

# Integration thermoelastisch gekoppelter diskreter Systeme

## Motivation

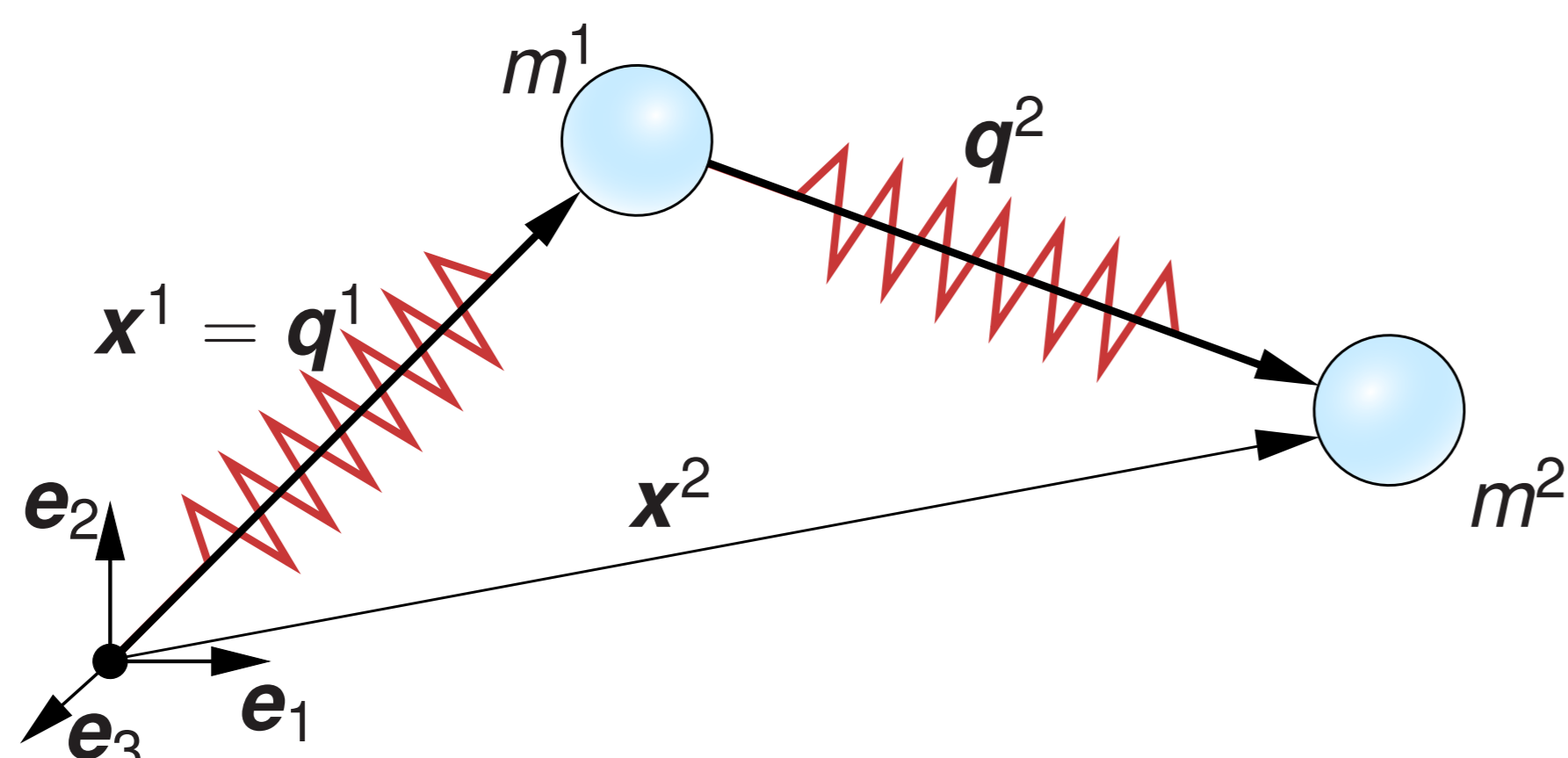
### Zeitliche Diskretisierung von thermoelastisch gekoppelten diskreten Systemen

Anforderungen an die Integratoren

- Stabilität
- Erhaltung der physikalischen Struktur
- Vergleich von Entropie- und Temperaturformulierung
  - Entropieformulierung nach Krüger et al. (2011)
  - Dirichlet-Randbedingung des thermischen Feldes meist in Temperaturvariablen gegeben
  - Temperaturformulierung intuitiver
- thermoelastisch gekoppeltes Doppelpendel als Modellproblem

## Thermoelastisch gekoppeltes Doppelpendel

### Hamiltonische Beschreibung des Doppelpendels



### Bestandteile

- Massenpunkte  $m^\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2$
- Freie Energiefunktionen  $\psi^\alpha$  der Federelemente

$$\begin{aligned} \psi^\alpha(c^\alpha, \theta^\alpha) &= \frac{K^\alpha}{2} \log^2 \left[ \frac{\lambda^\alpha}{\lambda_0^\alpha} \right] - \beta^\alpha \theta^\alpha \log \left[ \frac{\lambda^\alpha}{\lambda_0^\alpha} \right] + k^\alpha \left[ \theta^\alpha - \theta^\alpha \log \left[ \frac{\theta^\alpha}{\theta_\infty^\alpha} \right] \right] \\ &= \Psi_{mech}^\alpha(c^\alpha) + \Psi_{coupl}^\alpha(c^\alpha, \theta^\alpha) + \Psi_{therm}^\alpha(\theta^\alpha) \end{aligned}$$

### Beschreibung

- Gesamtenergiefunktion

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \theta) = T(\mathbf{p}) + e(\mathbf{q}, \theta)$$

- Gesamtentropiefunktion

$$S(\mathbf{q}, \theta)$$

- Zustandsvektor

$$\mathbf{z} = \langle \mathbf{q}, \mathbf{p}, \theta \rangle$$

- Evolutionsgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}}^j &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}^j} \\ \dot{\mathbf{p}}^j &= -\frac{\partial \Psi^j}{\partial \mathbf{q}^j} \\ \dot{\theta}^j &= \left[ \frac{\partial e^j}{\partial \theta^j} \right]^{-1} \left[ \kappa^j (\theta^j - \theta^i) - \theta^j \frac{\partial S^i}{\partial \lambda^j} \lambda^j \right], \quad j \neq i, \quad i = 1, 2 \end{aligned}$$

## GENERIC Formalismus

### General Equation for Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling (GENERIC)

- AWP in Matrix-Vektor Schreibweise

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{z}} &= \mathbb{L}(\mathbf{z}) \cdot \nabla H(\mathbf{z}) + \mathbb{M}(\mathbf{z}) \cdot \nabla S(\mathbf{z}) \\ \mathbf{z}(t_0) &= \mathbf{z}_0 \\ \mathbb{L} &= -\mathbb{L}^T, \quad \mathbb{M} = \mathbb{M}^T \text{ und pos. def.} \end{aligned}$$

- Degenerierungsbedingungen  $\rightarrow$  Erhaltung physikalischer Eigenschaften:

$$\mathbb{L} \cdot \nabla S = \mathbb{M} \cdot \nabla H = 0$$

### Folgerungen

- Energiebilanz:

$$\dot{H} = \nabla H \cdot \dot{\mathbf{z}} = \nabla H \cdot (\mathbb{L} \cdot \nabla H + \mathbb{M} \cdot \nabla S) = 0$$

- Entropiebilanz:

$$\dot{S} = \nabla S \cdot \dot{\mathbf{z}} = \nabla S \cdot \mathbb{M} \cdot \nabla S \geq 0$$

## Thermodynamically consistent Integrator (TC)

- Gewährleistet die Konsistenz mit dem 1. und 2. Hauptsatz der Thermodynamik
- Konzept der G-äquivalenten partitionierten diskreten Gradienten

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{z}_{n+1} - \mathbf{z}_n}{\Delta t} &= \mathbb{L}(\mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{z}_n) \cdot DH(\mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{z}_n) \\ &\quad + \mathbb{M}(\mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{z}_n) \cdot DS(\mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{z}_n) \end{aligned}$$

- Reparametrisierung mit Rotationsinvarianten  $\pi(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \theta)$

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \theta) = \bar{H}(\pi(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \theta))$$

$$S(\mathbf{q}, \theta) = \bar{S}(\pi(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \theta))$$

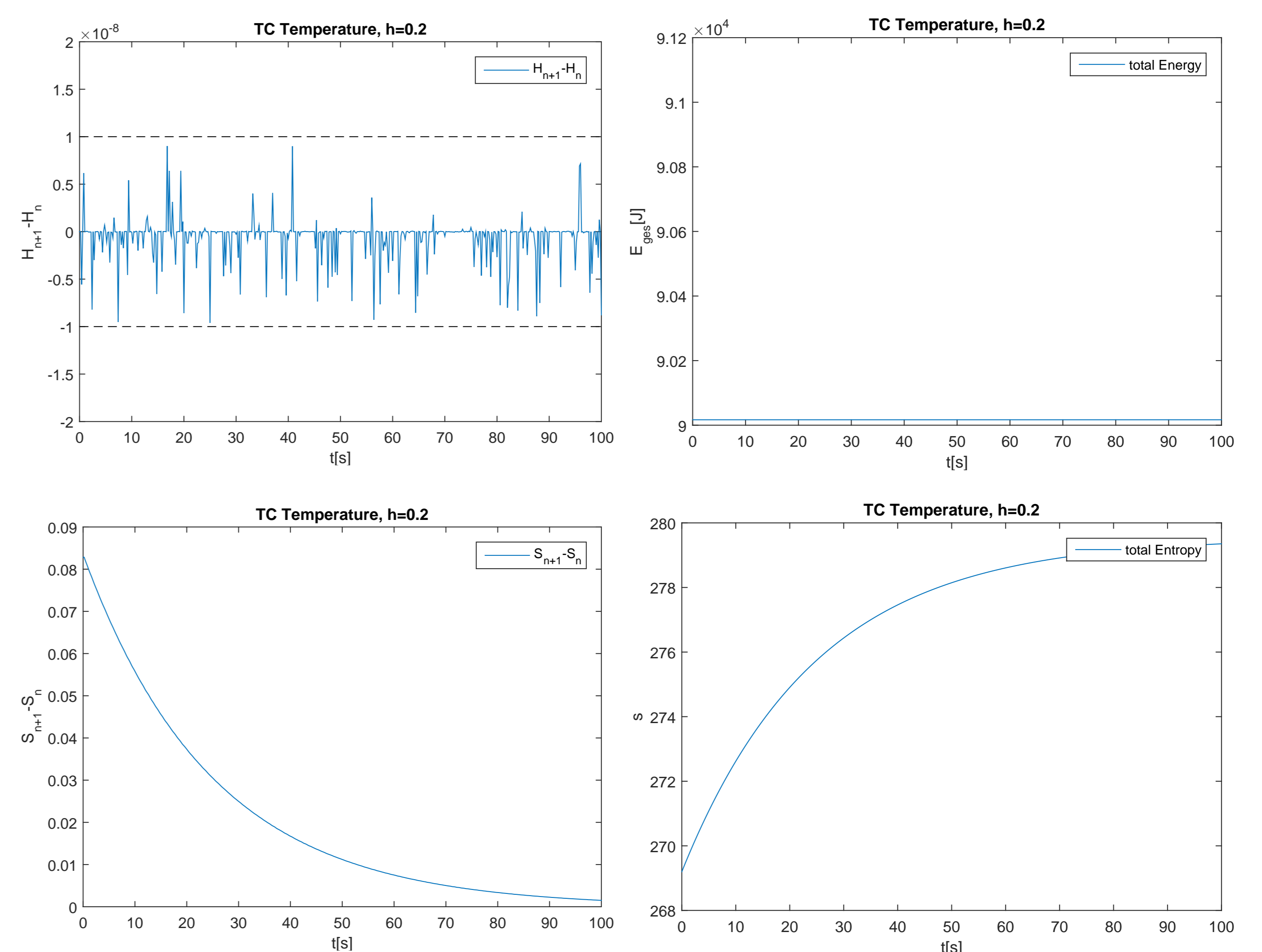
- Anwendung der Kettenregel

$$DH(\mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{z}_n) = \bar{D}\bar{H}(\pi_{n+1}, \pi_n) \cdot \nabla \pi(\mathbf{z}_{n+1/2})$$

$$DS(\mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{z}_n) = \bar{D}\bar{S}(\pi_{n+1}, \pi_n) \cdot \nabla \pi(\mathbf{z}_{n+1/2})$$

## Numerische Beispiele

Numerische Beispiele aus Krüger et al. (2011) mit Abbruchkriterium basierend auf der Bilanzierung der diskreten Energiedifferenz des Systems



## Referenzen

- Krüger, M., Groß, M., and Betsch, P. (2011). A comparison of structure-preserving integrators for discrete thermoelastic systems. *Computational Mechanics*, 47(6):701–722.
- Romero, I. (2009). Thermodynamically consistent time-stepping algorithms for non-linear thermomechanical systems. *International journal for numerical methods in engineering*, 79(6):706–732.