \right) \cdot \nabla_q \boldsymbol{\pi} + \overline{\overline{\nabla}}_\pi \Phi_1^{seg} \cdot \Delta \left( \nabla_q \boldsymbol{\pi} \right) \\
&= \nabla_q \boldsymbol{\pi} \cdot \Delta_\pi \left( \overline{\overline{\nabla}}_\pi \Phi_1^{seg} \right) \nabla_q \boldsymbol{\pi} + \overline{\overline{\nabla}}_\pi \Phi_1^{seg} \cdot \Delta_q \left( \nabla_q \boldsymbol{\pi} \right) \\
\Delta \left( \overline{\nabla}_q \tilde{\Phi}_2^{seg} \right) &= \Delta \left( \overline{\overline{\nabla}}_\pi \Phi_2^{seg} \right) \cdot \nabla_q \boldsymbol{\pi} + \overline{\overline{\nabla}}_\pi \Phi_2^{seg} \cdot \Delta \left( \nabla_q \boldsymbol{\pi} \right) \\
&= \nabla_q \boldsymbol{\pi} \cdot \Delta_\pi \left( \overline{\overline{\nabla}}_\pi \Phi_2^{seg} \right) \nabla_q \boldsymbol{\pi} + \overline{\overline{\nabla}}_\pi \Phi_2^{seg} \cdot \Delta_q \left( \nabla_q \boldsymbol{\pi} \right)
\end{aligned} \tag{B.20}$$

Für die zweite Ableitung der Zwangsbedingung nach den Invarianten wird zunächst die zweite Ableitung der isoparametrischen Transformation nach Gleichung (5.37) aufgebaut:

$$\Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(\alpha)}(\eta_{gp}) = \frac{1}{2}(1 - \eta_{gp}) \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(\alpha)} + \frac{1}{2}(1 + \eta_{gp}) \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(\alpha)} \tag{B.21}$$

mit

$$\begin{aligned}
\Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)} &= \begin{bmatrix} \frac{4\pi_2}{\pi_1^3} & -\frac{2}{\pi_1^2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{\pi_1^2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(1)} &= \begin{bmatrix} \frac{4\pi_3}{\pi_1^3} & 0 & -\frac{2}{\pi_1^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{\pi_1^2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
\Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(2)} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{(\pi_3 - \pi_2)^2} + \frac{2(-\pi_3 - \pi_2)}{(\pi_3 - \pi_2)^3} & -\frac{2(-\pi_3 - \pi_2)}{(\pi_3 - \pi_2)^3} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2(-\pi_3 - \pi_2)}{(\pi_3 - \pi_2)^3} & \frac{2}{(\pi_3 - \pi_2)^2} + \frac{2(-\pi_3 - \pi_2)}{(\pi_3 - \pi_2)^3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
\Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(2)} &= \begin{bmatrix} 0 & \frac{2}{(\pi_3 - \pi_2)^2} & -\frac{2}{(\pi_3 - \pi_2)^2} & 0 & 0 \\ \frac{2}{(\pi_3 - \pi_2)^2} & -\frac{2}{(\pi_3 - \pi_2)^2} + \frac{2(2\pi_1 - \pi_3 - \pi_2)}{(\pi_3 - \pi_2)^3} & -\frac{2(2\pi_1 - \pi_3 - \pi_2)}{(\pi_3 - \pi_2)^3} & 0 & 0 \\ -\frac{2}{(\pi_3 - \pi_2)^2} & -\frac{2(2\pi_1 - \pi_3 - \pi_2)}{(\pi_3 - \pi_2)^3} & \frac{2}{(\pi_3 - \pi_2)^2} + \frac{2(2\pi_1 - \pi_3 - \pi_2)}{(\pi_3 - \pi_2)^3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{B.22}$$

Daraus folgt die zweite Ableitung der Zwangsbedingung  $\tilde{\Phi}_1^{seg}$  nach den Invarianten:

$$\Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\Phi}_1^{seg} = \mathbf{A}_1(\eta_{gp}) + \mathbf{B}_1(\eta_{gp}) + \mathbf{C}_1(\eta_{gp}) \tag{B.23}$$

mit

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_1(\eta_{gp}) = & \\
& \frac{1}{16} \left( \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(1)} - \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)} \right) \left( \left( \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) - 1 \right) \pi_4 + \left( \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \pi_5 \right) + \\
& \frac{1}{16} \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(1)} - \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)} \right) \cdot \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)} \pi_4 + \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)} - \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)} \tilde{\xi}^{(2)} - \tilde{\xi}^{(1)} \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)} \right) \pi_5 \right) + \\
& \frac{1}{16} \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(1)} - \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)} \right) \cdot \left[ \begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \\ \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) - 1 & & \\ & \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) & \end{array} \right]
\end{aligned} \tag{B.24}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}_1(\eta_{gp}) = & \\
& \frac{1}{16} \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \cdot \\
& \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \pi_4 + \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \pi_5 \right) + \\
& \frac{1}{16} \left( \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \left( \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \pi_4 + \right. \\
& \left. \left( \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \cdot \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \right. \right. \\
& \left. \left. \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \cdot \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \pi_5 \right) + \\
& \frac{1}{16} \left( \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \times \\
& \left[ \begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \\ \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) & \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) & \end{array} \right]
\end{aligned} \tag{B.25}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{C}_1(\eta_{gp}) = & \\
& \frac{1}{16} \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \cdot \\
& \left[ \begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \\ \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) - 1 & & \\ & \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) & \end{array} \right] + \\
& \frac{1}{16} \left( \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \times \\
& \left[ \begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \\ \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) & \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) & \end{array} \right]
\end{aligned} \tag{B.26}$$

und für  $\tilde{\Phi}_2^{\text{seg}}$ :

$$\Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\Phi}_2^{\text{seg}} = \mathbf{A}_2(\eta_{gp}) + \mathbf{B}_2(\eta_{gp}) + \mathbf{C}_2(\eta_{gp}) \tag{B.27}$$

mit

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_2(\eta_{gp}) = & \\
& \frac{1}{16} \left( \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(1)} - \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)} \right) \left( \left( -\tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) - 1 \right) \pi_4 + \left( \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \pi_5 \right) + \\
& \frac{1}{16} \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(1)} - \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)} \right) \cdot \left( -\nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)} \pi_4 + \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)} + \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)} \tilde{\xi}^{(2)} + \tilde{\xi}^{(1)} \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)} \right) \pi_5 \right) + \\
& \frac{1}{16} \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(1)} - \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)} \right) \cdot \left[ \begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \\ -\tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) - 1 & & \\ & \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) & \end{array} \right]
\end{aligned} \tag{B.28}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}_2(\eta_{gp}) = & \\
& \frac{1}{16} \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \cdot \\
& \left( -\nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \pi_4 + \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \pi_5 \right) + \\
& \frac{1}{16} \left( \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \left( -\Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \pi_4 + \right. \\
& \left( \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \cdot \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \right. \\
& \left. \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \cdot \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \pi_5 \left. \right) + \\
& \frac{1}{16} \left( \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \times \\
& \left[ \mathbf{0} \quad \mathbf{0} \quad \mathbf{0} \quad -\nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \quad \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right]
\end{aligned} \tag{B.29}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{C}_2(\eta_{gp}) = & \\
& \frac{1}{16} \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \cdot \\
& \left[ \mathbf{0} \quad \mathbf{0} \quad \mathbf{0} \quad \left( -\tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) - 1 \right) \quad \left( \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \right] + \\
& \frac{1}{16} \left( \tilde{\xi}_b^{(1)}(\eta_{gp}) - \tilde{\xi}_a^{(1)}(\eta_{gp}) \right) \times \\
& \left[ \mathbf{0} \quad \mathbf{0} \quad \mathbf{0} \quad -\nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \quad \left( \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) + \tilde{\xi}^{(1)}(\eta_{gp}) \nabla_\pi \tilde{\xi}^{(2)}(\eta_{gp}) \right) \right]
\end{aligned} \tag{B.30}$$

Die zweite Ableitung der Invarianten führt auf folgende konstante Terme:

$$\begin{aligned}
\Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(1)} = & \begin{bmatrix} \frac{4\pi_2}{\pi_1^3} & -\frac{2}{\pi_1^2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{\pi_1^2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(1)} = & \begin{bmatrix} \frac{4\pi_3}{\pi_1^3} & 0 & -\frac{2}{\pi_1^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{\pi_1^2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
\Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_a^{(2)} = & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{(\pi_3-\pi_2)^2} + \frac{2(-\pi_3-\pi_2)}{(\pi_3-\pi_2)^3} & -\frac{2(-\pi_3-\pi_2)}{(\pi_3-\pi_2)^3} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2(-\pi_3-\pi_2)}{(\pi_3-\pi_2)^3} & \frac{2}{(\pi_3-\pi_2)^2} + \frac{2(-\pi_3-\pi_2)}{(\pi_3-\pi_2)^3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
\Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\xi}_b^{(2)} = & \begin{bmatrix} 0 & \frac{2}{(\pi_3-\pi_2)^2} & -\frac{2}{(\pi_3-\pi_2)^2} & 0 & 0 \\ \frac{2}{(\pi_3-\pi_2)^2} & -\frac{2}{(\pi_3-\pi_2)^2} + \frac{2(2\pi_1-\pi_3-\pi_2)}{(\pi_3-\pi_2)^3} & -\frac{2(2\pi_1-\pi_3-\pi_2)}{(\pi_3-\pi_2)^3} & 0 & 0 \\ -\frac{2}{(\pi_3-\pi_2)^2} & -\frac{2(2\pi_1-\pi_3-\pi_2)}{(\pi_3-\pi_2)^3} & \frac{2}{(\pi_3-\pi_2)^2} + \frac{2(2\pi_1-\pi_3-\pi_2)}{(\pi_3-\pi_2)^3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{B.31}$$

Zuletzt folgt die Ableitung des diskreten Gradientens nach den Invarianten:

$$\begin{aligned}
\Delta_\pi \overline{\nabla}_\pi \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_n, \boldsymbol{\pi}_{n+1}) &= \frac{1}{2} \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) + \\
&\frac{\nabla_\pi \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+1}) - \nabla_\pi \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}}) - \frac{1}{2} \Delta_\pi \nabla_\pi \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}})(\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)}{\|\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n\|^2} (\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n) + \\
&\frac{\tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+1}) - \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_n) - \nabla_\pi \tilde{\Phi}^A(\boldsymbol{\pi}_{n+\frac{1}{2}})(\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)}{\|(\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)\|^2} (\mathbb{I} - 2\mathbf{M} \otimes \mathbf{M})
\end{aligned} \tag{B.32}$$

mit

$$\mathbf{M} = \frac{\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n}{\|(\boldsymbol{\pi}_{n+1} - \boldsymbol{\pi}_n)\|} \tag{B.33}$$

und der  $5 \times 5$  Einheitsmatrix  $\mathbb{I}$ .

## Literaturverzeichnis

- [1] R. Abraham, J.E. Marsden, and T.S. Ratiu. *Manifolds, Tensor Analysis, and Applications*. Springer, 1988.
- [2] F. Armero and E. Petöcz. Formulation and analysis of conserving algorithms for frictionless dynamic contact/impact problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 158:269–300, 1998.
- [3] F. Armero and E. Petöcz. A new dissipative time-stepping algorithm for frictional contact problems: formulation and analysis. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 179:159–178, 1999.
- [4] F. Armero and I. Romero. On the formulation of high-frequency dissipative time-stepping algorithms for nonlinear dynamics. Part I: low-order methods for two model problems and nonlinear elastodynamics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190:2603–2649, 2001.
- [5] F. Armero and I. Romero. On the formulation of high-frequency dissipative time-stepping algorithms for nonlinear dynamics. Part II: second-order methods. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190:6783–6824, 2001.
- [6] K.J. Bathe and A.B. Chaudhary. A solution method for planar and axisymmetric contact problems. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 21:65–88, 1985.
- [7] R. Becker, P. Hansbo, and R. Stenberg. A finite element method for domain decomposition with non-matching grids. *CHALMERS*, pages 1–20, 2001.
- [8] M. Benzi, G.H. Golub, and J. Liesen. Numerical solution of saddle point problems. *Acta Numerica*, pages 1–137, 2005.
- [9] M. Bergounioux, K. Ito, and K. Kunisch. Primal-dual strategy for constrained optimal control problems. *SIAM J. Control Optim.*, 37:1176–1194, 1999.
- [10] C. Bernardi, Y. Mayday, and A.T. Patera. A new nonconforming approach to domain decomposition: the mortar element method. *Nonlinear partial differential equations and their applications*, pages 13–51, 1994.
- [11] P. Betsch. *Computational Methods for Flexible Multibody Dynamics*. Habilitationsschrift, Universität Kaiserslautern, 2002.

- [12] P. Betsch. The discrete null space method for the energy consistent integration of constrained mechanical systems: Part I: Holonomic constraints. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 194:5159–5190, 2005.
- [13] P. Betsch. Energy-consistent numerical integration of mechanical systems with mixed holonomic and non-holonomic constraints. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 195:7020–7035, 2006.
- [14] P. Betsch and C. Hesch. Energy-Momentum Conserving Schemes for Frictionless Dynamic Contact Problems. Part I: NTS Method. In P. Wriggers and U. Nackenhorst, editors, *IUTAM Symposium on Computational Methods in Contact Mechanics*, pages 77–96. Springer, 2007.
- [15] P. Betsch and S. Leyendecker. The discrete null space method for the energy consistent integration of constrained mechanical systems: Part II: Multibody dynamics. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 67:499–552, 2006.
- [16] P. Betsch and P. Steinmann. Conserving properties of a time FE method - Part I: Time-stepping schemes for n-body problems. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 49:599–638, 2000.
- [17] P. Betsch and P. Steinmann. Inherently energy conserving time finite elements for classical mechanics. *Journal of Computational Physics*, 160:88–116, 2000.
- [18] P. Betsch and P. Steinmann. Conserving properties of a time FE method - Part II: Time-stepping schemes for non-linear elastodynamics. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 50:1931–1955, 2001.
- [19] P. Betsch and P. Steinmann. Conservation properties of a time FE method. Part III: Mechanical systems with holonomic constraints. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 53:2271–2304, 2002.
- [20] Brunssen, S. and Hüeber, S. and Wohlmuth, B.I. Contact dynamics with Lagrange multipliers. *IUTAM Bookseries*, 2007.
- [21] X. Chen, Z. Nashed, and L. Qi. Smoothing methods and semismooth methods for nondifferentiable operator equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 38:1200–1216, 2000.
- [22] E. Eich-Soellner and C. Fuehrer. *Numerical Methods in Multibody Dynamics*. B.G. Teubner Stuttgart, 1998.
- [23] K.A. Fischer and P. Wriggers. Frictionless 2d contact formulations for finite deformations based on the mortar method. 36:226–244, 2005.
- [24] K.A. Fischer and P. Wriggers. Mortar based frictional contact formulation for higher order interpolations using the moving friction cone. 195:5020–5036, 2005.

- [25] B. Flemisch, M.A Puso, and B.I. Wohlmuth. A new dual mortar method for curved interfaces: 2d elasticity. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 63:813–832, 2005.
- [26] A. Fritzsche. *Nitsche-Finite-Element-Methode für Gebietszerlegungen mit nicht konformen Gittern*. IANS, 2003.
- [27] G.H. Golub, X. Wu, and J.Y. Yuan. SOR-like methods for augmented systems. *BIT*, 41:71–85, 2001.
- [28] O. Gonzalez. *Design and analysis of conserving integrators for nonlinear Hamiltonian systems with symmetry*. Stanford University, 1996.
- [29] O. Gonzalez. Time integration and discrete Hamiltonian systems. *J. Nonlinear Sci.*, 6:449–467, 1996.
- [30] O. Gonzalez. Mechanical systems subject to holonomic constraints: Differential - algebraic formulations and conservative integration. *Physica D*, 132:165–174, 1999.
- [31] O. Gonzalez. Exact energy and momentum conserving algorithms for general models in nonlinear elasticity. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 190:1763–1783, 2000.
- [32] O. Gonzalez and J.C. Simo. On the stability of symplectic and energy-momentum algorithms for non-linear Hamiltonian systems with symmetry. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 134:197–222, 1996.
- [33] M. Gross. *Conserving Time Integrators for Nonlinear Elastodynamics*. Universität Kaiserslautern, 2004.
- [34] W. Hackbusch. *Multi-Grid Methods and Applications*. Springer, 1985.
- [35] Hager, C. and Hübner, S. and Wohlmuth, B.I. A stable energy conserving approach for frictional contact problems based on quadrature formulas. *IANS*, 2006.
- [36] J.O. Hallquist. Nike2d. *Technical Report UCRL-52678, University of California, Lawrence Livermore National Laboratory*, 1979.
- [37] J.O. Hallquist, G.L. Goudreau, and D.J. Benson. Sliding interfaces with contact-impact in large-scale Lagrangian computations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 51:107–137, 1985.
- [38] S. Hartmann, S. Brunssen, E. Ramm, and B.I. Wohlmuth. A primal-dual active set strategy for unilateral non-linear dynamic contact problems of thin-walled structures, IANS preprint 2006/003. 2006.
- [39] P. Hauret and P. Le Tallec. Energy-controlling time integration methods for nonlinear elastodynamics and low-velocity impact. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 195:4890–4916, 2006.

- 
- [40] B. Heinrich and B. Jung. The Fourier-finite-element method with Nitsche-mortaring. *Preprint-Reihe des Chemnitzer SFB 393*, 04-11:1–25, 2004.
- [41] B. Heinrich and K. Poenitz. Nitsche type mortaring for singularly perturbed reaction-diffusion problems. *Preprint-Reihe des Chemnitzer SFB 393*, 03-17:1–21, 2003.
- [42] C. Hesch and P. Betsch. A comparison of computational methods for large deformation contact problems of flexible bodies. *ZAMM*, 86:818–827, 2006.
- [43] C. Hesch and P. Betsch. On the energy-momentum conserving integration of large deformation contact problems. In Proceedings of ECCOMAS Thematic Conference, 25–28.06.2007, Mailand, 2007.
- [44] P. Hild. Numerical implementation of two nonconforming finite element methods for unilateral contact. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 184:99–123, 2000.
- [45] M. Hintermueller, K. Ito, and K. Kunisch. The primal-dual active set strategy as a semismooth Newton method. *SIAM*, 13:865–888, 2003.
- [46] G.A. Holzapfel. *Nonlinear Solid Mechanics*. John Wiley & Sons, Ltd, 2001.
- [47] S. Hübner and B.I. Wohlmuth. Mortar methods for contact problems. In P. Wriggers and U. Nackenhorst, editors, *Analysis and Simulation of Contact Problems*, volume 27 of *Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics*, pages 39–47. Springer, 2006.
- [48] T.J.R. Hughes. *The Finite Element Method*. Dover Publications, 2000.
- [49] M. Jung and U. Langer. *Methode der finiten Elemente für Ingenieure*. B.G. Teubner, 2001.
- [50] E.P. Kasper and Taylor R.L. A mixed-enhanced strain method Part I: Geometrically linear problems. *Computer and Structures*, 75:237–250, 2000.
- [51] E.P. Kasper and Taylor R.L. A mixed-enhanced strain method Part II: Geometrically nonlinear problems. *Computer and Structures*, 75:251–260, 2000.
- [52] R.D. Kim, C. Lazarov, J.E. Pasciak, and P.S. Vassilevski. Multiplier spaces for the mortar finite element method in three dimensions. *SIAM J. Numer. Anal.*, 39:519–539, 2001.
- [53] A. Konyukhov and K. Schweizerhof. Covariant description for frictional contact problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 35:190–213, 2005.
- [54] A. Konyukhov and K. Schweizerhof. Covariant description of contact interfaces considering anisotropy for adhesion and friction: Part 1. Formulation and analysis of the computational model. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 196:103–117, 2006.

- [55] A. Konyukhov and K. Schweizerhof. Covariant description of contact interfaces considering anisotropy for adhesion and friction: Part II. Linearisation, finite element implementation and numerical analysis of the model. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 196:289–303, 2006.
- [56] E. Kuhl. *Theory and Numerics of Open System Continuum Thermodynamics - Spatial and Material Settings*. Habilitationsschrift, Universität Kaiserslautern, 2004.
- [57] H. W. Kuhn and A. W. Tucker. Nonlinear programming - Proceedings of 2nd Berkeley Symposium. *University of California Press*, pages 481–492, 1951.
- [58] T.A. Laursen. *Formulation and treatment of frictional contact problems using finite elements*. PhD thesis, Stanford University, 1992.
- [59] T.A. Laursen. *Computational Contact and Impact Mechanics*. Springer, 2002.
- [60] T.A. Laursen and V. Chawla. Design of energy conserving algorithms for frictionless dynamic contact problems. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 40:863–886, 1997.
- [61] T.A. Laursen and V. Chawla. Energy consistent algorithms for frictional contact problems. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 42:799–827, 1998.
- [62] T.A. Laursen and G.R. Love. Improved implicit integrators for transient impact problems – geometric admissibility within the conserving framework. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 53:245–274, 2002.
- [63] T.A. Laursen and X. Meng. A new solution procedure for application of energy-conserving algorithms to general constitutive models in nonlinear elastodynamics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 190:6309–6322, 2001.
- [64] C. Li, Z. Li, D.J. Evans, and T. Zhang. A note on an SOR-like method for augmented systems. *Journal of Numerical Analysis*, 23:581–592, 2003.
- [65] J.E. Marsden and J.R. Hughes. *Mathematical Foundations of Elasticity*. Prentice-Hall, INC, 1983.
- [66] J.E. Marsden and T.S. Ratiu. *Einführung in die Mechanik und Symmetrie*. Springer, 2001.
- [67] T.W. McDvitt and T.A. Laursen. A mortar-finite element formulation for frictional contact problems. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 48:1525–1547, 2000.
- [68] L. Meirovitch. *Methods of analytical dynamics*. McGraw-Hill, 1970.

- [69] J. Mergheim, E. Kuhl, and P. Steinmann. A hybrid discontinuous Galerkin / interface method for the computational modelling of failure. *Commun. Numer. Methods Engng.*, 20:511–519, 2004.
- [70] Y. Miyazaki and K.C. Park. A formulation of conserving impact system based on localized Lagrange multipliers. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 68(1):98–124, 2006.
- [71] J. Nitsche. Über ein Variationsprinzip zur Lösung von Dirichlet Problemen bei Verwendung von Teilräumen, die keinen Randbedingungen unterworfen sind. *Abh. in der Mathematik an der Universität Hamburg*, 36:9–15, 1970.
- [72] B. Nour-Omid and P. Wriggers. A two-level iteration method for solution of contact problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 54:131–144, 1986.
- [73] R.W. Ogden. *Non-Linear Elastic Deformations*. Ellis Horwood Limited, 1984.
- [74] P. Papadopoulos and R.L. Taylor. A mixed formulation for the finite element solution of contact problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 94:373–389, 1992.
- [75] K.C. Park and C.A. Felippa. A variational principle for the formulation of partitioned structural systems. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 47:395–418, 2000.
- [76] K.C. Park, C.A. Felippa, and G. Rebel. A simple algorithm for localized construction of non-matching structural interfaces. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 53:2117–2142, 2002.
- [77] M.A Puso. A 3d mortar method for solid mechanics. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 59:315–336, 2004.
- [78] M.A. Puso and T.A. Laursen. A mortar segment-to-segment contact method for large deformation solid mechanics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 193:601–629, 2004.
- [79] M.A. Puso, T.A. Laursen, and J. Solberg. A segment-to-segment mortar contact method for quadratic elements and large deformations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 197:555–566, 2008.
- [80] A. Quarteroni, R. Sacco, and F. Saleri. *Numerische Mathematik 1*. Springer, 2002.
- [81] A. Quarteroni, R. Sacco, and F. Saleri. *Numerische Mathematik 2*. Springer, 2002.
- [82] G. Rebel, K.C. Park, and C.A. Felippa. A contact formulation based on localized Lagrange multipliers: formulation and application to two-dimensional problems. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 54:263–297, 2002.

- [83] B.D. Reddy. *Introductory Functional Analysis*. Springer, 1998.
- [84] I. Romero. *Formulation and analysis of dissipative algorithms for nonlinear elastodynamics*. UC-Berkley, 1995.
- [85] J.C. Simo and F. Armero. Geometrically non-linear enhanced strain mixed methods and the method of incompatible modes. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 33:1413–1449, 1992.
- [86] J.C. Simo, F. Armero, and R.L. Taylor. Improved versions of assumed enhanced strain tri-linear elements for 3d finite deformation problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 110:359–386, 1993.
- [87] J.C. Simo and J.R. Hughes. *Computational Inelasticity*. Springer, 1997.
- [88] J.C. Simo and T.A. Laursen. An augmented Lagrangian treatment of contact problems involving friction. *Computer and Structures*, 42:97–116, 1992.
- [89] J.C. Simo and N. Tarnow. The discrete energy-momentum method. Conserving algorithms for nonlinear elastodynamics. *ZAMP*, 43, 1992.
- [90] J.C. Simo, N. Tarnow, and K.K. Wong. Exact energy-momentum conserving algorithms and symplectic schemes for nonlinear dynamics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 100:63–116, 1992.
- [91] J.C. Simo, P. Wriggers, and R.L. Taylor. A perturbed Lagrangian formulation for the finite element solution of contact problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 50:163–180, 1985.
- [92] R. Stenberg. Mortaring by a method of J.A. Nitsche. *Computational Mechanics - New Trends and Applications CIMNE*, 1998.
- [93] G. Strang. *Lineare Algebra*. Springer, 1998.
- [94] G. Strang and G.J. Fix. *An Analysis of the Finite Element Method*. Prentice-Hall, 1973.
- [95] R.L. Taylor and P. Papadopoulos. On a Finite Element Method for Dynamic Contact/Impact Problems. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 36:2123–2140, 1993.
- [96] R.L. Taylor, Zienkiewicz O.C. Simo, J.C., and A.C.H. Chan. The patch test - A condition for assessing fem convergence. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 22:39–62, 1986.
- [97] C. Truesdell and W. Noll. *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*. Springer, 2004.
- [98] B.F. Veubeke. Variational principles and the patch test. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 8:783–801, 1974.

- 
- [99] B.I. Wohlmuth. *Discretization Methods and Iterative Solvers based on Domain Decomposition*. Springer, 2000.
- [100] B.I. Wohlmuth. A mortar finite element method using dual spaces for the Lagrange multiplier. 38:989–1012, 2000.
- [101] B.I. Wohlmuth and S. Hübner. A primal-dual active set strategy for nonlinear multibody contact problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 194:3147–3166, 2005.
- [102] B.I. Wohlmuth and R. Krause. A multigrid methods based on the unconstrained product space arising from mortar finite element discretizations. 39:192–213, 2001.
- [103] B.I. Wohlmuth and B.P. Lamichhane. Mortar finite elements for interface problems. *IANS*, 2003.
- [104] P. Wriggers. Finite Element Algorithms for Contact Problems. *Archive of Computational Methods in Engineering*, 1995.
- [105] P. Wriggers. *Nichtlineare Finite-Element-Methoden*. Springer, 2001.
- [106] P. Wriggers. *Computational contact mechanics*. John Wiley & Sons Ltd, 2002.
- [107] P. Wriggers, T.V. Van, and E. Stein. Finite element formulations of large deformation impact-contact problems with friction. *Computers and Structures*, 37:319–331, 1990.
- [108] B. Yang, T.A. Laursen, and X. Meng. Two dimensional mortar contact methods for large deformation frictional sliding. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 62:1183–1225, 2005.
- [109] O.C. Zienkiewicz, Taylor R.L. Qu, S., and S. Nakazawa. The patch test for mixed formulations. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 23:1873–1883, 1986.
- [110] O.C. Zienkiewicz and R.L. Taylor. The finite element patch test revisited. A computer test for convergence, validation and error estimates. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 149:223–254, 1997.
- [111] O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, and J.Z. Zhu. *The Finite Element Method. Its Basis and Fundamentals*. Butterworth Heinemann, 2005.