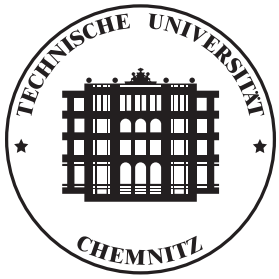
# Anwendung adaptiver FEM für piezoelektrische und spezielle mechanische Probleme

## Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
Doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)

**Technische Universität Chemnitz**
**Fakultät für Mathematik**




vorgelegt von Dipl.-Math. techn. Peter Steinhorst
geboren am 01.06.1978 in Schleiz

eingereicht am 29. Januar 2009

| | |
|---|---|
| Betreuer: | Prof. Dr. Arnd Meyer (TU Chemnitz) |
| Gutachter: | Prof. Dr. Arnd Meyer (TU Chemnitz) |
| | o. Univ.-Prof. Dr. Ulrich Langer (Universität Linz) |
| | Prof. Dr. Barbara Kaltenbacher (Universität Stuttgart) |

Tag der Verteidigung: 14. Juli 2009

**Umwelthinweis:** Die vorgelegte Arbeit wurde auf 100% Recyclingpapier gedruckt.

# Inhaltsverzeichnis


**1 Einleitung** **6**
- 1.1 Motivation . . . 6
- 1.2 Einführende Definitionen und Hilfsmittel . . . 7
  - 1.2.1 Räume stetig differenzierbarer Funktionen . . . 7
  - 1.2.2 Sobolevräume und zugehörige Normen . . . 7
  - 1.2.3 Ungleichungen . . . 8

**2 Grundlagen und mathematische Modelle** **9**
- 2.1 Lineare Elastizität . . . 9
  - 2.1.1 Beschreibung . . . 9
  - 2.1.2 Größen und Gleichungen . . . 10
  - 2.1.3 Schwache Formulierung . . . 12
  - 2.1.4 Reduzierte Zustände für 2D-Betrachtung . . . 14
- 2.2 Inkompressibles Materialverhalten . . . 15
  - 2.2.1 Schwache Formulierung . . . 16
  - 2.2.2 Sattelpunktprobleme und Inf-Sup-Bedingung . . . 17
- 2.3 Piezoelektrizität . . . 18
  - 2.3.1 Begriffsklärung und Grundlagen . . . 18
  - 2.3.2 Modelle für verschiedene Strukturebenen . . . 21
  - 2.3.3 Mathematische Problemformulierung . . . 22
  - 2.3.4 Hystereseverhalten und Linearisierung . . . 23
  - 2.3.5 Schwache Formulierung . . . 26
  - 2.3.6 Existenz und Eindeutigkeit . . . 28
  - 2.3.7 3D-Materialgleichungen (transversalisotrop) . . . 29
  - 2.3.8 Reduktion auf 2D . . . 30

**3 Finite-Element-Anwendung** **32**
- 3.1 Allgemeines und Diskretisierung . . . 32
- 3.2 Elementewahl . . . 34
  - 3.2.1 Elemente für inkompressible Materialien, LBB-Bedingung . . . 34
  - 3.2.2 Elemente für piezoelektrische Materialien . . . 36
- 3.3 Adaptivität . . . 37
  - 3.3.1 Motivation einer adaptiven FEM . . . 37

3.3.2 Fehlerschätzung . . . . . 37
3.4 Rotationssymmetrie bei piezoelektrischen Aufgaben . . . . . 45
3.4.1 Grundlagen . . . . . 46
3.4.2 Abgeleitete Größen bei Rotationssymmetrie . . . . . 47
3.4.3 Integranden für die Bilinearformen bei Polung in axialer Richtung . 48
3.4.4 Integranden für die Bilinearformen bei Polung in radialer Richtung 50
3.4.5 Anpassung des Fehlerschätzers . . . . . 53
3.4.6 Numerische Beispielrechnungen . . . . . 55

**4 Löser und Vorkonditionierung 62**
4.1 Modifizierter Bramble-Pasciak-CG . . . . . 62
4.2 Wahl geeigneter Parameter . . . . . 64
4.2.1 Abschätzung mithilfe von Teilmatrizen . . . . . 64
4.2.2 Konditionsbeschränkung mittels Parameterwahl . . . . . 67
4.2.3 Berechnung der Rayleighquotienten . . . . . 69
4.2.4 Numerische Experimente . . . . . 70
4.3 Vorkonditionierung des Schurkomplements im piezoelektrischen Fall . . . . 74

**5 Besondere Randbedingungen und Rißränder bei Piezomaterialien 80**
5.1 Besondere Randbedingung für leitfähige Teilränder . . . . . 80
5.2 Kontaktrandbedingungen . . . . . 82
5.3 Stationärer Riß . . . . . 86
5.3.1 Analytische Lösungszugänge . . . . . 86
5.3.2 Der elektromechanische Griffith-Riß . . . . . 88
5.3.3 Numerische Beispielrechnung zum Griffith-Riß . . . . . 94

**6 Rißwachstum 98**
6.1 Erweiterung des linear elastischer Falls . . . . . 99
6.1.1 Existierende Arbeiten . . . . . 99
6.1.2 Netzanpassung . . . . . 99
6.1.3 Verschiedene Basisfunktionen für Strukturen mit wachsendem Riß . 103
6.1.4 Effiziente DD-Vorkonditionierer für die Steifigkeitsmatrizen in der alternativen Basis . . . . . 106
6.2 Numerische Beispiele zum piezoelektrischen Riß . . . . . 108
6.2.1 Beispiel: Künstlich wachsender gerader Riß . . . . . 108
6.2.2 Beispiel: Künstlich abknickender Riß . . . . . 110
6.3 Nutzung zur Bestimmung bruchmechanischer Kenngrößen . . . . . 110
6.3.1 Vergleich mittels FEM erhaltener Kenngrößen mit Referenzbeispielen 110
6.3.2 Rißwachstumskriterien . . . . . 113

**A Umrechnungsformeln zum inversen Materialgesetz im 2D-Fall 115**

**Literaturverzeichnis 117**

**Danksagung** **122**

**Thesen** **123**

**Lebenslauf** **125**

**Erklärung** **127**

# Kapitel 1

# Einleitung

## 1.1 Motivation

In vielen modernen adaptronischen Systemen beispielsweise in der Automobilindustrie, Mechatronik, Medizin- und Meßtechnik (von Motoren über Schalter und Steuerkomponenten bis hin zu Lautsprechern und Mikrofonen) werden heutzutage piezoelektrische Keramiken eingesetzt. Die besondere Kopplung zwischen mechanischem und elektrischem Verhalten ermöglicht pfiffige Anwendungen und an verschiedenen Stellen die Ersetzung teurer oder umständlicher Lösungen.
Ein häufiger Wunsch ist es, das Verhalten der verschiedenen Materialien rechnergestützt zu simulieren. Dafür müssen entsprechende numerische Methoden bereitgestellt werden bzw. schon für andere Problemklassen existierende Methoden angepaßt und erweitert werden. Ein wichtiges Hilfsmittel für die moderne numerische Simulation ist die Finite-Element-Methode. Zur Anwendung dieser Methode in der Hauptsache auf piezoelektrische Probleme, aber auch auf zu ähnlichen Strukturen führende spezielle mechanische Aufgabenstellungen, soll die vorliegende Arbeit einen Beitrag leisten. Dabei besitzt die im Hinblick auf Speicherbedarf und Rechengenauigkeit große Vorteile aufweisende Adaptivität eine wichtige Bedeutung. Die Arbeit gliedert sich wie folgt:

Im restlichen Teil von Kapitel 1 werden einige mathematische Grundlagen eingeführt, auf welche im weiteren Verlauf zurückgegriffen wird.

Kapitel 2 beschreibt die technisch-naturwissenschaftlichen Grundlagen und die mathematische Modellbildung, außerdem werden einige in diesem Zusammenhang auftretenden Fragestellungen behandelt.

Kapitel 3 beschäftigt sich mit der Finite-Element-Behandlung der eingeführten Problemstellungen, besonderes Augenmerk wird hierbei auf die Adaptivität sowie die spezielle Behandlung rotationssymmetrischer Probleme gelegt.

Kapitel 4 behandelt die Lösung der resultierenden Gleichungssysteme, welche eine spezielle Struktur besitzen. Ziel ist dabei eine schnelle und effektive Lösung, wobei ein enger Zusammenhang zur Wahl einer geeigneten Vorkonditionierung besteht.

Kapitel 5 beschäftigt sich mit speziellen Randbedingungen und deren Behandlung bei piezoelektrischen Aufgabenstellungen, außerdem wird ein Rißproblem vorgestellt, für das eine analytische Lösung im asymptotischen Fall (unendliches Gebiet) bekannt ist.

Kapitel 6 schließlich befaßt sich mit der numerischen Behandlung von wachsenden Rissen, die dabei vorgestellten Methoden liefern Handwerkszeug zur Entwicklung einer Rißwachstumssimulation in piezoelektrischen Materialien.

## 1.2 Einführende Definitionen und Hilfsmittel

Nachfolgend sollen einige häufiger benutzte Definitionen und Ungleichungen kurz vorgestellt werden.

### 1.2.1 Räume stetig differenzierbarer Funktionen

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet.

**Definition 1.1** *Der Raum $\mathcal{C}(\Omega)$ ist der Raum der auf ganz $\Omega$ stetigen Funktionen $v(x)$.*

**Definition 1.2** *Der Raum $\mathcal{C}^m(\Omega)$ ist der Raum der auf $\Omega$ mindestens $m$ mal differenzierbaren Funktionen, die einschließlich ihrer Ableitungen bis zur $m$-ten Ordnung auf ganz $\Omega$ stetig sind. Der Raum $\mathcal{C}^\infty(\Omega)$ enthält alle auf $\Omega$ unendlich oft differenzierbaren Funktionen.*

**Definition 1.3** *Der Raum $\mathcal{C}_0(\Omega)$ ist der Raum der auf ganz $\Omega$ stetigen Funktionen, die auf dem Rand $\partial\Omega$ verschwinden. Der Raum $\mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$ enthält diejenigen Funktionen aus $\mathcal{C}^\infty(\Omega)$, welche lediglich auf einer kompakten Teilmenge von $\Omega$ von Null verschiedene Werte annehmen. Dies sichert das Verschwinden von $v(x) \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$ sowie aller Ableitungen auf dem Rand von $\Omega$.*

### 1.2.2 Sobolevräume und zugehörige Normen

**Definition 1.4** *Der Raum $L^2(\Omega)$ ist die Menge aller derjenigen skalaren Funktionen $v(x)$, die über $\Omega$ quadratisch integrierbar sind, d.h. für die gilt*

$$\int_\Omega (v(x))^2 \, dx < \infty \, .$$

**Definition 1.5** *Der Raum $H^1(\Omega)$ ist die Menge aller derjenigen skalaren Funktionen $v(x)$, deren verallgemeinerte Ableitungen bis zur 1.Ordnung über $\Omega$ quadratisch integrierbar sind, d.h. mit Multiindizes $\alpha$ gilt*

$$\int_\Omega \left( \frac{\partial^\alpha v(x)}{\partial x^\alpha} \right)^2 dx < \infty \quad \forall \alpha \text{ mit } |\alpha| \leq 1 \, .$$

**Definition 1.6** *Der Raum $H_0^1(\Omega)$ ist die Menge aller Funktionen aus $H^1(\Omega)$, welche auf dem Rand $\partial\Omega$ verschwinden, d.h.*

$$H_0^1(\Omega) = \left\{ v \in H^1(\Omega) : \, v = 0 \text{ auf } \partial\Omega \right\}.$$

*Eigentlich ist dabei die Nullrandbedingung nur im $H^1$-schwachen Sinne gefordert, exakt definiert man $H_0^1(\Omega)$ als die Vervollständigung von $\mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$ in $H^1(\Omega)$.*

**Definition 1.7** *Die $L^2$-Norm einer Funktion $v(x)$ über $\Omega$ ist definiert durch*

$$\|v(x)\|_{0,\Omega}^2 = \int_\Omega (v(x))^2 \, dx \, .$$

*Die $H^1$-Seminorm über $\Omega$ definiert man vermöge*

$$|v(x)|_{1,\Omega}^2 = \int_\Omega \sum_{|\alpha|=1} \left( \frac{\partial^\alpha v(x)}{\partial x^\alpha} \right)^2 dx \, .$$

*Die volle $H^1$-Norm über $\Omega$ ist definiert über*

$$\|v(x)\|_{1,\Omega}^2 = \int_\Omega \sum_{|\alpha|\leq 1} \left( \frac{\partial^\alpha v(x)}{\partial x^\alpha} \right)^2 dx \; = \|v(x)\|_{0,\Omega}^2 + |v(x)|_{1,\Omega}^2 \, .$$

### 1.2.3 Ungleichungen

**Friedrichssche Ungleichung:** Ist $\Omega \in \mathbb{R}^d$ ein beschränktes Gebiet, so existiert eine positive Konstante $c_F = c_F(\Omega)$ mit

$$\|v\|_{0,\Omega} \leq c_F |v|_{1,\Omega} \quad \forall v \in H_0^1(\Omega).$$

**Kornsche Ungleichung:** Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 2$ oder 3) ein Gebiet mit stückweise glattem Rand und besitze ein Teil des Randes $\Gamma_0 \subset \partial\Omega$ ein positives $(d-1)$-dimensionales Maß. Dann existiert eine positive Konstante $c_K = c_K(\Omega, \Gamma_0)$ mit

$$\int_\Omega \varepsilon(v) : \varepsilon(v) \, dx \geq c_K \|v\|_{1,\Omega}^2 \quad \forall v \in \left( H^1(\Omega) \right)^d \text{ mit } v = 0 \text{ auf } \Gamma_0 \, .$$

Der Verzerrungstensor $\varepsilon(v)$ einer Vektorfunktion $v$ wird dabei wie zu Beginn von Abschnitt 2.1.2 definiert.

# Kapitel 2

# Grundlagen und mathematische Modelle

Wir betrachten im Weiteren Probleme in der Ebene ($d = 2$) oder im Raum ($d = 3$).

## 2.1 Lineare Elastizität

Eine ausführliche Abhandlung der Elastizitätstheorie befindet sich in [17]. Recht umfassende Einführungen in das Gebiet der linearen Elastizität findet man beispielsweise auch in [8] sowie in [68]. Im weiteren werden einige Grundlagen der linearen Elastizität eingeführt, die zum Verständnis der Mechanik und für die in dieser Arbeit betrachtete Sondersituation inkompressiblen Materials sowie die Erweiterung auf piezoelektrische Aufgabenstellungen benötigt werden.

### 2.1.1 Beschreibung

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Körper (Gebiet), welcher im unverformten Zustand aus den Punkten $x \in \Omega$ besteht. Der Rand von $\Omega$ wird als $\Gamma = \partial\Omega$ bezeichnet. Durch einwirkende Kräfte erfährt jeder Punkt $x \in \Omega$ eine Verschiebung $u(x)$ ($u : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$) und wird somit auf den Punkt $\hat{x} = x + u(x)$ im deformierten Körper $\hat{\Omega}$ verschoben. Eine bildliche Veranschaulichung liefert Abbildung 2.1.
Formal gilt für das deformierte Gebiet $\hat{\Omega} = \Omega + u(\Omega)$. Einschränkungen der Bewegungsfreiheit sind dabei durch Randbedingungen 1.Art (Dirichletbedingungen) auf einem Teil des Randes gegeben:

$$u(x) = u_0(x)\,, \qquad x \in \Gamma_D \subset \Gamma\,. \tag{2.1}$$

Auf dem weiteren Rand $\Gamma_N \subset \Gamma$ können Randkräfte $\vec{g}_2(x)$ wirken, verschwinden diese spricht man von einem freien Rand. Zur Beschreibung dieser Randbedingungen 2.Art (Neumannbedingungen) werden zunächst weitere Größen eingeführt. Volumenkräfte $\vec{f}(x)$ können in ganz $\Omega$ vorgegeben sein, zum Beispiel entsprechen diese der Wirkung der Schwerkraft welche proportional zur Dichteverteilung wirkt.

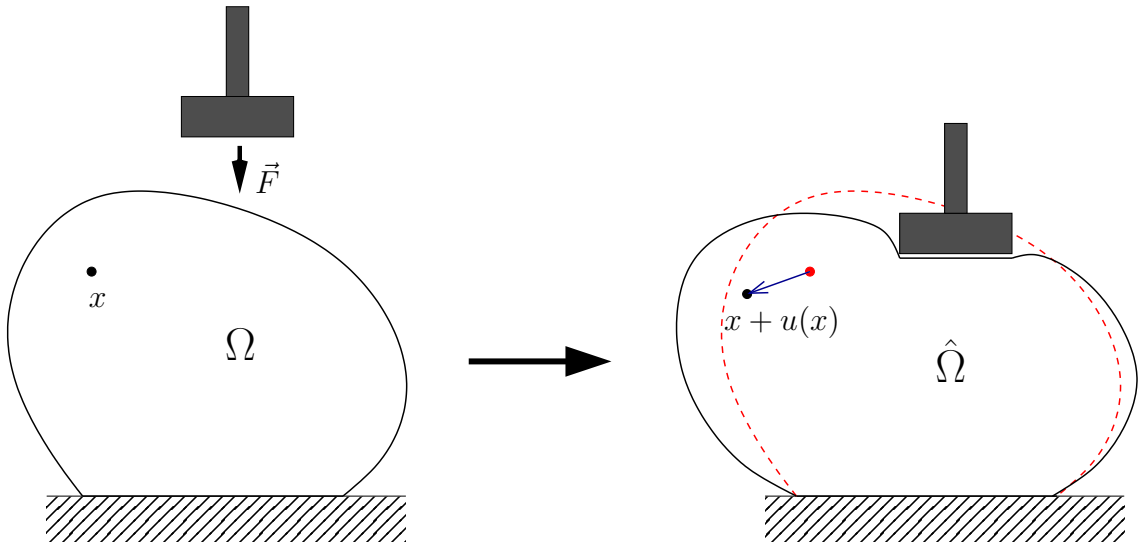



Abbildung 2.1: Undeformierter und deformierter Körper

### 2.1.2 Größen und Gleichungen

Als abgeleitete und abhängige Größen werden zwei Tensoren 2.Stufe betrachtet:

- Verzerrungstensor $\varepsilon(u) = \frac{1}{2}\left(\nabla u + (\nabla u)^\top\right)$, komponentenweise $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_i u_j + \partial_j u_i)$ ;
- Spannungstensor $\sigma(u) = C : \varepsilon(u)$ .

Hierbei ist $C = c_{ijkl}$ ein Tensor 4.Stufe der als linear-elastischer Tensor bezeichnet wird, unter Verwendung der EINSTEINschen Summenkonvention lautet das Materialgesetz

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\,\varepsilon_{kl}\,. \tag{2.2}$$

Die Indizes $i, j, k, l \in \mathbb{N}$ nehmen dabei abhängig von der Dimension Werte zwischen 1 und $d$ an. Sowohl Verzerrungstensor als auch Spannungstensor sind symmetrisch, d.h. es gilt

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}, \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ji}\,.$$

$C$ weist ebenfalls mehrere Symmetrien auf, so daß sich die Anzahl der Freiheiten entsprechend reduziert.
Im Spezialfall von ST. VERNANT-KIRCHHOFF-Material lässt sich der linear-elastische Tensor durch nur 2 Materialkonstanten darstellen, den Elastizitätsmodul $E$ der oft in der Einheit MPa (entspricht $\frac{\mathrm{N}}{\mathrm{mm}^2}$) angegeben wird, sowie die einheitenlose Querkontraktion $\nu$. Es gilt $E > 0$, wobei im allgemeinen $E \gg 1$ ist, während die Querkontraktion immer im Bereich $0 \leq \nu \leq 0.5$ liegt. Diese beiden Materialgrößen kann man (eineindeutig) in die sogenannten Lamé-Konstanten umrechnen:

$$2\mu = \frac{E}{1+\nu}; \qquad \lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}\,. \tag{2.3}$$

Hier gilt das lineare Materialgesetz von HOOKE:

$$\sigma(u) = 2\mu\varepsilon(u) + \lambda\, tr(\varepsilon(u))\, I = 2\mu\varepsilon(u) + \lambda \operatorname{div} u\, I\,. \tag{2.4}$$

Das Kräftegleichgewicht im Gebiet wird durch die Differentialgleichung

$$\operatorname{div}\sigma(u) + \vec{f} = 0\,, \qquad x \in \Omega \tag{2.5}$$

beschrieben, auf dem Neumannrand $\Gamma_N$ wird Gleichgewicht mit äußeren Kräften gefordert:

$$\sigma(u)\cdot \mathfrak{n} = \vec{g}_2(x)\,, \qquad x \in \Gamma_N\,. \tag{2.6}$$

Dabei bezeichnet $\mathfrak{n}$ den Einheitsaußennormalenvektor.

### Darstellung in Matrix-Vektor-Notation

Neben der Tensorschreibweise existiert eine für konkrete Rechnungen handlichere Notation. Man bildet dabei Spannungs- und Verzerrungstensor in Vektoren sowie den linearelastischen Tensor in eine Matrix ab. Wir definieren im Fall $d = 3$ unter Beachtung vorhandener Symmetrien:

$$\underline{\varepsilon}(u) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{12} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_1 u_1 \\ \partial_2 u_2 \\ \partial_3 u_3 \\ \partial_2 u_1 + \partial_1 u_2 \\ \partial_3 u_2 + \partial_2 u_3 \\ \partial_1 u_3 + \partial_3 u_1 \end{pmatrix},\ \underline{\sigma}(u) = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{C}} = (c_{ij})_{i,j=1}^{6}\,. \tag{2.7}$$

Man beachte dabei, daß in der Literatur teilweise unterschiedliche Reihenfolgen der gemischten Komponenten existieren, siehe etwa das von hier abweichende „Voigt Index Mapping“ ([71],[27]) oder die Notation in [28]. Im Fall $d = 2$ wird eine reduzierte Form verwendet:

$$\underline{\varepsilon}(u) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_1 u_1 \\ \partial_2 u_2 \\ \partial_2 u_1 + \partial_1 u_2 \end{pmatrix},\ \underline{\sigma}(u) = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{C}} = (c_{ij})_{i,j=1}^{3}\,.$$

Unter Verwendung dieser Schreibweise lautet das Materialgesetz (2.2) äquivalent

$$\underline{\sigma}(u) = \underline{\underline{C}}\,\underline{\varepsilon}(u)\,.$$

Im Fall der Gültigkeit des HOOKEschen Gesetzes (2.4) ist die Matrix $\underline{\underline{C}}$ blockdiagonal und wird durch die Lamé-Konstanten bestimmt:

$$\underline{\underline{C}} = \begin{pmatrix} 2\mu+\lambda & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & 2\mu+\lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & 2\mu+\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{pmatrix} \text{ für } d = 3, \quad \underline{\underline{C}} = \begin{pmatrix} 2\mu+\lambda & \lambda & 0 \\ \lambda & 2\mu+\lambda & 0 \\ 0 & 0 & \mu \end{pmatrix} \text{ für } d = 2\,.$$

### 2.1.3 Schwache Formulierung

Zur Einführung einer schwachen Formulierung oder auch Variationsformulierung ist es zweckmäßig, zuerst geeignete Funktionenräume zu definieren. Man sucht ein Verschiebungsfeld $u$ aus einem Ansatzraum $\mathbb{V}_D$, in welchem verallgemeinerte Ableitungen wenigstens 1.Ordnung existieren sowie die Dirichletrandbedingungen erfüllt sein sollen. Ebenfalls verallgemeinerte Differenzierbarkeit, aber homogene Randbedingungen auf dem Dirichletrand fordert man für die Testfunktionen $v$ aus dem Testraum $\mathbb{V}_0$. Die verallgemeinerte Differenzierbarkeit sichert man durch die Wahl von Ansatz- und Testraum als Teilmengen des Sobolevraums

$$\mathbb{V} = \left(H^1(\Omega)\right)^d \,. \tag{2.8}$$

Nun definiert man

$$\begin{aligned} \mathbb{V}_D &= \{v \in \mathbb{V}\,, \quad v|_{\Gamma_D} = u_0\}\,, \\ \mathbb{V}_0 &= \{v \in \mathbb{V}\,, \quad v|_{\Gamma_D} = 0\}\,. \end{aligned} \tag{2.9}$$

Die schwache Formulierung des Randwertproblemes erhält man durch Multiplikation (als Skalarprodukt zu verstehen) von (2.5) mit Testvektorfunktionen $v \in \mathbb{V}_0$ und anschließende Integration über $\Omega$. Durch Anwendung der GREENschen Formel unter Beachtung der Randbedingungen auf $\Gamma_N$ erhält man

$$\int_\Omega \sigma(u) : \varepsilon(v)\, d\,\Omega = \int_\Omega \vec{f} \cdot v\, d\,\Omega + \int_{\Gamma_N} \vec{g}_2 \cdot v\, ds \quad \forall v \in \mathbb{V}_0\,. \tag{2.10}$$

Dabei ist die doppelte Überschiebung $\sigma : \varepsilon$ wieder mit der EINSTEINschen Summenkonvention zu verstehen als $\sigma_{ij}\varepsilon_{ij}$. Mit Einführung einer Bilinearform

$$a(u,v) := \int_\Omega \sigma(u) : \varepsilon(v)\, d\,\Omega = \int_\Omega (\underline{\varepsilon}(v))^T \underline{\sigma}(u)\, d\,\Omega$$

sowie einer Linearform

$$f(v) := \int_\Omega \vec{f} \cdot v\, d\,\Omega + \int_{\Gamma_N} \vec{g}_2 \cdot v\, ds$$

erhält man die schwache Formulierung des Randwertproblems:

$$\text{Finde } u \in \mathbb{V}_D \quad \text{mit} \quad a(u,v) = f(v) \quad \forall v \in \mathbb{V}_0\,. \tag{2.11}$$

Man beachte, daß dabei homogene Neumannbedingungen (kräftefreier Rand entspricht $\vec{g}_2 = 0$) automatisch in der Variationsformulierung enthalten sind, obwohl in diesem Fall das entsprechende Integral verschwindet. Die Dirichletbedingungen steckt man dagegen in den Ansatzraum. Inhomogene Dirichletbedingungen ($u_0 \neq 0$ auf einem Teil von $\Gamma_D$) haben zur Folge, daß sich Ansatz- und Testraum unterscheiden. Man kann solche Probleme aber für die analytische Betrachtung auf ein Ersatzproblem mit $u_0 = 0$ auf dem Dirichletrand und somit $\mathbb{V}_D = \mathbb{V}_0$ zurückführen:

Sei $\tilde{u}$ eine beliebige Funktion aus $\mathbb{V}_D$ (diese braucht nicht die Differentialgleichung (2.5) zu erfüllen, allerdings gilt $\tilde{u} = u_0$ auf $\Gamma_D$). Dann gilt die Äquivalenz

$$(2.11) \iff a(u-\tilde{u}, v) = f(v) - a(\tilde{u}, v) \quad \forall v \in \mathbb{V}_0 \iff a(w, v) = f_1(v) \quad \forall v \in \mathbb{V}_0 \quad (2.12)$$

mit $w := u - \tilde{u} \in \mathbb{V}_0$ als neues Verschiebungsfeld und $f_1(v) := f(v) - a(\tilde{u}, v)$ als neue Linearform.

**Unterteilung der Bilinearform**

Gilt (2.4) als Materialgesetz, ist es möglich die Bilinearform in 2 Teile aufzuspalten:

$$a(u, v) = a_0(u, v) + a_1(u, v) \quad \text{mit}$$

$$a_0(u, v) = 2\mu \int_\Omega \varepsilon(u) : \varepsilon(v)\, d\,\Omega = \mu \int_\Omega (\underline{\varepsilon}(v))^T \underline{\underline{C}}_0\, \underline{\varepsilon}(u)\, d\,\Omega \quad (2.13)$$

$$a_1(u, v) = \lambda \int_\Omega \operatorname{div} u\, \operatorname{div} v\, d\,\Omega = \lambda \int_\Omega (\underline{\varepsilon}(v))^T \underline{\underline{C}}_1\, \underline{\varepsilon}(u)\, d\,\Omega \quad (2.14)$$

mit Matrizen

$$\underline{\underline{C}}_0 = diag(2,2,2,1,1,1)\,, \quad \underline{\underline{C}}_1 = blockdiag(\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \mathbb{O}) \quad (d=3)$$

$$\underline{\underline{C}}_0 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{C}}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (d=2)\,.$$

Man beachte dabei

$$I : \varepsilon(v) = \sum_{i=1}^{d} \varepsilon_{ii} = \sum_{i=1}^{d} \partial_i v_i = \operatorname{div} v\,.$$

**Bemerkung 2.1** *Das in (2.13) und (2.14) erfolgte Herausziehen der Lamé-Konstanten aus den Integralen ist nur erlaubt, wenn $\Omega$ aus einem homogenen Material besteht. Bei Vorhandensein unterschiedlicher Materialbereiche sind die Materialkonstanten ortsabhängig und die Bilinearformen bilden sich als*

$$a_0(u, v) = \int_\Omega 2\mu(x)\, \varepsilon(u) : \varepsilon(v)\, d\,\Omega = \int_\Omega \mu(x)\, (\underline{\varepsilon}(v))^T \underline{\underline{C}}_0\, \underline{\varepsilon}(u)\, d\,\Omega\,, \quad (2.15)$$

$$a_1(u, v) = \int_\Omega \lambda(x)\, \operatorname{div} u\, \operatorname{div} v\, d\,\Omega = \int_\Omega \lambda(x)\, (\underline{\varepsilon}(v))^T \underline{\underline{C}}_1\, \underline{\varepsilon}(u)\, d\,\Omega\,. \quad (2.16)$$

### 2.1.4 Reduzierte Zustände für 2D-Betrachtung

Es wurden in der vorangegangenen Ausführung auch schon reduzierte Darstellungen für den zweidimensionalen Fall verwendet, ohne deren Gültigkeit explizit aus den 3D-Darstellungen abzuleiten. Sowohl Rechenaufwand als auch technische Herausforderungen sind beim Lösen zweidimensionaler Probleme erheblich geringer als im dreidimensionalen Fall. Es existieren deshalb für verschiedene Fälle, in denen die Aufgabenstellung es zuläßt, Reduktionen der dreidimensionalen Elastizitätsgleichungen. Dies ist zum einen der „ebene Verzerrungszustand“, welcher näherungsweise auf lange Bauteile (z.B. Schienen) zutrifft, wobei lediglich von der 3.Koordinate unabhängige Kräfte auftreten. Zum anderen ist eine Betrachtung dünner Platten (Scheiben) mit Kräften in der Plattenebene im „ebenen Spannungszustand“ möglich. Außerdem existieren für Platten mit Kräften senkrecht zur Plattenebene verschiedene Plattenmodelle, deren Behandlung gegenüber der üblichen 2D-Betrachtung einige Erweiterungen erfordert. Als Beispiele sind hier die KIRCHHOFF-Platte sowie die MINDLIN-REISSNER-Platte zu nennen. Eine Beschreibung der verschiedenen Reduktionsmodelle findet man z.B. in [8], an dieser Stelle soll sich auf eine genauere Betrachtung des ebenen Verzerrungszustandes beschränkt werden. Die schon eingeführten 2D-Bezeichnungen entsprechen diesem Fall.

#### Ebener Verzerrungszustand (EVZ)

Als Voraussetzung wird angenommen, daß keine Verschiebung in $x_3$-Richtung auftritt sowie alle Verschiebungen unabhängig von $x_3$ sind, d.h.

- $u_3 \equiv 0$ ,
- $\partial_3 u_i = 0\,, \quad i = 1, 2\,(, 3)$ .

Somit ergibt sich ein Verzerrungstensor, welcher nur Komponenten der $x_1 - x_2$-Ebene enthält, was auch die Zustandsbezeichnung rechtfertigt:

$$\varepsilon(u) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & 0 \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

Hieraus entsteht im Fall der Gültigkeit des HOOKEschen Gesetzes (2.4) der Spannungstensor

$$\sigma(u) = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{pmatrix} ,$$

wobei $\sigma_{33} = \lambda\, tr(\varepsilon) = \lambda(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22})$ gilt. Die Komponente $\sigma_{33}$ geht aber nicht in die schwache Formulierung ein, was deutlich wird wenn man den Integranden der Bilinearform betrachtet (hier ohne Verwendung der EINSTEINschen Summenkonvention):

$$\sigma(u) : \varepsilon(v) = \sum_{i,j=1}^{3} \sigma_{ij}\varepsilon_{ij} = \sum_{i,j=1}^{2} \sigma_{ij}\varepsilon_{ij} + \sigma_{33} \cdot 0 = \sigma^{2D}(u) : \varepsilon^{2D}(v)$$

mit $\sigma^{2D}$ und $\varepsilon^{2D}$ als den entsprechenden Tensoren für $d = 2$. Der Einfluß von $\sigma_{33}$ verschwindet durch die Multiplikation mit $\varepsilon_{33} = 0$.
In den Randbedingungen spielt $\sigma_{33}$ ebenfalls keine Rolle, da der Vektor der Außennormale $\mathfrak{n}$ in der $x_1 - x_2$-Ebene liegt und diese Komponente bei der Bildung von $\sigma \cdot \mathfrak{n}$ immer auf eine Null trifft. Sie kann deshalb als entkoppelte Größe betrachtet und für die Rechnung ausgeblendet werden.

## 2.2 Inkompressibles Materialverhalten

Bestimmte Materialien weisen ein inkompressibles oder nahezu inkompressibles Verhalten auf. Körper aus inkompressiblem Material behalten bei Verformung ihr Volumen bei, auf die linear-elastischen Materialkonstanten bezogen bedeutet dies, daß die Querkontraktion $\nu$ im ideal inkompressiblen Fall den Wert $\frac{1}{2}$ annimmt. Fast inkompressibles Materialverhalten liegt vor, wenn $\nu$ nahe bei $\frac{1}{2}$ liegt.
Ein Problem bei der Formulierung inkompressibler linear-elastischer Probleme tritt auf, da die zweite Lamé-Konstante bei $\nu = \frac{1}{2}$ keinen bestimmbaren Wert mehr besitzt. Gleichung (2.3) liefert für diesen Grenzfall $\lambda = \infty$. Damit ist das Materialgesetz (2.4) nicht mehr anwendbar, auch existiert der linear-elastische Tensor $c_{ijkl}$ aus (2.2) hier nicht als Ganzes. Bei fast inkompressiblem Verhalten mit Werten von $\nu$ sehr nahe an 0.5 wird $\lambda$ sehr groß und verschafft somit bei der Zusammensetzung der Bilinearform $a(u, v)$ aus der in (2.13),(2.14) bzw. (2.15),(2.16) erfolgten Aufspaltung dem Divergenzanteil $a_1(u, v)$ aufgrund $\lambda \gg \mu$ ein starkes Übergewicht. Dies kann bei Nichtbeachtung in der numerischen Berechnung Instabilitäten nach sich ziehen.
Aufgrund der Tatsache daß im ideal inkompressiblen Fall aufgrund der infinitesimalen Volumenkonstanz gerade $\operatorname{div} u$ verschwindet, bietet sich als Ausweg die Einführung einer zusätzlichen Größe an, dem sogenannten hydrostatischen Druck. Dieser wird durch die Gleichung

$$p = \lambda \operatorname{div} u \tag{2.17}$$

definiert und wird als weitere Unbekannte neben den Verschiebungskomponenten angesetzt. Die so erzeugte Behandlung als Mehrfeldproblem bezeichnet man als gemischten Ansatz. Wegen Anwendung des Divergenzoperators wird der Ansatzraum für den hydrostatischen Druck einen Grad niedriger gewählt:

$$p \in \mathbb{M} = L_2(\Omega)\,.$$

Die Definition (2.17) wird in das Materialgesetz (2.4) eingesetzt und als zusätzliche Gleichung in das Differentialgleichungssystem aufgenommen. Das Materialgesetz lautet nach Einsetzen des hydrostatischen Druckes:

$$\sigma(u, p) = 2\mu\varepsilon(u) + p\,I\,. \tag{2.18}$$

**Bemerkung 2.2** *Die Bezeichnung ist dem von der Struktur her ähnlichen* Stokes-*Problem (Bewegung einer inkompressiblen viskosen Flüssigkeit ohne Konvektion) angelehnt. Im Stokes-Problem wird für Geschwindigkeiten $u$ und den Druck $p$ gefordert* $\operatorname{div} u = 0$.

**Bemerkung 2.3** *Zusätzliche Randbedingungen für den hydrostatischen Druck sind nicht notwendig.*

### 2.2.1 Schwache Formulierung

Leichter als die schwache Formulierung komplett neu herzuleiten ist es, die Aufspaltung der Bilinearform $a(.,.)$ zu nutzen und während $a_0(.,.)$ erhalten bleibt, die Gleichung (2.17) in die Definition von $a_1(.,.)$ einzusetzen. Dies liefert eine Bilinearform

$$b(p,v) = \int_\Omega p \ \mathrm{div}\, v \, d\,\Omega \,.$$

Die Variationsformulierung der Druckdefinitionsgleichung (2.17) nach Multiplikation einer skalaren Testfunktion $q$ und Division durch $\lambda$ liefert

$$\int_\Omega \frac{1}{\lambda} pq \, d\,\Omega = \int_\Omega q \ \mathrm{div}\, u \, d\,\Omega \,.$$

Definiert man also

$$k(p,q) = \frac{1}{\lambda} \int_\Omega pq \, d\,\Omega \,,$$

erhält man schließlich die gemischte Formulierung der Variationsaufgabe:

**Problem 2.1** *Finde* $u \in \mathbb{V}_D \,,\ p \in \mathbb{M}$ *mit*

$$\begin{array}{lcccll} a_0(u,v) & + & b(p,v) & = & f(v) & \forall v \in \mathbb{V}_0 \,, \\ b(q,u) & - & k(p,q) & = & 0 & \forall q \in \mathbb{M} \,. \end{array} \tag{2.19}$$

*wobei* $a_0(u,v)$ *gemäß (2.13) bzw. (2.15) definiert ist.*

Man beachte dabei wieder im Falle nicht einheitlichem Materials

$$k(p,q) = \int_\Omega \frac{1}{\lambda(x)} pq \, d\,\Omega \,.$$

Allgemein ist $k(.,.)$ eine symmetrische, positiv semidefinite Bilinearform.
Erkennbar ist, daß für Körper aus ideal inkompressiblem Material der Faktor $\frac{1}{\lambda}$ und mithin die Bilinearform $k(p,q)$ komplett verschwindet. Die schwache Formulierung steht in diesem Fall in direkter Analogie zu der des STOKES-Problems aus der Strömungsmechanik. Unterschied ist hier lediglich die Betrachtung von Verschiebungsfreiheitsgraden statt Geschwindigkeitsfreiheitsgraden und eines „künstlichen“ hydrostatischen Druckes. Die prinzipiellen Eigenschaften und Probleme bei der numerischen Behandlung übertragen sich vom STOKES-Problem auf die inkompressible Elastizität. Insbesondere ist für Existenz und Eindeutigkeit der Lösung im Allgemeinen nicht mehr die Elliptizität der Bilinearform $a_0(.,.)$ in $\mathbb{V}_0$ ausreichend, sondern es wird eine Zusatzbedingung benötigt, siehe dazu Abschnitt 2.2.2.

### 2.2.2 Sattelpunktprobleme und Inf-Sup-Bedingung

Das System (2.19) kann als ein Spezialfall des verallgemeinerten Sattelpunktproblems (2.20) verstanden werden.

$$\left\{ \begin{array}{rcrcll} c(u,v) & + & b(p,v) & = & f(v) & \forall v \in \mathbb{V} \\ b(q,u) & - & k(p,q) & = & g(q) & \forall q \in \mathbb{M} \end{array} \right. \tag{2.20}$$

Definiert man das lineare Funktional

$$\mathcal{L}(v,q) = \frac{1}{2}c(v,v) - f(v) + b(q,v) - \frac{1}{2}k(q,q) - g(q)\,,$$

so erfüllt die Lösung $(u,p)$ von (2.20) die Sattelpunktungleichung

$$\mathcal{L}(u,q) \leq \mathcal{L}(u,p) \leq \mathcal{L}(v,p) \quad \forall v \in \mathbb{V}\,, \forall q \in \mathbb{M}\,. \tag{2.21}$$

Der Nachweis erfolgt durch Einsetzen:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(u,q) - \mathcal{L}(u,p) &= b(q-p,u) - \frac{1}{2}k(q,q) + \frac{1}{2}k(p,p) - g(q-p) \\ &= b(q-p,u) - \frac{1}{2}k(p,q) - \frac{1}{2}k(q-p,q) + \frac{1}{2}k(p,q) - \frac{1}{2}k(p,q-p) - g(q-p) \\ &= b(q-p,u) - \frac{1}{2}k(q-p,q-p) - \frac{1}{2}k(q-p,p) - \frac{1}{2}k(p,q-p) - g(q-p) \\ &= b(q-p,u) - k(p,q-p) - \frac{1}{2}k(q-p,q-p) - g(q-p) \\ &= -\frac{1}{2}k(q-p,q-p) \ \leq 0 \end{aligned}$$

aufgrund der positiven Semidefinitheit von $k(.,.)$. Analog

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(v,p) - \mathcal{L}(u,p) &= \frac{1}{2}c(v,v) - \frac{1}{2}c(u,u) - f(v-u) + b(p,v-u) \\ &= \frac{1}{2}c(v,v-u) + \frac{1}{2}c(v,u) - \frac{1}{2}c(u,u-v) - \frac{1}{2}c(u,v) - f(v-u) + b(p,v-u) \\ &= \frac{1}{2}c(v,v-u) + \frac{1}{2}c(u,v-u) - f(v-u) + b(p,v-u) \\ &= \frac{1}{2}c(v-u,v-u) + c(u,v-u) - f(v-u) + b(p,v-u) \\ &= \frac{1}{2}c(v-u,v-u) \ \geq 0 \end{aligned}$$

Die Lösung ist also ein Sattelpunkt.
Daß auch nur die Lösung ein Sattelpunkt ist, folgt für den Fall daß die Bilinearform $k(.,.)$ verschwindet aus Theorem I.4.2. in [21]. Für nichtverschwindendes $k(.,.)$ bezeichnet man (2.20) auch als Sattelpunktproblem mit Strafterm. Genauere Ausführungen dazu finden sich z.B. in [8].

Für positiv definites $k(.,.)$ weist man leicht die Eindeutigkeit eines Sattelpunktes und somit auch der Lösung nach. Sei $(u', p')$ ein weiteres Paar welches (2.21) erfüllt. Dann gilt insbesondere mit

$$v = u',\ q = p'$$

nach Einsetzen

$$\mathcal{L}(u,p) \leq \mathcal{L}(u',p) \leq \mathcal{L}(u',p') \leq \mathcal{L}(u,p') \leq \mathcal{L}(u,p)\,,$$

was sofort die Gleichheit aller Terme nach sich zieht. Insbesondere folgt mit den Überlegungen von oben

$$0 = \mathcal{L}(u,p') - \mathcal{L}(u,p) = -\frac{1}{2}k(p'-p, p'-p)$$

und somit $p' = p$. Ferner folgt aus

$$0 = \mathcal{L}(u',p) - \mathcal{L}(u,p) = \frac{1}{2}c(u'-u, u'-u)$$

immer aus der positiven Definitheit von $c(.,.)$ die Übereinstimmung $u' = u$.

**Inf-Sup-Bedingung**

Für das Sattelpunktproblem (2.20) gilt im Allgemeinen keine Elliptizität auf $\mathbb{V} \times \mathbb{M}$, insbesondere im Fall $k(.,.) = 0$. Um trotzdem Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen treffen zu können, benötigt man zusätzlich zur Elliptizität von $c(.,.)$ bzw. $a_0(.,.)$ eine weitere Bedingung. Diese wird als (kontinuierliche) Inf-Sup-Bedingung an die Bilinearform $b(.,.)$ bezeichnet:

$$\inf_{q\in\mathbb{M}, q\neq 0} \sup_{v\in\mathbb{V}, v\neq 0} \frac{b(q,v)}{\|v\|_V \|q\|_M} \geq \beta > 0\,. \tag{2.22}$$

Gilt

$$k(q,q) \geq 0 \quad \forall q \in \mathbb{M}\,, \tag{2.23}$$

$$c(v,v) \geq \alpha \|v\|_V^2 \quad \forall v \in \mathbb{V} \tag{2.24}$$

und ist die Bedingung (2.22) erfüllt, so besitzt das Problem (2.19) eine eindeutige Lösung. Der Beweis dieser Aussage kann unter Nutzung von Überlegungen in [8] und [12] erfolgen, erfordert allerdings einen umfangreicheren Einstieg in die Materie und soll deswegen an dieser Stelle nicht ausgeführt werden. Zu bemerken ist, daß im Fall einer verschwindenen oder nicht elliptischen Bilinearform $k(.,.)$ die Inf-Sup-Bedingung (2.22) sogar notwendig ist.

## 2.3 Piezoelektrizität

### 2.3.1 Begriffsklärung und Grundlagen

Der piezoelektrische Effekt wurde 1880 von den Brüdern P. und J. Curie entdeckt. Sie stellten fest, daß an bestimmten Kristallen unter mechanischer Beanspruchung Oberflächenla-

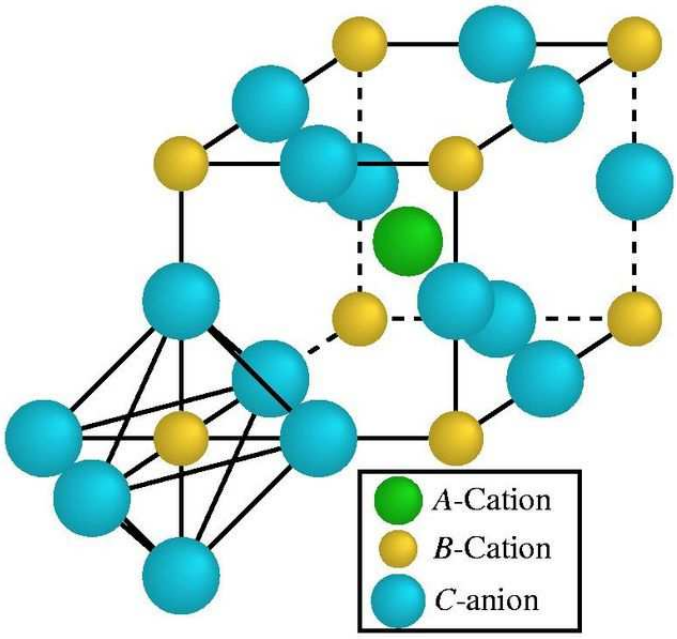



Abbildung 2.2: Kuboktaedrische Perowskitstruktur

dungen auftreten. Entdeckt wurde dieser direkte Piezoeffekt bei Versuchen mit Turmalinkristallen, aber auch andere natürliche Materialien mit Kristallstruktur wie Quarz, Seignettensalz, Zinksulfid und Rohrzucker weisen piezoelektrisches Verhalten auf. Umgekehrt zeigen diese Materialien auch eine Verformung bei Anlegen einer elektrischen Spannung, was als inverser Piezoeffekt bezeichnet wird.
Piezoelektrizität wird bei Kristallen mit polarer Achse, aber ohne Symmetriezentrum beobachtet. Durch Kraft oder Druck kommt es zu einem Verschieben der positiven und negativen Ladungen derart, daß ein elektrisches Dipolmoment entsteht. Piezoelektrische Effekte treten nur in elektrisch nichtleitenden Materialien auf.
Neben den natürlichen Piezomaterialien gibt es spezielle Keramiken, welche ein deutlicheres piezoelektrisches Verhalten zeigen. Für gewöhnlich liegen diese als Werkstoffe in polykristalliner Struktur vor. Gebräuchlich sind

- Bariumtitanat: $BaTiO_3$,
- PZT (Bleizirkonat-Titanate): $Pb[Zr_xTi_{1-x}]O_3$.

Eine Struktur solcher Materialien auf mikroskopischer Ebene ist die nach dem Mineral Perowskit (Calciumtitanat) benannte Perowskitstruktur, welche im Kristallverbund Würfel- und regelmäßige Oktaederverbünde aufweist, siehe Abbildung 2.2. In der Mitte der Kubuszelle befindet sich dabei ein kleines 4-fach positiv geladenes Ion (z.B. $Ti^{4+}$ oder $Zr^{4+}$, an den Ecken des Kubus sitzen 2-fach positiv geladene Ionen wie z.B. $Ba^{2+}$ oder $Pb^{2+}$ und in den Mitten der Seitenflächen befinden sich Sauerstoffionen ($O^{2-}$). Oberhalb einer

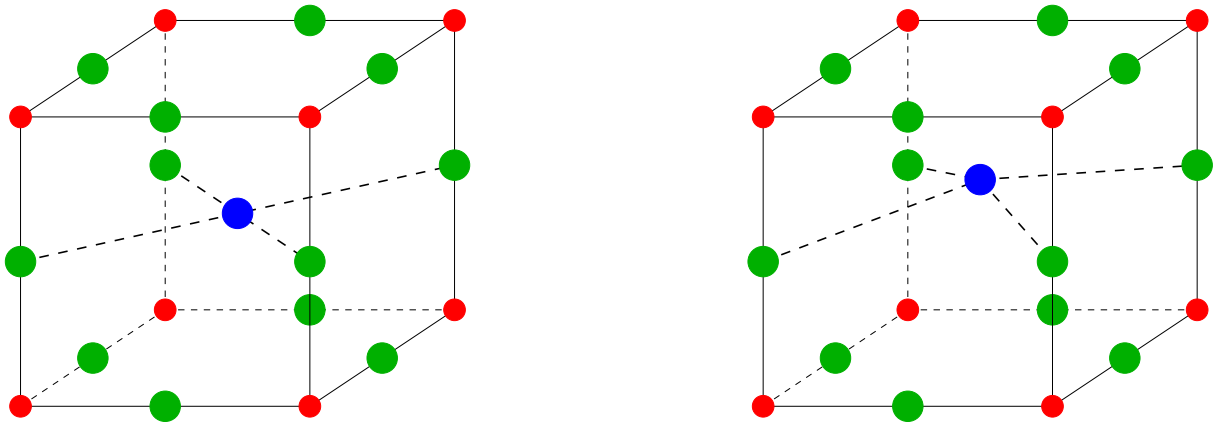


Abbildung 2.3: Perovskitstruktur in Piezomaterialien

materialspezifischen Temperatur (der Curie-Temperatur) liegt diese Struktur in kubisch-raumzentrierter Form vor. In diesem Stadium tritt kein Dipolverhalten respektive Piezoeffekt auf. Bei Abkühlung unter die Curie-Temperatur tritt eine Verschiebung des zentralen Ions aus der Mitte heraus auf, wobei die gesamte Kristallstruktur eine Verzerrung erfährt und sich aufgrund der entstandenen Unsymmetrie ein Dipolverhalten ausbildet. Bildlich dargestellt sind diese beiden Zustände in Abbildung 2.3. Genauere Angaben zu Curietemperaturen, Gitterabständen und weiteren Zuständen findet man z.B. bei Ricoeur [51] und in den dort angegebenen Referenzen. Eine Einführung in die Eigenschaften ferro- und piezoelektrischer Materialien liefert zum Beispiel Martin [37], eine Zusammenfassung der Grundlagen der piezoelektrischen Materialtheorie findet man unter anderem im Buch von Qin [48].

### Polung

Die Kristallstruktur liegt nach Dipolbildung durch Abkühlung nicht über das gesamte Werkstück in gleichmäßiger Polungsrichtung vor. Vielmehr kommt es zur Herausbildung von Domänen genannten Bereichen gleicher Dipolausrichtung, welche nur ein lokales Polungsverhalten besitzen. Die Domänen sind in größeren Strukturen (Körnern) zusammengefaßt, die Keramik im Makrobereich besteht wiederum aus einer Vielzahl von Körnern. Hierbei weisen kleinere Körner eine lamellenartige Anordnung der Domänen auf, während in großen Körnern die Domänen eine Art Fischgrätenmuster bilden. Über die gesamte Multikristallstruktur können sich die zufällig angeordneten Polungen größtenteils gegenseitig aufheben, so daß nach außen hin kein oder nur ein schwacher Piezoeffekt meßbar ist. Vergleiche dazu Abbildung 2.4, in dieser sind die Korngrenzen durch dickere Linien und die Domänengrenzen durch dünnere Linien dargestellt. Die kurzen vollen Pfeile deuten die Dipolausrichtung der Domänen an. Zu bemerken ist, daß innerhalb eines Kornes nur 90°- oder 180°-Domänenwände auftreten, während über Korngrenzen hinweg das Dipolverhalten in fast beliebigen Winkeln wechseln kann.

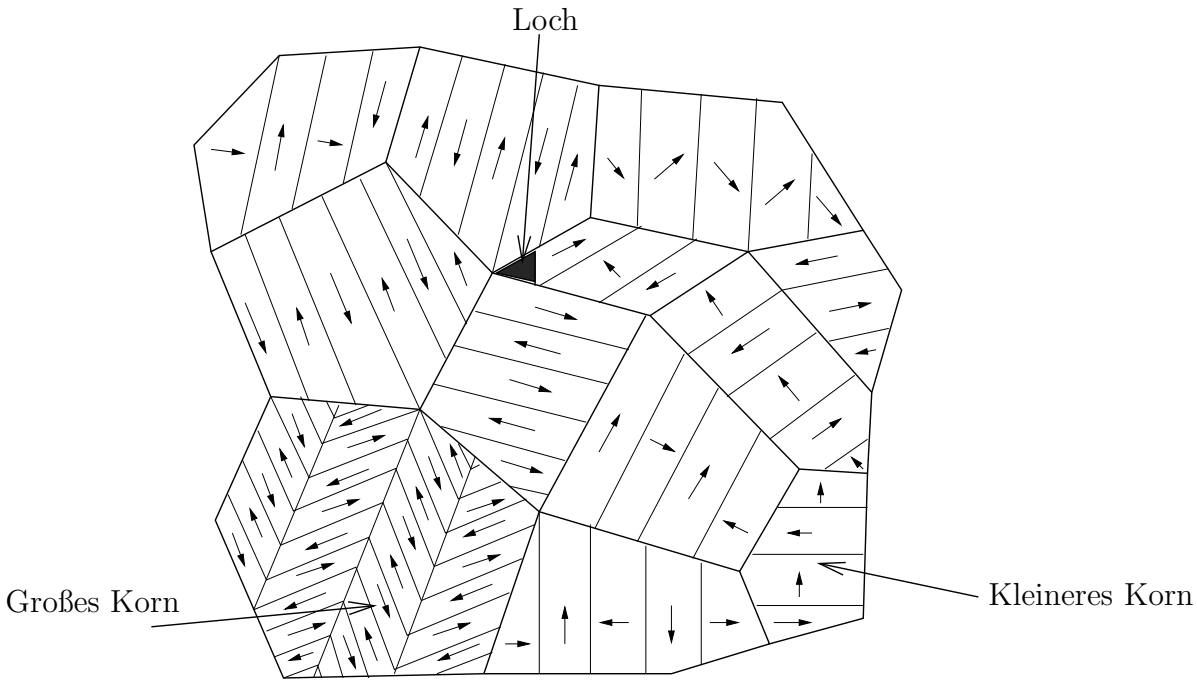



Abbildung 2.4: Schematische Korn- und Domänenstruktur in einer Piezokeramik

Eine ausgezeichnete Polungsrichtung und damit transversalisotropes Materialverhalten kann durch Anlegen eines starken elektrischen Feldes erreicht werden. Die Polung ist theoretisch wirkungsvoller, wenn das elektrische Feld schon während der Abkühlung unter den Curie-Punkt anliegt. Allerdings hat eine Abkühlung im elektrischen Feld bei gebräuchlichen keramischen Piezomaterialien oft ein Zerfallen bzw. Zerbröseln des Materials zur Folge, so daß die Polung nachträglich vorgenommen wird (dazwischen liegt noch der Prozeß des Sinterns). Gegenstand derzeitiger Forschung ist unter anderem auch, inwiefern es möglich ist die Polungseigenschaften zu verbessern bzw. zu modifizieren, indem zusätzlich zum elektrischen Feld mechanische Kräfte auf das Werkstück wirken. Siehe hierzu beispielsweise die Publikationen [25], [34] sowie in Verbindung mit numerischen Resultaten auch aktuell [72]. Während voll isotropes Materialverhalten keine Piezoeffekte zuläßt, ist Transversalisotropie mit einer ausgezeichneten Polungsrichtung und isotropem Verhalten in der dazu senkrechten Ebene der „natürliche Zustand“ in Piezomaterialien.

### 2.3.2 Modelle für verschiedene Strukturebenen

Korrespondierend mit den in Abbildung 2.4 skizzierten Grob- und Feinstrukturen gesinterter Piezokeramiken existieren Modelle für das Materialverhalten auf verschiedenen Auflösungsebenen. Eine mikromechanische Modellierung betrachtet dabei das Verhalten der Polung in jeder Domäne und löst die Domänenwände sowie im nächstgrößeren Maßstab

die Korngrenzen auf. Zur Berechnung von Verhalten größerer Werkstücke ist allerdings eine mikroskopische Auflösung normalerweise weder möglich noch sinnvoll, da die Feinstruktur selbst nur beispielsweise in Schnittebenen durch Dünnschliff sichtbar gemacht werden kann, was mit der Zerstörung des Materials einhergeht. Nebenbei würde eine exakte Auflösung ähnlich wie die Betrachtung der Bewegung jedes einzelnen Moleküles in einem Gas beizeiten jede Rechen- und Speicherkapazität sprengen. Mikrostrukturmodelle bedienen sich daher zwangsläufig stochastischer und synthetischer Feinverteilungen, um eine Berechenbarkeit herzustellen und Effekte vorherzusagen. Echt aufgelöst wird dabei nicht die Mikrostruktur, sondern die Makrostruktur (dazwischen liegt noch die Mesostrukturebene mit den Körnern bzw. Kristallen). Zu einer quantitativen Beschreibung der makroskopisch auftretenden Effekte (vor allem des Piezoeffektes) wird oft eine phänomenologische Modellbildung genutzt, indem die Verläufe der interessierenden Größen in Abhängigkeit zueinander betrachtet werden und wobei die mikromechanischen Effekte wie beispielsweise das Ausrichtungsverhalten der Domänen durch ihre Wirkung auf die entsprechenden funktionalen oder allgemeiner hysteretischen Zusammenhänge mit erfaßt sind. Bekannte Modelle für piezoelektrisches Materialverhalten existieren beispielsweise von Kamlah [33] sowie Schroeder und Romanowski [57],[58] oder Schrade et. al. [56].
In vielen Anwendungen kann auch eine Kopplung mit der Temperatur nicht vernachlässigt werden, diese verallgemeinerte Situation bezeichnet man als Thermopiezoelektrizität. Für genauere Ausführungen und Berechnungen dazu sei beispielsweise auf die Publikationen [24], [59], [54] sowie [65] verwiesen.

### 2.3.3 Mathematische Problemformulierung

Im Rahmen einer piezoelektrischen Randwertaufgabe sucht man in Erweiterung zur Elastizitätstheorie über einem Gebiet $\Omega$ die zwei Felder $u$ (Verschiebung als Vektorfeld mit den Komponenten $u_i$) und $\varphi$ (elektrisches Potential als skalares Feld). Dabei müssen in $\Omega$ mechanische und elektrische Bilanzgleichungen erfüllt sein sowie auf dem Rand geforderte Randbedingungen gelten.

#### Abgeleitete Größen, Bilanzgleichungen

Analog zur linearen Elastizitätstheorie setzt man „kleine Verzerrungen“ voraus und definiert den Verzerrungstensor

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_i u_j + \partial_j u_i)\,. \tag{2.25}$$

Zusätzlich führt man den aus der Elektrostatik bekannten Vektor der elektrischen Feldstärke ein als

$$E = -\nabla\varphi\,, \quad \text{d.h. } E_i = -\partial_i\varphi\,. \tag{2.26}$$

Aus den Definitionsgleichungen (2.25) und (2.26) lassen sich aufgrund Vertauschbarkeit der Differentiationsreihenfolge unmittelbar Kompatibilitätsgleichungen ableiten:

$$\partial_{22}^2\varepsilon_{11} + \partial_{11}^2\varepsilon_{22} - 2\partial_{12}^2\varepsilon_{12} = 0\,, \qquad \partial_2 E_1 - \partial_1 E_2 = 0\,. \tag{2.27}$$

Als abhängige Größen betrachtet man den (mechanischen) Spannungstensor $\sigma = (\sigma_{ij})$ sowie den dielektrischen Verschiebungsvektor $D = (D_i)$, welche bei piezoelektrischem Material über die elektromechanische Kopplung jeweils von sowohl elektrischem Feld $E$ als auch dem Verzerrungstensor $\varepsilon$ abhängen.
Im Gebiet $\Omega$ gelten Kräftegleichgewicht (2.28) (auch als CAUCHY-Equilibrium bezeichnet, vergleiche (2.5)) sowie Ladungsgleichgewicht (2.29) (GAUSSsches Gesetz):

$$\begin{aligned} \operatorname{div}\sigma + \vec{f} &= 0\,, & (2.28)\\ \operatorname{div} D - \omega_v &= 0\,. & (2.29) \end{aligned}$$

Dabei stellt $\vec{f}$ den Vektor der Volumenkräfte dar, während $\omega_v$ das skalare Feld der elektrischen Ladungsdichte ist. Auf Teilen des Randes existieren für Verschiebung und Potential Dirichlet-Randbedingungen:

$$u = u_0 \text{ auf } \Gamma_{D,u}\,, \quad \varphi = \varphi_0 \text{ auf } \Gamma_{D,\varphi} \tag{2.30}$$

sowie Neumann-Randbedingungen:

$$\sigma \cdot \mathfrak{n} = \overline{T} \text{ auf } \Gamma_{N,u}\,, \quad D \cdot \mathfrak{n} = -\overline{\omega}_s \text{ auf } \Gamma_{N,\varphi}\,, \tag{2.31}$$

wobei $\overline{T}$ den durch äußere Kräfte aufgetragene Randspannungsvektor und $\overline{\omega}_s$ die Randladung bezeichnen. Die Teilränder $\Gamma_{D,u}$ und $\Gamma_{D,\varphi}$ können sich in prinzipiell beliebiger Weise überlappen, wobei die Physik der Aufgabenstellung die Anordnung vorgibt. Analog verhält es sich mit $\Gamma_{N,u}$ und $\Gamma_{N,\varphi}$. Eine Skizze liefert Abbildung 2.5, in diesem Beispiel fallen die Dirichletränder für Verschiebung und elektrisches Potential zusammen, was einem fest eingespannten bzw. angeschweißten Körper auf einer leitfähigen und geerdeten Trägerunterlage entspricht. Die Teile des Randes ohne angegebene $u$- bzw. $\varphi$-Randbedingungen besitzen wiederum homogene Neumann-Randbedingungen und gehören jeweils zu $\Gamma_{N,*}$. Im abgebildeten Spezialfall zusammenfallender Dirichletränder fallen somit auch die korrespondierenden Neumannränder zusammen, da Randbedingungen 3.Art oder andere besondere Randbedingungen der Einfachheit halber hier nicht betrachtet werden.

### 2.3.4 Hystereseverhalten und Linearisierung

Der Zusammenhang zwischen den elektrischen und mechanischen Feldgrößen weist Nichtlinearitäten mit Abhängigkeiten von der Belastungsgeschichte („Materialgedächtnis“) auf, welche in Domänenumklappprozessen auf mikromechanischer Ebene begründet sind und durch Verbleiben einer nicht reversiblen Polung überhaupt erst das charakteristische Materialverhalten ermöglichen.
Bei Anlegen eines elektrischen Feldes in Polungsrichtung beobachtet man ein nichtlineares Materialverhalten mit den in Abbildung 2.6 qualitativ dargestellten Hystereseverläufen für die dielektrische Verschiebung $D$ sowie die Verzerrung $\varepsilon$, beide uniaxial in Richtung der Polung betrachtet. Die gestrichelten Linien entsprechen dabei einer „Neukurve“, d.h. An-

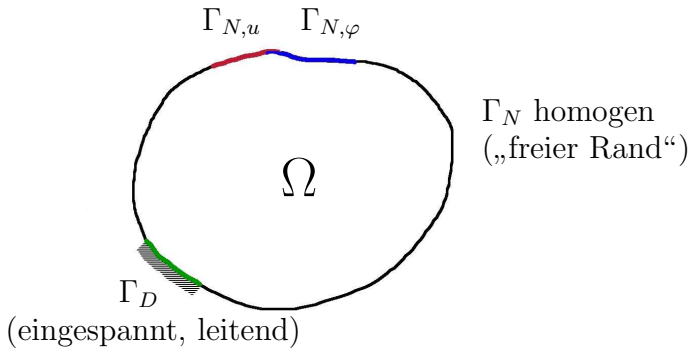



Abbildung 2.5: Skizze einer piezoelektrischen Randwertaufgabe

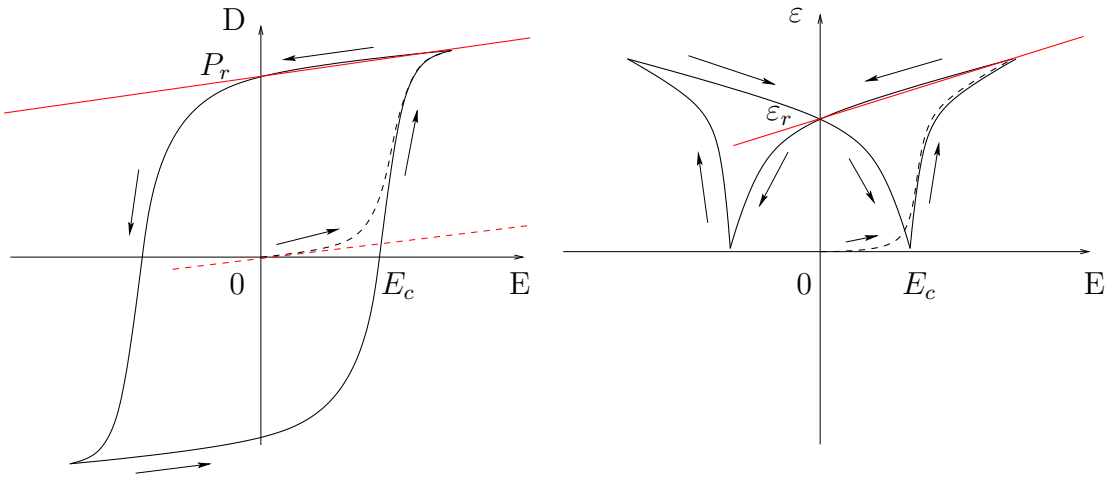



Abbildung 2.6: Dielektrische Hysterese (links) und piezoelektrische Schmetterlingshysterese (rechts) in schematischer Darstellung

legen eines elektrischen Feldes in positiver Richtung an eine ungepolte Keramik. Die dielektrische Verschiebung, welche hier der Polarisation entspricht, steigt bei wachsender Feldstärke von $E = 0$ aus zunächst langsam ungefähr linear an, bis es in der Nähe der sogenannten Koerzitivfeldstärke $E_c$ zu einem drastischen Anwachsen der dielektrischen Verschiebung kommt. Verursacht wird dies durch einsetzende Domänenumklappprozesse im Material. Bei weiterer Erhöhung der Feldstärke kommt es zu einer Sättigung (auch als Lock-in bezeichnet), wenn die Domänen maximal in Richtung des Feldvektors ausgerichtet sind. Von diesem Punkt an ist nun wieder näherungsweise lineares Materialverhalten zu beobachten (im Bild durch die rote Sekante dargestellt). Wird die Feldstärke $E$ wieder auf 0 heruntergefahren verbleibt eine remanente Polarisation $P_r$, da nur wenige Domänen sich wieder anders ausrichten verläuft die Kurve in diesem Bereich wieder näherungsweise linear. Legt man jetzt eine zunehmende Feldstärke in negativer Richtung an, kommt es zu einem weiteren anfangs etwa linearen, dann durch wieder einsetzendes Domänenumklappen zu einem drastischem Nachlassen der dielektrischen Verschiebung. Diese erreicht den Nullwert (vollständig depolarisierter Zustand) bei der negativen Koerzitivfeldstärke $-E_c$, bei weiter wachsender Feldstärke in negativer Richtung kehrt sich die Polarisation um bis auch hier wieder ein Lock-in-Zustand erreicht wird. Läßt man nun die Feldstärke wieder in positiver Richtung wachsen, vervollständigt sich die Hysteresekurve punktsymmetrisch zum Koordinatenursprung.
Der Verlauf der Verzerrung über dem elektrischen Feld verläuft achsensymmetrisch zur senkrechten ($\varepsilon$-)Achse und ähnelt einer Schmetterlingsform, daher wird diese häufig als Schmetterlingshysterese bezeichnet. Hier findet bei Anlegen des elektrischen Feldes zunächst eine nahezu lineare Dehnung statt bis es zum Domänenumklappen kommt, was einen starken Anstieg der Verzerrung hervorruft (genauer aufgeschlüsselt findet dieser in 2 Schüben statt, da 90°- sowie 180°-Domänenumklappen stattfindet). Bei maximaler Domänenausrichtung wird wieder ein Sättigungsbereich erreicht mit nahezu linearem Zusammenhang Dehnung zu Feldstärke. Wird das elektrische Feld wieder auf Null heruntergefahren, verbleibt eine remanente Dehnung $\varepsilon_r$. Fährt man das Feld in den negativen Bereich, geht die Dehnung zunächst noch näherungsweise linear zurück und sinkt dann drastisch auf ein Minimum nahe Null bei Erreichen der negativen Koerzitivfeldstärke. Bei weiter wachsendem Feld in Gegenrichtung findet eine Ausrichtung der Domänen um 180° umgekehrt statt, was mit einem schnellen Anwachsen der Dehnung bis in den Sättigungsbereich verbunden ist, wobei ein anschließendes Wiederhochfahren des Feldes die Hysterese vervollständigt indem wieder eine minimale Dehnung bei der Koerzitivfeldstärke auftritt.
Der Verlauf der Tangente bzw. Sekante im näherungsweise linearen Bereich ist jeweils durch eine rote Gerade dargestellt. Da bei Lastveränderungen in diesen Teilbereichen sehr flache Hysteresen auftreten (vgl. Abbildung 2.7), bringt die lineare Approximation hier eine sinnvolle Näherung. Auf diese lineare Näherung als Modell soll sich im weiteren Verlauf dieser Arbeit konzentriert werden. Die Beachtung von Hystereseverläufen für numerische Berechnungen erfordert kompliziertere Modellansätze, welche hier nicht weiterverfolgt werden sollen. Als Beispiel sei die Verwendung von Preisach-Operatoren genannt, siehe dazu ausführlich Kaltenbacher [32].
Der Nullpunkt war in der Hysteresendarstellung gemäß Abbildung 2.6 jeweils auf den Aus-

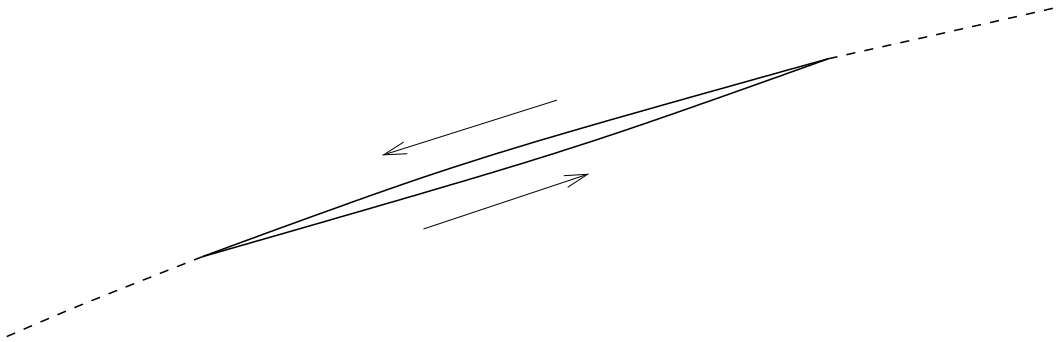


Abbildung 2.7: Hysteresenform bei Teildurchlauf im annähernd linearen Bereich

gangszustand der ungepolten Keramik bezogen. Der Zustand mit vorhandener remanenter Polarisation und remanenter Dehnung bei verschwindendem äußeren Feld ist dagegen der Ausgangszustand für eine gepolte Keramik, welcher im Sinne einer lagrangeschen Betrachtungsweise benutzt werden soll. Insbesondere wird bei einem piezoelektrischen Bauteil mit eingeprägter (remanenter) Polung von $u = 0$ und somit einem verzerrungsfreien Zustand ausgegangen. Für eine lineare Betrachtungsweise führt man somit für die reversiblen Anteile die Bezeichnungen

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon - \varepsilon_r \,, \quad \tilde{D} = D - P_r \tag{2.32}$$

ein und erhält somit mit unter Weglassen der Tilden die linearisierten konstitutiven Materialgleichungen:

$$\begin{array}{rcl} \sigma & = & C : \varepsilon - B \cdot E \\ D & = & B^T : \varepsilon + K \cdot E \end{array} \tag{2.33}$$

oder komponentenweise im Sinne der Einsteinschen Summenkonvention gemäß Abbildung 2.8, welche das Zusammenspiel zwischen den vorhandenen Feldgrößen veranschaulicht. Neben dem linear-elastischen Materialtensor 4.Stufe $C = (c_{ijkl})$ definiert man hier 2 weitere Tensoren:

- $B = (e_{ijk})$ als piezoelektrischen Kopplungstensor (3.Stufe) sowie
- $K = (\kappa_{ij})$ als den dielektrischen Materialtensor 2.Stufe.

### 2.3.5 Schwache Formulierung

Zu einer Variationsformulierung der linearen piezoelektrischen Aufgabe gelangt man durch eine Erweiterung des Vorgehens im Fall der linearen Elastizität: Multiplikation von (2.28) mit Testfunktionen $v \in \mathbb{V}_0$ sowie von (2.29) mit skalaren Testfunktionen $\psi \in \mathbb{M}_0$, anschließende Integration beider Gleichungen über $\Omega$ und die Anwendung von Greenscher Formel bzw. Gausssschem Integralsatz führt auf die folgende Variationsaufgabe:

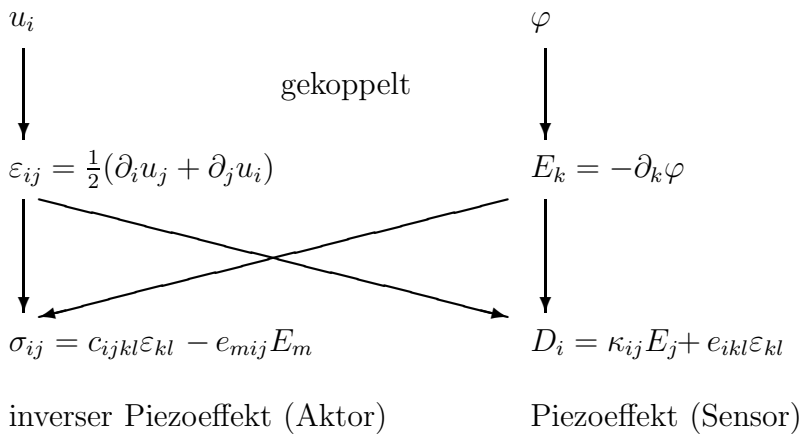



Abbildung 2.8: Feldgrößenabhängigkeit bei linear piezoelektrischem Materialverhalten

**Problem 2.2** *Finde* $u \in \mathbb{V}_D\,,\ \varphi \in \mathbb{M}_D$ *mit*

$$\begin{array}{rcll} c(u,v) + b(\varphi,v) & = & F(v) & \forall\, v \in \mathbb{V}_0\,, \\ b(\psi,u) - k(\varphi,\psi) & = & -G(\psi) & \forall\, \psi \in \mathbb{M}_0\,. \end{array} \tag{2.34}$$

Dabei sind die Bilinearformen definiert durch

$$\begin{array}{rcl} c(u,v) & = & \int_\Omega \varepsilon(u) : C : \varepsilon(v)\, d\Omega\,, \\ b(\psi,v) & = & \int_\Omega \varepsilon(v) : B \cdot \nabla\psi\, d\Omega\,, \\ k(\varphi,\psi) & = & \int_\Omega \nabla\psi \cdot K \cdot \nabla\varphi\, d\Omega\,, \end{array} \tag{2.35}$$

und die Linearformen durch

$$\begin{array}{rcl} F(v) & = & \int_\Omega \vec{f}\cdot v\, d\Omega \ + \int_{\Gamma_{N,u}} \overline{T}\cdot v\, d\Gamma\,, \\ G(\psi) & = & \int_\Omega \omega_v \psi\, d\Omega + \int_{\Gamma_{N,\varphi}} \overline{\omega}_s \psi\, d\Gamma\,. \end{array}$$

Die entsprechenden Räume sind Teilräume der $H^1$-Hilberträume

$$\mathbb{V} = \big(H^1(\Omega)\big)^d \quad \text{und } \mathbb{M} = H^1(\Omega) \tag{2.36}$$

mit folgenden Einschränkungen ($\mathbb{V}_D$ und $\mathbb{V}_0$ analog zu (2.9)):

$$\begin{array}{rclcrcl} \mathbb{V}_D & = & \big\{v \in \mathbb{V}\,,\ v|_{\Gamma_{D,u}} = u_0\big\}\,, & \qquad & \mathbb{M}_D & = & \big\{\psi \in \mathbb{M}\,,\ \psi|_{\Gamma_{D,\varphi}} = \varphi_0\big\}\,, \\ \mathbb{V}_0 & = & \big\{v \in \mathbb{V}\,,\ v|_{\Gamma_{D,u}} = 0\big\}\,, & & \mathbb{M}_0 & = & \big\{\psi \in \mathbb{M}\,,\ \psi|_{\Gamma_{D,\varphi}} = 0\big\}\,. \end{array} \tag{2.37}$$

Alle 3 Bilinearformen sind dabei offensichtlich beschränkt aufgrund der beschränkten Normen der Materialtensoren $C$, $K$ und $B$ (vgl. auch die Matrixdarstellung in Abschnitt 2.3.7). Die Bilinearformen $c(.,.)$ und $k(.,.)$ weisen zusätzlich folgende Eigenschaften auf:

- Symmetrie:

$$c(u,v) = c(v,u) \;\forall\, u,v \in \mathbb{V}\,,$$
$$k(\varphi,\psi) = k(\psi,\varphi) \;\forall\, \varphi,\psi \in \mathbb{M}\,.$$

- $\mathbb{V}_0$- bzw. $\mathbb{M}_0$-Elliptizität: Es existieren positive Konstanten $\alpha_c$, $\alpha_k$ mit

$$\begin{array}{rcll} c(u,u) & \geq & \alpha_c \|u\|^2_{1,\Omega} & \forall\, u \in \mathbb{V}_0\,, \\ k(\varphi,\varphi) & \geq & \alpha_k \|\varphi\|^2_{1,\Omega} & \forall\, \varphi \in \mathbb{M}_0\,. \end{array} \tag{2.38}$$

Die Elliptizität von $c(.,.)$ erhält man unter der Voraussetzung $\Gamma_{D,u} \neq \emptyset$ analog zum Fall linear-elastischer Probleme aus der KORNschen Ungleichung. Die Elliptizität von $k(.,.)$ kann unter der Bedingung $\Gamma_{D,\varphi} \neq \emptyset$ mit Hilfe der FRIEDRICHSschen Ungleichung gezeigt werden, da aufgrund der positiven Definitheit der Materialmatrix $K$ das Integral

$$\int_\Omega (\nabla\varphi)^T K\, \nabla\varphi \, dx$$

das Quadrat einer äquivalenten Norm zu

$$\int_\Omega (\nabla\varphi)^T \nabla\varphi \, dx = |\varphi|^2_{1,\Omega}$$

darstellt.

### 2.3.6 Existenz und Eindeutigkeit

**Lemma 2.1** *Die piezoelektrische Variationsformulierung (2.34) besitzt im Raum $\mathbb{V}_D \times \mathbb{M}_D$ eine eindeutige Lösung $(u^*, \varphi^*)$.*

**Beweis:** Wir führen in Vektorform zusammengefaßte Größen ein:

$$\mathbf{x} := \begin{pmatrix} u \\ \varphi \end{pmatrix},\ \mathbf{y} := \begin{pmatrix} v \\ \psi \end{pmatrix}$$

und definieren für $\mathbf{x}$ in $\mathbb{V} \times \mathbb{M}$ eine gewichtete Norm wie folgt:

$$\|\mathbf{x}\|^2_{1,\Omega,\alpha} = \|u\|^2_{1,\Omega} + \alpha \|\varphi\|^2_{1,\Omega}\,. \tag{2.39}$$

Dabei ist $\alpha$ eine positive Konstante.
Weiterhin definieren wir mit diesen Bezeichnungen eine „große“ Bilinearform

$$a(\mathbf{x},\mathbf{y}) = c(u,v) + b(\varphi,v) - b(\psi,u) + k(\psi,\varphi)\,. \tag{2.40}$$

Diese weist keine Symmetrie auf, ist allerdings elliptisch aufgrund der Eigenschaft

$$a(\mathbf{x},\mathbf{x}) = c(u,u) + k(\varphi,\varphi)\,,$$

welches zusammen mit (2.38) und obiger Normefinition ergibt:

$$\begin{aligned} a(\mathbf{x},\mathbf{x}) &\geq \alpha_c \|u\|^2_{1,\Omega} + \alpha\,\frac{\alpha_k}{\alpha}\|\varphi\|^2_{1,\Omega} \\ &\geq \min(\alpha_c, \frac{\alpha_k}{\alpha})\|\mathbf{x}\|^2_{1,\Omega,\alpha}\,. \end{aligned}$$

Es gilt die Äquivalenz von (2.34) zu der Variationsformulierung

$$a(\mathbf{x},\mathbf{y}) = f(\mathbf{y}) \quad \forall\,\mathbf{y} \in \mathbb{V}_0 \times \mathbb{M}_0\,, \tag{2.41}$$

wobei $f(\mathbf{y}) = F(v)+G(\psi)$. Die Richtung (2.34) $\Longrightarrow$ (2.41) ergibt sich sofort durch Addition der beiden Gleichungen, wohingegen (2.41) $\Longrightarrow$ (2.34) unmittelbar mit

$$\mathbf{y}_1 = \begin{pmatrix} v \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{sowie} \quad \mathbf{y}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi \end{pmatrix}$$

folgt. In Analogie zum in (2.12) dargestellten Vorgehen im linear-elastischen Fall läßt sich (2.41) wiederum auf ein Ersatzproblem mit homogenen Dirichleträndern zurückführen: Suche $\mathbf{w} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^* \in \mathbb{V}_0 \times \mathbb{M}_0$, so daß

$$a(\mathbf{w},\mathbf{y}) = \tilde{f}(\mathbf{y}) := f(\mathbf{y}) - a(\mathbf{x}^*,\mathbf{y}) \quad \forall\,\mathbf{y} \in \mathbb{V}_0 \times \mathbb{M}_0$$

mit einem beliebigen Funktionenvektor $\mathbf{x}^* = \begin{pmatrix} u^* \\ \varphi^* \end{pmatrix} \in \mathbb{V}_D \times \mathbb{M}_D$, der also alle Dirichletrandbedingungen erfüllt. Die Elliptizität von $a(.,.)$ in $\mathbb{V}_0 \times \mathbb{M}_0$ sichert zusammen mit der aus der Beschränktheit der Bilinearformen $c(.,.)$, $k(.,.)$, $b(.,.)$ offensichtlich folgenden Beschränktheit von $a(.,.)$ die eindeutige Lösbarkeit des Variationsproblems nach dem Lemma von Lax-Milgram. □

**Bemerkung 2.4** *Die Gültigkeit des* Lax-Milgram*-Lemmas setzt keine Symmetrie von $a(.,.)$ voraus, ein entsprechender Beweis befindet sich z.B. in [26].*

**Bemerkung 2.5** *Die Wichtung $\alpha$ ist bei der Definition der Norm in (2.39) insofern zweckmäßig, als je nach Einheitenwahl von $u$ und $\varphi$ die mechanischen und elektrischen Anteile sehr unterschiedlich gewichtet eingehen können. Für die reine Existenzbetrachtung ist es möglich, einfach $\alpha = 1$ zu wählen.*

### 2.3.7 3D-Materialgleichungen (transversalisotrop)

Für die numerische Behandlung erweist es sich als zweckmäßig, in Erweiterung zum Vorgehen in Abschnitt 2.1.2 die Tensoren höherer Stufe unter Ausnutzung vorhandener Symmetrien als Matrizen darzustellen, fernerhin die symmetrischen Tensoren $\sigma$ und $\varepsilon$ wie schon in (2.7) eingeführt in Vektorform zu betrachten.

$$\underline{\varepsilon}(u) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{12} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \end{pmatrix}, \quad \underline{\sigma}(u,\varphi) = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \end{pmatrix}$$

Im weiteren sei vorausgesetzt, daß Transversalisotropie bezüglich der $x_1$–$x_2$–Ebene vorliegt, was im transversalisotropen Material der Polungsrichtung $x_3$ entspricht. Die Materialparameter stellen sich dann in Matrizenform wie folgt dar:

$$\underline{\underline{C}} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & e_{13} \\ 0 & 0 & e_{13} \\ 0 & 0 & e_{33} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & e_{61} & 0 \\ e_{61} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{K}} = \begin{pmatrix} \kappa_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_{33} \end{pmatrix}, \tag{2.42}$$

wobei $c_{44} = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})$ gilt.
Gemäß Abbildung 2.8 ergeben die dreidimensionalen Materialgesetze in Matrix-Vektor-Schreibweise:

$$\begin{pmatrix} \underline{\sigma} \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{C}} & \underline{\underline{B}} \\ \underline{\underline{B}}^T & -\underline{\underline{K}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\varepsilon} \\ \nabla\varphi \end{pmatrix} \tag{2.43}$$

### 2.3.8 Reduktion auf 2D

Die Reduzierung auf zweidimensionale Probleme ist bei transversalisotropem Material möglich und auch in der Literatur beschrieben. Konkret entspricht eine 2D-Betrachtung einer Erweiterung des „ebenen Verzerrungszustandes“, welcher aus der linearen Elastizität bekannt ist. Als Anwendungsbeispiele kämen ähnlich wie im linear-elastischen Fall lange Bauteile mit fehlender oder gleichmäßiger Belastung bezüglich der dritten Koordinate in Frage, bei denen nur das Verhalten im Querschnitt interessant ist. Zu beachten ist, daß die Polungsrichtung $x_3$ für Piezoeffekte notwendig vorhanden sein muß, abweichend von der üblichen $x_1$–$x_2$–Ebene betrachten wir also einen $x_1$–$x_3$–Querschnitt: $u_i, \varphi$ sind unabhängig von $x_2$, sowie $u_2 = 0$. Unter Verwendung dieser Voraussetzungen ergeben sich verkleinerte Matrizen und Vektoren, welche im Folgenden kurz dargestellt sind.

$$\underline{\varepsilon}^{2\mathrm{D}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{13} \end{pmatrix}, \underline{\sigma}^{2\mathrm{D}} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{13} \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{C}}^{2\mathrm{D}} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{13} & 0 \\ c_{13} & c_{33} & 0 \\ 0 & 0 & c_{55} \end{pmatrix}, \underline{\underline{B}}^{2\mathrm{D}} = \begin{pmatrix} 0 & e_{13} \\ 0 & e_{33} \\ e_{61} & 0 \end{pmatrix}, \underline{\underline{K}}^{2\mathrm{D}} = \begin{pmatrix} k_{11} & 0 \\ 0 & k_{33} \end{pmatrix}$$

Um eine einfache 2D-Darstellung zu erhalten, verwendet man allerdings häufig auch die folgende umindizierte Schreibweise:

$$\underline{\varepsilon} = (\varepsilon_{11}\, \varepsilon_{22}\, 2\varepsilon_{12})^T, \quad \underline{\sigma} = (\sigma_{11}\, \sigma_{22}\, \sigma_{12})^T,$$

$$\underline{\underline{C}} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & 0 \\ c_{12} & c_{22} & 0 \\ 0 & 0 & c_{33} \end{pmatrix}, \underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} 0 & e_{12} \\ 0 & e_{22} \\ e_{31} & 0 \end{pmatrix}, \underline{\underline{K}} = \begin{pmatrix} k_{11} & 0 \\ 0 & k_{22} \end{pmatrix}. \tag{2.44}$$

Insbesondere folgt mit dieser Darstellung sowohl im dreidimensionalen als auch im zweidimensionalen Fall für die in (2.35) definierten Bilinearformen:

$$\begin{aligned} c(u,v) &= \int_\Omega (\underline{\varepsilon}(u))^T \underline{\underline{C}}\, \underline{\varepsilon}(v)\, d\,\Omega\,, \\ b(\varphi,v) &= \int_\Omega (\nabla\varphi)^T \underline{\underline{B}}^T \underline{\varepsilon}(v)\, d\,\Omega\,, \\ k(\varphi,\psi) &= \int_\Omega (\nabla\varphi)^T \underline{\underline{K}}\, \nabla\psi\, d\,\Omega\,. \end{aligned}$$

# Kapitel 3

# Finite-Element-Anwendung

## 3.1 Allgemeines und Diskretisierung

Der folgende Abschnitt soll eine kurze Einführung der Finite-Element-Methode (FEM) mit Hinblick auf die hier verwendeten Spezifiken bieten. Für eine ausführlichere Einführung in die FEM sei auf vielfältige Abhandlungen in der Literatur verwiesen, beispielsweise [8],[16],[26] oder [31]. Die Finite-Element-Methode löst Variationsaufgaben näherungsweise, indem Approximationen in endlichdimensionale Funktionenräume betrachtet werden, welche dann mit Hilfe der Rechentechnik gelöst werden können. Insbesondere müssen bei den hier betrachteten Mehrfeldproblemen (Inkompressible Elastizität, Piezoelektrizität) verschiedene Felder approximiert werden. Auf diese Aufgabenklassen bezogen, approximiert man Problem 2.1 bzw. Problem 2.2 in geeigneten Räumen. Das Gebiet $\Omega$ wird hierfür in ein Netz $\mathcal{T}$ von Teilgebieten (Elementen) $T$ unterteilt und es werden endlichdimensionale Funktionenräume

$$\mathbb{V}_h \subset \mathbb{V}, \quad \mathbb{M}_h \subset \mathbb{M}$$

sowie

$$\mathbb{V}_{0h} \subset \mathbb{V}_0\,,\ \mathbb{V}_{Dh} \subset \mathbb{V}_D^*\,, \quad \mathbb{M}_{0h} \subset \mathbb{M}_0\,,\ \mathbb{M}_{Dh} \subset \mathbb{M}_D^*$$

definiert.[1] (im Fall inkompressiblen Materials setzt man formal

$$\mathbb{M}_0 = \mathbb{M}_D = \mathbb{M} \quad \text{und } \mathbb{M}_{0h} = \mathbb{M}_{Dh} = \mathbb{M}_h\,,$$

da der Druck keine Dirichletbedingungen besitzt). Damit ist es möglich, die diskretisierte Version der Probleme 2.2 und 2.1 zu definieren:

**Problem 3.1** *Finde* $u_h \in \mathbb{V}_{Dh}\,,\ \varphi_h \in \mathbb{M}_{Dh}$ *mit*

$$\begin{array}{rcll} c(u_h, v_h) + b(\varphi_h, v_h) & = & F_h(v_h) & \forall\, v_h \in \mathbb{V}_{0h}\,, \\ b(\psi_h, u_h) - k(\varphi_h, \psi_h) & = & -G_h(\psi_h) & \forall\, \psi_h \in \mathbb{M}_{0h}\,. \end{array} \tag{3.1}$$

[1] Die Räume $\mathbb{V}_D^*$ sowie $\mathbb{M}_D^*$ entsprechen dabei den Räumen, in denen die in die Spurräume von $\mathbb{V}_h$ bzw. $\mathbb{M}_h$ über den entsprechenden Dirichleträndern projizierten Dirichletbedingungen $u = u_{0h}$ auf $\Gamma_{D,u}$ usw. (bezeichnet auch als diskrete Dirichletbedingungen) erfüllt sind. Diese Projektion sichert, daß es beispielsweise im Raum $\mathbb{V}_h$ überhaupt Funktionen gibt welche die (diskreten) Dirichletbedingungen erfüllen.

Die diskreten Linearformen $F_h$ und $G_h$ enthalten dabei die in der Diskretisierung approximierten Neumannrandbedingungen und ggf. rechten Seiten im Gebiet (Volumenkräfte, Ladungsdichten). Im Fall inkompressibler Elastizität (Problem 2.1) verschwindet $G_h$ aufgrund $G = 0$.
Die Finite-Element-Ansatzfunktionen können als Linearkombinationen von Basisfunktionen dargestellt werden aufgrund von

$$\begin{aligned} \mathbb{V}_{Dh} \subset \mathbb{V}_h = span\, \Phi &= span(\vec{\phi}_1, \vec{\phi}_2, \ldots, \vec{\phi}_{N_u})\,, \\ \mathbb{M}_{Dh} \subset \mathbb{M}_h = span\, \Psi &= span(\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_{N_p})\,; \end{aligned}$$

mit $N_u = N \cdot d$ Vektoransatzfunktionen und $N_p$ skalaren Ansatzfunktionen.
Dabei bezeichnet $N$ die Anzahl der Freiheitsgrade in $\Omega$ für eine Verschiebungskomponente, während möglicherweise davon abweichend $N_p$ der Anzahl der Freiheitsgrade für den Druck oder das elektrische Potential entspricht, jeweils ohne Einschränkungen durch Dirichletrandbedingungen. Damit kann man mit der Identifikation von $\Phi$ und $\Psi$ als Zeilenvektoren nach der Einführung von Koeffizientenvektoren $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{N_u}$, $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^{N_p}$ die FE-Ansatzfunktionen wie folgt darstellen:

$$u_h = \Phi \mathbf{u} := \sum_{j=1}^{N_u} u^j \vec{\phi}_j$$

sowie

$$\left\{ \begin{array}{ll} \varphi_h & \text{(piezoelektrischer Fall)} \\ p_h & \text{(inkompressible Elastizität)} \end{array} \right\} = \Psi \mathbf{p} := \sum_{j=1}^{N_p} p_j \psi_j\,.$$

Basen für die Räume der diskreten Testfunktionen erhält man durch die Einschränkung auf diejenigen Basisfunktionen, die auf den entsprechenden Dirichleträndern verschwinden:

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= \left\{ \vec{\phi} \in \Phi \,:\, \vec{\phi} \in \mathbb{V}_0 \right\}\,, \\ \Psi_0 &= \left\{ \psi \in \Psi \,:\, \psi \in \mathbb{M}_0 \right\}\,. \end{aligned}$$

Mit diesen Definitionen läßt sich (3.1) äquivalent als Gleichungssystem (3.2) formulieren, indem man als Testfunktionen gerade die Basisfunktionen aus $\Phi_0$ und $\Psi_0$ benutzt und somit für jede Basisfunktion eine Gleichung erhält.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^T & -\mathbf{K} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{pmatrix}\,. \tag{3.2}$$

Dabei sind die vorkommenden Matrizen und Vektoren der rechten Seite wie folgt definiert:

$$\begin{array}{rcccrcl} \mathbf{C} &=& (c_{ij}) & \text{mit} & c_{ij} &=& c(\vec{\phi}_i, \vec{\phi}_j)\,, \\ \mathbf{B} &=& (b_{ij}) & \text{mit} & b_{ij} &=& b(\psi_j, \vec{\phi}_i)\,, \\ \mathbf{K} &=& (k_{ij}) & \text{mit} & k_{ij} &=& k(\psi_i, \psi_j)\,, \\ \mathbf{f} &=& (f_i) & \text{mit} & f_i &=& F_h(\vec{\phi}_i)\,, \\ \mathbf{g} &=& (g_i) & \text{mit} & g_i &=& -G_h(\psi_i)\,. \end{array} \tag{3.3}$$

An die Ansatzräume werden normalerweise folgende Forderungen gestellt:

- $\mathbb{V}_h \subset (\mathcal{C}(\bar{\Omega}))^d$, d.h. Stetigkeit der Verschiebungskomponenten im gesamten Gebiet (Ausnahme: Nichtkonforme Elemente)
- – $\mathbb{M}_h \subset \mathcal{C}(\bar{\Omega})$ im Fall piezoelektrischer Probleme, d.h. Stetigkeit des elektrischen Potentials im Gebiet
  – $\mathbb{M}_h \subset L_2(\Omega)$ im Fall inkompressibler Materialien, d.h. auch unstetige Drücke werden zugelassen, es wird lediglich quadratische Integrierbarkeit global gefordert.
- $v_h|_T \in (\mathcal{P}_r(T))^d \quad \forall\, v_h \in \mathbb{V}_h, \forall\, T \in \mathcal{T}$ sowie
  $q_h|_T \in \mathcal{P}_s(T) \quad \forall\, q_h \in \mathbb{M}_h, \forall\, T \in \mathcal{T}$,
  das heißt auf jedem Element $T$ sind die Komponenten der Ansatzfunktionen Polynome kleinen Grades.

Dabei ist nicht jede beliebige Kombination von Elementen geeignet. Um zu brauchbaren Ergebnissen zu gelangen, muß die Spezifik des Problems berücksichtigt werden. Hierbei unterscheiden sich trotz der gleichartigen Blockstruktur piezoelektrische Aufgabenstellungen und inkompressible Elastizität.

## 3.2 Elementewahl

Für die FEM-Berechnung ist es notwendig, passende Finite-Element-Räume zu wählen. Die Wahl der finiten Elemente soll dabei die Ziele stabile Berechenbarkeit, gute Approximation der Lösung sowie möglichst geringen Speicher- und Rechenaufwand zusammenführen.

### 3.2.1 Elemente für inkompressible Materialien, LBB-Bedingung

Im Abschnitt 2.2.2 wurde darauf eingegangen, daß für eine eindeutige Lösbarkeit des gemischten Variationsproblems (2.19) neben der Elliptizität der Bilinearform $c(.,.)$ auf $\mathbb{V}_0$ eine Inf-Sup-Bedingung bezüglich der Räume $\mathbb{V}$ und $\mathbb{M}$ erfüllt sein muß. Für die Aufgabe in endlichdimensionalen FEM-Räumen $\mathbb{V}_h$, $\mathbb{M}_h$ existieren hier analoge Voraussetzungen für eindeutige Lösbarkeit:

$$c(v_h, v_h) \geq \alpha \|v_h\|_V^2 \;\forall\, v_h \in \mathbb{V}_{0h}\,, \tag{3.4}$$

$$\sup_{v_h \in \mathbb{V}_h} \frac{b(q_h, v_h)}{\|v_h\|_V} \;\geq\; \beta \|q_h\|_M \;\forall\, q_h \in \mathbb{M}_h\,. \tag{3.5}$$

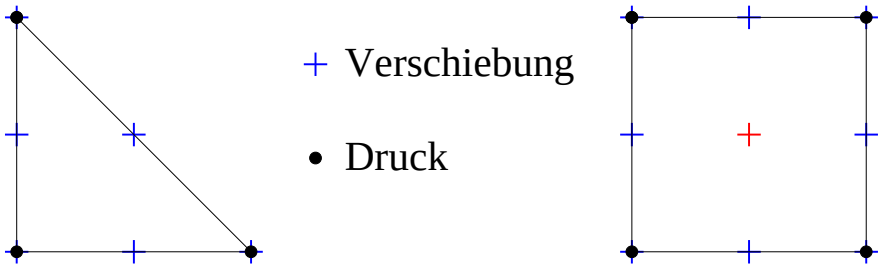
Dabei sind $\alpha$ und $\beta$ von der Diskretisierung bzw. von $h$ unabhängige Konstanten.
(3.5) wird nach ihren Entdeckern als Ladyšenskaya-Babuška-Brezzi-Bedingung, kurz LBB-Bedingung bezeichnet. Eine übliche Bezeichnung für (3.5) ist auch diskrete Inf-Sup-Bedingung, da die Gleichung äquivalent als

$$\inf_{q_h \in \mathbb{M}_h} \sup_{v_h \in \mathbb{V}_h} \frac{b(q_h, v_h)}{\|v_h\|_V \, \|q_h\|_M} \;\geq\; \beta$$

geschrieben werden kann. Während die Elliptizitätsbedingung (3.4) unmittelbar aus der entsprechenden Elliptizität der Bilinearform $c(.,.)$ im Raum $\mathbb{V}_0$ folgt bzw. sogar noch eine Abschwächung dieser darstellt, folgt die LBB-Bedingung (3.5) im allgemeinen nicht aus der (kontinuierlichen) Inf-Sup-Bedingung (2.22), sondern ist von der Wahl der Räume $\mathbb{V}_h$ und $\mathbb{M}_h$ abhängig. Die Mißachtung dieser Bedingung bei der Elementewahl kann sich bei der numerischen Lösung mittels FEM in instabilem Lösungsverhalten (z.B. Auftreten von Oszillationen in der Lösung) bis hin zu völlig falschen Lösungen äußern. Von daher ist es wichtig, geeignete Elementepaarungen zu kennen und zu verwenden.
In der Literatur findet man umfangreiche Ausführungen zur LBB-Bedingung und zugehörigen Elementen, hauptsächlich auf das Stokes-Problem und die inkompressible Elastizität bezogen (welche ja neben analoger Blockstruktur auch analoge Bilinearformen $c(.,.)$ und $b(.,.)$ besitzen). Siehe dazu etwa [8],[12],[18],[21],[69]. Neuere Untersuchungen existieren auch zu anisotropen Elementen, z.B. von Apel et. al. [4],[3],[5] sowie [49].

**Beispiele für nichtzulässige und zulässige Elemente bei inkompressiblem Material**

Die LBB-Bedingung wird nicht erfüllt von Elementen, welche für Verschiebungskomponenten und Druck den gleichen Ansatzraum benutzen, wie z.B. $\mathcal{P}_1 - \mathcal{P}_1$ oder $\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_2$ auf Dreiecks- bzw. Tetraederelementen, genauso $\mathcal{Q}_j - \mathcal{Q}_j$ auf Vierecks- bzw. Quaderelementen. Da die Verschiebungen im Gegensatz zum Druck mit einer um einen Grad höheren (höchsten) Ableitung in die Differentialgleichung bzw. Bilinearformen eingehen, erscheint es auch logisch entsprechend niedrigere Polynomgrade für den Druck zu benutzen. Es zeigt sich aber, daß dies nicht in jedem Fall ausreicht um die LBB-Bedingung zu sichern. So war z.B. das Element $\mathcal{Q}_1 - \mathcal{Q}_0$ mit stückweise bilinearen Verschiebungen und stückweise konstantem Druck aufgrund seiner Einfachheit lange Zeit populär und findet sich auch heute stellenweise noch in FEM-Anwendungssoftware in der Strömungsmechanik. Dieses Element erfüllt die LBB-Bedingung allerdings nicht bzw. nur mit von $h$ abhängiger Konstante, bei dessen Verwendung tritt oft eine sogenannte Schachbrett-Instabilität auf welche sich durch einen schachbrettartig auf dem Netz oszillierenden Druck in der Rechnung äußert. Ebenfalls ungeeignet ist die Kombination $\mathcal{P}_1 - \mathcal{P}_0$ mit linearer Verschiebung und konstantem Druck im Dreieckselement, bei dieser Elementepaarung tritt in einer Dreiecksvernetzung mit Dirichletrand der Effekt ein, daß der Druck mehr Freiheitsgrade besitzt als die Verschiebungskomponenten ([12], folgt mithilfe des Eulerschen Polyedersatzes), und somit ein Locking eintritt weil die Verschiebung $u_h$ überbestimmt ist. Abhilfe schaffen kann hier z.B. die Bildung von Makroelementen mit zusätzlichen Beschränkungen an den Ansatzraum.
Häufig benutzte Elemente welche die LBB-Bedingung erfüllen sind die sogenannten Taylor-Hood-Elemente, welche quadratische Verschiebungen und linearen Druck pro Element aufweisen, also $\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_1$ bei Dreieck-/Tetraedervernetzung sowie $\mathcal{Q}_2 - \mathcal{Q}_1$ bei Vierecks-/Quadervernetzung. Im zweidimensionalen Fall darf bei Viereckvernetzung ebenfalls ein Serendipity-Element verwendet werden, wobei die Verschiebung von den 9 Freiheitsgraden im echt biquadratischen Ansatz um einen Freiheitsgrad reduziert wird (weglassen des „Ele-




$u_T \in (\mathcal{P}_2(T))^2$
$p_T \in \mathcal{P}_1(T)$

$u_T \in (\mathcal{Q}_2(T))^2$
$p_T \in \mathcal{Q}_1(T)$

Abbildung 3.1: Taylor-Hood-Elemente für Dreiecks- und Viereckvernetzung

mentbubbels“ entsprechend $xy(1-x)(1-y)$ im Masterelement $(0,1)^2$. Ebenfalls zulässig ist das modifizierte Taylor-Hood-Element (linearer Druck und Verschiebung linear auf einmal komplett verfeinertem Netz, d.h. Unterteilung in „Subelemente“ der Größe $\frac{h}{2}$). Die Verteilung der Freiheitsgrade in den 2D Taylor-Hood-Elementen verdeutlicht Abbildung 3.1.
Weitere zulässige Kombinationen sind $\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_0/\mathcal{Q}_2 - \mathcal{Q}_0$ mit stückweise konstantem Druck bei quadratischer Verschiebung sowie das sogenannte Mini-Element $\mathcal{P}_1^{\text{bubb}} - \mathcal{P}_1$, bei welchem der Verschiebungsraum aus linearen Funktionen noch durch sogenannte Bubbel-Funktionen angereichert wird, welche auf dem Rand des Elements verschwinden, d.h.

$$\mathcal{P}_1^{\text{bubb}} = \mathcal{P}_1 \oplus span \prod_{i=1}^{d+1} \lambda_i$$

wobei $\lambda_i$ den linearen Ansatzfunktionen oder auch baryzentrischen Koordinaten entsprechen. Eine weitere Möglichkeit die LBB-Bedingung zu erfüllen ist die Verwendung nichtkonformer Elemente, das heißt von Ansatzfunktionen mit Polynomgrad 1 oder größer im Element, die aber trotzdem über die Kanten nicht stetig sind. Ein Beispiel dafür ist das Crouzeix-Raviart-Element, welches auf Dreiecksnetzen stückweise konstanten Druck und stückweise lineare Verschiebungen besitzt, wobei die Verschiebungsknoten sich aber in den Seitenmitten befinden und somit ein global unstetiges Verschiebungsfeld erzeugt wird.
Für die im weiteren durchgeführten Rechnungen wurde immer das Taylor-Hood-Element bzw. dessen Serendipity-Variante bei Viereckselementen verwendet, die ursprünglich auch getestete Variante quadratische Verschiebung und konstanter Druck wurde verworfen aufgrund schlechterer Approximation des Druckes und außerdem schwierigerer rechentechnischer Handhabung bei nur vernachlässigbarer Speicherbedarfsreduktion, da die Druckfunktionswerte in diesem Falle extra dem Element und nicht wie üblich den Knoten zugeordnet werden müssen.

### 3.2.2 Elemente für piezoelektrische Materialien

Aufgrund der ähnlichen Struktur der Variationsformulierung sowie des Gleichungssystems stellt sich die Frage, ob bei der FEM für Piezoprobleme ebenfalls eine LBB-artige Bedin-

gung an die Elemente gefordert werden muß. Dies erweist sich allerdings nicht als notwendig, weil aufgrund von Lemma 2.1 schon die strenge Elliptizität der Bilinearformen $c(.,.)$ in $\mathbb{V}_0$ und $k(.,.)$ in $\mathbb{M}_0$ die Existenz einer eindeutigen Lösung sichert und diese Voraussetzungen erst recht bei Einschränkungen auf Teilräume $V_{0h} \subset \mathbb{V}_0$ sowie $\mathbb{M}_{0h} \subset \mathbb{M}_0$ erhalten bleiben. Da hier auch die zugehörigen Differentialoperatoren respektive die höchsten auftretenden Ableitungen von $u$ und $\varphi$ die gleiche Ordnung besitzen, ist hier die Wahl gleicher Polynomgrade in den Ansatzfunktionen eine kanonische Wahl. Die Verwendung von z.B. Taylor-Hood-Elementen würde hier eine schlechtere Approximation des elektrischen Feldes erwarten lassen, die Verwendung von $\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_0$ wäre hier sogar ganz unzulässig und würde auf ein singuläres System führen, da sämtliche $\nabla\varphi$ der Ansatzfunktionen in den Elementen verschwinden würden.
Für die zweidimensionalen FEM-Rechnungen wurden wahlweise lineare oder quadratische Ansatzfunktionen für beide Felder $u$ und $\varphi$ verwendet, d.h. $\mathcal{P}_1 - \mathcal{P}_1$ oder $\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_2$ bei Dreiecksvernetzung sowie $\mathcal{Q}_1 - \mathcal{Q}_1$ oder $\mathcal{Q}_2 - \mathcal{Q}_2$ (in diesem Fall wieder als Serendipity-Variante) bei Viereckvernetzung.

## 3.3 Adaptivität

### 3.3.1 Motivation einer adaptiven FEM

Adaptivität ist ein wichtiger Bestandteil vieler moderner Finite–Element–Anwendungen und weist einige bedeutende Vorteile auf. So ist es gegenüber der herkömmlichen Methode, ein feines Netz über das gesamte Gebiet vorzugeben, möglich, mit einer vergleichsweise groben Vernetzung zu beginnen und das Netz nur an den Stellen zu verfeinern wo dies eine signifikante Fehlerreduktion bringt. So ist es möglich, z.B. die Umgebung von Singularitäten, Randschichten etc. sehr fein aufzulösen, während der Rest des Gebietes mit relativ glatter Lösung schon durch eine gröbere Diskretisierung gut approximiert wird. Entsprechend ergibt sich gegenüber einer gleichmäßigen Vernetzung eine erhebliche Verringerung der Anzahl der Freiheitsgrade, verbunden mit Einsparung von Rechen- und Speicheraufwand. Nebenbei ermöglicht der Beginn mit einem Grobnetz, welches sich im Laufe der adaptiven Rechung verfeinert, auch den Einsatz effektiver hierarchischer Techniken für die Vorkonditionierung und Lösung.

### 3.3.2 Fehlerschätzung

Für eine sinnvolle adaptive Rechnung sind Informationen darüber notwendig, an welchen Stellen das Netz verfeinert (oder auch vergröbert) werden soll. Sind analytische Informationen über das Lösungsverhalten bekannt, wie etwa das Auftreten von Singularitäten an einspringenden Ecken, kann an den entsprechenden Stellen im Gebiet eine gezielte Verfeinerung z.B. in Form einer graduellen Netzanpassung vor der Rechnung erfolgen. Im allgemeinen Fall ist das Lösungsverhalten allerdings nicht oder nur ungenügend bekannt. Hier hilft die Verwendung von Fehlerschätzern oder Fehlerindikatoren, welche ein Maß für

die Abweichung der berechneten Näherungslösung von der exakten Lösung liefern.

Bei dem Begriff Fehlerschätzer unterscheidet man grundlegend zwischen a-priori und a-posteriori Fehlerabschätzung. Eine a-priori (im Voraus-) Fehlerschätzung liefert eine Abschätzung über den Fehler der FEM-Lösung $u_h$ gegenüber der exakten Lösung $u$, ohne $u_h$ selbst zu berechnen. Aufgrund des Lemmas von Cea hängt die Größe des Fehlers $\|u_h - u\|_V$ im wesentlichen davon ab, wie gut die exakte Lösung $u$ im Finite-Element-Raum $\mathbb{V}_h$ approximiert werden kann.

In die a-priori Abschätzung gehen die gegebenen Daten, das FE-Netz sowie die exakte Lösung ein. Aufgrund dessen eignet sich die a-priori Schätzung für analytische Betrachtungen, ist aber im allgemeinen Fall aufgrund der unbekannten exakten Lösung nicht für eine Nutzung zur adaptiven Netzanpassung geeignet.

Wir konzentrieren uns hier auf eine a-posteriori Fehlerschätzung. Diese zielt darauf ab, den Fehler $u_h - u$ gegen eine lokalisierbare, berechenbare Größe abzuschätzen, welche nur von Daten, Netz und FEM-Lösung abhängt. In den letzten Jahrzehnten fand eine umfangreiche Entwicklung von a-posteriori-Fehlerschätzmethoden statt, so existieren verschiedene Klassen von Fehlerschätzern welche in relativ breiten Problemklassen Anwendung finden. Eine Übersicht findet man z.B. in den Büchern von Ainsworth/Oden [1] und Verfürth [70].

Gebräuchlich für elliptische Probleme wie Potentialprobleme oder lineare Elastizität sind Fehlerschätzer vom Residuumtyp, für deren Konstruktion ein 1978 erschienener Artikel von Babuška und Rheinboldt [6] als Ausgangspunkt angesehen wird. Residuale Fehlerschätzer werten die zur Differentialgleichung $Lu = f$ gehörigen Residuen

$$r_T = L(u - u_h)|_T = (f - L(u_h))|_T$$

auf den Elementen $T$ sowie Sprünge von $\nabla u_h \cdot \mathfrak{n}$ oder $\sigma \cdot \mathfrak{n}$ über die Elementkanten $s_j$ aus, um die Fehlerverteilung im Netz zu lokalisieren. In [15] sowie für anisotrope Elemente in [35] wurde gezeigt, daß dabei die Betrachtung der Kantensprünge die Fehlerschätzung dominiert. Damit ist es möglich, unter Weglassen der Elementresiduen einen auf Kantensprüngen basierenden Residuenfehlerschätzer zu benutzen.

Ein weiterer Ansatz zur Fehlerschätzung ist die Lösung lokaler Dirichlet- oder Neumannprobleme. Man unterteilt dabei das Gebiet in kleine Teile (Patches) aus wenigen Elementen und benutzt die errechnete Näherungslösung auf den inneren Rändern als Dirichlet- oder Neumann-Randbedingungen. Die bei der Lösung der Teilprobleme (diese ist relativ exakt möglich, da kleindimensional) auftretenden Abweichungen zur approximativen Gesamtlösung sind hier Indikator für den Fehler der FEM-Rechnung sowie dessen Verteilung im Gebiet.

Eine dritte Strategie zur Fehlerschätzung basiert auf Gradientenmittelung, oft auch als Zienciewicz/Zhu-Typ Fehlerschätzer bezeichnet (vergleiche [75]). Idee ist hier eine stetige Approximation der Gradienten über die Elementränder hinweg und Vergleich der daraus gebildeten Interpolation mit der FEM-Näherungslösung.

**Fehlerschätzer für piezoelektrische Probleme**

Für piezoelektrische Probleme benutzen wir einen Fehlerschätzer vom Residuumtyp, welcher als Erweiterung eines residualen Fehlerschätzers für linear-elastische Probleme verstanden werden kann, der sich auf die Auswertung der Sprünge von $\sigma \cdot \mathfrak{n}$ über die Elementkanten sowie Abgleich der entsprechenden Werte an den Neumannrändern beschränkt. Dazu definieren wir für eine Kante $E$ mit dem Einheitsnormalenvektor $\mathfrak{n}$ den Sprung einer Funktion $v$ über $E$ an einer Stelle $x \in E$ durch

$$[\![v(x)]\!]_{s_j} = \lim_{h \to +0} (v(x + h\mathfrak{n}) - v(x - h\mathfrak{n}))\,. \tag{3.6}$$

Das Vorzeichen des Sprungterms hängt davon ab in welche Richtung der Normalenvektor $\mathfrak{n}$ zeigt, ist allerdings für die weitere Berechnung unerheblich. Folgendes Schema wird zur Fehlerschätzung genutzt:

- berechne Näherungslösung $(u_h, \varphi_h)$ auf $\Omega = \bigcup_{i=1}^{N_{\text{el}}} T_i$
- erzeuge aus Lösung „Sekundärfelder“ $\varepsilon_h$, $E_h$, $\sigma_h$, $D_h$ an den Elementgrenzen $\partial T_i$ in jedem Element
- Berechne dabei die Sprünge von $\sigma \cdot \mathfrak{n}$ sowie $D \cdot \mathfrak{n}$ über die Elementgrenzen und führe auf jeder Kante $s_j$ eine vektorielle und eine skalare Fehlergröße wie folgt ein:

$$R_{j,\sigma} = \begin{cases} [\![\sigma(u_h, \varphi_h) \cdot \mathfrak{n}]\!]_{s_j} & s_j \text{ innere Kante} \\ \bar{T} - \sigma(u_h, \varphi_h) \cdot \mathfrak{n} & s_j \subset \Gamma_{N,u} \\ 0 & s_j \subset \Gamma_{D,u}\,. \end{cases} \tag{3.7}$$

$$R_{j,D} = \begin{cases} [\![D(u_h, \varphi_h) \cdot \mathfrak{n}]\!]_{s_j} & s_j \text{ innere Kante} \\ \bar{\omega_s} + D(u_h, \varphi_h) \cdot \mathfrak{n} & s_j \subset \Gamma_{N,\varphi} \\ 0 & s_j \subset \Gamma_{D,\varphi}\,. \end{cases} \tag{3.8}$$

- Definiere für jede Kante Fehlerfunktionale vermöge

$$\eta_{j,\sigma}^2 = \text{meas}(s_j) \int_{s_j} \|R_{j,\sigma}\|^2 \, ds\,, \quad \eta_{j,D}^2 = \text{meas}(s_j) \int_{s_j} R_{j,D}^2 \, ds \tag{3.9}$$

  und bilde die Maximalwerte

$$\eta_{\max,*} = \max_j \eta_{j,*}\,. \tag{3.10}$$

- Vergleiche nun für jede Kante $s_j$ die Werte $\eta_{j,*}$ mit den Maximalwerten und markiere $s_j$ zur

$$\begin{aligned} &\text{– Verfeinerung,} && \text{falls } \tfrac{\eta_{i,\sigma}}{\eta_{\max,\sigma}} && \textbf{oder} && \tfrac{\eta_{i,D}}{\eta_{\max,D}} && \text{groß}\,, \\ &\text{– Vergröberung,} && \text{falls } \tfrac{\eta_{i,\sigma}}{\eta_{\max,\sigma}} && \textbf{und} && \tfrac{\eta_{i,D}}{\eta_{\max,D}} && \text{klein}\,. \end{aligned} \tag{3.11}$$

  Die Entscheidung was unter „groß“ bzw. „klein“ zu verstehen ist, kann durch entsprechende Parameter als Prozentsätze des Maximalwertes festgelegt werden.

Diese Strategie der lokalen Fehlerabschätzung soll eine etwa gleichmäßige Konvergenz der Verschiebungs- und elektrischen Felder sichern, gegenüber einer Beschränkung der Fehlerbetrachtung auf die „mechanischen Anteile“ $\eta_{i,\sigma}$. Denkbar wäre auch, für jede Kante eine gewichtete Summe $\eta_i = \alpha_1\eta_{i,\sigma} + \alpha_2\eta_{i,D}$ zu benutzen, allerdings erfordert diese Variante die Wahl einer geeigneten Wichtung, um weder mechanische noch elektrische Größen zu bevorzugen.

**Zur Herleitung des Fehlerschätzers für das lineare Piezoproblem**

Definiere für $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} u \\ \varphi \end{pmatrix} \in \mathbb{V} \times \mathbb{M}$ eine $H^1$-Norm gemäß

$$\| x\|^2_{1,\Omega} = \|u\|^2_{1,\Omega} + \|\varphi\|^2_{1,\Omega}$$

als einen Spezialfall von (2.39). Weiterhin schreiben wir für den Fehler

$$e = \begin{pmatrix} e_u \\ e_\varphi \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} u - u_h \\ \varphi - \varphi_h \end{pmatrix} . \tag{3.12}$$

und definieren aus den Differentialgleichungen (2.28),(2.29) die klassischen Residuen

$$r_u(u_h, \varphi_h) = \vec{f} + \operatorname{div} \sigma(u_h, \varphi_h) , \quad r_\varphi(u_h, \varphi_h) = \omega_v - \operatorname{div} D(u_h, \varphi_h) . \tag{3.13}$$

Aus (2.34) und (3.1) folgt durch subtrahieren die auch als Galerkin-Orthogonalität des Fehlers bezeichnete Beziehung:

$$\begin{array}{rcll} c(e_u, v_h) + b(e_\varphi, v_h) & = & 0 & \forall\, v_h \in \mathbb{V}_{0h} \subset \mathbb{V}_0 , \\ b(\psi_h, e_u) - k(e_\varphi, \psi_h) & = & 0 & \forall\, \psi_h \in \mathbb{M}_{0h} \subset \mathbb{M}_0 . \end{array} \tag{3.14}$$

Unter Beachtung der Elliptizität von $c(.,.)$ und $k(.,.)$ gemäß (2.38) existiert nun eine Konstante $\underline{c} \geq \min(\alpha_c, \alpha_k) > 0$ mit

$$\hat{J}(e) := c(e_u, e_u) + k(e_\varphi, e_\varphi) \geq \alpha_c \|e_u\|^2_{1,\Omega} + \alpha_k \|e_\varphi\|^2_{1,\Omega} \geq \underline{c} \|e\|^2_{1,\Omega} . \tag{3.15}$$

Wir definieren zur Bilinearform

$$c(u, v) = \int_\Omega \varepsilon(v) : C : \varepsilon(u)\, dx$$

eine abgewandelte Variante gemäß

$$\tilde{c}(u, v) := \int_\Omega (\nabla v)^T : C : \nabla u\, dx \tag{3.16}$$

wobei diese in der $H^1$-Seminorm elliptisch ist gemäß

$$\tilde{c}(u, u) \geq \int_\Omega c_{\min} (\nabla u)^T : \mathfrak{I} : \nabla u\, dx \quad = c_{\min} |u|^2_{1,\Omega} \text{ bei konstantem Material}$$

mit $\mathfrak{I}$ als Einheitstensor und $c_{\min}$ als kleinstem Eigenwert des positiv definiten Tensors $C$. Analog gilt

$$k(\varphi,\varphi) \geq \kappa_{\min}|\varphi|^2_{1,\Omega}$$

mit entsprechend $\kappa_{\min}$ als kleinstem Eigenwert der Materialmatrix $K$. Wir führen nun ein Fehlerfunktional $J(e)$ ein, welches als Zähler $\hat{J}(e)$ besitzt:

$$J(e) := \frac{c(e_u,e_u)+k(e_\varphi,e_\varphi)}{\sqrt{\tilde{c}(e_u,e_u)+k(e_\varphi,e_\varphi)}}\,. \tag{3.17}$$

Nun schätzen wir den Zähler ab:

$$\begin{aligned}
\hat{J}(e) &= c(e_u,e_u)+b(e_\varphi,e_u)-b(e_\varphi,e_u)+k(e_\varphi,e_\varphi)\\
&\overset{(3.14)}{=} c(e_u,e_u+v_h)+b(e_\varphi,e_u+v_h)-b(e_\varphi+\psi_h,e_u)+k(e_\varphi,e_\varphi+\psi_h)\\
&\qquad\qquad \forall \begin{pmatrix} v_h \\ \psi_h \end{pmatrix} \in \mathbb{V}_{0h}\times\mathbb{M}_{0h}\\
&\overset{(3.12),(2.34)}{=} F(\tilde{v})-c(u_h,\tilde{v})-b(\varphi_h,\tilde{v})+G(\tilde{\psi})+b(\tilde{\psi},u_h)-k(\varphi_h,\tilde{\psi})
\end{aligned}$$

wobei

$$\tilde{v} = e_u + v_h\,, \quad \tilde{\psi} = e_\varphi + \psi_h. \tag{3.18}$$

Zur weiteren Abschätzung setzen wir die Definitionen der Bilinear- und Linearformen ein:

$$\begin{aligned}
\hat{J}(e) &= \int_\Omega \vec{f}\cdot\tilde{v}\,dx + \int_{\Gamma_{N,u}} \overline{T}\cdot\tilde{v}\,ds - \int_\Omega \left(\varepsilon(\tilde{v}) : C : \varepsilon(u_h) + \varepsilon(\tilde{v}) : B\cdot\nabla\varphi_h\right) dx\\
&\quad + \int_\Omega \omega_v\tilde{\psi}\,dx + \int_{\Gamma_{N,\varphi}} \overline{\omega}_s\tilde{\psi}\,ds + \int_\Omega \left(\varepsilon(u_h) : B\cdot\nabla\tilde{\psi} - \nabla\varphi_h\cdot K\cdot\nabla\tilde{\psi}\right) dx\\
&= \sum_T \left( \int_T \vec{f}\cdot\tilde{v}\,dx + \int_{\partial T\cap\Gamma_{N,u}} \overline{T}\cdot\tilde{v}\,ds - \int_T \varepsilon(\tilde{v}) : \sigma(u_h,\varphi_h)dx \right.\\
&\quad \left. + \int_T \omega_v\tilde{\psi}\,dx + \int_{\partial T\cap\Gamma_{N,\varphi}} \overline{\omega}_s\tilde{\psi}\,ds + \int_T D(u_h,\varphi_h)\cdot\nabla\tilde{\psi}dx \right)\\
&= \sum_T \left( \int_T \vec{f}\cdot\tilde{v}\,dx + \int_{\partial T\cap\Gamma_{N,u}} \overline{T}\cdot\tilde{v}\,ds - \int_{\partial T} \mathfrak{n}\cdot\sigma(u_h,\varphi_h)\cdot\tilde{v}\,ds + \int_T \operatorname{div}\sigma(u_h,\varphi_h)\cdot\tilde{v}\,dx \right.\\
&\quad \left. + \int_T \omega_v\tilde{\psi}\,dx + \int_{\partial T\cap\Gamma_{N,\varphi}} \overline{\omega}_s\tilde{\psi}\,ds + \int_{\partial T} \mathfrak{n}\cdot D(u_h,\varphi_h)\,\tilde{\psi}\,ds - \int_T \operatorname{div} D(u_h,\varphi_h)\,\tilde{\psi}\,dx \right)\\
&= \sum_T \left[ \int_T r_u(u_h,\varphi_h)\cdot\tilde{v}\,dx + \int_T r_\varphi(u_h,\varphi_h)\tilde{\psi}\,dx + \sum_{s_j\in\partial T} \left( \int_{s_j} \hat{R}_{j,\sigma}\cdot\tilde{v}\,ds + \int_{s_j} \hat{R}_{j,D}\,\tilde{\psi}\,ds \right) \right],
\end{aligned}$$

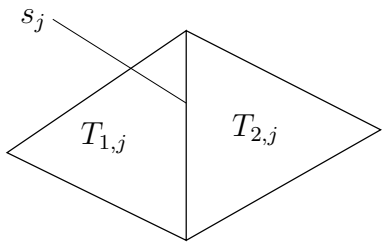



Abbildung 3.2: Veranschaulichung von $T_{1,j}$ und $T_{2,j}$.

wobei $r_u, r_\varphi$ gemäß (3.13) definiert sind sowie $\hat{R}_{j,\sigma}, \hat{R}_{j,D}$ in leichter Abwandlung zu (3.7),(3.8) als

$$\hat{R}_{j,\sigma} = \begin{cases} \frac{1}{2}[\![\sigma(u_h,\varphi_h)\cdot\mathfrak{n}]\!]_{s_j} & s_j \text{ innere Kante} \\ \bar{T} - \sigma(u_h,\varphi_h)\cdot\mathfrak{n} & s_j \in \Gamma_{N,u} \\ 0 & s_j \in \Gamma_{D,u}\,. \end{cases} \tag{3.19}$$

$$\hat{R}_{j,D} = \begin{cases} \frac{1}{2}[\![D(u_h,\varphi_h)\cdot\mathfrak{n}]\!]_{s_j} & s_j \text{ innere Kante} \\ \bar{\omega}_s + D(u_h,\varphi_h)\cdot\mathfrak{n} & s_j \in \Gamma_{N,\varphi} \\ 0 & s_j \in \Gamma_{D,\varphi}\,. \end{cases} \tag{3.20}$$

Dabei wird in der Summation jede innere Kante $s_j$ einmal über das Element $T_{1,j}$ auf der einen Seite und einmal über das Element $T_{2,j}$ auf der anderen Seite durchlaufen (vgl. Abb. 3.2), woraus sich wegen des umgekehrten Vorzeichens des Außennormalenvektors der Kantensprung von $\sigma\cdot\mathfrak{n}$ bzw. $D\cdot\mathfrak{n}$ ergibt. Damit dieser aber in der Gesamtsumme nicht verdoppelt vorkommt, wird jeder Kante die Hälfte zugeschlagen.
Die verschwindenden $\hat{R}_{j,*}$ auf den Dirichleträndern werden dadurch gerechtfertigt, daß die entsprechenden Funktionen $\tilde{v}$ sowie $\tilde{\psi}$ so gewählt werden, daß sie auf dem jeweiligen Dirichletrand verschwinden. Da die Funktionen $v_h \in \mathbb{V}_h$ und $\psi_h \in \mathbb{M}_h$ zur Bildung von $\tilde{v}$ bzw. $\tilde{\psi}$ beliebig gewählt werden können, setzen wir mit Interpolationsoperatoren $\mathrm{I}_h$ an:

$$\tilde{v} = e_u - \mathrm{I}_h\, e_u\,, \quad \tilde{\psi} = e_\varphi - \mathrm{I}_h\, e_\varphi\,.$$

Nun setzen wir obige Gleichungskette fort und schätzen mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung (siehe z.B. [13]) ab:

$$\begin{aligned} \hat{J}(e) &= \sum_T \left[ \langle r_u(u_h,\varphi_h),\tilde{v}\rangle_{0,T} + \langle r_\varphi(u_h,\varphi_h),\tilde{\psi}\rangle_{0,T} + \sum_{s_j\in\partial T} \left( \langle \hat{R}_{j,\sigma},\tilde{v}\rangle_{0,s_j} + \langle \hat{R}_{j,D},\tilde{\psi}\rangle_{0,s_j} \right) \right] \\ &\le \sum_T \left( \|r_u(u_h,\varphi_h)\|_{0,T}\|\tilde{v}\|_{0,T} + \|r_\varphi(u_h,\varphi_h)\|_{0,T}\|\tilde{\psi}\|_{0,T} \right) \\ &\quad + \sum_T \sum_{s_j\in\partial T} \left( \|\hat{R}_{j,\sigma}\|_{0,s_j}\|\tilde{v}\|_{0,s_j} + \|\hat{R}_{j,D}\|_{0,s_j}\|\tilde{\psi}\|_{0,s_j} \right)\,. \end{aligned}$$

Weiter nutzen wir eine bekannte Interpolationsfehlerabschätzung aus [68], welche besagt daß ein oben eingeführter Interpolationsoperator existiert, so daß für alle $e \in \mathbb{V} \times \mathbb{M}$ gezeigt werden kann

$$\begin{aligned}
\|\tilde{v}\|_{0,T} &= \|e_u - \mathrm{I}_h\, e_u\|_{0,T} \leq C h_T |e_u|_{1,\Delta(T)}\,, \\
\|\tilde{\psi}\|_{0,T} &= \|e_\varphi - \mathrm{I}_h\, e_\varphi\|_{0,T} \leq C h_T |e_\varphi|_{1,\Delta(T)}\,, \\
\|\tilde{v}\|_{0,s_j} &= \|e_u - \mathrm{I}_h\, e_u\|_{0,s_j} \leq C \sqrt{h_{s_j}} |e_u|_{1,\Delta(s_j)}\,, \\
\|\tilde{\psi}\|_{0,s_j} &= \|e_\varphi - \mathrm{I}_h\, e_\varphi\|_{0,s_j} \leq C \sqrt{h_{s_j}} |e_\varphi|_{1,\Delta(s_j)}\,.
\end{aligned}$$

Dabei sind $\Delta(T)$ und $\Delta(s_j)$ Teilgebiete von $\Omega$ bestehend aus den Mengen derjenigen Elemente, die mit dem Element $T$ bzw. der Kante $s_j$ einen nichtleeren Durchschnitt besitzen (bildliche Darstellung in [68]), $C$ ist eine nur von der Vernetzung abhängige Konstante. Die Abschätzung von oben läßt sich also fortführen (die Argumente der Residuen $r_u$ und $r_\varphi$ werden im Folgenden der Einfachheit halber weggelassen):

$$\begin{aligned}
\hat{J}(e) &\leq C \sum_T h_T \left( \|r_u\|_{0,T} |e_u|_{1,\Delta(T)} + \|r_\varphi\|_{0,T} |e_\varphi|_{1,\Delta(T)} \right) \\
&\quad + C \sum_T \sum_{s_j \in \partial T} \sqrt{h_{s_j}} \left( \|\hat{R}_{j,\sigma}\|_{0,s_j} |e_u|_{1,\Delta(s_j)} + \|\hat{R}_{j,D}\|_{0,s_j} |e_\varphi|_{1,\Delta(s_j)} \right) \\
&= C \sum_T h_T \left( \|r_u\|_{0,T} |e_u|_{1,\Delta(T)} + \|r_\varphi\|_{0,T} |e_\varphi|_{1,\Delta(T)} \right) \\
&\quad + C \sum_{s_j \in \mathcal{S}} \sqrt{h_{s_j}} \left( \|R_{j,\sigma}\|_{0,s_j} |e_u|_{1,\Delta(s_j)} + \|R_{j,D}\|_{0,s_j} |e_\varphi|_{1,\Delta(s_j)} \right) \\
&\leq C \left( \sqrt{\sum_T h_T^2 \|r_u\|_{0,T}^2} \sqrt{\sum_T |e_u|_{1,\Delta(T)}^2} + \sqrt{\sum_{s_j \in \mathcal{S}} h_{s_j} \|R_{j,\sigma}\|_{0,s_j}^2} \sqrt{\sum_{s_j \in \mathcal{S}} |e_u|_{1,\Delta(s_j)}^2} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{\sum_T h_T^2 \|r_\varphi\|_{0,T}^2} \sqrt{\sum_T |e_\varphi|_{1,\Delta(T)}^2} + \sqrt{\sum_{s_j \in \mathcal{S}} h_{s_j} \|R_{j,D}\|_{0,s_j}^2} \sqrt{\sum_{s_j \in \mathcal{S}} |e_\varphi|_{1,\Delta(s_j)}^2} \right) \\
&\leq \tilde{C} \left( \sqrt{\sum_T h_T^2 \|r_u\|_{0,T}^2} \sqrt{\sum_T |e_u|_{1,T}^2} + \sqrt{\sum_{s_j \in \mathcal{S}} h_{s_j} \|R_{j,\sigma}\|_{0,s_j}^2} \sqrt{\sum_T |e_u|_{1,T}^2} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{\sum_T h_T^2 \|r_\varphi\|_{0,T}^2} \sqrt{\sum_T |e_\varphi|_{1,T}^2} + \sqrt{\sum_{s_j \in \mathcal{S}} h_{s_j} \|R_{j,D}\|_{0,s_j}^2} \sqrt{\sum_T |e_\varphi|_{1,T}^2} \right).
\end{aligned}$$

Dabei bezeichnet $\mathcal{S}$ die Menge aller Kanten $s_j$ im Finite-Element-Netz. Die letzte Ungleichung folgt dadurch, daß jedes Element $T$ bei regulärer (insbesondere isotroper) Vernetzung nur in beschränkt vielen Mengen $\Delta(T)$ bzw. $\Delta(s_j)$ enthalten ist und somit bei der Summation vorkommt, die Gesamtsumme vergrößert sich also höchstens um einen konstanten

Faktor. Damit kann man schließlich unter Berücksichtigung der Definition der Normquadrate $|.|_{1,\Omega}$ als Summen über die Normquadrate $|.|_{1,T}$ weiterschätzen:

$$\begin{aligned}
\hat{J}(e) &\leq \tilde{C}\left(\sqrt{\sum_T h_T^2\|r_u\|_{0,T}^2}+\sqrt{\sum_{s_j} h_{s_j}\|R_{j,\sigma}\|_{0,s_j}^2}\right)|e_u|_{1,\Omega} \\
&\quad +\tilde{C}\left(\sqrt{\sum_T h_T^2\|r_\varphi\|_{0,T}^2}+\sqrt{\sum_{s_j} h_{s_j}\|R_{j,D}\|_{0,s_j}^2}\right)|e_\varphi|_{1,\Omega} \\
&\leq \tilde{C}\left(\sqrt{\sum_T h_T^2\|r_u\|_{0,T}^2}+\sqrt{\sum_{s_j} h_{s_j}\|R_{j,\sigma}\|_{0,s_j}^2}\right)\frac{1}{\sqrt{c_{\min}}}\sqrt{\tilde{c}(e_u,e_u)} \\
&\quad +\tilde{C}\left(\sqrt{\sum_T h_T^2\|r_\varphi\|_{0,T}^2}+\sqrt{\sum_{s_j} h_{s_j}\|R_{j,D}\|_{0,s_j}^2}\right)\frac{1}{\sqrt{\kappa_{\min}}}\sqrt{k(e_\varphi,e_\varphi)} \\
&\leq C_c\left(\sqrt{\sum_T h_T^2\|r_u\|_{0,T}^2}+\sqrt{\sum_{s_j} h_{s_j}\|R_{j,\sigma}\|_{0,s_j}^2}\right)\sqrt{\tilde{c}(e_u,e_u)+k(e_\varphi,e_\varphi)} \\
&\quad +C_k\left(\sqrt{\sum_T h_T^2\|r_\varphi\|_{0,T}^2}+\sqrt{\sum_{s_j} h_{s_j}\|R_{j,D}\|_{0,s_j}^2}\right)\sqrt{\tilde{c}(e_u,e_u)+k(e_\varphi,e_\varphi)}
\end{aligned}$$

Hieraus folgt schließlich

$$J(e)\leq C_c\left(\sqrt{\sum_T h_T^2\|r_u\|_{0,T}^2}+\sqrt{\sum_{s_j} h_{s_j}\|R_{j,\sigma}\|_{0,s_j}^2}\right)+C_k\left(\sqrt{\sum_T h_T^2\|r_\varphi\|_{0,T}^2}+\sqrt{\sum_{s_j} h_{s_j}\|R_{j,D}\|_{0,s_j}^2}\right),$$

was einem element- bzw. kantenweise und ausschließlich aus der FEM-Lösung sowie den gegebenen Daten bestimmbaren Fehlerschätzer entspricht.
Aufgrund der von Verfürth et. al. gezeigten Dominanz der Kantensprunganteile kann man die Elementresiduen noch wegschätzen und erhält unter Nutzung der Beziehung

$$\sqrt{a}+\sqrt{b}\leq\sqrt{2}\sqrt{a+b}$$

(folgt sofort durch Quadrieren und Beachtung von $(\sqrt{a}-\sqrt{b})^2\geq 0$) mit neuen Konstanten:

$$J^2(e)\leq c_1\sum_{s_j} h_{s_j}\left(\|R_{j,\sigma}\|_{0,s_j}^2+\frac{C_k^2}{C_c^2}\|R_{j,D}\|_{0,s_j}^2\right)=:c_1\sum_{s_j}\left(\eta_{j,\sigma}^2+c_2\eta_{j,D}^2\right).$$

Dabei sind die Fehlerfunktionale $\eta_{j,*}$ gemäß (3.9) sowie $h_{s_j}=\mathrm{meas}(s_j)$ definiert.
Durch die Gewichtung der Anteile hat man hier auch die je nach Einheitenwahl oft stark verschiedenen Größenordnungen der Materialparameter mit berücksichtigt. Da es aber bei

verschiedenen Materialien schon problematischer ist, Kanten an Materialgrenzen sinnvolle Werte zuzuordnen, außerdem im Zusammenhang zwischen Fehlerfunktional $J(e)$ und dem $H^1$-Fehler von $e$ noch die KORNsche Ungleichung steckt, sichert man die Verringerung beider Fehleranteile leichter durch die in (3.11) angegebenen logischen Verknüpfungen. Wenn beide Fehleranteile um einen bestimmten Prozentsatz fallen, dann unabhängig von der Gewichtung auf jeden Fall auch der Gesamtfehler. Um zum Zwecke von Vergleichsbetrachtungen den Effekt der Gewichtung auszublenden, definieren wir hier noch zusätzlich mittels Aufspaltung in beide Fehlerkomponenten Teilfunktionale:

$$J_\sigma^2 = \sum_{s_j} \eta_{j,\sigma}^2 \,, \quad J_D^2 = \sum_{s_j} \eta_{j,D}^2 \,.$$

**Fehlerschätzer für inkompressible Elastizität**

Hier wird ebenfalls ein Residuumfehlerschätzer benutzt, allerdings beschränkt sich hier die Auswertung auf die Kantensprünge von $\sigma \cdot \mathfrak{n}$, wobei auch der hydrostatische Druck über die Bildung von $\sigma$ gemäß Gleichung (2.18) mit einfließt. Man definiert also für jede Kante $s_j$ unter Beachtung von (3.6) eine Fehlergröße

$$R_j = \begin{cases} [\![\sigma(u_h, p_h) \cdot \mathfrak{n}]\!]_{s_j} & s_j \text{ innere Kante} \\ \sigma(u_h, p_h) \cdot \mathfrak{n} - \vec{g}_2 & s_j \subset \Gamma_N \\ 0 & s_j \subset \Gamma_D \,. \end{cases} \tag{3.21}$$

und bildet daraus das Fehlerfunktional

$$\eta_j^2 = \operatorname{meas}(s_j) \int_{s_j} \|R_j\|^2 \, ds \,. \tag{3.22}$$

Mithilfe des gemäß (3.10) ermittelten Maximalwertes markiert man nun $s_j$ zur

$$\left\{ \begin{array}{c} \text{Verfeinerung} \\ \text{Vergröberung} \end{array} \right\} \quad \text{falls} \quad \frac{\eta_j}{\eta_{\max}} \left\{ \begin{array}{c} \text{groß} \\ \text{klein} \end{array} \right\} \text{ ist.}$$

## 3.4 Rotationssymmetrie bei piezoelektrischen Aufgaben

Zweidimensionale Probleme lassen sich mit der FEM erheblich einfacher, bei gleicher Genauigkeit auch mit drastisch geringerem Speicher- und Rechenaufwand lösen als dreidimensionale Probleme. Da der Raum um uns herum nun aber einmal dreidimensional ist, stellen sich die meisten Probleme aus der Praxis auch in 3 Dimensionen. Rotationssymmetrie stellt hierbei einen Spezialfall dar, in dem sich bestimmte dreidimensionale Probleme auf eine Betrachtung im Zweidimensionalen zurückführen lassen. In diesem Abschnitt soll die numerische Lösung einer rotationssymmetrischen linear piezoelektrischen Aufgabe auf eine modifizierte Finite-Element-Rechnung im Zweidimensionalen zurückgeführt werden. Dabei werden Überlegungen aus einem vom Autor erstellten Preprint [62] aufgegriffen und erweitert.

### 3.4.1 Grundlagen

#### Zylinderkoordinaten

Zur Betrachtung rotationssymmetrischer Probleme ist es sinnvoll, Zylinderkoordinaten zu benutzen. Diese transformieren sich aus den kartesischen Koordinaten wie folgt:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2},\ \phi = \arctan \frac{y}{x}.$$

Umgekehrt gilt

$$x = r\cos\phi,\ y = r\sin\phi.$$

Die $z$-Koordinate bleibt bei der Transformation unberührt. Die Ableitungen transformieren sich folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial \phi} = \frac{x}{r}\frac{\partial f}{\partial r} - \frac{y}{r^2}\frac{\partial f}{\partial \phi} = \cos\phi\frac{\partial f}{\partial r} - \frac{\sin\phi}{r}\frac{\partial f}{\partial \phi}, \\ \frac{\partial f}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial \phi}{\partial y}\frac{\partial f}{\partial \phi} = \frac{y}{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{x}{r^2}\frac{\partial f}{\partial \phi} = \sin\phi\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\cos\phi}{r}\frac{\partial f}{\partial \phi}. \end{aligned} \tag{3.23}$$

#### Rotationssymmetrische Gebiete

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein 3D-Gebiet, welches Rotationssymmetrie bezüglich der $z$-Achse erfüllt. Dieses Gebiet läßt sich in Zylinderkoordinaten parametrisch darstellen als $\Omega = \omega \times [0, 2\pi]$, wobei $\omega$ der erzeugende Gebietsquerschnitt in $(r, z)$ ist. Zur Veranschaulichung siehe Abbildung 3.3. Sei beispielsweise $\Omega$ ein Zylinder vom Radius $R$ und $z \in [0, H]$. Dann gilt $\omega = [0, R] \times [0, H]$.

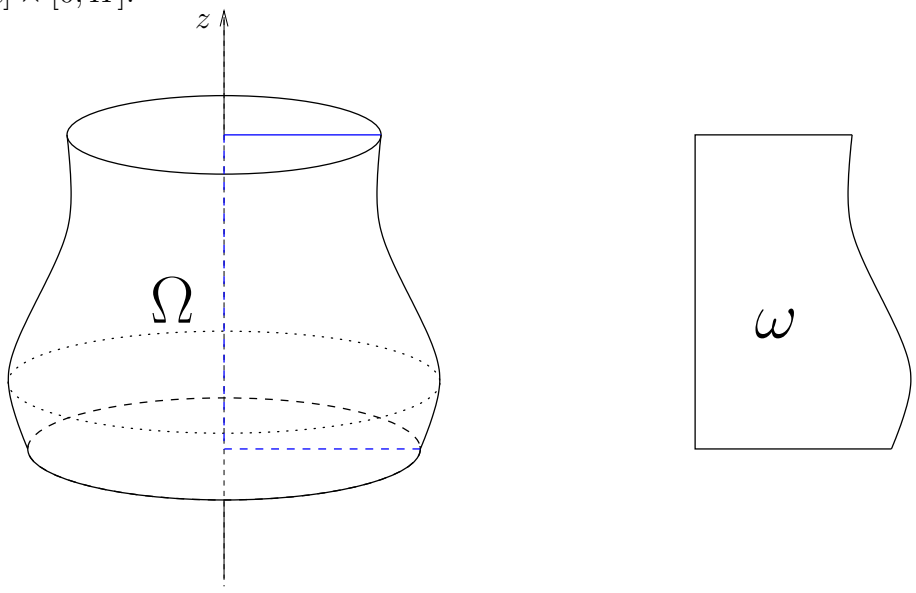



Abbildung 3.3: Ein rotationssymmetrisches Gebiet mit erzeugendem Querschnitt

### 3.4.2 Abgeleitete Größen bei Rotationssymmetrie

Wir betrachten Rotationssymmetrie in dem Sinne, daß die Verschiebung eines Punktes nur in radialer oder $z$-Richtung möglich ist, das bedeutet eine Drehung des Körpers um die Rotationsachse findet nicht statt. Fernerhin dürfen radiale und $z$-Verschiebung nicht vom Winkel $\phi$ abhängen. Für die Verschiebung $u$ gilt daher:

$$\begin{aligned} u_x &= u_r(r,z)\cos\phi\,, \\ u_y &= u_r(r,z)\sin\phi\,, \\ u_z &= u_z(r,z)\,. \end{aligned}$$

Die partiellen Ableitungen nach den kartesischen Koordinaten berechnen sich wie folgt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_x}{\partial x} &= \frac{\partial u_x}{\partial r}\cos\phi - \frac{\partial u_x}{\partial \phi}\frac{\sin\phi}{r} = \frac{\partial u_r}{\partial r}\cos^2\phi + \frac{u_r}{r}\sin^2\phi\,, \\ \frac{\partial u_y}{\partial y} &= \frac{\partial u_y}{\partial r}\sin\phi + \frac{\partial u_y}{\partial \phi}\frac{\cos\phi}{r} = \frac{\partial u_r}{\partial r}\sin^2\phi + \frac{u_r}{r}\cos^2\phi\,, \\ \frac{\partial u_z}{\partial z} &= \frac{\partial u_z}{\partial z}\,. \end{aligned}$$

Mit analogen Rechnungen erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_x}{\partial y} = \frac{\partial u_y}{\partial x} &= \left(\frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{u_r}{r}\right)\sin\phi\cos\phi\,, \\ \frac{\partial u_x}{\partial z} &= \frac{\partial u_r}{\partial z}\cos\phi\,, \\ \frac{\partial u_y}{\partial z} &= \frac{\partial u_r}{\partial z}\sin\phi\,, \\ \frac{\partial u_z}{\partial x} &= \frac{\partial u_z}{\partial r}\cos\phi\,, \\ \frac{\partial u_z}{\partial y} &= \frac{\partial u_z}{\partial r}\sin\phi\,. \end{aligned}$$

#### Rotationssymmetrischer Verzerrungstensor

Mit diesen Ableitungstransformationen ist es möglich, den dreidimensionalen Verzerrungstensor $\varepsilon(u)$ bzw. dessen Vektornotation wie folgt aufzuschreiben:

$$\underline{\varepsilon}(u) := \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{12} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_x}{\partial x} \\ \frac{\partial u_y}{\partial y} \\ \frac{\partial u_z}{\partial z} \\ \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \\ \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \\ \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r}\cos^2\phi + \frac{u_r}{r}\sin^2\phi \\ \frac{\partial u_r}{\partial r}\sin^2\phi + \frac{u_r}{r}\cos^2\phi \\ \frac{\partial u_z}{\partial z} \\ 2\left(\frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{u_r}{r}\right)\sin\phi\cos\phi \\ \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r}\right)\sin\phi \\ \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r}\right)\cos\phi \end{pmatrix} =: A_1(\phi)\hat{\underline{\varepsilon}}(u) \qquad (3.24)$$

mit

$$A_1(\phi) = \begin{pmatrix} \sin^2\phi & \cos^2\phi & 0 & 0 \\ \cos^2\phi & \sin^2\phi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -2\sin\phi\cos\phi & 2\sin\phi\cos\phi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sin\phi \\ 0 & 0 & 0 & \cos\phi \end{pmatrix}, \quad \hat{\underline{\varepsilon}}(u) := \begin{pmatrix} \frac{u_r}{r} \\ \frac{\partial u_r}{\partial r} \\ \frac{\partial u_z}{\partial z} \\ \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \end{pmatrix}.$$

**Rotationssymmetrischer Potentialgradient**

Das Potential $\varphi$ ist im rotationssymmetrischen Fall eine vom Winkel $\phi$ unabhängige skalare Funktion $\varphi(r, z)$, d.h. $\frac{\partial \varphi}{\partial \phi} = 0$. Der Gradient in kartesischen Koordinaten ergibt sich also zu

$$\nabla\varphi := \begin{pmatrix} \frac{\partial\varphi}{\partial x} \\ \frac{\partial\varphi}{\partial y} \\ \frac{\partial\varphi}{\partial z} \end{pmatrix} \overset{(3.23)}{=} \begin{pmatrix} \frac{\partial\varphi}{\partial r}\cos\phi \\ \frac{\partial\varphi}{\partial r}\sin\phi \\ \frac{\partial\varphi}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & 0 \\ \sin\phi & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial\varphi}{\partial r} \\ \frac{\partial\varphi}{\partial z} \end{pmatrix} =: A_2(\phi)\hat{\nabla}\varphi. \tag{3.25}$$

**Bemerkung 3.1** *Eine hübsche Eigenschaft der Matrizen $A_1(\phi)$ und $A_2(\phi)$ ist deren Spaltenorthogonalität, d.h. man kann leicht nachrechnen*

$$A_1^T(\phi)A_1(\phi) = I_4, \quad A_2^T(\phi)A_2(\phi) = I_2.$$

Um die rotationssymmetrischen Bilinearformen zu bilden, ist es noch notwendig die Polungsrichtung festzulegen. Soll diese im gesamten Gebiet echt konstant sein, bleibt bei Rotationssymmetrie nur die Rotationsachse $z$ übrig. Es existieren aber auch Anwendungen z.B. in Hohlzylindern bzw. Röhren, wo die Polung zwischen innerem und äußerem Rand, also in Radiusrichtung erfolgt. Aufgrund der Krümmung liegt in diesem Fall nur lokal transversalisotropes Verhalten vor. Im Folgenden wird zwischen axialer und radialer Polung unterschieden, vergleiche Abbildung 3.4.

### 3.4.3 Integranden für die Bilinearformen bei Polung in axialer Richtung

**Verkürzte Notation:** Im folgenden wird bei der Darstellung von Sinus- und Cosinustermen in Matrizen das Winkelargument teils weggelassen. Man denke sich in diesen Fällen

$$\cos := \cos\phi\,, \quad \sin := \sin\phi\,. \tag{3.26}$$

Die dreidimensionalen Materialtensoren in Matrix-Vektor-Notation sehen hier folgendermaßen aus:

$$\underline{\underline{C}}^{\mathrm{ax}} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} \end{pmatrix}, \; \underline{\underline{B}}^{\mathrm{ax}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & e_{13} \\ 0 & 0 & e_{13} \\ 0 & 0 & e_{33} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & e_{61} & 0 \\ e_{61} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \; \underline{\underline{K}}^{\mathrm{ax}} = \begin{pmatrix} \kappa_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_{33} \end{pmatrix}$$

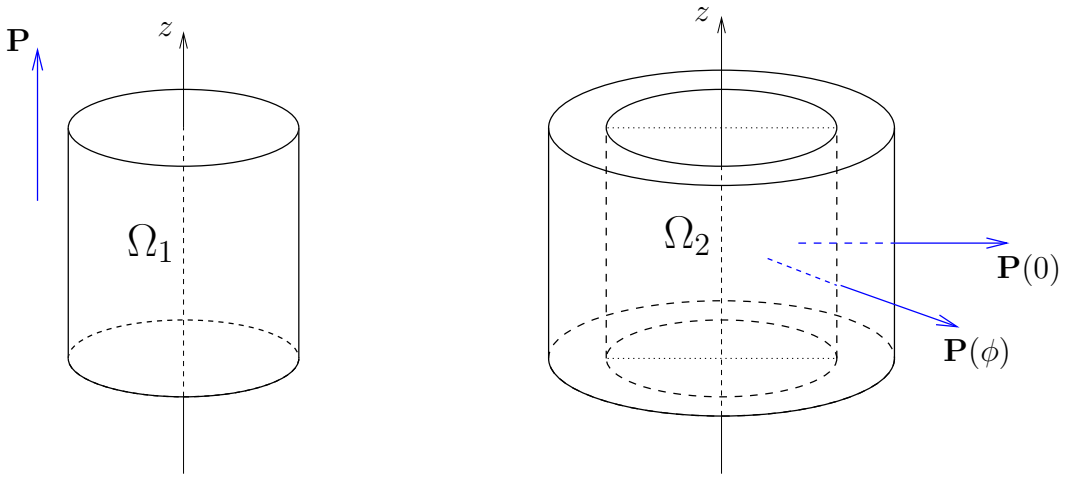



Abbildung 3.4: Zylinder mit axialer und Hohlzylinder mit radialer Polung

mit $c_{44} = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})$.

**Elastischer Teil** $c(u,v)$ Es gilt (mit $d\Omega = d(x,y,z)$):

$$c(u,v) = \int_\Omega \varepsilon(v) : C : \varepsilon(u) d\Omega = \int_\Omega (\underline{\varepsilon}(v))^T \underline{\underline{C}}^{\text{ax}} (\underline{\varepsilon}(u)) d\Omega.$$

Rotationssymmetrie angewendet auf den Integranden führt zu

$$(\underline{\varepsilon}(v))^T \underline{\underline{C}}^{\text{ax}} (\underline{\varepsilon}(u)) = (\hat{\underline{\varepsilon}}(v))^T A_1^T(\phi) \underline{\underline{C}}^{\text{ax}} A_1(\phi) \hat{\underline{\varepsilon}}(u) =: (\hat{\underline{\varepsilon}}(v))^T \hat{\underline{\underline{C}}}^{\text{ax}}(\phi) \hat{\underline{\varepsilon}}(u) \qquad \text{mit}$$

$\hat{\underline{\underline{C}}}^{\text{ax}}(\phi) = A_1^T(\phi) \underline{\underline{C}}^{\text{ax}} A_1(\phi)$

$$= \begin{pmatrix} \sin^2 & \cos^2 & 0 & 0 \\ \cos^2 & \sin^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -2\sin\cos & 2\sin\cos & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sin \\ 0 & 0 & 0 & \cos \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} c_{11}\sin^2 + c_{12}\cos^2 & c_{11}\cos^2 + c_{12}\sin^2 & c_{13} & 0 \\ c_{12}\sin^2 + c_{11}\cos^2 & c_{12}\cos^2 + c_{11}\sin^2 & c_{13} & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 \\ (c_{12} - c_{11})\sin\cos & (c_{11} - c_{12})\sin\cos & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{55}\sin \\ 0 & 0 & 0 & c_{55}\cos \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} c_{11}(\sin^4 + \cos^4 + 2\sin^2\cos^2) & c_{12}(\sin^4 + \cos^4 + 2\sin^2\cos^2) & c_{13} & 0 \\ c_{12}(\sin^4 + \cos^4 + 2\sin^2\cos^2) & c_{11}(\sin^4 + \cos^4 + 2\sin^2\cos^2) & c_{13} & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{55}(\sin^2 + \cos^2) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} c_{11} & \mathbf{c_{12}} & c_{13} & 0 \\ \mathbf{c_{12}} & c_{11} & c_{13} & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{55} \end{pmatrix}.$$

Das heißt, die transformierte Koeffizientenmatrix $\underline{\underline{\hat{C}}}^{\mathrm{ax}}$ enthält keine Abhängigkeiten mehr vom Winkel $\phi$ und besteht aus der zweidimensionalen Koeffizientenmatrix $\underline{\underline{C}}^{\mathrm{2D}}$ mit zusätzlicher erster Zeile und Spalte. Über die zweidimensionalen Koeffizienten hinaus wird noch zusätzlich $c_{12}$ benötigt. Es gilt

$$c(u,v) = \int_0^{2\pi} \int_\omega (\underline{\hat{\varepsilon}}(v))^T \underline{\underline{\hat{C}}}^{\mathrm{ax}} \underline{\hat{\varepsilon}}(u) \cdot r \, d(r,z) d\phi = 2\pi \int_\omega (\underline{\hat{\varepsilon}}(v))^T \underline{\underline{\hat{C}}}^{\mathrm{ax}} \underline{\hat{\varepsilon}}(u) \cdot r \, d(r,z).$$

**Integrand für piezoelektrische Kopplung** $b(\varphi, v)$

$$\begin{aligned}
(\underline{\varepsilon}(v))^T \underline{\underline{B}}^{\mathrm{ax}} \nabla\varphi &= (\underline{\hat{\varepsilon}}(v))^T A_1^T(\phi) \underline{\underline{B}}^{\mathrm{ax}} A_2(\phi) \hat{\nabla}\varphi =: (\underline{\hat{\varepsilon}}(v))^T \underline{\underline{\hat{B}}}^{\mathrm{ax}}(\phi) \hat{\nabla}\varphi \\
\underline{\underline{\hat{B}}}^{\mathrm{ax}}(\phi) &= A_1^T(\phi) \underline{\underline{B}}^{\mathrm{ax}} A_2(\phi) \\
&= \begin{pmatrix} \sin^2 & \cos^2 & 0 & 0 \\ \cos^2 & \sin^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -2\sin\cos & 2\sin\cos & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sin \\ 0 & 0 & 0 & \cos \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 0 & e_{13} \\ 0 & e_{13} \\ 0 & e_{33} \\ 0 & 0 \\ e_{61}\sin & 0 \\ e_{61}\cos & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e_{13} \\ 0 & e_{13} \\ 0 & e_{33} \\ e_{61} & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Somit ist auch $\underline{\underline{\hat{B}}}^{\mathrm{ax}}$ unabhängig vom Winkel $\phi$ und keine zusätzlichen Materialkonstanten werden benötigt. Die erste Zeile von $\underline{\underline{B}}^{\mathrm{2D}}$ wird lediglich verdoppelt.

**Integrand für dielektrischen Teil** $k(\varphi, \psi)$

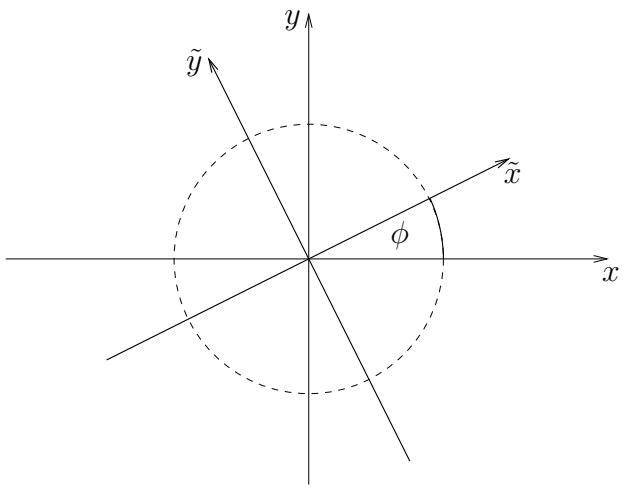
$$\begin{aligned}
(\nabla\psi)^T \underline{\underline{K}}^{\mathrm{ax}} \nabla\varphi &= (\hat{\nabla}\psi)^T A_2^T(\phi) \underline{\underline{K}}^{\mathrm{ax}} A_2(\phi) \hat{\nabla}\varphi =: (\hat{\nabla}\psi)^T \underline{\underline{\hat{K}}}^{\mathrm{ax}}(\phi) \hat{\nabla}\varphi \\
\underline{\underline{\hat{K}}}^{\mathrm{ax}}(\phi) &= A_2^T(\phi) \underline{\underline{K}}^{\mathrm{ax}} A_2(\phi) \\
&= \begin{pmatrix} \cos & \sin & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa_{11}\cos & 0 \\ \kappa_{11}\sin & 0 \\ 0 & \kappa_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa_{11} & 0 \\ 0 & \kappa_{33} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Daraus folgt, auch $\underline{\underline{\hat{K}}}^{\mathrm{ax}}$ ist unabhängig vom Winkel $\phi$ und entspricht dem zweidimensionalen $\underline{\underline{K}}^{\mathrm{2D}}$.
Zu beachten ist noch, daß bei der (numerischen) Integration jeweils die Funktionaldeterminante $r$ als zusätzlicher Faktor einfließt. Implementierungstechnisch wird diese z.B. einfach auf das Gaußgewicht aufmultipliziert.

### 3.4.4 Integranden für die Bilinearformen bei Polung in radialer Richtung

Auch bei radialer Polung sollen die Materialmatrizen wieder geeignet verkleinert werden, um verkürzte Verzerrungsvektoren und Potentialgradienten zu verwenden. Bevor aber ein

Vorgehen analog zur axialen Polung (Abschnitt 3.4.3) möglich ist, müssen die Materialmatrizen bezüglich der kartesischen Koordinaten bekannt sein. Diese sind offensichtlich vom Winkel $\phi$ abhängig, da sich die Polungsrichtung mit dem Winkel dreht. Durch Koordinatentransformation (Drehung des Koordinatensystems um $\phi$) läßt sich erreichen, daß die Polungsrichtung in Richtung der gedrehten Achse $\tilde{x}$ zeigt.




Die zum gedrehten Koordinatensystem gehörigen Materialmatrizen entstehen demnach durch Zeilen- und Spaltentausch aus den entsprechenden Matrizen für Polung in 3-Richtung, dabei sind die zu den 1- und 3- (respektive $x$- und $z$-) Komponenten von $\underline{\varepsilon}$ und $\nabla\varphi$ gehörenden Spalten und Zeilen zu tauschen. Das führt zu

$$\underline{\underline{\tilde{C}}}^{\mathrm{rad}} = \begin{pmatrix} c_{33} & c_{13} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} \end{pmatrix}, \underline{\underline{\tilde{B}}}^{\mathrm{rad}} = \begin{pmatrix} e_{33} & 0 & 0 \\ e_{13} & 0 & 0 \\ e_{13} & 0 & 0 \\ 0 & e_{61} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e_{61} \end{pmatrix}, \underline{\underline{\tilde{K}}}^{\mathrm{rad}} = \begin{pmatrix} \kappa_{33} & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_{11} \end{pmatrix}.$$

Die Umrechnung zwischen originalen und gedrehten Koordinaten erfolgt über

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = Q^T(\phi) \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \\ z \end{pmatrix} \qquad \text{mit} \quad Q(\phi) = \begin{pmatrix} \cos(\phi) & \sin(\phi) & 0 \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Daraus ergibt sich sofort

$$\tilde{\nabla}\varphi = Q(\phi)\nabla\varphi \tag{3.27}$$

sowie nach umfangreicherer Rechnung

$$\underline{\tilde{\varepsilon}}(u) := \begin{pmatrix} \partial_{\tilde{x}} u_{\tilde{x}} \\ \partial_{\tilde{y}} u_{\tilde{y}} \\ \partial_z u_z \\ \partial_{\tilde{y}} u_{\tilde{x}} + \partial_{\tilde{x}} u_{\tilde{y}} \\ \partial_z u_{\tilde{y}} + \partial_{\tilde{y}} u_z \\ \partial_{\tilde{x}} u_z + \partial_z u_{\tilde{x}} \end{pmatrix} = R(\phi)\underline{\varepsilon}(u) \tag{3.28}$$

mit

$$R(\phi) = \begin{pmatrix} \cos^2(\phi) & \sin^2(\phi) & 0 & \cos(\phi)\sin(\phi) & 0 & 0 \\ \sin^2(\phi) & \cos^2(\phi) & 0 & -\cos(\phi)\sin(\phi) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2\cos(\phi)\sin(\phi) & 2\cos(\phi)\sin(\phi) & 0 & \cos^2(\phi) - \sin^2(\phi) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix}.$$

Nun könnte man aufgrund der Invarianz des Integranden unter Drehung des Koordinatensystems bei Rotationssymmetrie die elastische Materialmatrix in kartesischen Koordinaten mittels

$$(\underline{\varepsilon}(v))^T \underline{\underline{C}}^{\mathrm{rad}}(\phi)(\underline{\varepsilon}(u)) = (\underline{\tilde{\varepsilon}}(v))^T \underline{\underline{\tilde{C}}}^{\mathrm{rad}} \underline{\tilde{\varepsilon}}(u) = (\underline{\varepsilon}(v))^T R^T(\phi) \underline{\underline{\tilde{C}}}^{\mathrm{rad}} R(\phi)\underline{\varepsilon}(u)$$

als

$$\underline{\underline{C}}^{\mathrm{rad}}(\phi) = R^T(\phi)\underline{\underline{\tilde{C}}}^{\mathrm{rad}} R(\phi)$$

berechnen (ähnlich $\underline{\underline{B}}^{\mathrm{rad}}(\phi)$ sowie $\underline{\underline{K}}^{\mathrm{rad}}(\phi)$), und schließlich mittels

$$\underline{\underline{\hat{C}}}^{\mathrm{rad}}(\phi) = A_2^T(\phi)\underline{\underline{C}}^{\mathrm{rad}}(\phi)A_2(\phi)$$

und entsprechenden Gleichungen die modifizierten Materialmatrizen bestimmen. Diese Rechnung ist aber ziemlich umständlich und langwierig, es gibt noch einen alternativen Weg.
Aus (3.24) und (3.28) ergibt sich

$$\underline{\tilde{\varepsilon}}(u) =: \tilde{A}_1(\phi)\underline{\hat{\varepsilon}}(u) \qquad \text{mit} \quad \tilde{A}_1(\phi) = R(\phi)A_1(\phi) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Das bedeutet, $\tilde{A}_1(\phi)$ ist vom Winkel unabhängig! Analog führt man (3.25) und (3.27) zusammen:

$$\tilde{\nabla}\varphi =: \tilde{A}_2(\phi)\hat{\nabla}\varphi \qquad \text{mit} \quad \tilde{A}_2(\phi) = Q(\phi)A_2(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Mit diesen beiden vom Winkel $\phi$ unabhängigen Matrizen berechnet man leicht

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{\hat{C}}}^{\mathrm{rad}} &= \tilde{A}_1^T(\phi)\underline{\underline{\tilde{C}}}^{\mathrm{rad}}\tilde{A}_1(\phi) = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{13} & \mathbf{c_{12}} & 0 \\ c_{13} & c_{33} & c_{13} & 0 \\ \mathbf{c_{12}} & c_{13} & c_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{55} \end{pmatrix}, \\
\underline{\underline{\hat{B}}}^{\mathrm{rad}} &= \tilde{A}_1^T(\phi)\underline{\underline{\tilde{B}}}^{\mathrm{rad}}\tilde{A}_2(\phi) = \begin{pmatrix} e_{13} & 0 \\ e_{33} & 0 \\ e_{13} & 0 \\ 0 & e_{61} \end{pmatrix}, \\
\underline{\underline{\hat{K}}}^{\mathrm{rad}} &= \tilde{A}_2^T(\phi)\underline{\underline{\tilde{K}}}^{\mathrm{rad}}\tilde{A}_2(\phi) = \begin{pmatrix} \kappa_{33} & 0 \\ 0 & \kappa_{11} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Die Bilinearformen ergeben sich entsprechend zu

$$\begin{aligned}
c(u,v) &= 2\pi \int_\omega (\underline{\hat{\varepsilon}}(v))^T \underline{\underline{\hat{C}}}^{\mathrm{rad}} \underline{\hat{\varepsilon}}(u) \cdot r \, d(r,z), \\
b(\varphi,v) &= 2\pi \int_\omega (\underline{\hat{\varepsilon}}(v))^T \underline{\underline{\hat{B}}}^{\mathrm{rad}} \hat{\nabla}\varphi \cdot r \, d(r,z), \\
k(\varphi,\psi) &= 2\pi \int_\omega ((\hat{\nabla}\psi)^T \underline{\underline{\hat{K}}}^{\mathrm{rad}} \hat{\nabla}\varphi \cdot r \, d(r,z).
\end{aligned}$$

### 3.4.5 Anpassung des Fehlerschätzers

Der auf Kantensprüngen basierende Fehlerschätzer ist ebenfalls auf Rotationssymmetrie anzupassen. Von Interesse sind hierbei die Größen

$$\sigma \cdot \mathfrak{n} \quad \text{(vektoriell)} \qquad \text{sowie} \qquad D \bullet \mathfrak{n} \quad \text{(skalar)},$$

wobei $\mathfrak{n}$ die Außennormale eines Elements bezeichnet.

**Außennormale** Die Außennormale $\mathfrak{n} = \begin{pmatrix} n_x & n_y & n_z \end{pmatrix}^T$ stellt sich im rotationssymmetrischen Fall, sowie unter Benutzung der in Abschnitt 3.4.2 eingeführten Bezeichnungen wie folgt dar:

$$\mathfrak{n} = \begin{pmatrix} n_r \cos\phi \\ n_r \sin\phi \\ n_z \end{pmatrix} =: A_2(\phi)\tilde{\mathfrak{n}} \qquad \text{mit } \tilde{\mathfrak{n}} = \begin{pmatrix} n_r \\ n_z \end{pmatrix}.$$

**Spannungsteil $\sigma \cdot \mathfrak{n}$** Bekannt ist:

$$\sigma(u,\varphi) = \underbrace{C : \varepsilon(u)}_{\sigma_{\mathrm{mech}}} + \underbrace{B \cdot \nabla\varphi}_{\sigma_{\mathrm{el}}}.$$

Die Spannung berechnet sich über die Vektorform

$$\underline{\sigma} = \underline{\underline{C}}_6 \cdot \underline{\varepsilon}(u) + \underline{\underline{B}} \cdot \nabla\varphi\,.$$

Bei axialer Polung (bei radialer Polung ist die Herleitung etwa analog) besitzt diese folgende Anteile:

$$\begin{aligned}
\underline{\sigma}_{\text{mech}} &= \begin{pmatrix} c_{11}\sin^2 + c_{12}\cos^2 & c_{11}\cos^2 + c_{12}\sin^2 & c_{13} & 0 \\ c_{11}\cos^2 + c_{12}\sin^2 & c_{11}\sin^2 + c_{12}\cos^2 & c_{13} & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 \\ (c_{12}-c_{11})\sin\cos & (c_{11}-c_{12})\sin\cos & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{55}\sin \\ 0 & 0 & 0 & c_{55}\cos \end{pmatrix} \cdot \tilde{\underline{\varepsilon}} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{u_r}{r}(c_{11}\sin^2 + c_{12}\cos^2) + u_{r,r}(c_{11}\cos^2 + c_{12}\sin^2) + u_{z,z}c_{13} \\ \frac{u_r}{r}(c_{11}\cos^2 + c_{12}\sin^2) + u_{r,r}(c_{11}\sin^2 + c_{12}\cos^2) + u_{z,z}c_{13} \\ (\frac{u_r}{r} + u_{r,r})c_{13} + u_{z,z}c_{33} \\ (\frac{u_r}{r}(c_{12}-c_{11}) + u_{r,r}(c_{11}-c_{12}))\sin\cos \\ (u_{r,z} + u_{z,r})c_{55}\sin \\ (u_{r,z} + u_{z,r})c_{55}\cos \end{pmatrix}, \\
\underline{\sigma}_{\text{el}} &= \begin{pmatrix} 0 & e_{13} \\ 0 & e_{13} \\ 0 & e_{33} \\ 0 & 0 \\ e_{61}\sin & 0 \\ e_{61}\cos & 0 \end{pmatrix} \cdot \tilde{\nabla}\varphi = \begin{pmatrix} e_{13}\varphi_{,z} \\ e_{13}\varphi_{,z} \\ e_{33}\varphi_{,z} \\ 0 \\ e_{61}\varphi_{,r}\sin \\ e_{61}\varphi_{,r}\cos \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

In Tensor-/Matrixform zurückgebracht folgt

$$\sigma \cdot \mathfrak{n} = \underbrace{\sigma \cdot A_2(\phi)}_{\tilde{\sigma}} \cdot \tilde{\mathfrak{n}}$$

wobei geduldiges Ausrechnen ergibt:

$$\tilde{\sigma} = A_2(\phi)\hat{\sigma} \quad \text{mit } \hat{\sigma} = \begin{pmatrix} c_{12}\frac{u_r}{r} + c_{11}u_{r,r} + c_{13}u_{z,z} + e_{13}\varphi_{,z} & c_{55}u_{r,z} + u_{z,r} + e_{61}\varphi_{,r} \\ c_{55}u_{r,z} + u_{z,r} + e_{61}\varphi_{,r} & c_{13}(\frac{u_r}{r} + u_{r,r}) + c_{33}u_{z,z} + e_{33}\varphi_{,z} \end{pmatrix}.$$

Es gilt

$$\|\sigma \cdot \mathfrak{n}\|^2 = \|\tilde{\sigma} \cdot \tilde{\mathfrak{n}}\|^2 = \|A_2(\phi)\hat{\sigma} \cdot \tilde{\mathfrak{n}}\|^2 = \tilde{\mathfrak{n}}^T\hat{\sigma}^T \underbrace{A_2^T A_2}_{I}\hat{\sigma}\tilde{\mathfrak{n}} = \|\hat{\sigma} \cdot \tilde{\mathfrak{n}}\|^2.$$

Entsprechendes gilt auch für die Kantensprünge, es genügt daher mit den verkleinerten Matrizen $\hat{\sigma}$ zu rechnen, wobei im Vergleich zur 2D-Rechnung lediglich die Anteile mit $\frac{u_r}{r}$ auf der Hauptdiagonalen hinzukommen.

**Dielektrischer Verschiebungsteil** $D \bullet \mathfrak{n}$ Etwa analog zum Spannungsteil, aber etwas einfacher da $\nabla\varphi$ sowie $D$ schon in Vektorform sind:

$$D(u,\varphi) \;=\; B^T : \varepsilon - K\nabla\varphi = \underline{\underline{B}}^T \underline{\varepsilon} - K\nabla\varphi = \underline{\underline{B}}^T A_1(\phi)\tilde{\underline{\varepsilon}} - KA_2(\phi)\tilde{\nabla}\varphi$$

wobei sich wieder nachrechnen läßt:

$$\underline{\underline{B}}^T A_1(\phi) = A_2(\phi)\hat{\underline{\underline{B}}}^T, \quad KA_2(\phi) = A_2(\phi)\hat{K}$$

mit

$$\hat{\underline{\underline{B}}}^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & e_{61} \\ e_{13} & e_{13} & e_{33} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{K} = \begin{pmatrix} k_{11} & 0 \\ 0 & k_{33} \end{pmatrix}.$$

Somit gilt

$$D = A_2(\underbrace{\hat{\underline{\underline{B}}}^T \tilde{\underline{\varepsilon}} - \hat{K}\tilde{\nabla}\varphi}_{\hat{D}})$$

und daraus folgend die Zurückführung auf die erweiterten zweidimensionalen Größen:

$$D \bullet \mathfrak{n} = D^T\mathfrak{n} = \hat{D}^T A_2^T A_2 \tilde{\mathfrak{n}} = \hat{D}^T \tilde{\mathfrak{n}}\,.$$

**Bemerkung 3.2** *Die Zurückführung von rotationssymmetrischen linearen Elastizitätsproblemen sowie Potentialproblemen auf zweidimensionale FEM sind in dem in diesem Abschnitt beschriebenen Vorgehen als Spezialfälle enthalten und können unter Einsetzung der entsprechenden Materialparameter übernommen werden.*

### 3.4.6 Numerische Beispielrechnungen

**Beispiel 3.1** *Wir betrachten einen axial gepolten Vollzylinder vom Radius $R = 1$ und Höhe $H = 2$. Dieser ist am unteren Rand (Boden) fest eingespannt und geerdet (homogene Dirichletbedingung für $u$ und $\varphi$ bei $z = 0$). Auf die Deckfläche ($z = 2$) wirkt eine konstante Flächenkraft senkrecht nach unten, der Rest des Randes wird als kräftefrei und wie auch die Deckfläche als ladungsfrei angenommen.*

Adaptive Rechnung mit quadratischen Viereckselementen bis zur Überschreitung von 2500 Knoten liefert die in Abbildung 3.5 im Erzeugendenquerschnitt $\omega$ dargestellten Verläufe von Verschiebung und Potential.
Das adaptiv verfeinerte Netz sowie die zugehörigen Iterationszahlen zeigt Abbildung 3.6.

**Beispiel 3.2** *Als weiteres Beispiel betrachten wir einen axial gepolten Hohlzylinder mit innerem Radius $R_i = 1$, äußerem Radius $R_a = 2$ und Höhe $H = 2$. Die Randbedingungen werden analog wie im Beispiel 3.1 gesetzt (feste Einspannung und Erdung am unteren Bodenrand, senkrechte Druckkraft auf Deckflächenring).*

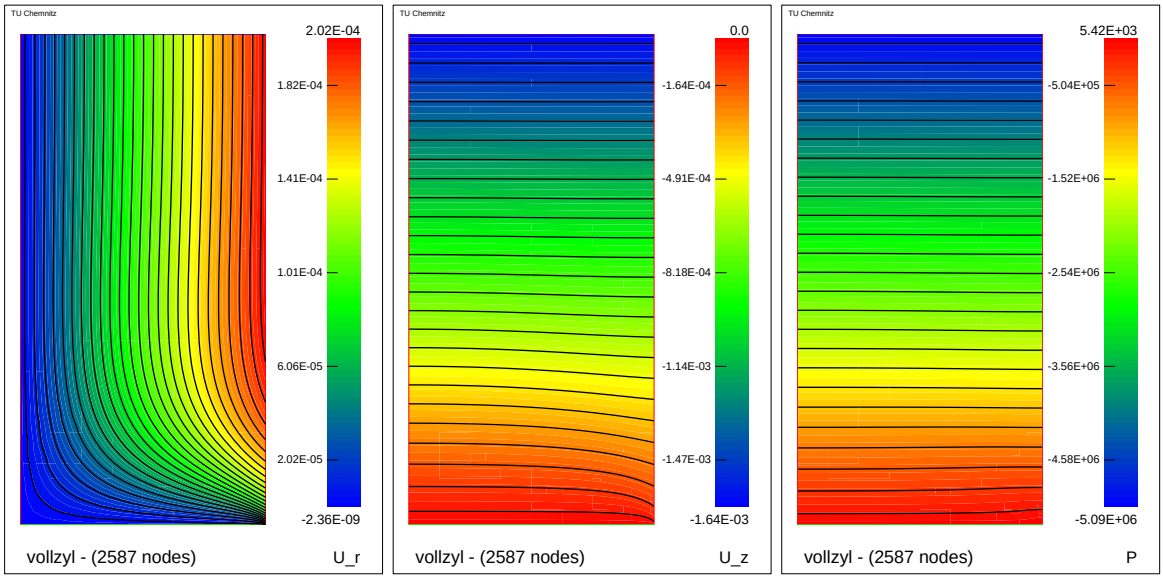



Abbildung 3.5: Radiale und axiale Verschiebung sowie elektrisches Potential mit Isolinien im druckbelasteten Vollzylinder

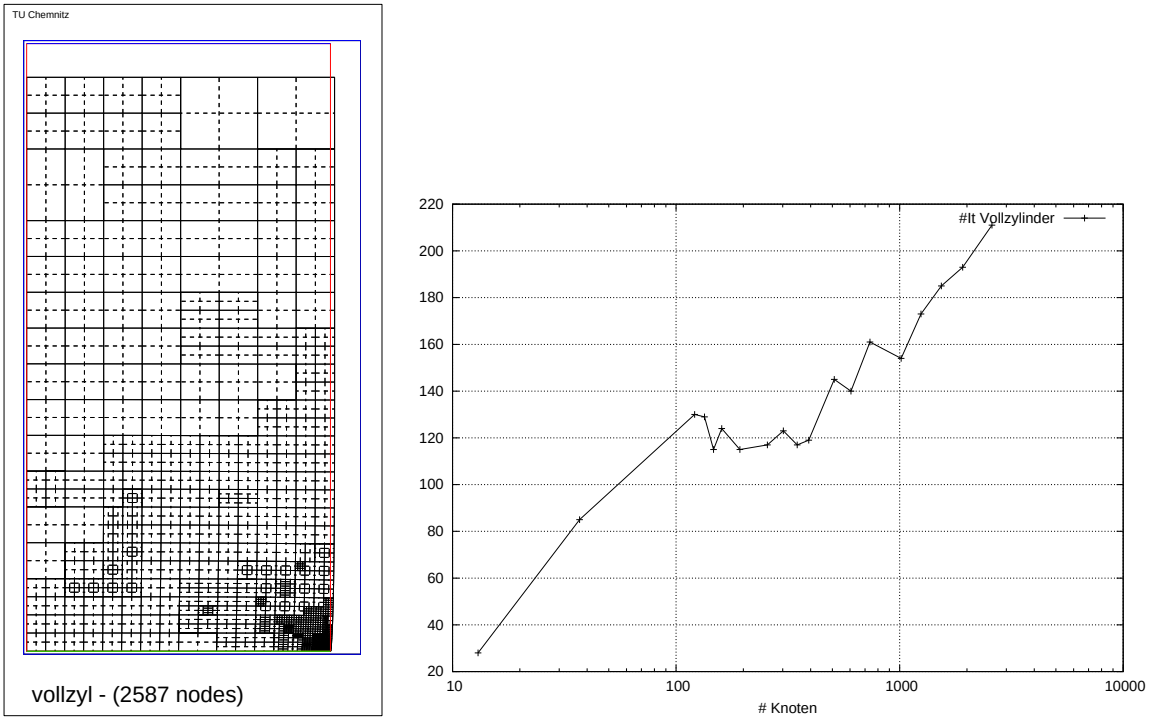



Abbildung 3.6: Verformtes Netz sowie Iterationszahlen beim druckbelasteten Vollzylinder

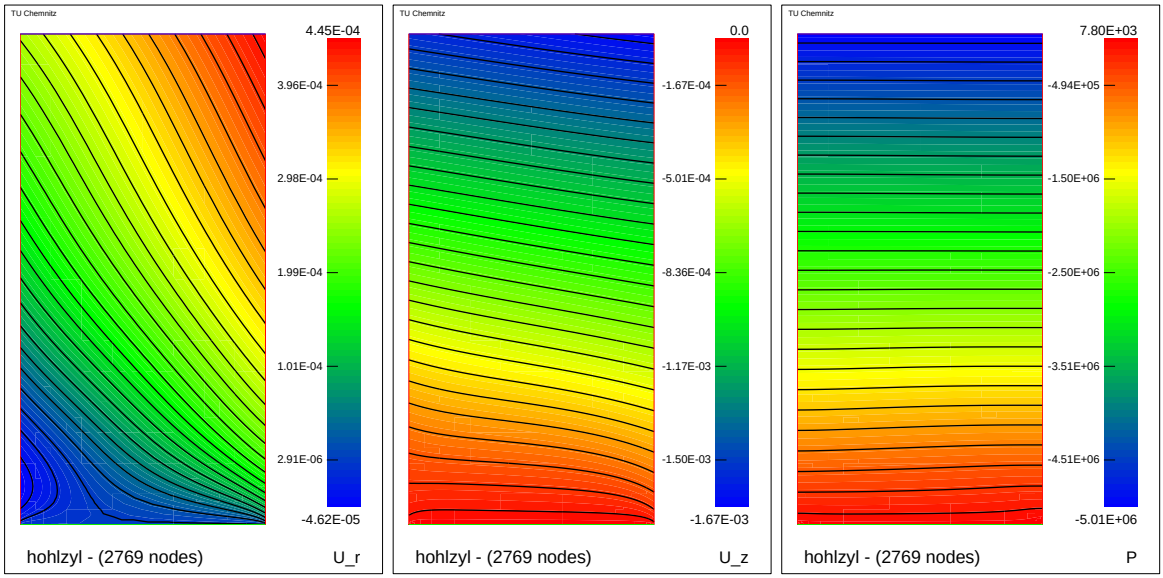



Abbildung 3.7: Radiale und axiale Verschiebung sowie elektrisches Potential mit Isolinien im druckbelasteten Hohlzylinder

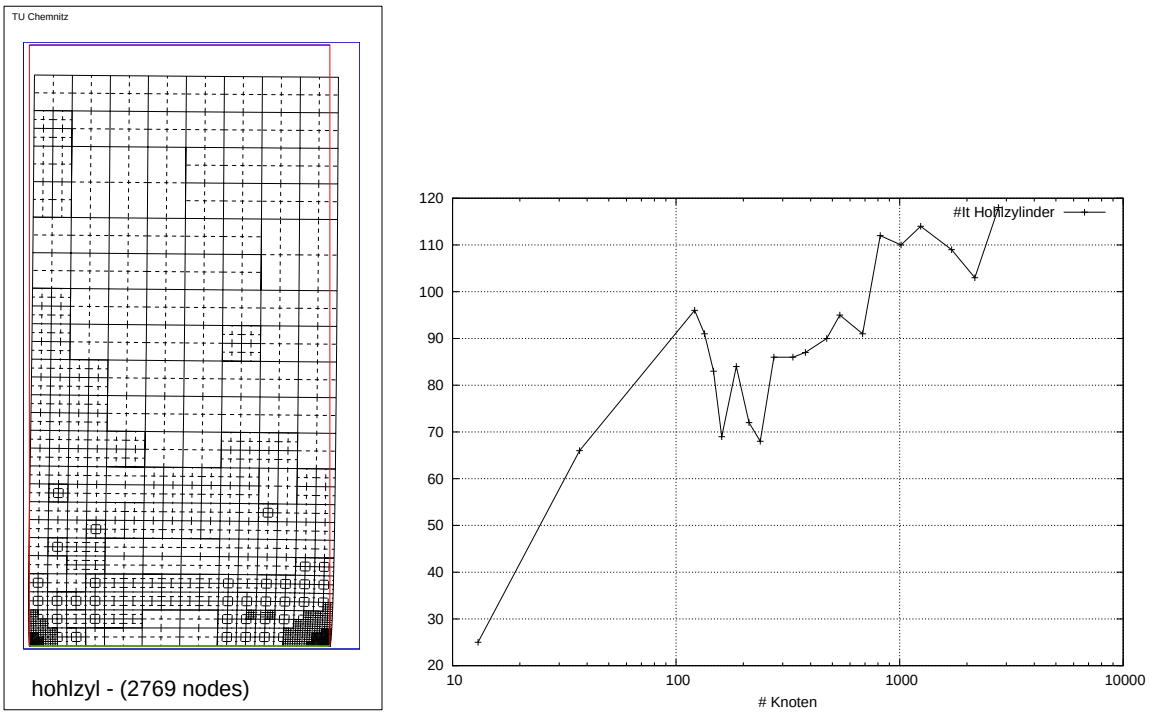



Abbildung 3.8: Verformtes Netz sowie Iterationszahlen beim druckbelasteten Hohlzylinder

Eine adaptive Rechnung bis zur Überschreitung von 2500 Knoten liefert die in Abbildung 3.7 im Erzeugendenquerschnitt dargestellten Verläufe von Verschiebung und Potential.
Das adaptiv verfeinerte Netz sowie die zugehörigen Iterationszahlen zeigt Abbildung 3.8. Auffällig ist eine leichte Ausbeulung des Hohlzylinders nach innen nahe des unteren Randes, während sich mit zunehmender Höhe der gesamte Hohlzylinder nach außen verformt. Der Fehlerschätzer erkennt auch richtig die im Unterschied zum Vollzylinder vorhandene innere Ecke (innerer Rand des Bodenkreisrings) mit Randbedingungswechsel und bewirkt dort eine etwas später als an der äußeren Ecke einsetzende, aber doch deutliche lokale Netzverfeinerung. Die Iterationszahlen steigen überraschenderweise im Hohlzylinderbeispiel wesentlich weniger stark an als im Vollzylinderbeispiel. Eventuell ist dies der dort vorhandenen impliziten Restriktion am „Rand“ $r = 0$ geschuldet, welcher nur Rand des Rechengebietes aber nicht des betrachteten Körpers ist und in welchem die verwendeten Zylinderkoordinaten eine Singularität aufweisen. Dies würde auch die physikalisch unsinnigen im Bereich „numerischen Schmutzes“ liegenden negativen ausgerechneten Radialverschiebungen im Vollzylinderbeispiel erklären. Aus den semilogarithmischen Darstellungen der Abbildungen 3.6 und 3.8 ist allerdings zu erkennen, daß in der Tendenz lediglich ein logarithmisches Anwachsen der Iterationszahlen bezüglich der Knotenanzahl zu verzeichnen ist, was der Theorie nach mit den verwendeten Vorkonditionierern (Hierarchische Basen nach Yserentant) auch zu erwarten ist.
Zur besseren Verifikation der rotationssymmetrischen 2D-FEM-Berechnung konnte zum Vergleich eine vor kurzem von J.Glänzel auf lineare Piezoprobleme erweiterte Implementierung einer echten 3D-FEM mit Quaderelementen [22] herangezogen werden. Die durchgeführten Vergleichsrechnungen liefern dabei eine weitgehende Übereinstimmung der numerischen Ergebnisse und zeigen gleichzeitig den in Größenordnungen niedrigeren Rechenaufwand der 2D-rotationssymmetrischen Variante bei vergleichbarer Genauigkeit. Die Ergebnisse der dreidimensionalen Rechnung zeigen für den Vollzylinder die Abbildung 3.10 sowie für den Hohlzylinder die Abbildung 3.11. Die radiale Verschiebung kann hier mit der vorhandenen Grafikroutine nicht separat dargestellt werden, allerdings entsprechen die Maximalwerte der radialen Verschiebung am Rand gerade der maximalen x-Verschiebung am Rand, was an den Max/Min-Werten der Skala zumindest in den ersten beiden signifikanten Stellen mit den Werten aus der 2D-rotationssymmetrischen Rechnung übereinstimmt. Noch besser ersichtlich ist die (genäherte) Übereinstimmung mit der zweidimensionalen Rechung an Schnittbildern mit Darstellung des zweidimensionalen Erzeugendenquerschnittes aus der 3D-Rechnung heraus. Die entsprechenden Bilder inklusive Isolinien für radiale sowie axiale Verschiebung befinden sich in Abbildung 3.9. Im Vergleich mit den korrespondierenden Bildern in den Abbildungen 3.5 und 3.7 ergeben sich kaum sichtbare Unterschiede, lediglich durch das gröbere Netz im 2D-Schnitt der 3D-Rechnung bedingt besitzen beispielsweise einige Isolinien von $u_r$ im Hohlzylinderbeispiel einen groben, nur wenig abgerundeten Verlauf.

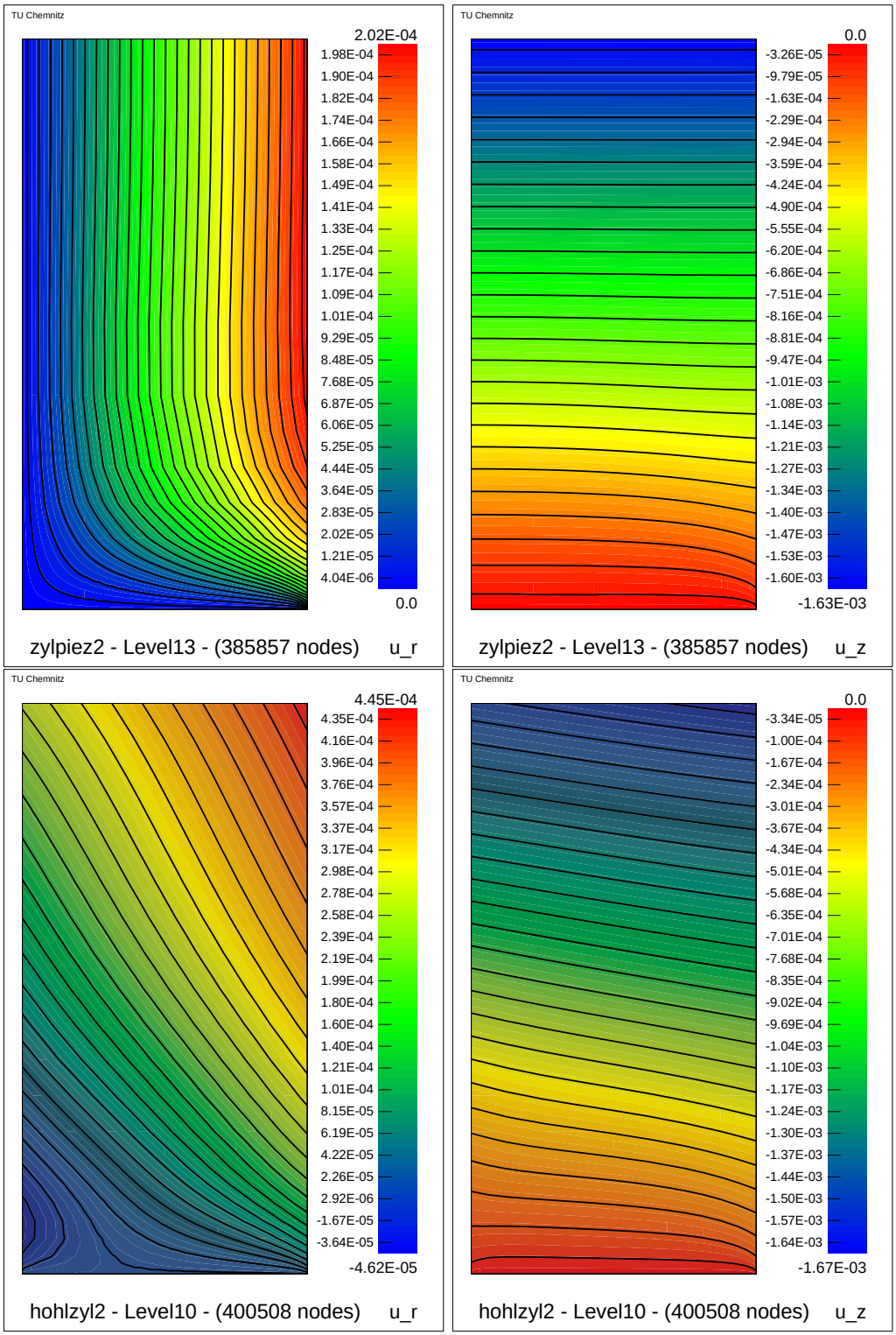



Abbildung 3.9: Verschiebung in Radiusrichtung sowie axial im Erzeugendenquerschnitt, bei 3D-Rechnung vom druckbelasteten Vollzylinder und Hohlzylinder

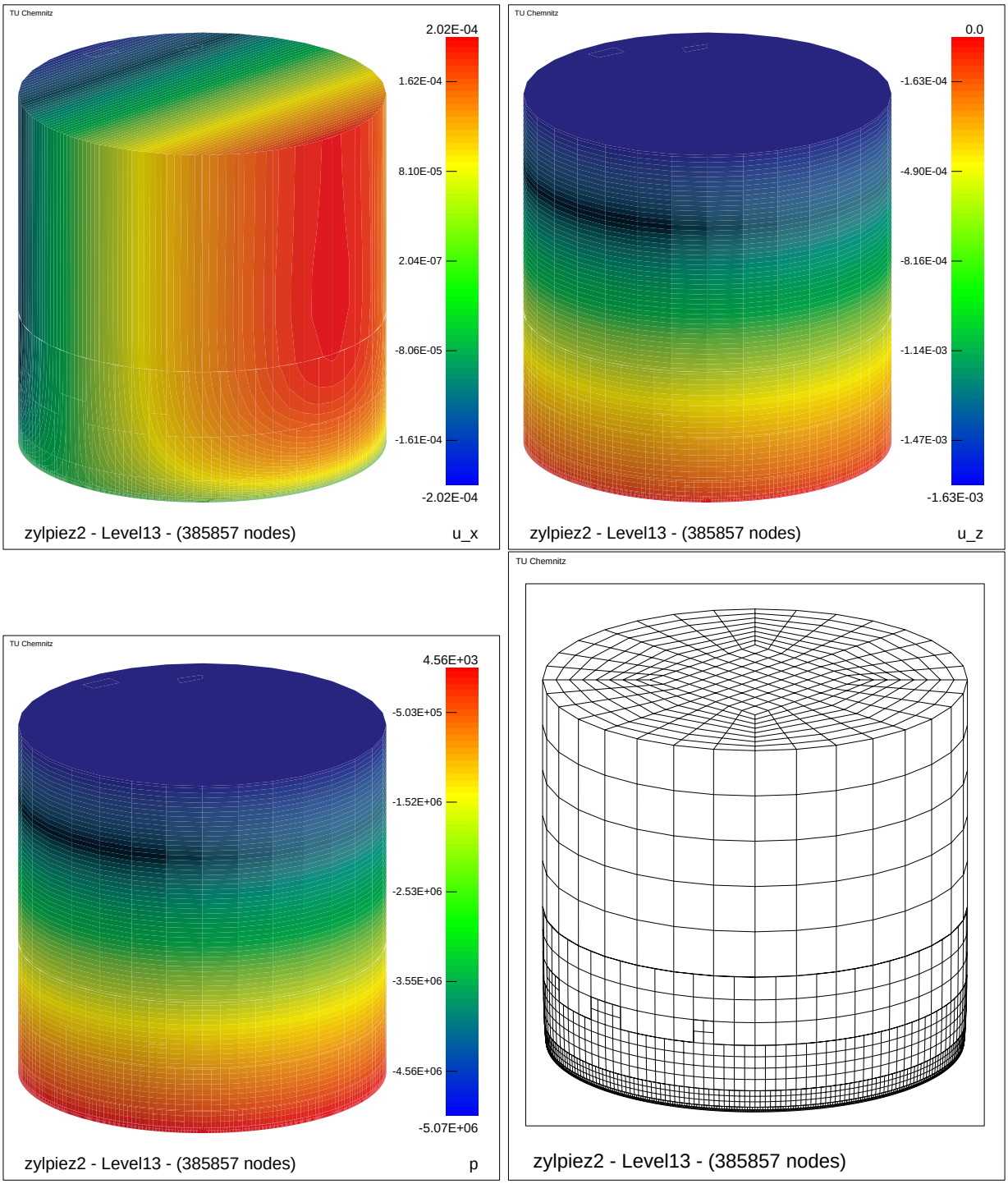



Abbildung 3.10: Verschiebung in x-Richtung sowie axial (z-Richtung), Potentialverteilung sowie deformiertes Netz nach adaptiver Verfeinerung bei 3D-Rechnung druckbelasteter Vollzylinder

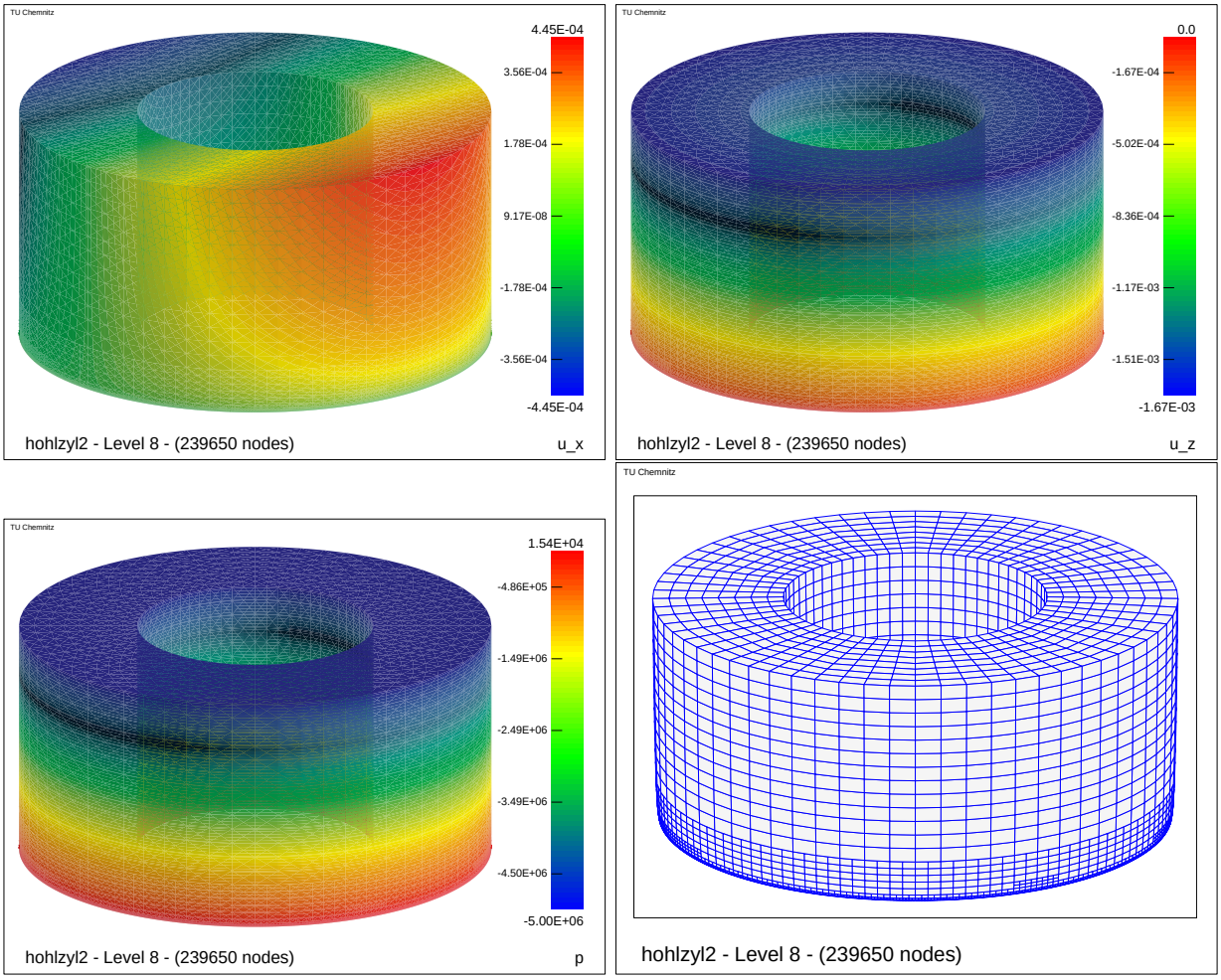



Abbildung 3.11: Verschiebung in x-Richtung sowie axial (z-Richtung), Potentialverteilung sowie deformiertes Netz nach adaptiver Verfeinerung bei 3D-Rechnung druckbelasteter Hohlzylinder

# Kapitel 4

# Löser und Vorkonditionierung

## 4.1 Modifizierter Bramble-Pasciak-CG

Die FEM-Diskretisierung einer Variationsformulierung (2.20) führt mit Unbekanntenvektoren $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{N_u}$ sowie $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^{N_p}$ auf ein Gleichungssystem der Struktur analog zu (3.2):

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^T & -\mathbf{K} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{pmatrix} , \tag{4.1}$$

wobei im Fall inkompressibler Elastizitätsprobleme $\mathbf{g} = \mathbf{0}$ ist. Neben den in dieser Arbeit genauer betrachteten Problemklassen führen auch noch weitere Aufgabenstellungen auf eine Gleichungssystemstruktur (4.1), etwa die Erweiterung nahezu inkompressibler Elastizität auf große Verzerrungen [14] oder poroelastisches Materialverhalten [23].
Die Matrizen $\mathbf{C}$ und $\mathbf{K}$ und somit auch die gesamte Systemmatrix $A = \begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^T & -\mathbf{K} \end{pmatrix}$ sind dabei symmetrisch. Während $\mathbf{C}$ außerdem positiv definit ist, ist $\mathbf{K}$ positiv semidefinit, wobei sowohl verschwindendes $\mathbf{K}$ als auch positive Definitheit auftreten können. Die Gesamtmatrix $A$ ist nicht definit, da $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} \leq 0$ für $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}$. Der gewöhnliche CG kann damit nicht zur Lösung angewendet werden. Als Ausweg führten Bramble und Pasciak einen Löser für Sattelpunktprobleme ein ([9]), dieser nutzt die speziellen Blockstrukturen aus und wird als Bramble-Pasciak-CG bezeichnet. Wir betrachten eine Erweiterung von Meyer und Steidten [41], welche ein nichtverschwindendes $\mathbf{K}$ zuläßt. Der modifizierte Bramble-Pasciak-CG transformiert das Gleichungssystem durch Multiplikation von links mit einer Matrix

$$\mathcal{K} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_0^{-1} & \mathbb{O} \\ \delta \mathbf{B}_0^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{C}_0^{-1} & -\gamma\delta \mathbf{B}_0^{-1} \end{pmatrix} ,$$

wobei $\gamma$ und $\delta$ positive Parameter sind, $\mathbf{C}_0$ ein Vorkonditionierer für $\mathbf{C}$ sowie $\mathbf{B}_0$ ein weiterer Vorkonditionierer für das inexakte Schurkomplement

$$\mathbf{S} = \mathbf{B}^T \mathbf{C}_0^{-1} \mathbf{B} + \gamma \mathbf{K}$$

ist. Die neue Systemmatrix ist damit

$$\mathcal{A} = \mathcal{K}A = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C} & \mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{B} \\ \delta\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{B}^T(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C} - \gamma I) & \delta\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S} \end{pmatrix} .$$

An den Parameter $\gamma$ wird die Beschränkung gestellt, daß $\mathbf{C} - \gamma\mathbf{C}_0$ positiv definit bleibt. Außerdem sollen beide Vorkonditionierer $\mathbf{C}_0$ und $\mathbf{B}_0$ symmetrisch sein. Dann ist $\mathcal{A}$ symmetrisch und positiv definit in einem speziellen Skalarprodukt $\langle ., . \rangle$, welches bei Benutzung der Blockschreibweise

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}, \ \mathbf{y} = \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}$$

definiert ist durch

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle := ((\mathbf{C} - \gamma\mathbf{C}_0)\mathbf{u}, \mathbf{v}) + (\delta^{-1}\mathbf{B}_0\mathbf{p}, \mathbf{q}) =: \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle_o + \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} \rangle_u , \tag{4.2}$$

dabei bezeichnet $(., .)$ das übliche euklidische Skalarprodukt im $\mathbb{R}^{N_u}$ bzw. $\mathbb{R}^{N_p}$.
Der modifizierte Bramble-Pasciak-CG entspricht dem üblichen CG mit $\mathcal{A}$ und $\langle ., . \rangle$, wobei die (blockweise) Vorkonditionierung gleich enthalten ist. Zu beachten ist, daß für die üblicherweise benutzten Multilevel-Vorkonditionierer lediglich die Multiplikation mit $\mathbf{C}_0^{-1}$ implementierbar ist, nicht aber direkt mit $\mathbf{C}_0$. Es ergibt sich folgender

**Algorithmus 4.1 (Modifizierter Bramble-Pasciak-CG)**

1. *Setup:*
   - $\overline{r}^{(0)} = \mathbf{C}\mathbf{u} + \mathbf{B}\mathbf{p} - \mathbf{f}$
   - $\overline{w}^{(0)} = \mathbf{C}_0^{-1}\overline{r}^{(0)}$
   - $\underline{r} = \mathbf{B}^T\mathbf{u} - \mathbf{K}\mathbf{p} - \mathbf{g}$
   - $\underline{r}^{(0)} = \mathbf{B}^T\overline{w}^{(0)} - \gamma\underline{r}$
   - $\underline{w}^{(0)} = \mathbf{B}_0^{-1}\underline{r}^{(0)}$
   - $\underline{s}^{(0)} = \delta\underline{w}^{(0)}$
   - $\overline{s}^{(0)} = \overline{w}^{(0)}, \quad q^{(0)} = \mathbf{C}\overline{s}^{(0)}$
   - $W = \langle w, w \rangle = (q^{(0)}, \overline{w}^{(0)}) - \gamma(\overline{r}^{(0)}, \overline{w}^{(0)}) + \delta(\underline{r}^{(0)}, \underline{w}^{(0)})$
   - *Dabei Test ob* $(q^{(0)}, \overline{w}^{(0)}) - \gamma(\overline{r}^{(0)}, \overline{w}^{(0)}) > 0$*, ansonsten* $\gamma$ *verkleinern.*
   - $abbr = \varepsilon_a^2 W$
2. *Iteration:*
   - $u = q + \mathbf{B}\underline{s}$
   - $\overline{v} = \mathbf{C}_0^{-1}u$
   - $\underline{v} = \mathbf{B}^T(\overline{v} - \gamma\overline{s}) + \gamma\mathbf{K}\underline{s}$

- *Berechne* $\langle \mathcal{A}s, s\rangle = (q, \overline{v}) - \gamma(u, \overline{s}) + (\underline{s}, \underline{v})$
- $\alpha = -\frac{W}{\langle \mathcal{A}s, s\rangle}$
  - $\mathbf{u} = \mathbf{u} + \alpha\overline{s}$
  - $\overline{r} = \overline{r} + \alpha u$
  - $\overline{w} = \overline{w} + \alpha\overline{v}$
  - $\mathbf{p} = \mathbf{p} + \alpha\underline{s}$
  - $\underline{r} = \underline{r} + \alpha\underline{v}$
  - $\underline{w} = \mathbf{B}_0^{-1}\underline{r}$
- $W_{alt} = W$
- $\overline{v} = \mathbf{C}\overline{w}$
- $W = \langle w, w\rangle = (\overline{w}, \overline{v}) - \gamma(\overline{w}, \overline{r}) + \delta(\underline{w}, \underline{w})$
- *Falls* $(\overline{w}, \overline{v}) - \gamma(\overline{w}, \overline{r}) \leq 0$ *verkleinere* $\gamma$ *und zurück zu 1.*
  *Falls* $W \leq$ *abbr beende Iteration, Lösung* $(\mathbf{u}, \mathbf{p})^T$
- $\beta = \frac{W}{W_{alt}}$
  - $\overline{s} = \overline{w} + \beta\overline{s}$
  - $q = \overline{v} + \beta q$
  - $\underline{v} = \delta\underline{w}$
  - $\underline{s} = \underline{v} + \beta\underline{s}$

Die Zwischentests bei der Bildung des Residuumquadrats $\langle w, w\rangle$ können bei zu groß gewähltem Parameter $\gamma$ eine Verletzung der positiven Definitheit von $\mathbf{C} - \gamma\mathbf{C}_0$ aufdecken, da immer $\overline{r} = \mathbf{C}_0\overline{w}$ gilt und somit $((\mathbf{C} - \gamma\mathbf{C}_0)\overline{w}, \overline{w})$ auf Nichtnegativität getestet wird. Der maximal zulässige Wert von $\gamma$ entspricht dem kleinsten Eigenwert von $\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}$ und hängt damit vom verwendeten Vorkonditionierer, aber auch von der Problemstellung über die Steifigkeitsmatrix $\mathbf{C}$ ab.

## 4.2 Wahl geeigneter Parameter

Die in diesem Abschnitt geführten Überlegungen und numerischen Beispiele sind zum größeren Teil einem Preprint entnommen, welches im Zuge der Projektbearbeitung am Sonderforschungsbereich 393 entstanden ist [42].

### 4.2.1 Abschätzung mithilfe von Teilmatrizen

Um den modifizierten Bramble-Pasciak-CG verwenden zu können, sind 2 grundlegende Herausforderungen zu bewältigen:

- Finden geeigneter Vorkonditionierer,
- Wahl geeigneter Parameter.

Vom Vorkonditionierer $\mathbf{C}_0$ fordert man die Eigenschaft

$$\underline{\mu}(\mathbf{C}_0\mathbf{u},\mathbf{u}) \leq (\mathbf{C}\mathbf{u},\mathbf{u}) \leq \overline{\mu}(\mathbf{C}_0\mathbf{u},\mathbf{u}) \quad \forall\, \mathbf{u} \in \mathbb{R}^{N_u} \tag{4.3}$$

mit positiven Konstanten $\underline{\mu}$ und $\overline{\mu}$, welche ein möglichst kleines Verhältnis $\overline{\mu}/\underline{\mu}$ aufweisen. Zur Erhaltung der positiven Definitheit ist somit eine Wahl $\gamma < \underline{\mu}$ erforderlich. Ziel ist es eine möglichst günstige Konditionszahl von $\mathcal{A}$ zu erreichen, deshalb wurden zum Einfluß von $\gamma$ und $\delta$ auf $\kappa(\mathcal{A})$ Untersuchungen durchgeführt. Eine Spektralabschätzung zwischen $\mathcal{A}$ und dem Blockdiagonalteil von $\mathcal{A}$ liefert folgendes Lemma aus [41]:

**Lemma 4.1** *Definiere*

$$\mathcal{M} := \begin{pmatrix} \mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C} & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & \delta\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S} \end{pmatrix}.$$

*als Blockdiagonale von $\mathcal{A}$. Gilt (4.3) für den Vorkonditionierer $\mathbf{C}_0$, so existieren positive Konstanten $\underline{\alpha}$ und $\overline{\alpha}$, mit denen die folgenden Ungleichungen erfüllt sind:*

$$\underline{\alpha}\langle\mathcal{M}\mathbf{x},\mathbf{x}\rangle \;\leq\; \langle\mathcal{A}\mathbf{x},\mathbf{x}\rangle \;\leq\; \overline{\alpha}\langle\mathcal{M}\mathbf{x},\mathbf{x}\rangle\,. \tag{4.4}$$

**Beweis:** Der Beweis dieses Lemmas wird in [41] über Spektralüberlegungen geführt, man schaut sich dazu die Matrix

$$\mathcal{M}^{-1}\mathcal{A} =: \begin{pmatrix} I & E \\ F^T & I \end{pmatrix}$$

an, wobei $E = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}$ sowie $F^T = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}^T(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C} - \gamma I)$ sind. Die Eigenwerte $\lambda \in \sigma(\mathcal{M}^{-1}\mathcal{A})$ sind 1 oder haben die Struktur

$$\lambda = 1 \pm \sqrt{\lambda''} \quad \text{mit} \quad \lambda'' \in \sigma(F^T E)\,.$$

Der Spektralradius von $F^T E$ läßt sich wiederum abschätzen durch

$$\rho(F^T E) \leq \rho(I - \gamma\mathbf{C}^{-1}\mathbf{C}_0)\,,$$

mithilfe von (4.3) und daraus folgend $\sigma(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}) \subset [\underline{\mu},\overline{\mu}]$ führt das zu $\rho(F^T E) \leq 1 - \frac{\gamma}{\overline{\mu}}$ und schließlich zur Abschätzung (4.4) mit

$$\underline{\alpha} = 1 - \sqrt{1 - \frac{\gamma}{\overline{\mu}}} \text{ und } \overline{\alpha} = 1 + \sqrt{1 - \frac{\gamma}{\overline{\mu}}}\,.$$

□

**Bemerkung 4.1** *Somit hängen $\underline{\alpha}$ und $\overline{\alpha}$ lediglich vom Verhältnis $\xi := \frac{\gamma}{\underline{\mu}}$ ab. Die beste Abschätzung wird demnach bei einer Wahl von $\gamma$ nahe des maximal zulässigen Wertes erreicht, zur Bewahrung der positiven Definitheit von $\mathbf{C} - \gamma\mathbf{C}_0$ gilt die Begrenzung $\gamma < \underline{\mu}$. Die Konditionszahl von $\mathcal{A}$ läßt sich abschätzen durch*

$$\kappa(\mathcal{A}) \leq \kappa(\mathcal{M})\frac{1+\sqrt{1-\xi}}{1-\sqrt{1-\xi}} = \kappa(\mathcal{M})\frac{(1+\sqrt{1-\xi})^2}{\xi} = \kappa(\mathcal{M})\frac{2-\xi+2\sqrt{1-\xi}}{\xi} \leq (\frac{4}{\xi}-1)\kappa(\mathcal{M})\,.$$

Ziel ist es nun, die Kondition von $\mathcal{M}$ möglichst klein zu halten, um die Kondition von $\mathcal{A}$ zu beschränken.
Für das Spektrum von $\mathcal{M}$ gilt aufgrund der Blockdiagonalstruktur:

$$\sigma(\mathcal{M}) = \sigma(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}) \cup \sigma(\delta\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}) \ = \sigma(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}) \cup \delta\sigma(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}).$$

Der Parameter $\delta$ skaliert also das Spektrum des unteren Blockes gegenüber dem oberen Block. Um im CG eine schnelle Konvergenz zu erreichen möchten wir mittels geschickter Wahl von $\delta$ nun die beiden Blockspektren möglichst ineinanderschieben, damit die Kondition der Gesamtmatrix möglichst klein bleibt. Fernerhin bezeichnen wir mit $\lambda_{\min}(T)$ und $\lambda_{\max}(T)$ den kleinsten bzw. größten Eigenwert einer positiv definiten Matrix $T$. Wir betrachten nun die Blöcke von $\mathcal{M}$ bezüglich der in (4.2) definierten Skalarprodukte. Es ist leicht einzusehen, daß $\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}$ im Skalarprodukt $\langle ., . \rangle_o$ selbstadjungiert ist, da gilt:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}\mathbf{u}, \mathbf{v}\rangle_o &= ((\mathbf{C} - \gamma\mathbf{C}_0)\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}\mathbf{u}, \mathbf{v}) = ((\mathbf{C}\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C} - \gamma\mathbf{C})\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\
&= (\mathbf{C}\mathbf{C}_0^{-1}(\mathbf{C} - \gamma\mathbf{C}_0)\mathbf{u}, \mathbf{v}) = ((\mathbf{C} - \gamma\mathbf{C}_0)\mathbf{u}, \mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}\mathbf{v}) \\
&= \langle \mathbf{u}, \mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}\mathbf{v}\rangle_o \qquad \forall\, \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^{N_u}\,.
\end{aligned}$$

Analog ist $\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}$ wie auch $\delta\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}$ bezüglich $\langle ., . \rangle_u$ selbstadjungiert, hier gilt mit der offensichtlichen Symmetrie des Schurkomplementes $\mathbf{S}$ bezüglich $(., .)$:

$$\langle \delta\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}\mathbf{q}, \mathbf{q}\rangle_u = (\mathbf{S}\mathbf{q}, \mathbf{q}) = (\mathbf{q}, \mathbf{S}\mathbf{q}) = (\delta^{-1}\mathbf{B}_0\mathbf{q}, \delta\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}\mathbf{q}) = \langle \mathbf{q}, \delta\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}\mathbf{q}\rangle_u\,.$$

Bekanntlich gilt somit die folgende Beziehung zwischen den Rayleigh-Quotienten und den Eigenwerten:

$$\lambda_{\min}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}) \ \leq R_o(x) := \tfrac{\langle \mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}\mathbf{x}, \mathbf{x}\rangle_o}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}\rangle_o} \leq \ \lambda_{\max}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})\,, \tag{4.5}$$

$$\lambda_{\min}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}) \ \leq R_u(q) := \tfrac{\langle \mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}\mathbf{q}, \mathbf{q}\rangle_u}{\langle \mathbf{q}, \mathbf{q}\rangle_u} \leq \ \lambda_{\max}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})\,. \tag{4.6}$$

Unter der Bedingung, daß $\mathbf{C}_0$ und $\mathbf{B}_0$ gute Vorkonditionierer für die Matrizenblöcke $\mathbf{C}$ bzw. $\mathbf{S}$ sind, sind die Konditionszahlen

$$\kappa(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}) = \frac{\lambda_{\max}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})}{\lambda_{\min}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})} \ \text{ sowie } \kappa(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}) = \frac{\lambda_{\max}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})}{\lambda_{\min}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})}$$

im wesentlichen von der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$. Unmittelbar folgt daraus aber auch für das Verhältnis zwischen Rayleigh-Quotienten prinzipiell beliebiger Vektoren $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^{N_u} \neq 0$ bzw. $\mathbf{p}, \mathbf{q} \in \mathbb{R}^{N_p} \neq 0$:

$$\frac{R_o(\mathbf{u})}{R_o(\mathbf{v})} \leq \kappa(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}),\ \frac{R_u(\mathbf{p})}{R_u(\mathbf{q})} \leq \kappa(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}),$$

so daß der Quotient zwischen Rayleigh-Quotienten zu verschiedenen nichtverschwindenden Vektoren immer von der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$ ist.

### 4.2.2 Konditionsbeschränkung mittels Parameterwahl

Die Kondition der Blockdiagonalmatrix $\mathcal{M}$ ergibt sich aus der Vereinigungsmenge der Eigenwerte von $\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}$ und $\delta\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}$:

$$\kappa(\mathcal{M}) = \frac{\max(\lambda_{\max}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}), \delta \cdot \lambda_{\max}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}))}{\min(\lambda_{\min}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}), \delta \cdot \lambda_{\min}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}))}\,. \tag{4.7}$$

Angenommen, wir würden $\delta$ so wählen, daß $\lambda_{\min}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}) = \delta\lambda_{\min}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})$ ist. Dann folgt aus obiger Formel sofort

$$\kappa(\mathcal{M}) = \max(\kappa(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}), \kappa(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}))\,.$$

Hier werden die Spektren der Blöcke so ineinandergeschoben, daß der untere Rand übereinstimmt. Die gleiche Abschätzung ergibt sich auch, wenn man stattdessen $\lambda_{\max}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}) = \delta\lambda_{\max}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})$ fordert, oder aber

$$\lambda_{\max}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}) \left\{ \begin{matrix} + \\ \cdot \end{matrix} \right\} \lambda_{\min}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}) = \delta\lambda_{\max}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}) \left\{ \begin{matrix} + \\ \cdot \end{matrix} \right\} \delta\lambda_{\min}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})$$

setzt, was eine Aufeinanderschiebung des oberen Spektrumrandes bzw. der (arithmetischen oder geometrischen) Spektrenmittelpunkte bedeutet. Veranschaulicht werden die beschriebenen Situationen in Abb. 4.1, wobei $T_1$ und $T_2$ die Matrizen $\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}$ und $\delta\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}$ derart bezeichnen, daß $\kappa(T_1) \geq \kappa(T_2)$ gilt. Dabei wird mit $\overline{\sigma(T_i)}$ die konvexe Hülle von $\sigma(T_i)$ bezeichnet. Das Problem liegt nun darin, daß wir $\delta$ nicht einfach nach einer der beschrie-

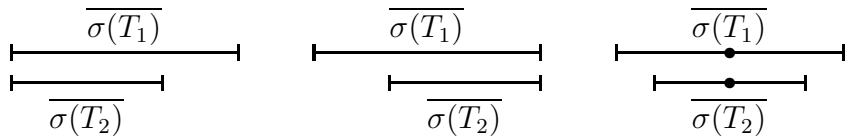



Abbildung 4.1: Spektrenschachtelung bei optimaler Wahl von $\delta$

benen Varianten wählen können, da wir die extremalen Eigenwerte von $\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}$ sowie $\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}$ von vorneherein nicht kennen. Wir wissen aber, daß beliebig gewählte Rayleigh-Quotienten immer innerhalb der Spektrumsgrenzen liegen. Wählen wir einen Vektor in Blockaufteilung $\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}$, $0 \neq \mathbf{v} \in \mathbb{R}^{N_u}$, $0 \neq \mathbf{q} \in R^{N_p}0$, und wählen wir $\delta$ so, daß $R_o(\mathbf{v}) = \delta R_u(\mathbf{q})$ ist, so ergibt sich mittels (4.5),(4.6) sofort:

$$R_o(\mathbf{v}) \in [\lambda_{\min}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}), \lambda_{\max}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})]\,,\ R_u(\mathbf{q}) \in [\lambda_{\min}(\delta\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}), \lambda_{\max}(\delta\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})]\,.$$

Immerhin haben wir die Tatsache, daß bei guter Vorkonditionierung $\lambda_{\min}$ und $\lambda_{\max}$ jeweils „nah beieinanderliegen“, die Wahl von

$$\delta = \frac{R_o(\mathbf{v})}{R_u(\mathbf{q})} \tag{4.8}$$

führt also schon einmal in die richtige Größenordnung. Wir erhalten mit diesem $\delta$ nun eine Abschätzung für die Kondition von $\mathcal{M}$. In Gleichung (4.7) können wir dazu eine Fallunterscheidung durchführen:

- $\lambda_{\min}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}) \leq \delta\lambda_{\min}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow\ \kappa(\mathcal{M}) &= \max\left(\frac{\lambda_{\max}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})}{\lambda_{\min}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})}, \frac{\delta\lambda_{\max}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})}{\lambda_{\min}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})}\right) \\
&\overset{(4.8)}{=} \max\left(\kappa(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}), \frac{R_o(x)\lambda_{\max}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})}{R_u(q)\lambda_{\min}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})}\right) \\
&\overset{(4.5),(4.6)}{\leq} \max\left(\kappa(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}), \frac{\lambda_{\max}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})\lambda_{\max}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})}{\lambda_{\min}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})\lambda_{\min}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})}\right) \\
&= \max(\kappa(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}), \kappa(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})\kappa(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})) \\
&\overset{\kappa(.)\geq 1}{=} \kappa(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})\kappa(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}).
\end{aligned}$$

- $\lambda_{\min}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}) > \delta\lambda_{\min}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow\ \kappa(\mathcal{M}) &= \max\left(\frac{\lambda_{\max}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})}{\delta\lambda_{\min}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})}, \frac{\delta\lambda_{\max}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})}{\delta\lambda_{\min}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})}\right) \\
&\overset{(4.8)}{=} \max\left(\frac{R_u(q)\lambda_{\max}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})}{R_u(q)R_o(x)\lambda_{\min}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})}, \kappa(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})\right) \\
&\overset{(4.5),(4.6)}{\leq} \max\left(\frac{\lambda_{\max}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})\lambda_{\max}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})}{\lambda_{\min}(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})\lambda_{\min}(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})}, \kappa(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})\right) \\
&= \max(\kappa(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})\kappa(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}), \kappa(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})) \\
&= \kappa(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C})\kappa(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}).
\end{aligned}$$

Die grafische Veranschaulichung dieses Sachverhaltes liefert Abb. 4.2.

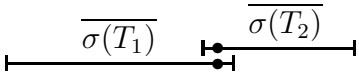



Abbildung 4.2: Spektrenüberlappung mittels einfacher Wahl von $\delta$

Lediglich durch Berechnung je eines oberen und unteren Rayleigh-Quotienten läßt sich damit absichern, daß die Kondition von $\mathcal{M}$ das Produkt der Konditionszahlen der Blöcke nicht übersteigt. Sind die verwendeten Vorkonditionierer hinreichend gut (d.h. $\kappa(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}), \kappa(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S})$ jeweils $\mathcal{O}(1)$), so ist bei Wahl von $\delta$ vermöge (4.8) auch $\kappa(\mathcal{M})$ von der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$, wobei allerdings die Konstanten im ungünstigsten Fall multipliziert werden. Selbst eine logarithmische Abhängigkeit der Kondition von $N$ via

$$\kappa(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}) = \mathcal{O}((\ln(N_u))^k),\ \kappa(\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}) = \mathcal{O}((\ln(N_u))^l)$$

führt für die Gesamtkondition auf eine lediglich logarithmische Abhängigkeit

$$\kappa(\mathcal{M}) \leq \mathcal{O}((\ln(N))^{k+l}).$$

### 4.2.3 Berechnung der Rayleighquotienten

Eine Problematik ist nun noch die Berechnung von $R_o$ bzw. $R_u$. Wir haben ja z.B. im Fall von Hierarchische-Basen oder anderen Multilevel-Vorkonditionierungen den Vorkonditionierer $\mathbf{C}_0$ nicht direkt vorliegen, sondern können nur einen gegebenen Vektor mit $\mathbf{C}_0^{-1}$ multiplizieren. Es besteht aber die Möglichkeit, über Umformungen berechenbare Ausdrücke zu erhalten:

$$\begin{aligned}
R_o(\mathbf{v}) &= \frac{\langle \mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}\mathbf{v}, \mathbf{v}\rangle_o}{\langle \mathbf{v}, \mathbf{v}\rangle_o} = \frac{((\mathbf{C}-\gamma\mathbf{C}_0)\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}\mathbf{v}, \mathbf{v})}{((\mathbf{C}-\gamma\mathbf{C}_0)\mathbf{v}, \mathbf{v})} \\
&= \frac{((\mathbf{C}\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}-\gamma\mathbf{C})\mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}}y, \mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}}y)}{((\mathbf{C}-\gamma\mathbf{C}_0)\mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}}y, \mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}}y)} \quad \longleftarrow \mathbf{v} =: \mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}}y \\
&= \frac{(((\mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}}\mathbf{C}\mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}})^2-\gamma\mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}}\mathbf{C}\mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}})y, y)}{((\mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}}\mathbf{C}\mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}}-\gamma I)y, y)} \\
&= \frac{(\tilde{\mathbf{C}}(\tilde{\mathbf{C}}-\gamma I)y, y)}{((\tilde{\mathbf{C}}-\gamma I)y, y)} \quad \longleftarrow \tilde{\mathbf{C}} := \mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}}\mathbf{C}\mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}} \\
&= \frac{(\tilde{\mathbf{C}}(\tilde{\mathbf{C}}-\gamma I)^{\frac{1}{2}}y, (\tilde{\mathbf{C}}-\gamma I)^{\frac{1}{2}}y)}{((\tilde{\mathbf{C}}-\gamma I)^{\frac{1}{2}}y, (\tilde{\mathbf{C}}-\gamma I)^{\frac{1}{2}}y)} \quad \longleftarrow \tilde{\mathbf{C}}, (\tilde{\mathbf{C}}-\gamma I)^{\frac{1}{2}} \text{ vertauschbar} \\
&= \frac{(\tilde{\mathbf{C}}z, z)}{(z, z)} = \frac{(\mathbf{C}\mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}}z, \mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}}z)}{(z, z)} \quad \longleftarrow z := (\tilde{\mathbf{C}}-\gamma I)^{\frac{1}{2}}y \\
&= \frac{(\mathbf{C}\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{w}, \mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{w})}{(\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{w}, \mathbf{w})} \quad \longleftarrow z =: \mathbf{C}_0^{-\frac{1}{2}}\mathbf{w}
\end{aligned}$$

Die Vertauschbarkeit von $\tilde{\mathbf{C}}$ und $(\tilde{\mathbf{C}}-\gamma I)^{\frac{1}{2}} = f(\tilde{\mathbf{C}})$ ist klar aufgrund der Eigenzerlegung der Matrixfunktion ($\tilde{\mathbf{C}}$ symmetrisch).
Damit lässt sich also tatsächlich $R_o$ berechnen, da wir lediglich Vektoren mit $\mathbf{C}$ bzw. $\mathbf{C}_0^{-1}$ multiplizieren müssen:

$$R_o = \frac{(\mathbf{C}\mathbf{s}, \mathbf{s})}{(\mathbf{s}, \mathbf{w})} \quad \text{mit } \mathbf{s} = \mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{w}. \tag{4.9}$$

Für den unteren Teil gilt

$$R_u(\mathbf{q}) = \frac{\langle \mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{S}\mathbf{q}, \mathbf{q}\rangle_u}{\langle \mathbf{q}, \mathbf{q}\rangle_u} = \frac{(\delta^{-1}\mathbf{S}\mathbf{q}, \mathbf{q})}{(\delta^{-1}\mathbf{B}_0\mathbf{q}, \mathbf{q})} = \frac{(\mathbf{S}\mathbf{q}, \mathbf{q})}{(\mathbf{B}_0\mathbf{q}, \mathbf{q})}.$$

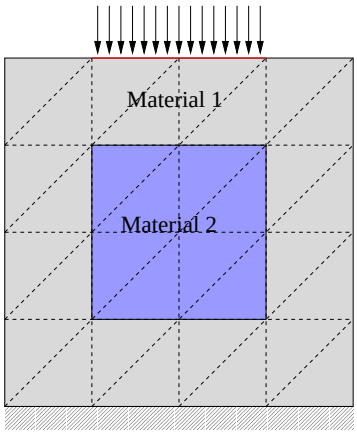
Wenn wir $\mathbf{B}_0$ direkt kennen (z.B. Diagonalvorkonditionierung für die Massenmatrix) können wir somit direkt $R_u$ berechnen, ansonsten folgt mit $\mathbf{q} = \mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{r}$ die Äquivalenz

$$R_u = \frac{(\mathbf{S}\mathbf{q}, \mathbf{q})}{(\mathbf{B}_0\mathbf{q}, \mathbf{q})} = \frac{(\mathbf{S}\mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{r}, \mathbf{B}_0^{-1}\mathbf{r})}{(B_0^{-1}\mathbf{r}, \mathbf{r})}. \tag{4.10}$$

### 4.2.4 Numerische Experimente

Mit dem für zweidimenensionale gemischte Elastizitätsprobleme erstellten Experimentalprogramm *SPC-Pm2AdMix* wurden einige Testrechnungen durchgeführt, um an Beispielen die Auswirkung der Parameterwahl zu testen.

**Beispiel 4.1** *Als erstes Beispiel wurde hier ein Quadrat* $\Omega = [0,4]^2$ *aus normal elastischem Material (z.B. Stahl) genommen, in welchem ein kleineres Quadrat* $\Omega_2 = [1,3]^2$ *aus einem inkompressiblen Material eingelassen ist. Unten* ($y = 0$) *ist ein Dirichletrand mit Verschiebung 0 vorgegeben, während auf einem Teil des oberen Randes* ($x \in [1,3]$, $y = 4$) *in y-Richtung eine konstante Kraft* $\overline{t}$ *wirkt. Volumenkräfte werden als* 0 *angenommen. Anordnung und Materialparameter siehe auch Abbildung 4.3.*




$$\begin{aligned} E_1 &= 200.000 \\ \nu_1 &= 0.3 \\ \\ E_2 &= 20.000 \\ \nu_2 &= 0.5 \end{aligned}$$

Abbildung 4.3: Grafische Veranschaulichung von Beispiel 4.1

Die Iterationszahlen im CG bei Wahl verschiedener Werte für $\delta$ (Dreieckselementen mit globaler Rot-Grün-Verfeinerung bis zu 3 Leveln) zeigt Abbildung 4.4. Mit eingezeichnet ist das Ergebnis bei automatischer Wahl von $\delta$ vermöge (4.8), welches hier je nach Verfeinerungslevel Werte in der Größenordnung um 30000 annimmt. Dieser $\delta-$Bereich ist im Diagramm zur leichteren Erkennbarkeit durch senkrechte Linien eingegrenzt. Dabei wurden als Ausgangsvektoren für die Berechnung mittels (4.9),(4.10) Vektoren aus lauter Einsen gewählt. Das Diagramm zeigt einen relativ chaotischen Verlauf der Iterationszahlen für „kleines“ $\delta$ (etwa $\delta < 100$), was im konkreten Beispiel sicherlich damit zusammenhängt, daß hier bei $\delta \leq 3000$ in manchen Verfeinerungsschritten aufgrund der konkreten Implementierung der Wert von $\gamma$ zwischendurch von 0.01 auf 0.001 abgesenkt wurde, wobei die aktuelle Iterierte als neue Startnäherung benutzt wurde und so vermutlich schlechtere Kondition und ein kleineres Abbruchresiduum vorlag. Etwa analog ist das Ergebnis bei Viereckvernetzung (Teilung mit hängenden Knoten), siehe dazu auch Abbildung 4.5.
Testweise wurde auf einer leistungsfähigen Maschine einmal mit adaptiver Verfeinerung bis zur Überschreitung von 10000 Knoten gerechnet. Die dabei aufgelaufenen PCG-Zeiten verdeutlicht Abbildung 4.6.

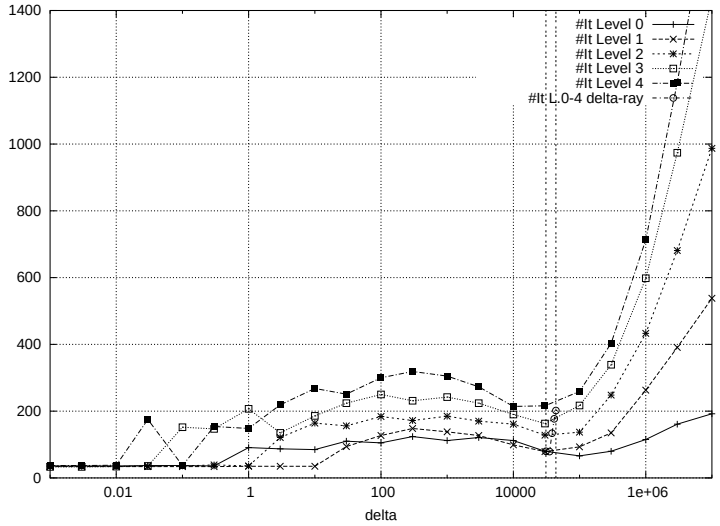



Abbildung 4.4: Iterationszahlen in Beispiel 4.1 bei Dreiecksvernetzung

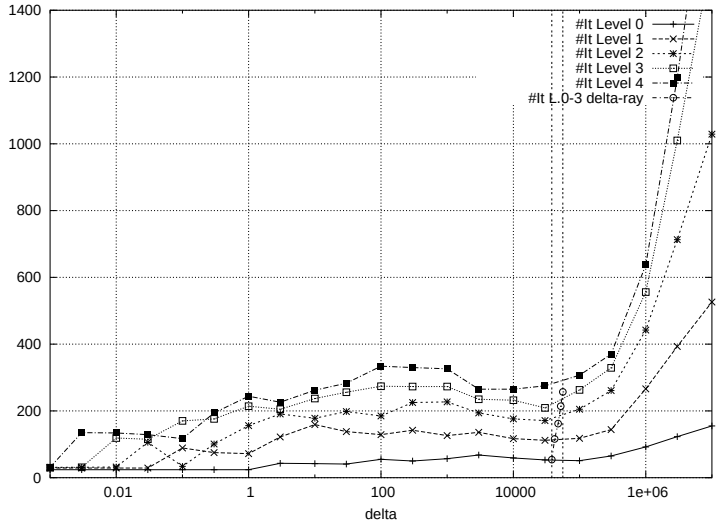



Abbildung 4.5: Iterationszahlen in Beispiel 4.1 bei Viereckvernetzung

Der Effekt abnehmender Iterationszeiten bei $\delta < 1$ motiviert eine genauere Betrachtung, da dort in einzelnen Verfeinerungsschritten durchaus hohe Iterationszahlen auftreten und es sich somit um ein scheinbar instabiles Konvergenzverhalten handelt. Fernerhin stellt sich die Frage, ob bei sehr kleinem (und evtl. auch sehr großem) $\delta$ überhaupt Konvergenz gegen eine sinnvolle Lösung stattfindet. Unterscheiden sich nämlich die Diagonalblöcke der Gesamtmatrix $\mathcal{A}$ in der Größenordnung um mehr als $\varepsilon^2$ (wobei $\varepsilon$ das Abbruch-Epsilon darstellt), so löst der PCG nur mit dem oberen (oder unteren) Teil der Gesamtmatrix. Bei

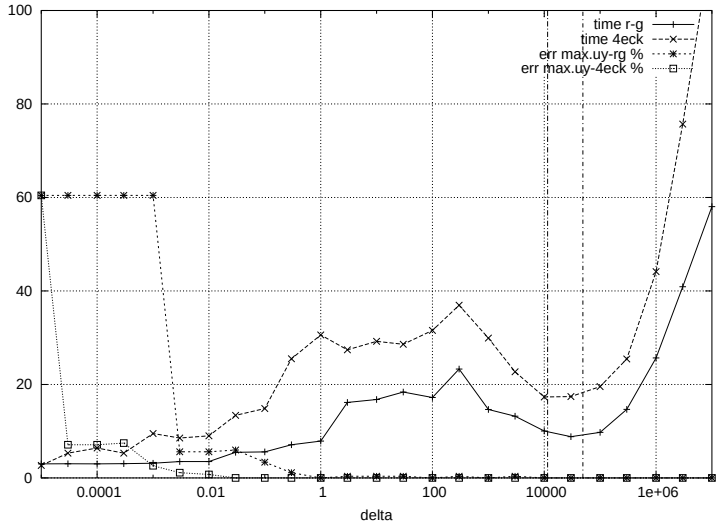



Abbildung 4.6: PCG-Zeiten in Beispiel 4.1 bei Dreiecksvernetzung mit rot-grüner Verfeinerung sowie hängenden Knoten

einem Unterschied in der Nähe von $\varepsilon^2$ wird der andere Teil zwar nicht komplett wegskaliert, verliert aber an Gewicht und somit an Genauigkeit in der Lösung. Wird also durch kleines $\delta$ der untere Matrixteil nur schwach gewichtet, wirkt hauptsächlich die sehr gute hierarchische Vorkonditionierung des oberen Teils, was eine beschleunigte Konvergenz erklärt. Bei Wahl von $\delta$ über Rayleighquotienten oder eines in der gleichen Größenordnung ist in diesem Beispiel erfreulicherweise nur ein moderates Wachstum der Iterationszahlen mit steigenderder Knotenzahl festzustellen (bei adaptiver rot-grüner Verfeinerung rund 80 Iterationen beim Start mit 81 Knoten, rund 120 It. bei 1000 Knoten, etwa 200 It. bei 10000 Knoten). Etwa vergleichbar ist die Situation bei totaler Verfeinerung: rund 150 Iterationen in Level 3 (4225 Knoten), 180 Iterationen in Level 4 (16641 Knoten).

**Beispiel 4.2** *Als ein weiteres Beispiel wurde die gleiche Versuchsanordnung wie in Beispiel 4.1 genommen, diesmal aber mit einem Quadrat aus einheitlichem Material der Parameter* $E = 20000,\ \nu = 0.3$.

Der Vorteil bei diesem einfacheren Beispiel ist, daß die berechneten Verschiebungskomponenten der Lösung problemlos auch mit dem herkömmlichen Elastizitätsprogramm SPC-Pm2Ad berechnet werden können und so ein Vergleich hinsichtlich Korrektheit zumindest der $u$-Komponenten möglich ist. Es wurde wieder mit rot-grüner Dreiecksverfeinerung gearbeitet und Werte von $\delta$ aus verschiedenen Größenordnungen gewählt. Außerdem wurde diesmal ein näherungsweise optimaler Wert für $\gamma$ insofern ausgewählt, daß in den PCG-Iterationen keine Verletzung der positiven Definitheit von $K - \gamma K_0$ feststellbar war. Dieser beträgt im gesamten Beispiel $\gamma = 0.008$. Einige charakteristische Lösungswerte zeigt Abbildung 4.7, die Lösungen sind dabei nach 5maliger Totalverfeinerung untersucht worden.

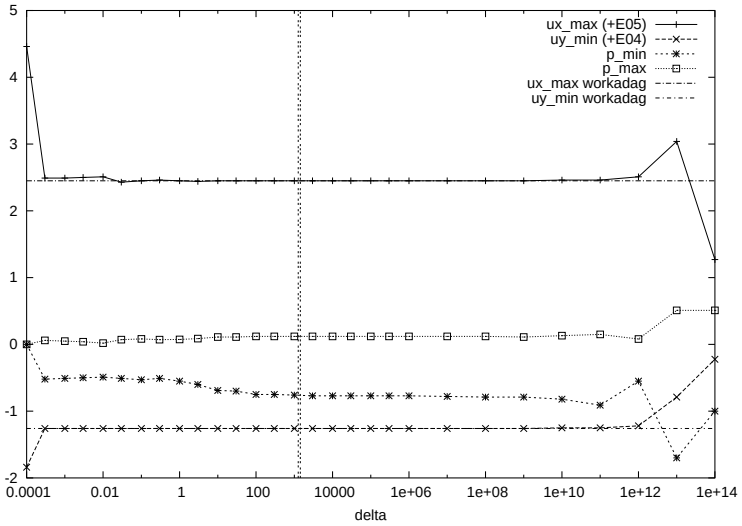



Abbildung 4.7: Berechnete Lösungskomponenten im Beispiel 4.2

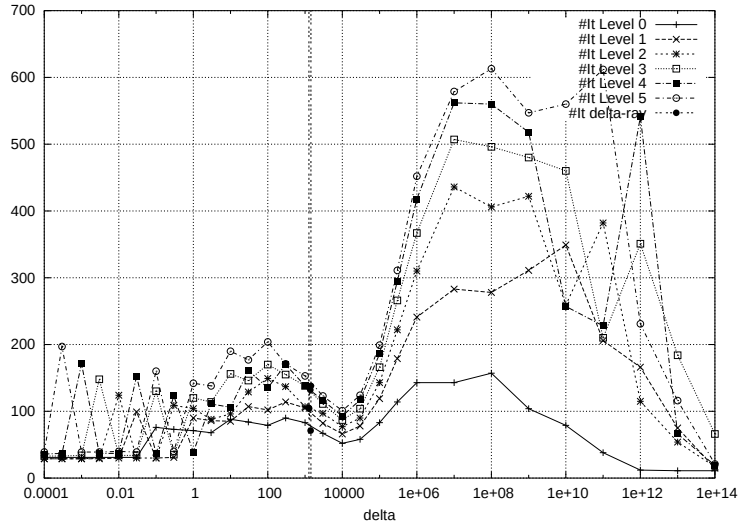



Abbildung 4.8: Iterationszahlen im Beispiel 4.2

Auffällig ist, daß für exotische Werte von $\delta$ außerhalb etwa der Größenordnungen $10^{-4} \ldots 10^{12}$ die Verschiebung $u_x$ bzw. $u_y$ keine sinnvollen Werte mehr ergibt. Man beachte, daß dies bei dem verwendeten Abbruch-Epsilon von $\varepsilon = 10^{-4}$ gerade die von einem „gutartigen“ $\delta-$Wert $10^4$ in der Größenordnung um mehr als $\varepsilon^2$ abweichenden $\delta$-Werte sind. Der Bereich stabiler $p$-Werte ist dagegen kleiner, der vermutlich korrekte Druck wird zumindest näherungsweise zuverlässig nur für $\delta \in [30, 10^9]$ getroffen. Die über Rayleigh-Quotienten ermittelten Werte für $\delta$ lagen hier im Bereich 1250..1500, ein optimales Konvergenz- bzw. Lösungsverhalten scheint aber hier erst bei etwas größerem $\delta \approx 10^4$ aufzutreten, was auch

die Darstellung der Iterationszahlen in Abbildung 4.8 belegt.

**Beispiel 4.3** *Als letztes Beispiel wurde ein Quadrat aus piezoelektrischem Material untersucht, welches gerade der in Abschnitt 5.3.2 beschriebenen FEM-Approximation des Griffith-Riß mit* $\rho = 4.25$ *entspricht. Gerechnet wurde hier mit der Genauigkeit* $\varepsilon = 1e-3$.

Auch hier zeigt sich, daß eine Wahl von $\delta \approx \delta_{\text{ray}} \approx 1$ näherungsweise ein lokales Minimum der Iterationszahlen trifft (siehe Abbildung 4.9), während für stark abweichende $\delta$ keine Konvergenz mehr gegen die exakte Lösung erfolgt (Abbildungen 4.10 und 4.11).

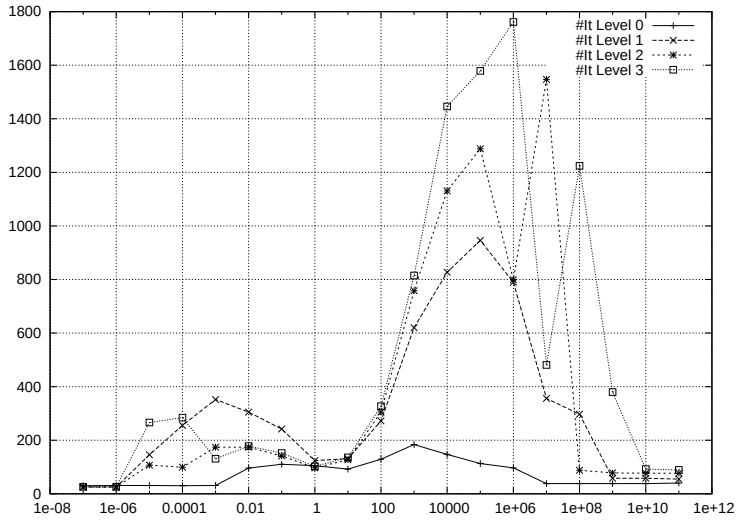



Abbildung 4.9: Iterationszahlen im Piezo-Beispiel 4.3 mit Viereckvernetzung.

## 4.3 Vorkonditionierung des Schurkomplements im piezoelektrischen Fall

Zu den in diesem Abschnitt beschriebenen Überlegungen existiert ebenfalls ein Preprint als Vorarbeit [43].
Im linearen piezoelektrischen Fall überführt die FEM die Variationsformulierung (2.34) in das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^T & -\mathbf{K} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{u} \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{f} \\ \underline{g} \end{pmatrix}, \tag{4.11}$$

wobei die elastische sowie dielektrische Steifigkeitsmatrix $\mathbf{C}$ und $\mathbf{K}$ jeweils symmetrisch und positiv definit sind. ($\mathbf{B}$ ist die aus der piezoelektrischen Kopplung entstehende Matrix.)
Untersucht werden soll zum Zwecke der Anwendung des in Abschnitt 4.1 beschriebenen modifizierten Bramble-Pasciak-CG zur Lösung dieses Systems, ob ein guter Vorkonditionierer

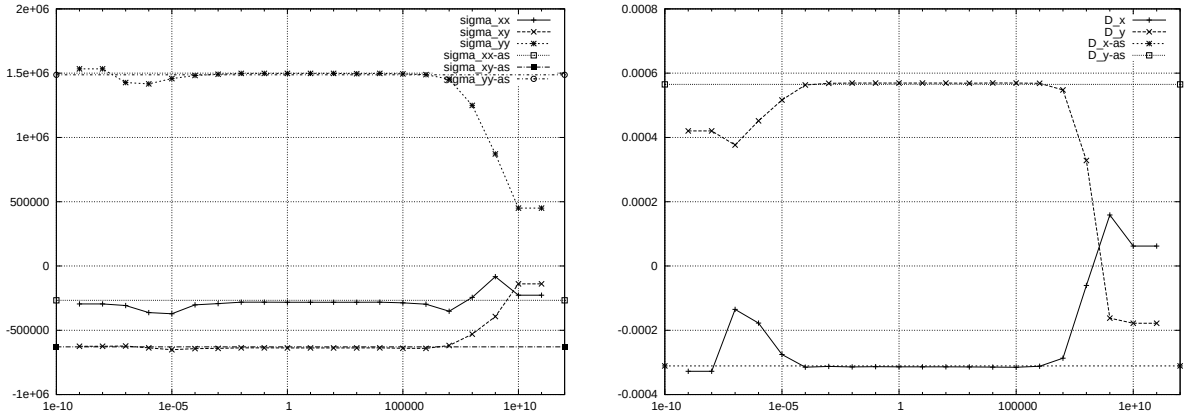



Abbildung 4.10: Vergleich FEM-Lösung (adaptiv verfeinert bis $> 4000$ Knoten) für $\sigma$ und $D$ mit asymptotischer Lösung im Punkt $(1, 0.25)$ bei verschiedenen Werten von $\delta$.

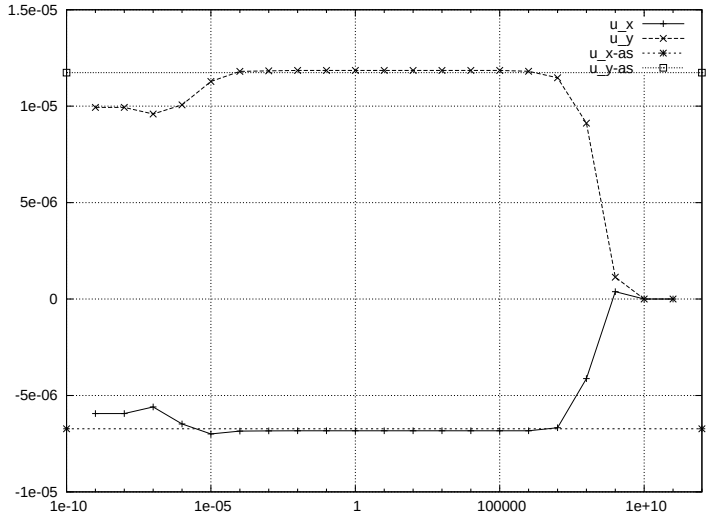



Abbildung 4.11: Vergleich FEM-Lösung (adaptiv bis $> 4000$ Knoten) für Verschiebung $u$ mit asymptotischer Lösung im Punkt $(1, 0.25)$ bei verschiedenen Werten von $\delta$.

für $\mathbf{K}$ in diesem speziellen Fall auch für das inexakte Schurkomplement

$$\mathbf{S} = \mathbf{B}^T \mathbf{C}_0^{-1} \mathbf{B} + \gamma \mathbf{K}$$

ein guter Vorkonditionierer ist. Dazu sind Spektraläquivalenzbetrachtungen notwendig, zunächst untersuchen wir das exakte Schurkomplement.

**Lemma 4.2** *Es existieren positive Konstanten* $\underline{\lambda}$, $\overline{\lambda}$ *mit welchen die Ungleichungen*

$$\underline{\lambda}\, p^T \mathbf{K} p \leq p^T \mathbf{B}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{B} p \leq \overline{\lambda}\, p^T \mathbf{K} p \qquad \forall p \in \mathbb{R}^N \tag{4.12}$$

*erfüllt sind.*

**Beweis:** Wir formen zuerst den abzuschätzenden Ausdruck um:

$$p^T\mathbf{B}^T\mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}p = \|\mathbf{C}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{B}p\|_2^2 = \sup_{\underline{v}} \frac{(\underline{v}^T\mathbf{C}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{B}p)^2}{\|\underline{v}\|_2^2} = \sup_{\underline{u}} \frac{(\underline{u}^T\mathbf{B}p)^2}{\underline{u}^T\mathbf{C}\underline{u}}$$

mit $\mathbf{C}^{-\frac{1}{2}}\underline{v} =: \underline{u}$.
Die gewünschten Abschätzungen folgen dann aus

a) $\frac{(\underline{u}^T\mathbf{B}p)^2}{\underline{u}^T\mathbf{C}\underline{u}} \leq \overline{\lambda} p^T\mathbf{K}p \quad \forall \underline{u} \in \mathbb{R}^{N_u}$

b) $\exists \underline{u}^* \in \mathbb{R}^{N_u}: \quad \frac{((\underline{u}^*)^T\mathbf{B}p)^2}{(\underline{u}^*)^T\mathbf{C}\underline{u}^*} \geq \underline{\lambda} p^T\mathbf{K}p$

mit von $p$ unabhängigen Konstanten $\overline{\lambda}$, $\underline{\lambda}$.

**a) (Obere Abschätzung)** Zu zeigen:

$$(\underline{u}^T\mathbf{B}p)^2 \leq \overline{\lambda}\underline{u}^T\mathbf{C}\underline{u} \cdot p^T\mathbf{K}p$$

In Bilinearformen ausgedrückt entspricht dies:

$$\begin{aligned} (b(\varphi,u))^2 &\leq \overline{\lambda}\, c(u,u)\cdot k(\varphi,\varphi) \;\; \forall u \in \mathbb{V}_h,\; \forall \varphi \in \mathbb{M}_h \\ &\Updownarrow \\ \left(\int_\Omega (\underline{\varepsilon}(u))^T \underline{\underline{B}}\, \nabla\varphi \, d\Omega\right)^2 &\leq \overline{\lambda} \int_\Omega (\underline{\varepsilon}(u))^T \underline{\underline{C}}\, \underline{\varepsilon}(u)\, d\Omega \int_\Omega (\nabla\varphi)^T \underline{\underline{K}}\, \nabla\varphi \, d\Omega\,. \end{aligned} \tag{4.13}$$

Zum Beweis der Ungleichung (4.13) werden Vektoren $\underline{x},\ \underline{w} \in \mathbb{R}^{\dim(\underline{\varepsilon})}$ sowie $\underline{z} \in \mathbb{R}^d$ benutzt. Seien $\underline{x}$ und $\underline{z}$ beliebige Vektoren. Dann existiert eine Konstante $\overline{\lambda}$ (maximaler Eigenwert des verallgemeinerten Eigenwertproblems $\underline{\underline{B}}^T\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{B}}\underline{z} = \lambda\underline{\underline{K}}\underline{z}$), welche folgende Abschätzung erfüllt:

$$\underline{z}^T\underline{\underline{B}}^T\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{B}}\underline{z} \leq \overline{\lambda}\,\underline{z}^T\underline{\underline{K}}\underline{z}\,. \tag{4.14}$$

Folglich gilt mit $\underline{w} := \underline{\underline{C}}^{\frac{1}{2}}\underline{x}$ folgendes:

$$\frac{(\underline{x}^T\underline{\underline{B}}\underline{z})^2}{\underline{x}^T\underline{\underline{C}}\underline{x}} = \frac{(\underline{w}^T\underline{\underline{C}}^{-\frac{1}{2}}\underline{\underline{B}}\underline{z})^2}{\underline{w}^T\underline{w}} \leq \frac{\|\underline{\underline{C}}^{-\frac{1}{2}}\underline{\underline{B}}\underline{z}\|_2^2\|\underline{w}\|_2^2}{\|\underline{w}\|_2^2} = \underline{z}^T\underline{\underline{B}}^T\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{B}}\underline{z} \overset{(4.14)}{\leq} \overline{\lambda}\,\underline{z}^T K\underline{z}\,.$$

Fazit: $\forall \underline{x}, \underline{z}$ gilt

$$(\underline{x}^T\underline{\underline{B}}\underline{z})^2 \leq \overline{\lambda}\cdot\underline{x}^T\underline{\underline{C}}\underline{x}\cdot\underline{z}^T\underline{\underline{K}}\underline{z}\,. \tag{4.15}$$

Die Schwarzsche Ungleichung für Integrale liefert hiermit:

$$\left(\int_\Omega \underline{x}^T\underline{\underline{B}}\underline{z}\right)^2 \leq \overline{\lambda}\left(\int_\Omega \sqrt{\underline{x}^T\underline{\underline{C}}\underline{x}}\sqrt{\underline{z}^T\underline{\underline{K}}\underline{z}}\right)^2 \leq \overline{\lambda}\int_\Omega \underline{x}^T\underline{\underline{C}}\underline{x}\cdot\int_\Omega \underline{z}^T\underline{\underline{K}}\underline{z}\,.$$

Damit ist (4.13) bewiesen, mithin gilt auch

$$p^T\mathbf{B}^T\mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}p \leq \overline{\lambda}\,p^T\mathbf{K}p \qquad \forall p \in \mathbb{R}^N\,. \tag{4.16}$$

**b) (Untere Abschätzung)** Mithilfe von Transformation auf Bilinearformen genügt es unter Berücksichtigung der Sonderbehandlung von inhomogenen Dirichletrandbedingungen, für jedes Skalarfeld $\varphi \in \mathbb{M}_{0h}$ die Existenz eines Vektorfeldes $\underline{u}^* \in \mathbb{V}_{0h}$ zu zeigen, so daß gilt

$$\frac{(b(\varphi, u^*))^2}{c(u^*, u^*)} \geq \underline{\lambda} k(\varphi, \varphi)\,.$$

Damit gilt die Abschätzung erst recht für das Supremum. Wir betrachten zunächst den Fall $d = 2$. Setzt man als Einschränkung Verträglichkeit der Dirichletränder im Sinne von $\Gamma_{D,u} \subset \Gamma_{D,\varphi}$ voraus, ist es zulässig, zu jedem $\varphi \in \mathbb{M}_{0h}$ ein Vektorfeld

$$u^* = \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi \end{pmatrix} \in \mathbb{V}_{0h}$$

zu wählen. Daraus ergibt sich $\underline{\varepsilon}(u^*) = (0,\, \partial_2\varphi,\, \partial_1\varphi)^T$, und mit der Struktur von $\underline{\underline{B}}^{2\mathrm{D}}$ sowie $\underline{\underline{C}}^{2\mathrm{D}}$ im transversalisotropen Fall folgt

$$\begin{aligned}
\underline{\varepsilon}^T(u^*)\underline{\underline{B}}^{2\mathrm{D}}\nabla\varphi &= e_{22}(\partial_2\varphi)^2 + e_{31}(\partial_1\varphi)^2 = (\nabla\varphi)^T \underbrace{\begin{pmatrix} e_{31} & 0 \\ 0 & e_{22} \end{pmatrix}}_{\hat{B}} \nabla\varphi\,, \\
\underline{\varepsilon}^T(u^*)\underline{\underline{C}}^{2\mathrm{D}}\underline{\varepsilon}(u^*) &= c_{22}(\partial_2\varphi)^2 + c_{33}(\partial_1\varphi)^2 = (\nabla\varphi)^T \underbrace{\begin{pmatrix} c_{33} & 0 \\ 0 & c_{22} \end{pmatrix}}_{\hat{C}} \nabla\varphi\,.
\end{aligned}$$

Die entstehenden Diagonalmatrizen $\hat{C}$ und $\hat{B}$ sind bei den bekannten Piezomaterialien positiv definit, ferner gilt

$$((\nabla\varphi)^T \hat{B} \nabla\varphi = e_{31}(\partial_x\varphi)^2 + e_{22}(\partial_y\varphi)^2\,.$$

Es gilt also

$$\begin{aligned}
\frac{(b(\varphi, u^*))^2}{k(\varphi,\varphi)\cdot c(u^*,u^*)} &= \frac{\int_\Omega ((\nabla\varphi)^T \hat{B}\nabla\varphi\, d\,\Omega}{\int_\Omega ((\nabla\varphi)^T K\nabla\varphi\, d\,\Omega} \cdot \frac{\int_\Omega ((\nabla\varphi)^T \hat{B}\nabla\varphi\, d\,\Omega}{\int_\Omega ((\nabla\varphi)^T \hat{C}\nabla\varphi\, d\,\Omega} \\
&\geq \lambda_{\min}(K^{-1}\hat{B}) \cdot \lambda_{\min}(\hat{C}^{-1}\hat{B}) = \min(\frac{e_{31}}{\kappa_{11}}, \frac{e_{22}}{\kappa_{22}}) \cdot \min(\frac{e_{31}}{c_{33}}, \frac{e_{22}}{c_{22}}) =: \underline{\lambda}\,.
\end{aligned}$$

Supremumsbildung über $u$ liefert also sofort

$$p^T \mathbf{B}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{B} p \geq \underline{\lambda}\, p^T \mathbf{K} p \qquad \forall p \in \mathbb{R}^N\,.$$

Im Fall $d = 3$ führt die Wahl von $u^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \varphi \end{pmatrix}$ (wiederum in Polungsrichtung) vermittels $\underline{\varepsilon}(u^*) = (0,\, 0,\, \partial_3\varphi,\, 0,\, \partial_2\varphi,\, \partial_1\varphi)^T$ mit äquivalenter Rechnung zum gleichen Resultat.
Mit Hinzunahme von (4.16) ist damit die gesamte Abschätzung (4.12) gezeigt. □

**Bemerkung 4.2** *Die Konstante $\overline{\lambda}$, deren Existenz in (4.14) vorausgesetzt wurde, läßt sich aus den bekannten Materialparametern im betrachteten transversal-isotropen Fall einfach berechnen. Es ergibt sich, daß sowohl $\underline{\underline{K}}$ als auch $S_0 := \underline{\underline{B}}^T \underline{\underline{C}}^{-1} \underline{\underline{B}}$ Diagonalmatrizen sind, für $S_0$ zeigt man die Diagonaleigenschaft folgendermaßen:*

- *2D:*

$$\underline{\underline{C}} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & 0 \\ c_{12} & c_{22} & 0 \\ 0 & 0 & c_{33} \end{pmatrix} \implies \underline{\underline{C}}^{-1} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & 0 \\ h_{12} & h_{22} & 0 \\ 0 & 0 & h_{33} \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} \underline{\underline{B}}^T \underline{\underline{C}}^{-1} \underline{\underline{B}} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & e_{31} \\ e_{12} & e_{22} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & 0 \\ h_{12} & h_{22} & 0 \\ 0 & 0 & h_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & e_{12} \\ 0 & e_{22} \\ e_{31} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & e_{31} \\ e_{12} & e_{22} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & h_{11}e_{12} + h_{12}e_{22} \\ 0 & h_{12}e_{12} + h_{22}e_{22} \\ h_{33}e_{31} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} h_{33}e_{31}^2 & 0 \\ 0 & * \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} s_{11} & 0 \\ 0 & s_{22} \end{pmatrix} = S_0 \,. \end{aligned}$$

  *Als konkretes Beispiel wird hier das Material PZT4$_b$ betrachtet. Die Materialkonstanten aus [55] bzw. [47] entnommen und auf die 2D-Notation umindiziert ergeben*

$$\begin{array}{llllll} c_{11} = 1.39e11\,, & e_{12} = -6.98\,, & \kappa_{11} = 6.00e-9\,, \\ c_{12} = 7.43e10\,, & e_{22} = 13.84\,, & \kappa_{22} = 5.47e-9\,, \\ c_{22} = 1.13e11\,, & e_{31} = 13.44\,, \\ c_{33} = 2.56e10\,. \end{array}$$

  *Damit folgt für dieses Material*

$$K = \begin{pmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 5.47 \end{pmatrix} \cdot 10^{-9},\ S_0 \approx \begin{pmatrix} 7.06 & 0 \\ 0 & 4.56 \end{pmatrix} \cdot 10^{-9}\,.$$

  *Hier wäre also etwa $\overline{\lambda} = \max_{i=1,2} \frac{s_{ii}}{k_{ii}} = 1.18$ zu wählen.*

- *3D: Analoge Rechnung (hier $x_3$ Polungsachse) mit*

$$\underline{\underline{C}} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{c_{11}-c_{12}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} \end{pmatrix},\ \underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & e_{13} \\ 0 & 0 & e_{13} \\ 0 & 0 & e_{33} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & e_{61} & 0 \\ e_{61} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

  *ergibt jetzt*

$$\underline{\underline{B}}^T \underline{\underline{C}}^{-1} \underline{\underline{B}} = S_0 = \begin{pmatrix} s_{11} & 0 & 0 \\ 0 & s_{11} & 0 \\ 0 & 0 & s_{33} \end{pmatrix}.$$

*Am Beispiel PZT4$_b$ bedeutet das*

$$\underline{\underline{K}} = \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 5.47 \end{pmatrix} \cdot 10^{-9},\ S_0 \approx \begin{pmatrix} 7.06 & 0 & 0 \\ 0 & 7.06 & 0 \\ 0 & 0 & 6.04 \end{pmatrix} \cdot 10^{-9}\,.$$

*Also gilt hier das gleiche $\overline{\lambda}$ wie im 2D-Fall.*

*Für das Beispielmaterial PZT4$_b$ folgt außerdem in der unteren Abschätzung $\underline{\lambda} = \frac{e_{31}}{\kappa_{11}} \cdot \frac{e_{22}}{c_{22}} \approx 0.27$, was die Verwendbarkeit des Vorkonditionierers anzeigt.*

**Inexaktes Schurkomplement mit Vorkonditionierer $\mathbf{C}_0$**

Existieren positive Konstanten $\underline{\mu}, \overline{\mu}$ (vgl. [41]) mit

$$\underline{\mu}(\mathbf{C}_0\underline{u}, \underline{u}) \leq (\mathbf{C}\underline{u}, \underline{u}) \leq \overline{\mu}(\mathbf{C}_0\underline{u}, \underline{u})\,, \tag{4.17}$$

lassen sich diese auch auf die Inversen übertragen (nachzurechnen mittels eines verallgemeinerten Eigenwertproblems):

$$\underline{\mu}(\mathbf{C}^{-1}\underline{v}, \underline{v}) \leq (\mathbf{C}_0^{-1}\underline{v}, \underline{v}) \leq \overline{\mu}(\mathbf{C}^{-1}\underline{v}, \underline{v})\,.$$

Damit folgt aus (4.12) sofort

$$\frac{\underline{\lambda}}{\overline{\mu}} p^T\mathbf{K}p \leq p^T\mathbf{B}^T\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{B}p \leq \frac{\overline{\lambda}}{\underline{\mu}} p^T\mathbf{K}p\,.$$

Es gilt also auch im inexakten Schurkomplement die Spektraläquivalenz.

**Theoretisches Resultat**

Sind also (4.12) bzw. (4.17) mit von der Feinheit der Diskretisierung unabhängigen Konstanten $\underline{\lambda}, \overline{\lambda}, \underline{\mu}, \overline{\mu}$ erfüllt (was bei geeigneten Materialien und Wahl eines Vorkonditionierers $\mathbf{C}_0$ optimaler Effektivität gesichert ist) und wird ein zulässiges $\gamma > 0$ gewählt, so folgt

$$(\frac{\underline{\lambda}}{\overline{\mu}} + \gamma)\, p^T\mathbf{K}p \leq p^T\mathbf{S}p \leq (\frac{\overline{\lambda}}{\underline{\mu}} + \gamma)\, p^T\mathbf{K}p\,.$$

Jeder bekanntermaßen gute Vorkonditionierer für $\mathbf{K}$ bewirkt auch eine Vorkonditionierung des Schurkomplements $\mathbf{S}$, deren Güte von der Größe der eingehenden Konstanten abhängt. Ein guter Vorkonditionierer $\mathbf{C}_0$ des mechanischen Blocks $\mathbf{C}$ ist hier übrigens ein zweites Mal von Vorteil, da ein kleines Verhältnis der Konstanten $\overline{\mu}$ und $\underline{\mu}$ die Abschätzung verbessert.

# Kapitel 5

# Besondere Randbedingungen und Rißränder bei Piezomaterialien

## 5.1 Besondere Randbedingung für leitfähige Teilränder

In der technischen Anwendung können Fälle auftreten, in denen ein Teil des Randes mit einer leitfähigen Schicht überzogen ist, z.B. erzeugt durch Aufdampfen eines leitfähigem Materials. Von Berechnungsseite her bedeutet dies, daß auf einem Teilrand $\Gamma_k \subset \Gamma$ ein konstantes elektrisches Potential vorliegt, d.h.

$$\varphi(x) = \varphi_k \quad \text{für } x \in \Gamma_k \,.$$

Im Gegensatz zu einer Dirichletrandbedingung ist allerdings der Wert von $\varphi_k$ nicht vorgegeben, sondern ergibt sich bei der Berechnung als Lösung. Genauer gesagt reduziert sich die Anzahl der $\varphi$-Freiheitsgrade auf dem Teilrand $\Gamma_k$ von ursprünglich $N_k$ auf 1. Eventuell zu erwartende mechanische Auswirkungen der leitfähigen Schicht werden vorerst nicht berücksichtigt.
Die numerische Behandlung kann mit vergleichsweise geringem Zusatzaufwand direkt in den Löser eingebettet werden. Zum Einsatz kommen hierbei Unterraum-Projektionstechniken, welche für verschiedene Problemklassen wie FE-Netze mit hängenden Knoten, Vorhandensein von Rutschrandbedingungen sowie linear-elastische Kontaktprobleme schon erfolgreich eingesetzt werden (eine recht ausführliche Behandlung findet z.B. in der Arbeit von Unger [68] statt).

### Numerisches Beispiel

Um die Wirkung der verwendeten Technik zu demonstrieren, wird ein Bauteil in liegender U-Form betrachtet, welches auf einer festen (aber isolierenden) Unterlage befestigt ist und auf welches von oben eine Kraft wirkt. An den gegenüberliegenden Innenseiten befinden sich leitfähige Schichten, die man sich als aufgedampfte Elektroden vorstellen kann.

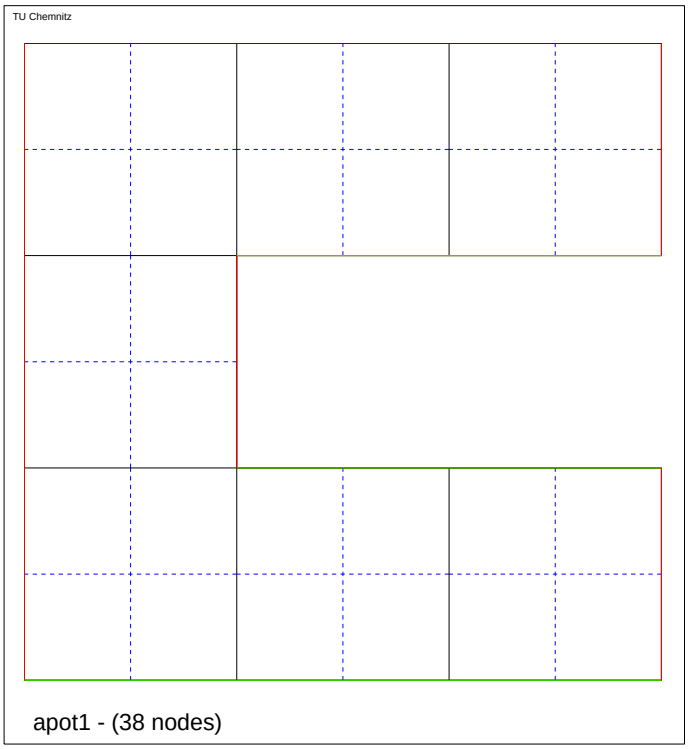



Abbildung 5.1: Startnetz des Beispiels 5.1

**Beispiel 5.1** *Betrachten* $\Omega = (0,3)^2 \setminus [1,3) \times [1,2]$ *mit den Randbedingungen*

$$\begin{aligned} u = \mathbf{0} \quad & \textit{auf} \quad \Gamma_{D,u} = (0,3) \times 0\,, \\ \varphi = 0 \quad & \textit{auf} \quad \Gamma_{D,\varphi} = (1,3) \times 1\,, \\ \varphi = \varphi_k \quad & \textit{auf} \quad \Gamma_k = (1,3) \times 2\,, \\ \sigma \cdot \mathfrak{n} = \sigma_0 \quad & \textit{auf} \quad \Gamma_{N,u} = (0,3) \times 3\,. \end{aligned}$$

Durch die einwirkende Kraft entsteht mittels piezoelektrischer Kopplung zwischen diesen beiden Seiten eine elektrische Spannung, welche der Potentialdifferenz entspricht. Die Startvernetzung der Anordnung mit Viereckselementen ist in Abbildung 5.1 dargestellt. Nach einigen Schritten adaptiver Verfeinerung ist das verformte Netz sowie die elektrische Potentialverteilung und ihre Isolinien in Abbildung 5.2 dargestellt. Zur eindeutigen Bestimmtheit ist das Potential an der unteren Elektrode auf Null gesetzt, an der oberen weist es einen konstanten Wert auf, welcher als Näherungslösung ermittelt wird. Die numerischen Ergebnisse zeigen eine starke Verdichtung der Potential-Isolinien entsprechend hohen Gradienten (elektrische Feldstärke) an den inneren Ecken an, dort liegen mit den einspringenden Ecken und dem Wechsel der Randbedingung gleich 2 Ursachen für eine Singularität des elektrischen Feldes vor. Die Konzentration der Verfeinerung weist darauf hin, daß der Fehlerschätzer die auftretenden Singularitäten identifiziert.

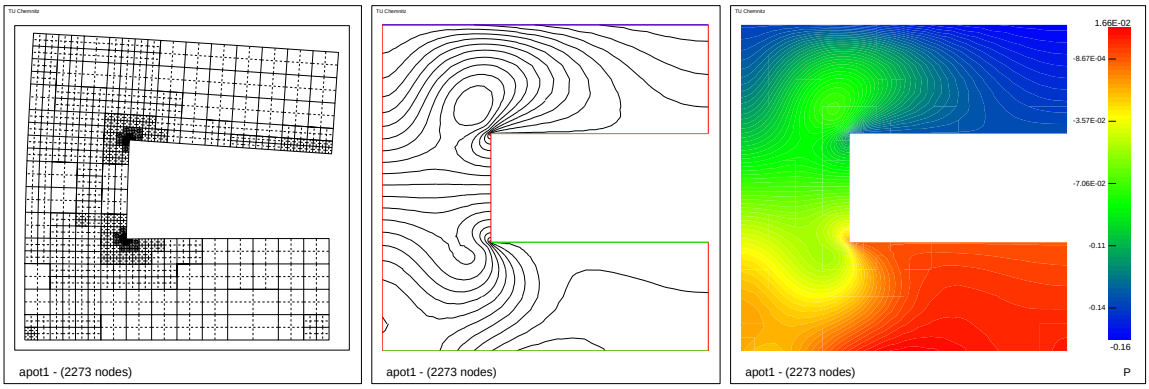



Abbildung 5.2: Deformiertes Netz und Potential nach Verfeinerung

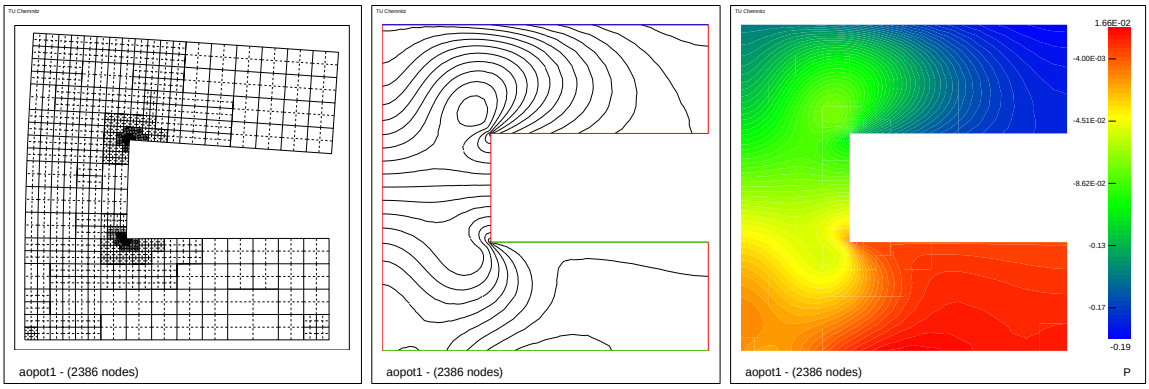



Abbildung 5.3: Deformiertes Netz und Potential ohne leitfähige obere Innenseite

Zum Vergleich wurde das Beispiel modifiziert, indem die Leitfähigkeitsrandbedingung auf $\Gamma_k$ einfach weggelassen bzw. in eine homogene Neumannrandbedingung umgewandelt wurde. Die Ergebnisse der modifizierten Rechnung zeigt Abbildung 5.3, man sieht daß auf dem nun freien Randstück die Isopotentiallinien nun nicht mehr alle zur inneren Ecke abzweigen, sondern in den inneren Rand hineinlaufen. Die Verformung des Rechengebietes ändert sich dabei nur geringfügig, wie Abbildung 5.4 zeigt.

## 5.2 Kontaktrandbedingungen

Durch die Deformation des betrachteten Körpers kann es an Teilen des Randes, im weiteren als Kontaktrand $\Gamma_C$ bezeichnet, zu Kontakt mit festen Hindernissen (Body-Obstacle-Contact) oder aber mit einem anderen Körper bzw. mit sich selbst (Body-Body-Contact) kommen. Um eine physikalisch nicht gegebene Durchdringung als Resultat der Berechnung zu vermeiden, sind zusätzliche Beschränkungen an die Verschiebungsfreiheit zu setzen. Eine Schwierigkeit gegenüber gewöhnlichen Randbedingungen besteht darin, daß die genaue Kontaktzone $\Gamma_C$ im Vorhinein meist nicht bekannt ist. Im Allgemeinen kann man aber

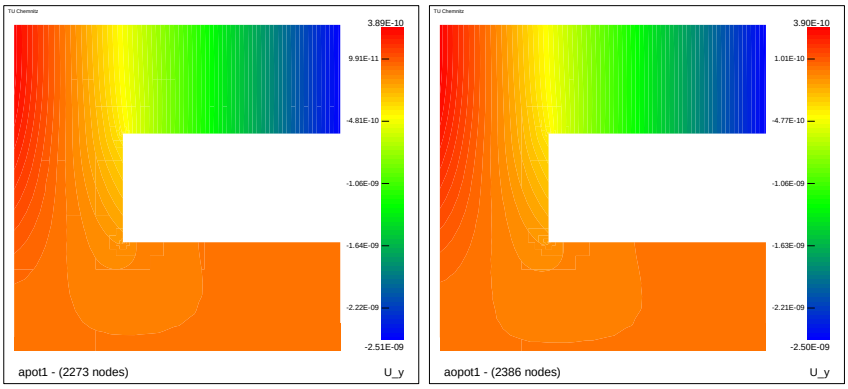



Abbildung 5.4: Verschiebung in $y$-Richtung bei beiden Beispielvarianten im Vergleich

eine „kontaktverdächtige“ Teilmenge $\Gamma_C^{\text{pot}}$ des Randes angeben, so daß $\Gamma_C \subset \Gamma_C^{\text{pot}}$ gesichert ist. Für den linear-elastischen Fall wurde in der Arbeit von Unger [68] die Kontaktproblematik ausführlich untersucht sowie Lösungstechniken beschrieben, welche sich relativ allgemein anwenden lassen da sie auf der Anwendung von Projektionsverfahren direkt im Löser fußen. Die Kontaktzone $\Gamma_C$ wird dabei im Verlauf der adaptiven Rechnung erlernt und zunehmend genauer aufgelöst. Somit ist eine Basis gegeben, die Kontaktproblematik auch auf piezoelektrische Aufgabenstellungen zu erweitern.
In welcher Weise das elektrische Feld in die Kontaktrandbedingungen einfließt, hängt von der Art des Kontaktes und seiner Modellierung ab. Die am einfachsten zu realisierende Variante ist der isolierende Kontakt, welcher einem festen Hindernis aus elektrisch isolierendem Material wie z.B. Porzellan, oder einem zweiten deformierbaren Körper aus elektrisch isolierendem Material entspricht. In diesem Falle gilt die homogene dielektrische Verschiebungsrandbedingung

$$D \cdot \mathfrak{n} = 0 \quad \text{für } x \in \Gamma_C \,.$$

Bei Kontakt des Körpers mit einem weiteren Körper aus piezoelektrischem Material oder sich selbst wäre die Isolierrandbedingung nur gültig, wenn die Körperoberfläche zumindest auf einer Kontaktseite isoliert ist, z.B. durch einen Isolieranstrich. Andernfalls ist als elektrische Kontaktrandbedingung hier im Sinne eines ideal leitenden Kontaktes ein Potentialausgleich zwischen den beiden Kontakträndern anzusetzen:

$$\varphi(x_1) = \varphi(x_2) \quad \text{für } x_i \in \Gamma_{C_i} \text{ sowie } x_1 + u(x_1) = x_2 + u(x_2) \,.$$

Dabei bezeichnet hier $\varphi(x_i)$ den Wert von $\varphi$ auf dem Rand $\Gamma_{C_i}$ des (Teil-)Körpers $\Omega_i$, welcher in Abbildung 5.5 für den undeformierten Zustand dünn gepunktet dargestellt ist. Im deformierten Körper dagegen kommen beide Kontaktränder auf der Kontaktkurve $\hat{\Gamma}_C$ zum liegen.
Die Kontaktrandbedingung für das Potential müßte also wiederum beispielsweise durch eine Unterraum-Projektion realisiert werden.

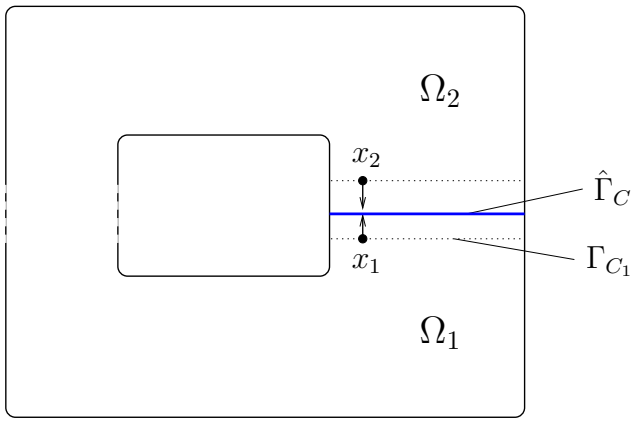



Abbildung 5.5: Bezeichnung bei leitendem Kontakt ($\hat{\Gamma}_C$ im deformierten Zustand)

Eine dritte denkbare Art Kontaktrandbedingung wäre der Kontakt mit einem Hindernis oder zweiten Körper aus leitfähigem Material wie Metall. In diesem Falle würde die Kontaktrandbedingung für das elektrische Feld der in Abschnitt 5.1 eingeführten Randbedingung entsprechen. In Unterschied zu Abschnitt 5.1 wirkt diese Randbedingung im Kontaktfall allerdings nur in der Kotaktzone, die im allgemeinen nicht von vornherein bekannt ist.

**Beispiel 5.2** *Wir betrachten den in Abbildung 5.6 dargestellten quadratischen Körper $\Omega$ der Seitenlänge $a$ aus Piezomaterial, der in einer Raumecke liegt und am unteren sowie linken Rand in Tangentenrichtung reibungsfrei rutschen kann, während die Normalverschiebung jeweils fixiert ist („halbe Dirichletbedingung“ für die Komponente $u_y$ bzw. $u_x$). An der oberen Seite ($y = a$) greifen in Normalenrichtung Randkräfte und Randladungen an. Nach der rechten Seite ist zunächst ein freier Rand, allerdings befindet sich in kleiner Entfernung $0.01a$ ein senkrechtes Hindernis bis zur halben Höhe $\frac{a}{2}$.*

Die Randbedingungen bewirken ein Zusammendrücken des Körpers in vertikaler Richtung, während in Richtung der positiven $x$-Achse eine Ausdehnung erzeugt wird und der Körper im unteren Teil gegen das Hindernis gedrückt wird. In Abbildung 5.7 wird die Verformung von $\Omega$ durch das deformierte adaptiv verfeinerte Netz dargestellt, man kann sehr deutlich eine Konzentration der Verfeinerung am Rand der Kontaktzone beobachten. Zusätzlich zum Netz sind in Abbildung 5.7 die Höhenlinien der Horizontalverschiebung $u_x$ dargestellt, man erkennt eine nach oben hin zunehmende Ausbeulung des Körpers oberhalb des Hindernisses. Die maximale $x$-Verschiebung liegt hier bei etwa $0.018a$.
Exakt die gleichen Lösungsbilder bekommt man, wenn man Beispiel 5.2 modifiziert und die Kraftrandbedingung auf dem oberen Rand zu $\sigma_{yy} = \sigma_{xy} = 0$ abändert. Der Einfluß der Ladungsrandbedingung ist in diesem Beispiel aufgrund der gewählten Größenordnung stark dominierend. Diesen Effekt kann man auch indirekt beobachten: Schaltet man die Piezokopplung testweise einmal aus (Konstanten $e_{ij} = 0$ setzen), so ergibt sich eine maximale

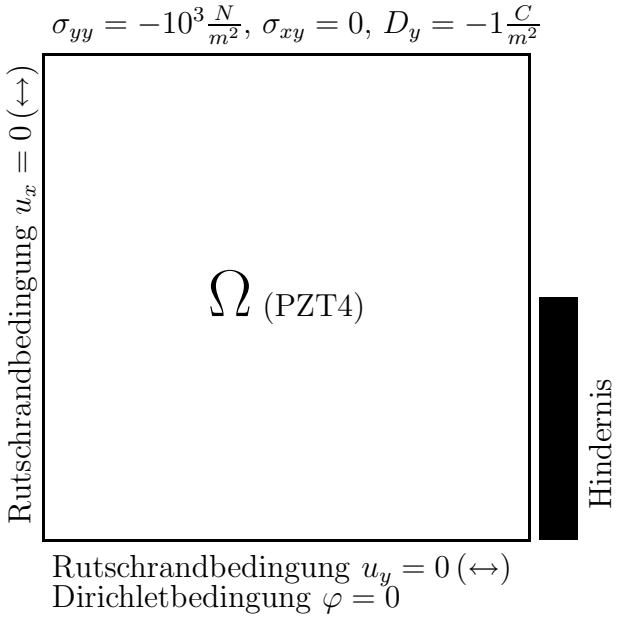



Abbildung 5.6: Anordnung des Beispiels 5.2 mit möglichem Hinderniskontakt

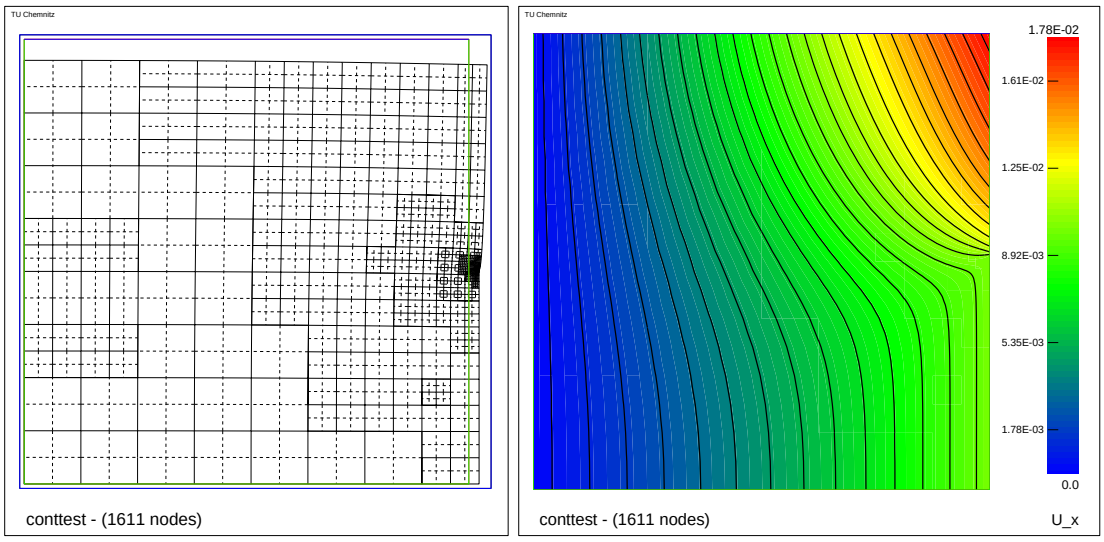



Abbildung 5.7: Deformiertes Netz und Isolinien von $u_x$ in Beispiel 5.2.

$u_x$-Verschiebung lediglich in der Größenordnung $10^{-8}a$, so daß es zu keinem Hinderniskontakt kommt und sich $\Omega$ nur sehr gering zu einem Rechteck verformt.

## 5.3 Stationärer Riß

Ein Riß ist als sehr schmaler Einschnitt in das Gebiet gekennzeichnet und reicht meist vom Rand her in das Gebiet hinein. Es ist aber auch möglich, daß Risse im Gebietsinneren existieren (ein gern genutztes Beispiel hierfür ist der später vorgestellte Griffith-Riß).
Geometrisch läßt sich ein Rißgebiet als Grenzfall eines Gebietes mit einspringender Ecke ansehen, an der Rißspitze weist dieses im unverformten Zustand einen Innenwinkel von 360 Grad auf. Aufgrund dieser Eigenschaft sind an der Rißspitze Singularitäten der Spannungskomponenten $\sigma_{ij}$, im piezoelektrischen Fall außerdem auch der dielektrischen Verschiebungen $D_i$ zu erwarten.

### 5.3.1 Analytische Lösungszugänge

Für spezielle Rißkonfigurationen in der unendlichen Ebene wurden von verschiedenen Autoren analytische Lösungsmethoden beschrieben. Ein Ansatz um derartige Problem zu lösen ist die Verwendung der Methode der komplexen Potentiale, welche einen von Muskhelichwili [44] und Lekhnitzkij [36] für Elastizitätsprobleme vorgeschlagenen Formalismus benutzt. Zur Erweiterung auf piezoelektrische Aufgabenstellungen wurden von Sosa [60, 61] zwei Potentiale $U$ für die Spannungen und $\chi$ für die dielektrischen Verschiebungen eingeführt, man definiert

$$\begin{array}{lll} \sigma_{11} = U_{,22} \ , & \sigma_{12} = U_{,12} \ , & \sigma_{22} = U_{,11} \ , \\ D_1 = \chi_{,2} \ , & D_2 = \chi_{,1} \ . & \end{array} \tag{5.1}$$

Mit dieser Definition sind die homogenen Gleichgewichtsbedingungen (2.28) und (2.29) automatisch erfüllt (homogen bedeutet verschwindende Volumenkräfte und Ladungsdichte). Schreibt man das lineare Materialgesetz (2.43) invers auf, erhält man im zweidimensionalen Fall die folgenden Gleichungen, vgl. [60]:

$$\left[\begin{array}{c} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ 2\varepsilon_{12} \\ \hline \\ E_1 \\ E_2 \end{array}\right] = \left(\begin{array}{ccc|cc} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & b_{12} \\ a_{12} & a_{22} & 0 & 0 & b_{22} \\ 0 & 0 & a_{33} & b_{31} & 0 \\ \hline 0 & 0 & -b_{31} & \delta_{11} & 0 \\ -b_{12} & -b_{22} & 0 & 0 & \delta_{22} \end{array}\right) \left[\begin{array}{c} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \\ \hline \\ D_1 \\ D_2 \end{array}\right] . \tag{5.2}$$

Die Umrechnungsformeln der Materialkonstanten befinden sich im Anhang. Einsetzen von (5.1) und (5.2) in die Kompatibilitätsbedingungen (2.27) und anschließende Elimination des Potentials $\chi$ führt gemäß [60] bzw. [55] zu einer partiellen Differentialgleichung 6.Ordnung in $U$ der Form

$$(L_4 L_2 + L_3 L_3) U = 0$$

mit linear von den Materialparametern abhängigen Differentialoperatoren $L_m$ der Ordnung $m$. Diese Differentialgleichung läßt sich mit dem Ansatz

$$U(x_1, x_2) = U(x_1 + \tau x_2)$$

automatisch befriedigen, wenn die komplexe Zahl $\tau$ die charakteristische Gleichung des zugehörigen Differentialoperators erfüllt. Die im allgemeinen Fall 6 linear unabhängigen Wurzeln ermöglichen die Konstruktion von 6 Funktionen $U_j(x_1 + \tau_j x_2),\ j = 1, \ldots, 6$, als deren Linearkombinationen sich die allgemeine Lösung der Differentialgleichung darstellen läßt. Definiert man $z_j = x_1 + \tau_j x_2$ und stellt nun die Funktionen $U_j(z_j)$ mithilfe einer Laurentreihenentwicklung dar (wobei der Koordinatenursprung in die Rißspitze gelegt werden sollte), erhält man die in [55] angegebene Darstellung

$$U(x_1, x_2) = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{6} d_j(\lambda_k)(x_1 + \tau_j x_2)^{\lambda_k + 2}\,.$$

Dabei sind $\lambda_k$ allgemeine komplexe Zahlen (so daß $\bar{\lambda}_k$ existiert), und die komplexen Variablen $d_j(\lambda_k)$ sind die freien Koeffizienten der Funktionen $(x_1 + \tau_j x_2)^{\lambda_k + 2}$. Man bezeichnet $\lambda_k$ auch als Eigenwerte zu den Eigenfunktionen

$$U_k = \sum_{j=1}^{6} d_j(\lambda_k)(x_1 + \tau_j x_2)^{\lambda_k + 2}\,.$$

Für eine konkrete Lösung müssen zunächst die Eigenwerte und dann die Koeffizienten $d_j(\lambda_k)$ derart bestimmt werden, daß die vorgegebenen Randbedingungen erfüllt werden (im konkreten Beispiel die Randbedingungen an den Rißufern sowie am fernen Rand). In analoger Weise bestimmt man die Lösung für das ebenfalls eingeführte Potential $\chi$ und ist somit in der Lage, die elektromechanischen Felder anzugeben. Interessant für das Verhalten in der Rißspitzenumgebung sind vor allem die ersten Eigenfunktionen mit $\lambda_1 = -\frac{1}{2}$, weil diese die asymptotisch stärkste Singularität darstellen und somit das Nahfeld dominieren. Die abgeleiteten Basisfunktionen für $\sigma_{ij}$ sowie $D_j$ besitzen dann ein Verhalten proportional zu $r^{-0.5}$, wobei $r$ den Abstand zur Rißspitze bezeichnet. Die Koeffizienten für die ersten Eigenfunktionen bezeichnet man als K-Faktoren oder auch Spannungsintensitätsfaktoren.

Die beschriebene Methode wurde unter anderem von Scherzer und Kuna verwendet, um Eigenfunktionsentwicklungen für Probleme mit Interface-Eckenkonfigurationen anzugeben [55]. Xu und Rajapakse ermittelten Lösungen für einen abknickenden Riß [73] in Modifizierung zum im folgenden Abschnitt vorgestellten Griffith-Problem.

Ein ähnlicher formaler Zugang zur Lösung ist die Erweiterung eines von Stroh [63] eingeführten Formalismus durch Barnett und Lothe [7]. Mit dieser Methode ermittelte Lösungsdarstellungen für Rißkonfigurationen findet man unter anderem in [46],[64],[47] sowie [51].

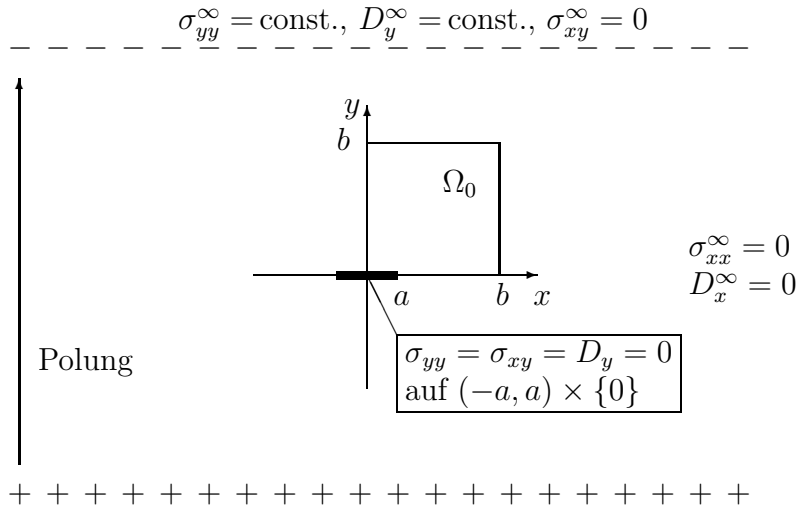



Abbildung 5.8: Rißanordnung und Ausschnitt Rechengebiet für FEM

### 5.3.2 Der elektromechanische Griffith-Riß

Eine Möglichkeit numerische Berechnungsverfahren für zweidimensionale Probleme mit piezoelektrischem Material zu verifizieren, ist die Betrachtung eines Risses der Länge $2a$ in der unendlichen Ebene. Dieser Riß verläuft senkrecht zur Polungsrichtung $x_2$. Als asymptotische Randbedingungen im Unendlichen setzt man Normalspannungen $\sigma_{22}^{\infty}$, Schubspannungen $\sigma_{21}^{\infty}$ sowie ein elektrisches Feld $D_2^{\infty}$ an.
Analytische Lösungen für verschiedene Belastungsfälle des Griffith-Problems findet man beispielsweise in den Publikationen von Suo et.al [64] und Park/Sun [47] sowie dem hier benutzten unveröffentlichten Manuskript von Scherzer [53] für die folgenden elektrischen und mechanischen Feldgrößen:

$$u_i^{as},\ \varphi^{as},\ \varepsilon_{ij}^{as},\ E_i^{as},\ \sigma_{ij}^{as},\ D_i^{as}\,.$$

Der Index $^{as}$ steht hierbei für die asymptotische Lösung. Außerdem ist eine explizite Angabe der Spannungsintensitätsfaktoren ($K$-Faktoren) möglich, welche als bruchmechanische Kenngrößen Bedeutung haben.
Abbildung 5.8 stellt die Anordnung in der unendlichen Ebene dar. Für die numerische Berechnung mittels FEM ist es notwendig, ein endliches Teilgebiet auszuschneiden. Dieses wird hier als ein Quadrat der Seitenlänge $2b$ mit dem Koordinatenursprung im Zentrum gewählt. Für $b \gg a$ ergibt sich eine Annäherung zum asymptotischen Griffith-Problem.
Aufgrund von Symmetrieeigenschaften genügt es, lediglich einen Quadranten zu betrachten. Dies führt auf das zum Einheitsquadrat proportionale Rechengebiet

$$\Omega_0 = (0, b)^2\,,$$

welches mit finiten Dreiecks- oder Vierecks-Elementen vernetzt werden kann. Zusätzlich ist bei der Vernetzung zu beachten, daß ein Knoten auf die Rißspitze $(a, 0)$ gelegt wird. Die

Randbedingungen werden hier folgendermaßen gesetzt (Riss-Mode I):

$$\begin{aligned} u_2 = 0 \quad &, \quad x_1 = 0,\, x_2 \in (0,b) \\ u_2 = \varphi = 0 \quad &, \quad x_1 \in (a,b), x_2 = 0 \\ \sigma_{22} = \sigma_{22}^{\infty},\, \sigma_{21} = 0,\, D_2 = D_2^{\infty} \quad &, \quad x_1 \in (0,b), x_2 = b \\ \sigma \cdot \mathfrak{n} = \mathbf{0},\, D \cdot \mathfrak{n} = 0 \quad &, \quad \text{sonst}\,. \end{aligned} \tag{5.3}$$

Die asymptotische Lösung sowie bei festgelegtem Parameter $b$ auch die Lösung der Aufgabe im endlichen Teilgebiet hängt aufgrund der Linearität der Aufgabe bis auf Proportionalität vom hier einheitenlos definierten Verhältnis

$$\rho := \frac{D_y^{\infty}}{\sigma_{yy}^{\infty}} \cdot 10^{10} \frac{V}{m} \tag{5.4}$$

ab. Zur Durchführung von Beispielrechnungen wurde für $\Omega$ der Größenparameter $b = 10$ gewählt und die Rißlänge $a = 1$ gesetzt. Schon für dieses Verhältnis 1:10 von Rißlänge zu Gebietsausdehnung liefert die FEM-Rechnung in der Umgebung des Risses brauchbare Näherungen der asymptotischen Lösung.
Die Betrachtung der analytischen Lösung zeigt außerdem für den Parameter $\rho$ zwei Grenzfälle auf:

$$\rho_u = -7.9, \quad \rho_o = 102.5$$

mit Abweichung der Lösung vom physikalisch plausiblen Verhalten für $\rho \notin [\rho_u, \rho_o]$ aus den folgenden Gründen:

- Durchstoßung der Rißlinie (auch als Ligament bezeichnet, $\equiv x_2 = 0$) aufgrund theoretisch negativer Werte von $u_2$ im Bereich $(0, a)$ für Werte von $\rho < \rho_u$. Dies würde zur Durchdringung mit dem symmetrisch liegenden und dann in positiver $x_2$-Richtung verschobenen Rißrand von der Seite $x_2 < 0$ her führen und damit geht die Aufgabe in ein Kontaktproblem über. Die unzulässige Deformation ist sichtbar in einer Beispielrechnung mit dem Wert $\rho = -100$, siehe dazu Abbildung 5.9 (die Netzdeformation wird zwecks besserer Sichtbarkeit von der Programmgrafik überhöht dargestellt).

- Selbstdurchdringungseffekte in der Umgebung der Rißspitze für Werte von $\rho > \rho_o$. Verursacht werden diese durch eine Aufdehnung der Rißflanken in $x_1$-Richtung, gekennzeichnet durch $\varepsilon_{11} > 0$ für $x_2 = 0$ im Bereich $x_1 \in (0, a)$ einerseits und eine starke Kontraktion des verbleibenden Teils der $x_1$-Achse resultierend in gegenläufigen $x_1$-Verschiebungen andererseits.

Um zu sehen wie nahe die adaptive FEM die asymptotische Lösung approximiert, kann man die analytischen und numerisch berechneten Werte entlang ausgewählter Linien vergleichen. Das wäre z.B. auf dem Ligament (entlang Rißlinie $x_2 = 0$), oder senkrecht zum Ligament wie $x_1 = a$, $x_1 = 2a$.
Abbildung 5.10 zeigt die berechnete FEM-Approximation von $\sigma_{22}$ entlang des Ligaments im Vergleich zur asymptotisch exakten Lösung für die Werte $\rho = 10\rho_o$ (unzulässig), $\rho = \rho_o$ (an

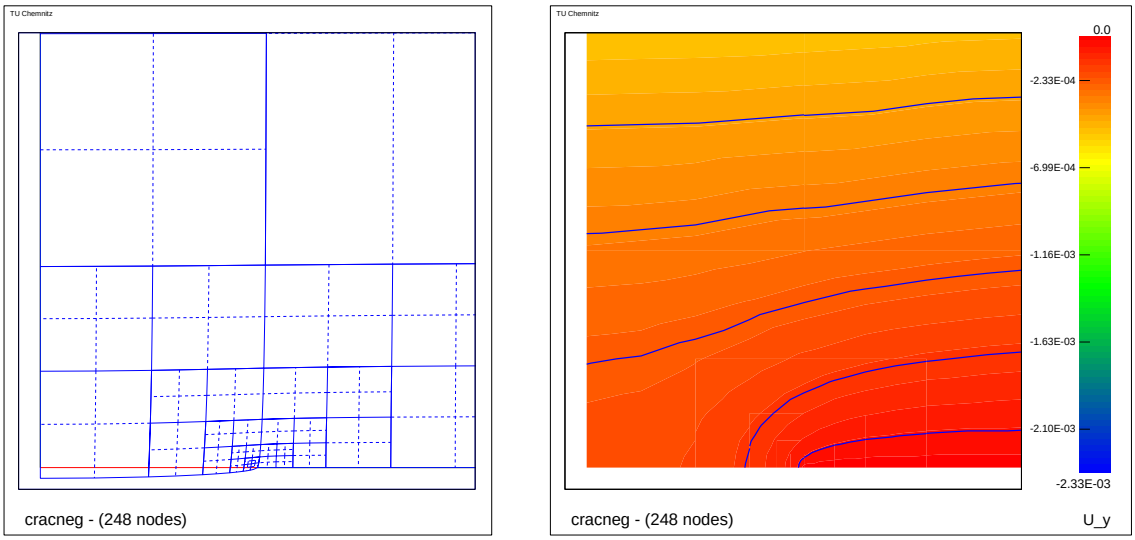
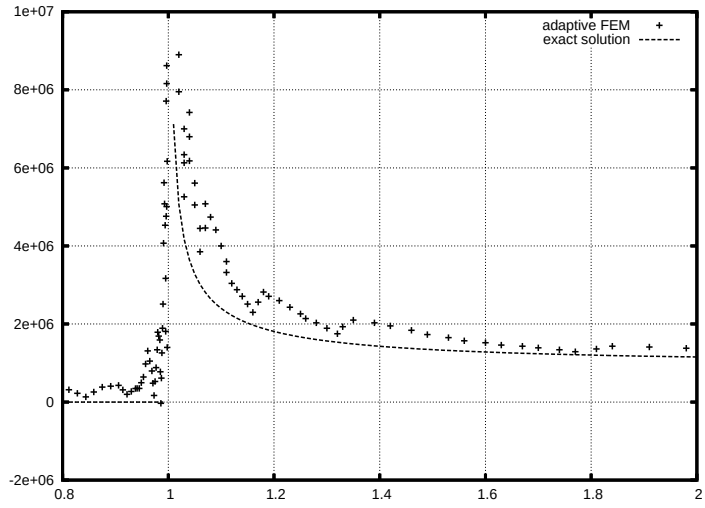
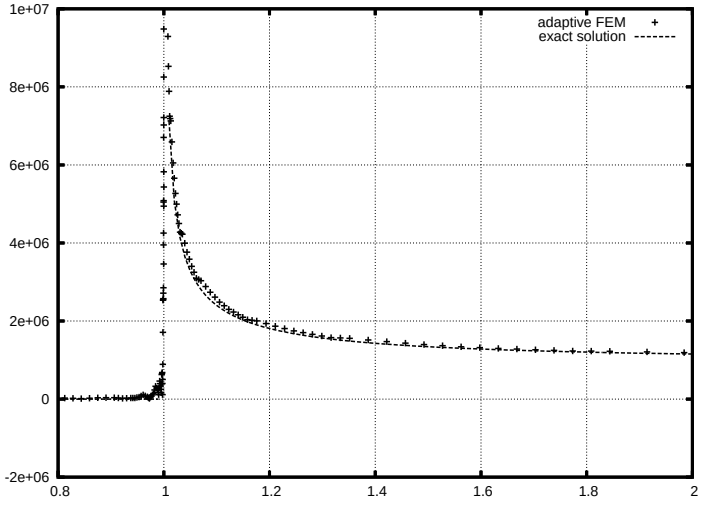



Abbildung 5.9: Verformtes Netz und $y$-Verschiebung im Teilgebiet $[0,2]^2$ beim Griffith-Rißbeispiel mit $\rho = -100$ ohne Kontaktbeachtung.

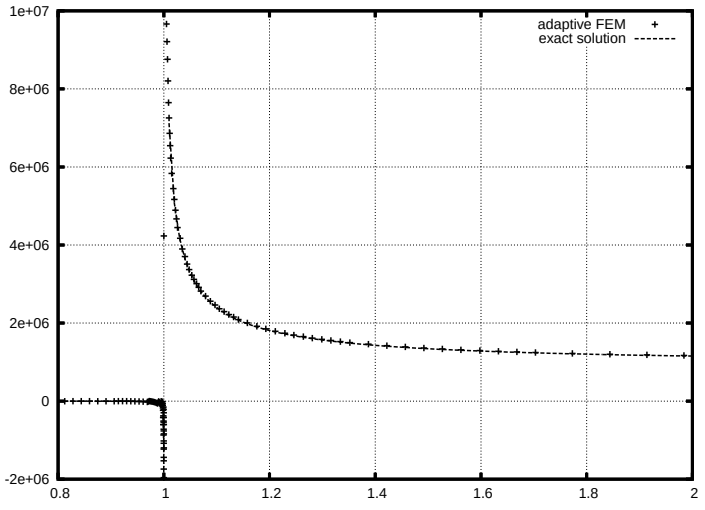
der Grenze des zulässigen Bereichs) sowie $\rho = \frac{1}{10}\rho_o$ (im Inneren des zulässigen Bereichs). Die analytische Lösung des asymptotischen Problems ist in allen 3 Fällen gleich, allerdings ist erkennbar daß die FEM-Lösung im unzulässigen Fall Oszillationen und einen erheblichen Fehler aufweist, während an der Grenze des zulässigen Bereichs schon eine brauchbare Approximation vorliegt und im 3.Fall im Inneren des zulässigen Bereichs die analytische Lösung nahezu exakt approximiert wird.
Weiterhin zeigt Abbildung 5.11 FEM-Lösung und analytische Lösung $\sigma_{22}$ auf der Geraden von der Spitze ausgehend senkrecht zum Ligament. Hier sind ebenfalls für das unzulässige $\rho = 10\rho_o$ Ungenauigkeiten zu erkennen (allerdings geringer und weniger oszillierend als auf dem Ligament), welche mit Verkleinerung von $\rho$ wieder verschwinden. Hier ist allerdings auch die analytische Lösung von $\rho$ abhängig.
Da aufgrund des linearen Modells die FEM-Lösung auch für physikalisch unmögliche Deformationen eine Näherung der analytischen Berechnung herstellen müßte, stellt sich die Frage, durch welche numerischen Effekte die beschriebenen Instabilitäten und fehlerhafte Approximation bei überhöhten Werten von $\rho$ zustande kommen. Diese Effekte wurden sowohl bei der Verwendung quadratischer als auch linearer Elemente in ähnlicher Weise beobachtet. Um Ursachen zu finden, wird zunächst die numerische Berechnung der fraglichen Größen aufgeschlüsselt. Die Lösung des FEM-Gleichungssystems führt zunächst zu den Unbekanntenvektoren von $u_h$ sowie $\varphi_h$. Aus diesen werden dann durch Differentiation der Ansatzfunktionen die abgeleiteten Größen $\varepsilon_h$ und $\nabla\varphi_h$ in den Elementen berechnet, diese Ableitungen sind allerdings nicht über die Elementgrenzen stetig und damit an den Eckknoten nicht wohlbestimmt. Um trotzdem verwendbare Knotenwerte und damit stetige Funktionen $\varepsilon_h$ sowie $\nabla\varphi_h$ zu bekommen, werden die Werte aus allen im entsprechenden Knoten zusammenstoßenden Elementen $T_i$ gemittelt, wobei die Werte aus den einzelnen angrenzenden Elementen mit der Elementfläche gewichtet werden. In Formeln ausgedrückt




$\rho = 1025$

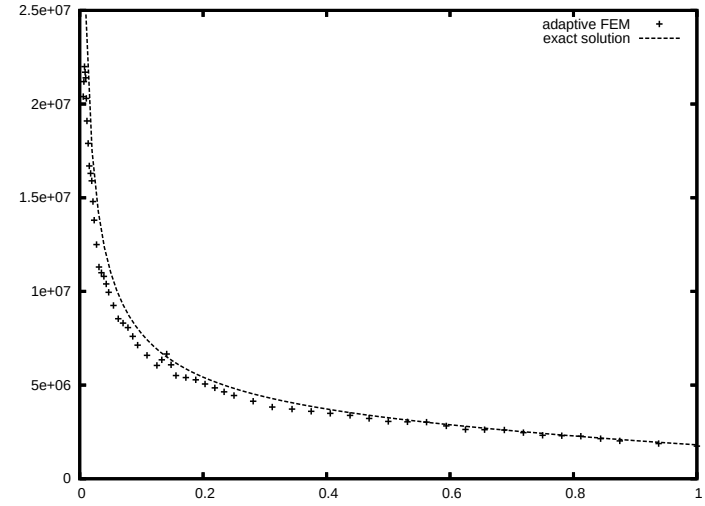



$\rho = 102.5$

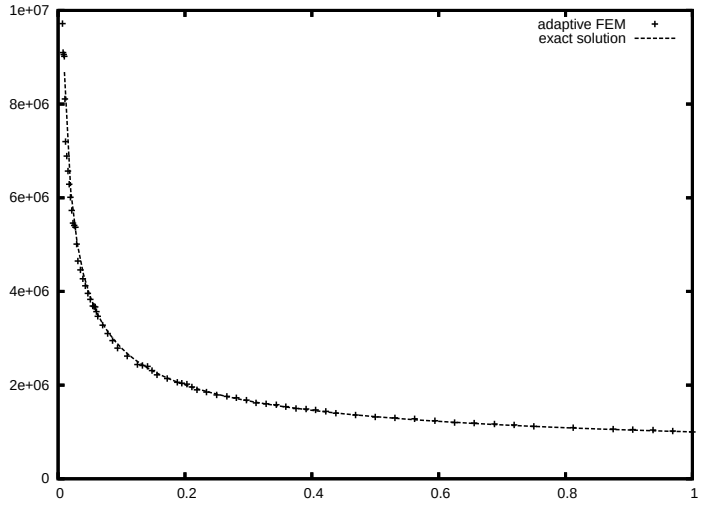



$\rho = 10.25$

Abbildung 5.10: Numerisch berechneter und asymptotisch exakter Verlauf von $\sigma_{22}$ auf dem Ligament für unzulässige und zulässige Werte von $\rho$.




$\rho = 1025$




$\rho = 102.5$

Abbildung 5.11: Numerisch berechneter und asymptotisch exakter Verlauf von $\sigma_{22}$ auf Geraden $x = a$ senkrecht zum Ligament für verschiedene Werte von $\rho$.

| $(x, y)$ | $\sigma_{22}^{\text{mech}}$ | $\sigma_{22}^{\text{el}}$ | $\left\lvert\frac{\sigma_{22}}{\sigma_{22}^{\text{mech}}}\right\rvert$ |
|---|---|---|---|
| (1.0703,0) | 3.97589 E+8 | -3.91575 E+8 | 0.015 |
| (1.0703,0.25) | 1.82728 E+8 | -1.77676 E+8 | 0.027 |
| (0.9375, 0.0625) | 1.42623 E+8 | -1.44335 E+8 | 0.016 |

Tabelle 5.1: Aufspaltung der Spannungskomponente $\sigma_{22}$ in einigen Punkten

| $\lambda$ | $P_1 \begin{pmatrix} 1.0703 \\ 0 \end{pmatrix}$ | $P_2 \begin{pmatrix} 1.0703 \\ 0.25 \end{pmatrix}$ | $P_3 \begin{pmatrix} 0.9375 \\ 0.0625 \end{pmatrix}$ |
|---|---|---|---|
| 1025 | 0.015 | 0.027 | 0.016 |
| **102.5** | .07 | .11 | .025 |
| 10.25 | .44 | .57 | .37 |
| 4.25 | .69 | .88 | .66 |

Tabelle 5.2: Verhältnis $\sigma_{22}^{\text{mech}}/\sigma_{22}$ für verschiedene Werte von $\rho$

berechnet sich für einen Knoten $P$ also

$$\varepsilon_h(P) = \sum_{P \in T_i} \frac{\text{meas}(T_i)}{\sum_{P \in T_i} \text{meas}(T_i)} \cdot \varepsilon_h(P)|_{T_i} \,.$$

Analog berechnet man $\nabla\varphi_h(P)$.
Zu beachten ist, daß die abhängigen Größen $\sigma_{ij}$ und $D_i$ in der FEM-Berechnung erst im Nachgang aus den approximierten Verzerrungen und elektrischen Feldvektoren ermittelt werden. Genauer aufgeschlüsselt berechnet man Spannung und dielektrische Verschiebung als Summen:

$$\begin{array}{rcccl} \sigma & = & \sigma_{\text{mech}} + \sigma_{\text{el}} & := & C : \varepsilon - B \cdot E \,, \\ D & = & D_{\text{mech}} + D_{\text{el}} & := & B^T : \varepsilon + K \cdot E \,, \end{array} \tag{5.5}$$

mit der Aufspaltung in durch mechanische Verzerrungen und durch elektrisches Feld hervorgerufenen Spannungs- bzw. Dielektrische Verschiebungsanteile. Schaut man sich die bei der FEM-Approximation ermittelten mechanisch und elektrisch induzierten Anteile der Spannungskomponente $\sigma_{22}$ in einigen Punkten nahe der Rißspitze an, so erhält man für den zu hoch gewählten Wert $\rho = 1025$ die in Tabelle 5.1 dargestellten Ergebnisse. Auffällig ist dabei, daß die elektrisch induzierten Anteile näherungsweise das negative der mechanisch induzierten sind, es demzufolge zu einer Stellenauslöschung kommt (klassische numerische Instabilität). Die rechte Spalte von Tabelle 5.1 gibt die Größenverhältnisse zwischen der Gesamtspannung und dem mechanisch induzierten Anteil wieder, an den untersuchten Punkten liegt das Verhältnis zwischen 1 und 3 Prozent. In Tabelle 5.2 werden die Verhältnisse zwischen mechanisch induziertem Anteil und Gesamtspannung an den gleichen 3 Punkten für verschiedene Werte von $\rho$ dargestellt. Zu erkennen ist, daß die numerische Instabilität mit kleiner werdendem $\rho$ zunehmend verschwindet, was erklärt daß die FEM

| $(x, y)$ | $D_2^{\text{mech}}$ | $D_2^{\text{el}}$ | $\left\lvert\frac{D_2}{D_2^{\text{mech}}}\right\rvert$ |
|---|---|---|---|
| (1.0703,0) | 0.1334 | 0.1548 | 2.16 |
| (1.0703,0.25) | 0.0597 | 0.0702 | 2.17 |
| (0.9375, 0.0625) | 0.0469 | 0.057 | 2.21 |

Tabelle 5.3: Aufspaltung von $D_2$ in einigen Punkten bei $\rho = 1025$

unterhalb des fett gedruckten Grenzfalles $\rho = 102.5$ wieder brauchbare Ergebnisse liefert. Anders ist die Situation bei der dielektrischen Verschiebung $D$. Hier haben die mechanisch und elektrisch induzierten Anteile gleiches Vorzeichen, weswegen auch für unzulässig hohe Werte von $\rho$ keine Instabilitätseffekte zu beobachten sind, siehe dazu Tabelle 5.3.
Die unterschiedlich stabile Berechnung von $\sigma$ und $D$ sieht man auch gut bei einer Betrachtung der numerischen Lösung in einer Umgebung der Rißspitze, siehe Abbildung 5.12 oben. Ebenfalls erkennt man eine stabilere Berechnung von sowohl $\sigma$ als auch $D$ bei $\rho = 102.5$ und eine noch stabilere Berechnung bei $\rho = 10.25$. Es wurde dabei ausgehend vom Grobnetz jeweils bis zum Erreichen von ca. 3500 Knoten adaptiv verfeinert.

### 5.3.3 Numerische Beispielrechnung zum Griffith-Riß

Für den im vorangegangenen Abschnitt 5.3.2 betrachteten Griffith-Riß wurde eine Beispielrechnung mit der Parameterwahl $\rho = 4.25$ (also im Inneren des zulässigen Bereichs) durchgeführt. Es wurde dabei mit quadratischen Viereckselementen eine adaptive Verfeinerung ausgehend vom Startnetz mit etwa 100 Knoten bis zu einem verfeinerten Netz mit etwa 5000 Knoten durchgeführt. Durch die starke Verfeinerung an der Rißspitzensingularität entstehen mit einer rund 20-maligen Halbierung der Elementgröße nahe der Rißspitze schon sehr winzige Elemente, so daß bei naiver Betrachtung von Knotenkoordinaten numerische Rundungsfehler eine Rolle zu spielen beginnen. Die bei der adaptiven Rechnung auftretenden Iterationszahlen zeigt Abbildung 5.13. Es ist zu erkennen daß die Iterationszahlen mit zunehmender Verfeinerung nicht wesentlich anwachsen, was auf eine sehr gute Arbeit des Vorkonditionierers hindeutet.
Ebenso wurde der mittels Fehlerschätzer geschätzte Fehlerverlauf aufgespalten in beide Anteile $J_\sigma^2$ und $J_D^2$ und diese in Abbildung 5.14 dargestellt. Hier ist zu erkennen, daß nach einem Anwachsen des geschätzten Fehlers im ersten Verfeinerungsschritt (welches dem besseren Erlernen des wahren Fehlers gegenüber dem Grobnetz geschuldet ist) eine signifikante Reduktion des Fehlerquadrates in beiden Komponenten mit fortschreitender Netzverfeinerung erfolgt.
Um an einigen abgeleiteten Lösungskomponenten die Konvergenz der adaptiven Rechnung zu demonstrieren, wurde in dieser Beispielrechnung außerdem in jedem Verfeinerungsschritt die FEM-Näherung für $\sigma_{yy}, \sigma_{xx}$ sowie $\sigma_{xy}$ am schon im Startnetz vorhandenen Punkt $(1, 0.5)$ berechnet und zusammen mit der analytischen Lösung im asymptotischen Fall (welche wie weiter oben erwähnt als Näherung für die korrekte Lösung angesehen werden darf) in Abbil-

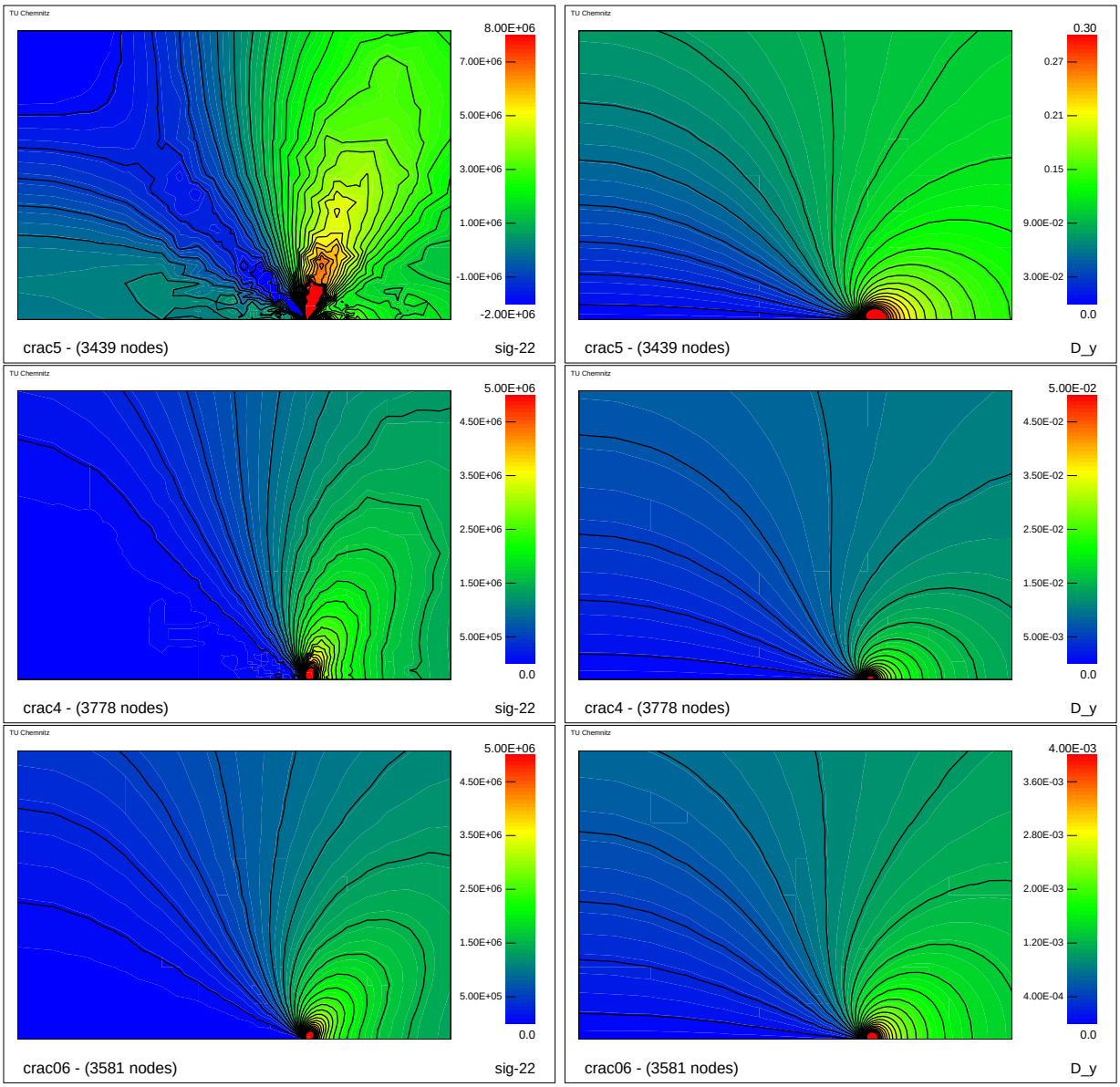



Abbildung 5.12: Isolinienverlauf von $\sigma_{22}$ und $D_y$ aus FEM-Berechnung im Teilgebiet $[0, 1.5] \times [0, 1]$ bei $\rho = 1025$ (oben), $\rho = 102.5$ (Mitte) und $\rho = 10.25$ (unten).

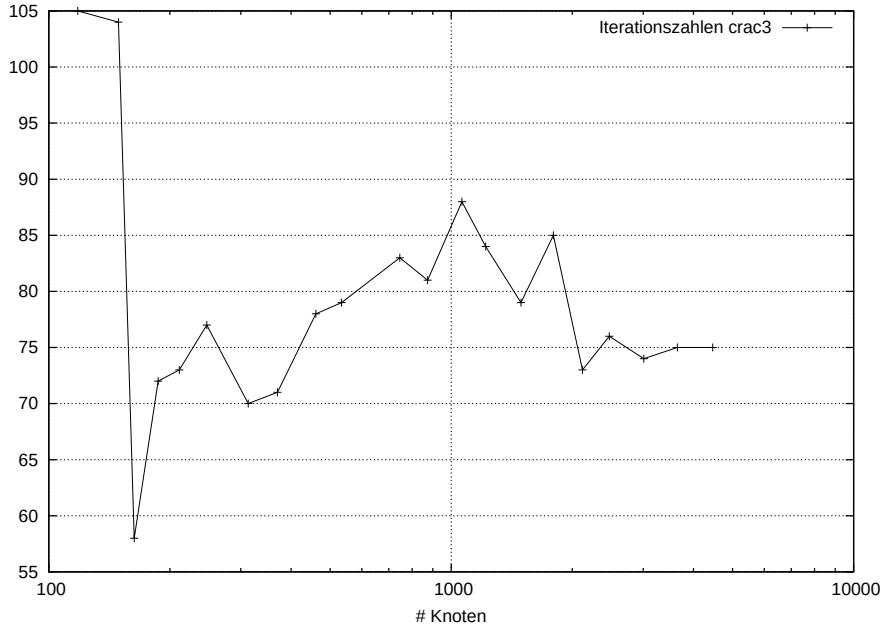



Abbildung 5.13: Iterationszahlen im Griffith-Riß-Beispiel mit $\rho = 4.25$ bei adaptiver Verfeinerung.

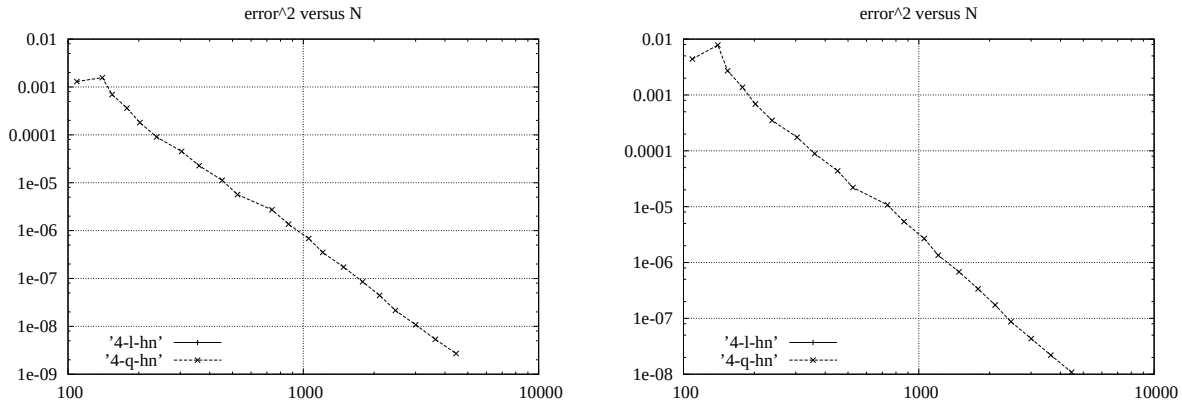



Abbildung 5.14: Geschätzter Fehlerverlauf aufgespalten in $J_\sigma^2$ (links) und $J_D^2$ (rechts) im Griffith-Riß-Beispiel mit $\rho = 4.25$ bei adaptiver Verfeinerung.

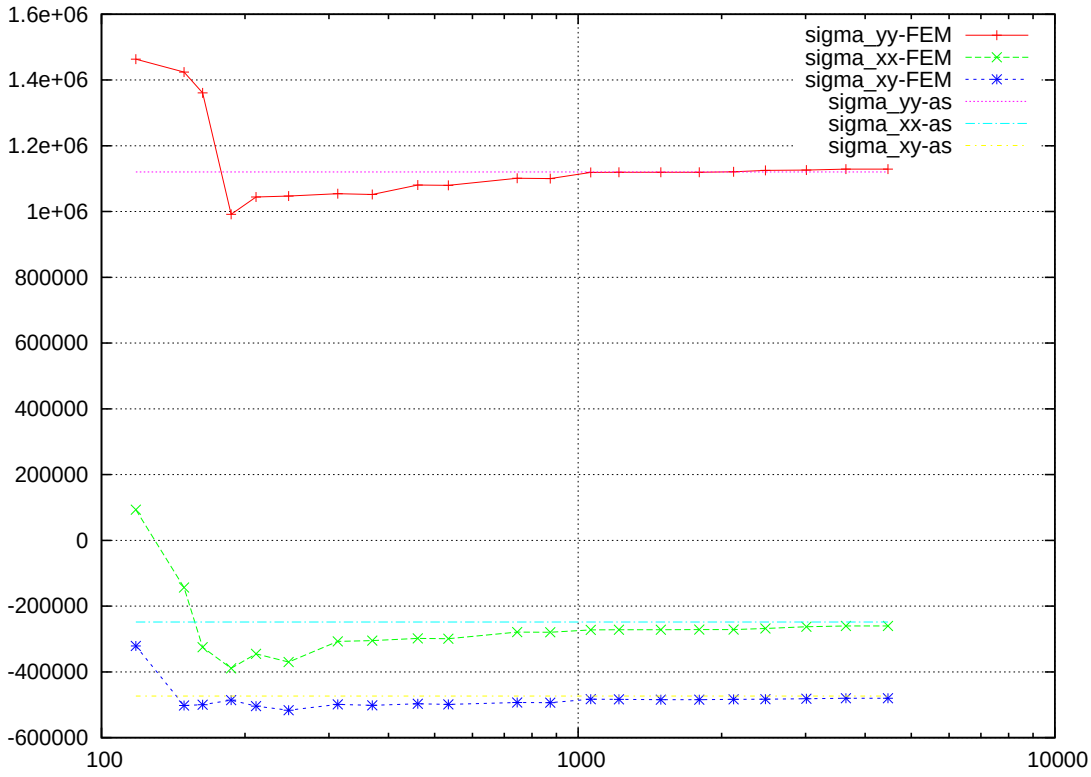



Abbildung 5.15: FEM-Lösungsentwicklung mit adaptiver Verfeinerung und asymptotische Lösung im Punkt $(1, 0.5)$ im Griffith-Riß-Beispiel mit $\rho = 4.25$.

dung 5.15 dargestellt. Hierbei ist eine relativ zügige Konvergenz in die Nähe der asymptotischen Werte zu erkennen. Die verbleibenden Abweichungen sind unter anderem damit zu erklären, daß die asymptotische Lösung für das unendliche Gebiet zur korrekten Lösung im Rechengebiet mit Unendlichkeitsrandbedingungen an den im Endlichen liegenden Rändern (Verhältnis Rißlänge zu Gebietsdurchmesser 1:10) nur eine Näherung darstellt. Auch ein Einsetzen der asymptotischen Lösung in die FEM-Randbedingungen (Dirichlet- oder Neumann) an den endlichen Gebietsrändern liefert nur eine Näherung aufgrund der relativ groben Approximation der Randbedingungen im groben Startnetz.

# Kapitel 6

# Rißwachstum

Einen speziellen Fall bei Elastizitäts- sowie piezoelektrischen Problemstellungen stellen Risse im Material dar. Ursache für die Rißentstehung sind mechanische Spannungsüberhöhungen im Material, für die Auslösung von bruchmechanischen Vorgängen sind allerdings nicht die Spannungen $\sigma$ an konkreten Punkten entscheidend (welche ja beispielsweise an einer Eckensingularität schon jede Schranke überschreiten können). Um Rißwachstum und eventuell auch noch die Richtung des Wachstums vorauszusagen, müssen komplizierter zu berechnende Größen herangezogen werden. Man kennt zum Beispiel Spannungsintensitätsfaktoren, auch als K-Faktoren bezeichnet, welche die Stärke der Singularität an der Rißspitze kennzeichnen, vergleiche Abschnitt 5.3.1. Das Überschreiten kritischer Werte der Spannungsintensitätsfaktoren gilt als ein Kriterium für das Fortschreiten eines Risses im linear-elastischen Fall.
Hervorgerufen werden Spannungsüberhöhungen in erster Linie durch mechanische Beanspruchung (Einwirkung äußerer Kräfte) sowie Materialermüdung und damit einhergehende Zunahme der Sprödigkeit. Im piezoelektrischen Material kommen aufgrund der Piezokopplung außerdem elektrische Einwirkungen in Frage. Begünstigend wirken sich Materialfehler und kleinere Defekte aus, von denen ein Riß seinen Ausgang nehmen kann.
Risse können sich entscheidend auf die Eigenschaften von Bauteilen auswirken. So wird einerseits die Belastbarkeit und damit die Lebensdauer von mechanischen wie piezoelektrischen Komponenten herabgesetzt, bei zyklisch belasteten Bauteilen z.B. in Motoren folgt auf einen Materialriß je nach Rißausrichtung oft schon im nächsten Belastungsschritt der Bruch des Bauteils. Weiterhin stören Risse die elektromechanische Kopplung in piezoelektrischen Komponenten, so daß unter Umständen ein Bauteil trotz mechanischer Stabilität unbrauchbar werden kann.
Interessant ist die Untersuchung der Ausbreitung eines Risses. Gelingt es das Rißwachstum mittels numerischer Simulation vorherzuberechnen, kann dies ein wichtiges Werkzeug bei der Vorhersage der Wirkung sowie zur Entwicklung von Mechanismen zur Vermeidung schädlicher Auswirkungen von Rissen darstellen. Ziel ist dafür, das Wachstum eines Risses zuverlässig zu simulieren.
Die weiteren Betrachtungen beschränken sich auf zweidimensionale Probleme, im allgemeinen dreidimensionalen Fall bringt ein nichtstationärer Riß eine erhebliche Verkomplizierung

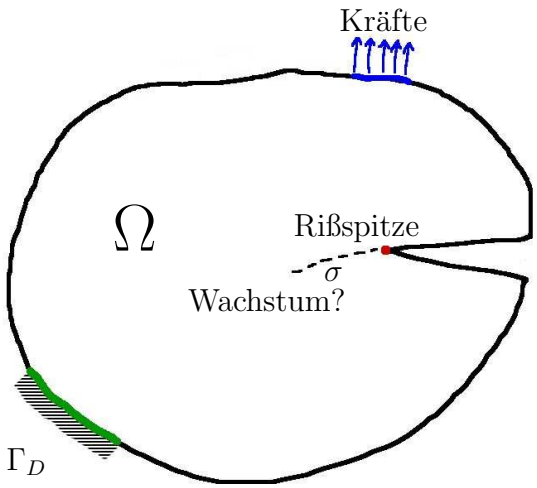



Abbildung 6.1: Schematische Problemdarstellung Rißwachstum

der Aufgabenstellung (vor allem geometrisch) mit sich, so daß eine numerische Untersuchung im Rahmen dieser Arbeit nicht umfassend erfolgen konnte.

## 6.1 Erweiterung des linear elastischer Falls

### 6.1.1 Existierende Arbeiten

Die Entwicklung der linear-elastischen Bruchmechanik findet seit Anfang des 20. Jahrhunderts statt. Ein historischer Überblick findet sich in der Literatur, z.B. [2],[52].
Unter Einbeziehung moderner Methoden der adaptiven FEM öffnen sich neue Möglichkeiten, Rißfortschrittsprobleme numerisch zu simulieren. Im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 393 entstand in Zusammenarbeit der TU Chemnitz mit der TU BA Freiberg ein Finite-Element-Werkzeug zur zweidimensionalen Simulation von Ermüdungsrißwachstum in linear-elastischem Material, siehe [40]. Mit dieser Finite-Element-Simulation gelang es unter anderem, das Rißwachstum in einem Benchmarkproblem [67] eines Werkstücks mit Löchern und gegebenem Anriß in guter Näherung nachzubilden.

### 6.1.2 Netzanpassung

Das Fortschreiten eines Risses erfolgt in die bestehende Vernetzung hinein und erfordert somit die Anpassung des FE-Netzes auf die neue Geometriesituation. Es erfolgt von vornherein eine Beschränkung auf Dreieckselemente, damit vermeidet man eine unnötige Verkomplizierung da bei „schräger“ Teilung eines Vierecks durch einen Riß wieder Dreiecke entstehen können. Außerdem ist mit Vorausschau auf die Rißwachstumsprozeduren die Berechnung von Interaction-Integralen günstiger bei Dreieckselementen möglich.

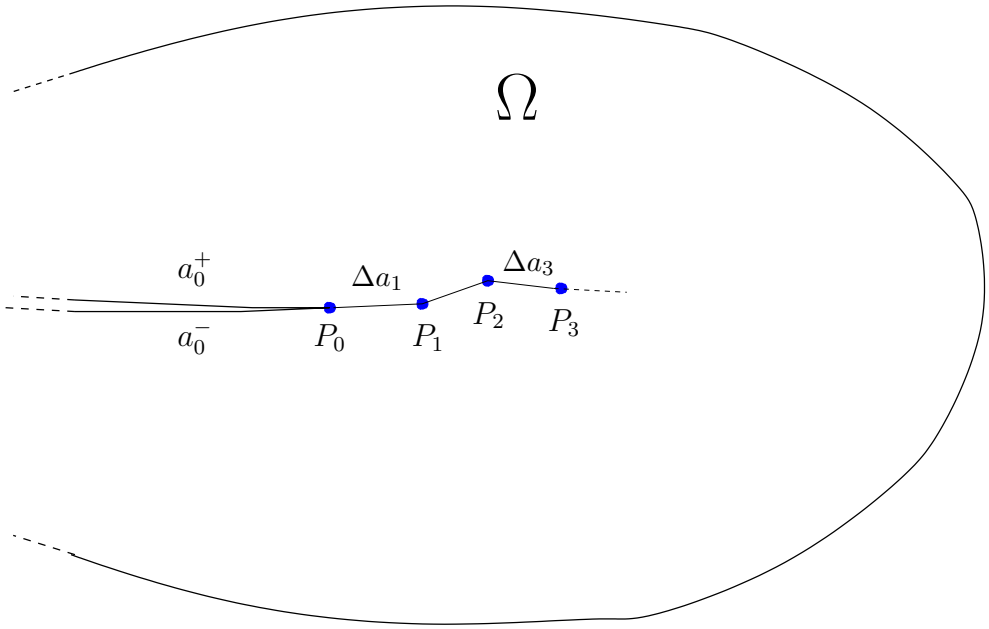



Abbildung 6.2: Bezeichnungen zum ins Gebiet hineinwachsenden Riß

Die Algorithmen zur Netzanpassung aus [40] sollen hier zunächst beschrieben werden, gleichzeitig wird die eingeführte Notation in späteren Teilkapiteln verwendet. Die Netzanpassung kann vom linear-elastischen Rißwachstumsproblem direkt für den piezoelektrischen Fall übernommen werden. Als Ausgangszustand betrachten wir ein vernetztes Gebiet $\Omega$ in welchem ein Riß $a_0$ existiert. Es kann auch der Fall $a_0 = \emptyset$ auftreten, wenn zu Beginn des Rißwachstums lediglich ein Punkt existiert, von dem aus der Riß seinen Ausgang nimmt. Der Einfachheit halber soll im Folgenden nur an einem Rißende ein Wachstum des Risses möglich sein, nämlich der Rißspitze $P_0$. Die entsprechenden Methoden lassen sich aber auch auf einen beidseitig wachstumsfähigen Riß im Gebietsinneren erweitern.
Die Rißufer von $a_0$, welcher im deformierten Zustand eine Öffnung aufweisen kann, bezeichnen wir mit $a_0^+$ und $a_0^-$. Vom Ausgangsriß können nun Rißwachstumsschritte stattfinden, welche die Numerierung $1, 2, \ldots \in \mathbb{N}$ erhalten. Dabei wird im $i$-ten Wachstumsschritt zum Riß $a_{i-1}$ eine Verlängerung $\Delta a_i$ hinzugefügt, welche von der bisherigen Rißspitze $P_{i-1}$ zur neuen Rißspitze $P_i$ reicht. Siehe dazu die schematische Darstellung in Abbildung 6.2.
Die Rißufer entsprechen im FE-Netz Polygonzügen und sind aus Elementkanten zusammengesetzt. Mit Erkennen der Singularität durch den Fehlerschätzer ist es möglich, automatisch mit einigen Schritten adaptiver Rechnung eine lokale Verfeinerung des Netzes in der Umgebung von $P_{n-1}$ zu erzeugen. Sei eine vorläufige Rißverlängerung um $\Delta a'_n$ vorgegeben, welche als Geradenverbindung von $P_{n-1}$ zu einer neuen vorläufigen Rißspitze $P'_n$ führt:

$$L := \Delta a'_n = \overline{P_{n-1}P'_n}\,.$$

Die Strecke $L$ schneidet dabei Elementkanten oder verläuft genau auf solchen, falls $L$ ganz innerhalb eines Elementes verläuft sollte zuvor weiter adaptiv verfeinert werden. Algorith-

mus 6.1 realisiert die Netzanpassung an die verlängerte Rißlinie:

**Algorithmus 6.1** *Für jede Kante $s_j$ tue:*

1. *Bestimme den Schnittpunkt $\mathbf{Q}$ von $L$ mit $s_j$, wenn dieser existiert.*
2. *Falls kein Schnittpunkt, fahre mit nächster Kante fort.*
3. *Untersuche ob $\mathbf{Q}$ nah an einem der Endpunkte der Kante liegt:*
   *Sei $E = [\mathbf{a}, \mathbf{b}]$ mit $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^2$ als Endknoten, dann gilt $Q = \alpha\,\mathbf{a} + (1-\alpha)\mathbf{b}$ mit $\alpha \in [0,1]$. Sei $\varepsilon$ mit $0 < \varepsilon < 0.5$ eine definierte Toleranz.*
   - *Wenn $\alpha$ nahe an 1 liegt (d.h. $\alpha > 1-\varepsilon$), korrigiere $\mathbf{a}$ zu $\mathbf{Q}$ und fahre mit der nächsten Kante $s_{j+1}$ fort.*
   - *Wenn $\alpha$ nahe an 0 liegt ($\alpha < \varepsilon$), korrigiere $\mathbf{b}$ zu $\mathbf{Q}$ und fahre mit $s_{j+1}$ fort.*
   - *Sonst: Unterteile die Kante $s_j$ in Tochterkanten $s_{j_1} = [\mathbf{a}, Q]$ und $s_{j_2} = [\mathbf{Q}, \mathbf{b}]$, wobei $\mathbf{Q}$ als neuer Knoten aufgenommen wird.*

**Bemerkung 6.1** *Die optionale Knotenverschiebung in Schritt 3 verhindert die Entstehung stark entarteter bzw. anisotroper Elemente.*

Zur Vereinfachung wird der Rißzuwachs $\Delta a'_n$ auf $\Delta a_n$ verkürzt, indem die neue Rißspitze $P_n$ auf den $P'_n$ am nähesten liegenden Schnittpunkt von $L$ mit einer Elementkante zurückgesetzt wird.
Eine zulässige Vernetzung erhält man wieder durch

- „Rote“ Teilung jedes Elementes, von welchem 2 Kanten durch $L$ geschnitten werden.
- „Grüne“ Teilung jedes Elementes, von dem eine Kante durch $L$ geschnitten wird.

Durch die roten Teilungen entstehen üblicherweise noch „hängende Knoten“ auf von der Rißlinie entfernten Kanten, welche im nächsten Schritt mit der gewöhnlichen Verfeinerungsprozedur durch einen rot-grünen Abschluss beseitigt werden. Zur Veranschaulichung siehe Abbildung 6.3 (der Abschluß findet dort in den blaßgrün dargestellten Elementen statt).
Die Rißverlängerung aus allen Wachstumsschritten $i = 1, \ldots, n$ ist damit zerlegt in eine Menge von Kanten

$$\Delta a = \bigcup_{i=1}^{n} \Delta a_i = \bigcup_{j \in I_L} s_j \,,$$

wobei $I_L$ die zu den Rißkanten gehörige Indexmenge darstellt. Jede dieser Kanten ordnet sich in die Netzhierarchie ein, kommt allerdings im aufgerissenen Netz eigentlich zweimal vor, nämlich an jedem Rißufer. Um diesem Umstand Rechnung zu tragen, wird von jedem Rißknoten eine Kopie angefertigt, welche unabhängig vom Originalknoten mit Freiheitsgraden ausgestattet ist.

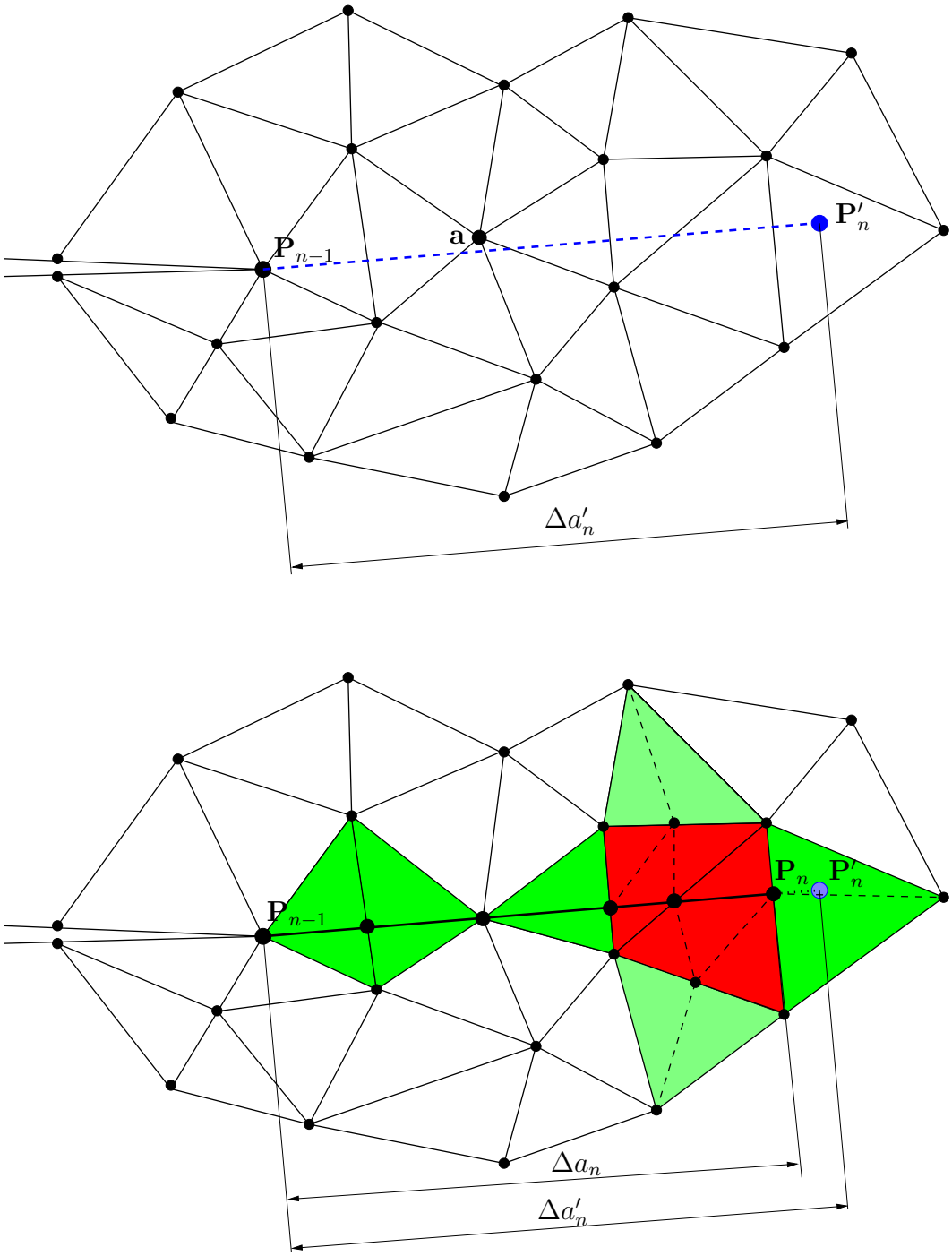



Abbildung 6.3: Netzanpassung bei wachsendem Riß

Aus Sicht den Riß entlang in Richtung Rißspitze, bezeichnet man das linke Rißufer mit „+“, das rechte Ufer mit „−“, die entsprechenden Knotenkopien aus allen Rißverlängerungen ausgehend vom Ursprungsnetz entsprechend als „+“-Knoten and „−“-Knoten. Die Rißspitze $P_n$ selbst ist kein Rißknoten, sondern gewöhnlicher Knoten. Allerdings zählt die ursprüngliche Rißspitze $P_0$ sowie die zwischenzeitlichen Rißspitzen $P_1, \ldots, P_{n-1}$ als Rißknoten, sobald der Riß im $n$-ten Wachstumsschritt weitergewachsen ist.
Insgesamt besitzt das Netz nun $N_g$ gewöhnliche Knoten und $N_c$ Rißknoten mit Kopie, wobei üblicherweise $N_c << N_g$ aufgrund der eindimensionalen Rißlinie. Insgesamt existieren damit $(N_g+2N_c)\cdot N_{\mathrm{DoF}}$ Freiheitsgrade abzüglich der Einschränkungen durch Dirichletrandbedingungen, die wir uns der einfacheren Bezeichnung halber schon eingearbeitet denken. ($N_{\mathrm{DoF}}$...Anzahl der Freiheitsgrade pro Knoten).

**Rißrandbedingungen**

An den neu entstandenen Rißkanten müssen jetzt Randbedingungen gesetzt werden, als mechanische Randbedingungen wählt man hier den bei Rißöffnung kanonischen spannungsfreien Zustand (homogene Neumannbedingung $\sigma \cdot \mathfrak{n} = 0$), während als elektrische Randbedingung abhängig von der Rißmodellierung mehrere Möglichkeiten in Frage kommen. Nimmt man an, daß eine Rißöffnung stattfindet und sich in dem Rißspalt ein impermeables (d.h. elektrisch nicht durchlässiges) Medium befindet, führt dies ebenfalls zu einer homogenen Neumannbedingung $D \cdot \mathfrak{n} = 0$. Der andere Extremfall ist die Annahme eines elektrisch durchlässigen Mediums, was einen ideal permeablen Riß mit einer elektrischen Übergangsbedingung am Rißrand der Form

$$\varphi^-(x) = \varphi^+(x) \tag{6.1}$$

für Punkte $x$ auf der Rißlinie. Aufgrund der Tatsache, daß die üblicherweise im Riß befindlichen Medien Luft oder Vakuum eine um mindestens 3 Größenordnungen kleinere Permittivität $\kappa$ als die Piezokeramik besitzen, erscheint der impermeable Riß als gute Näherung. Allerdings kann ein Riß auch so schmal sein, daß die elektrische Durchdringung an Gewicht gewinnt oder sogar dominiert (näherungsweise permeabler Riß). Betrachtungen zu dieser Problematik sowie Diskussion einer Zwischenstufe (semipermeable Rißrandbedingungen) findet man in [38] und [51]. Ein Grenzfall ist der Kontakt der beiden Rißufer, welcher durch die elektromechanische Kopplung auch in Teilbereichen eines wachsenden Risses gut vorstellbar ist. In dem Falle wäre (6.1) für das Potential sowie eine Mehrkörperkontaktbedingung der Verschiebungskomponenten anzusetzen (vgl. [68] – Sonderfall Kontakt eines Körpers mit sich selbst).

### 6.1.3 Verschiedene Basisfunktionen für Strukturen mit wachsendem Riß

Ein Problem bei in das Gebiet hineinwachsenden Rissen besteht darin, daß durch die Geometrieänderung nebst Knotenverdopplung die Netzhierarchie gestört wird. Somit funktioniert die hierarchische Vorkonditionierung der Matrizen $\mathbf{C}$ und $\mathbf{K}$ nicht mehr wie im Fall

ohne Rißwachstum, da die Rißknoten aufgrund der Kopien nun die doppelte Anzahl an Freiheitsgraden aufweisen. Als Ansatz um diesen Mangel auszugleichen, benutzten Meyer, Rabold und Scherzer in [40] eine Art Mittelung, wobei zwischen der hierarchischen Vorkonditionierung unter Betrachtung nur der gewöhnlichen und der „+"-Rißknoten sowie einer weiteren unter Betrachtung nur der gewöhnlichen und der „−"-Rißknoten mithilfe eines geeigneten Restriktionsoperators aus einem vergrößerten Raum (ficticious space) der Dimension $2 \cdot (N_g + N_c) \cdot N_{\mathrm{DoF}}$ in den Raum mit tatsächlich vorhandenen $(N_g + 2N_c) \cdot N_{\mathrm{DoF}}$ Freiheitsgraden durchgeführt wurde.
Eine Möglichkeit die Vorkonditionierung nochmals deutlich zu verbessern, welche hier auf die piezoelektrische Aufgabenstellung erweitert werden soll, wurde von Meyer in [39] beschrieben. Zentrale Idee ist dabei die Einführung von zwei verschiedenen Typen Basisfunktionen am Riss. Um die Beschreibung möglichst einfach zu halten, werden im Folgenden den lineare Ansatzfunktionen betrachtet, eine Erweiterung auf höhere Polynomgrade ist allerdings möglich. Sei

$$\Psi = (\psi_1, \ldots, \psi_{N_g}, \psi^-_{N_g+1}, \ldots, \psi^-_{N_g+N_c}, \psi^+_{N_g+1}, \ldots, \psi^+_{N_g+N_c})$$

eine Basis skalarer Funktionen, wobei $\psi_1, \ldots, \psi_{N_g}$ gewöhnlichen Hütchenfunktionen entsprechen, während $\psi^-_{N_g+i}$ sowie $\psi^+_{N_g+i}$ für alle $i = 1 \ldots N_c$ halbe Hutfunktionen darstellen welche an der Rißlinie abgeschnitten sind (analog einer Hütchenfunktion zu einem gewöhnlichen Knoten am Gebietsrand).
Eine weitere Basis ermöglicht ein Springen der approximierten Funktion an der Rißlinie auf alternative Weise: Definiere

$$\tilde{\Psi} = (\psi_1, \ldots, \psi_{N_g}, \psi_{N_g+1}, \ldots, \psi_{N_g+N_c}, \tilde{\psi}_{N_g+1}, \ldots, \tilde{\psi}_{N_g+N_c})$$

wobei $\psi_{N_g+i}$ die gewöhnlichen Hutfunktionen darstellen (stetig über die Rißlinie!), sowie $\tilde{\psi}_{N_g+i}$ als Produkt von $\psi_{N_g+i}$ mit einer Heavyside-Funktion bezüglich der Rißlinie definiert sind. Das bedeutet:

$$\begin{aligned} \psi_{N_g+i} &= \psi^-_{N_g+i} + \psi^+_{N_g+i}\,, \\ \tilde{\psi}_{N_g+i} &= \psi^-_{N_g+i} - \psi^+_{N_g+i}\,. \end{aligned} \tag{6.2}$$

Eine Veranschaulichung der verschiedenen Basisfunktionen im 1D-Schnitt liefert Abbildung 6.4. Dabei ist zur besseren Unterscheidbarkeit die Rißlinie etwas auseinandergezogen dargestellt, im undeformierten Netz stoßen „+"- und „−"-Ufer direkt zusammen und ergeben stetige $\psi_{N_g+i}$ sowie Sprungfunktionen $\tilde{\psi}_{N_g+i}$.
Für das elektrische Potential $\varphi$ wird die Basis $\Psi$ oder $\tilde{\Psi}$ verwendet, während das zweidimensionale Verschiebungsfeld $u$ eine Vektorbasis benötigt. Hier werden analog 2 verschiedene Basen eingeführt:

$$\begin{aligned} \Phi &= (\phi_1, \ldots, \phi_{2N_g}, \phi^-_{2N_g+1}, \ldots, \phi^-_{2N_g+2N_c}, \phi^+_{2N_g+1}, \ldots, \phi^+_{2N_g+2N_c})\,, \\ \tilde{\Phi} &= (\phi_1, \ldots, \phi_{2N_g}, \phi_{2N_g+1}, \ldots, \phi_{2N_g+2N_c}, \tilde{\phi}_{2N_g+1}, \ldots, \tilde{\phi}_{2N_g+2N_c})\,. \end{aligned}$$

Dabei definiert man für jedes $k = 1, \ldots, N_g + N_c$

$$(\phi_{2k-1}, \phi_{2k}) = (\psi_k \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \psi_k \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}) =: \psi_k I\,,$$

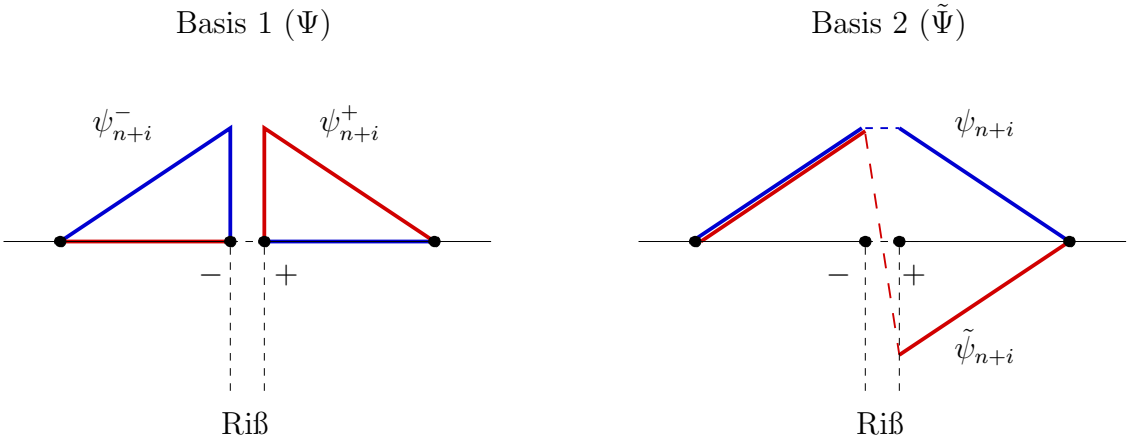



Abbildung 6.4: Zwei Typen von Basisfunktionen an der Rißlinie (hier mit $n = N_g$)

analog für $k = N_g + 1, \ldots, N_g + N_c$

$$(\phi^-_{2k-1}, \phi^-_{2k}) =: \psi^-_k I\,, \quad ,(\phi^+_{2k-1}, \phi^+_{2k}) =: \psi^+_k I \quad \text{sowie } (\tilde{\phi}_{2k-1}, \tilde{\phi}_{2k}) =: \tilde{\psi}_k I\,.$$

Die Transformationen zwischen den verschiedenen Basen sind unter Beachtung von (6.2) recht einfach darzustellen: $\tilde{\Psi} = \Psi D_1$ sowie $\tilde{\Phi} = \Phi D_2$ mit den Blockdiagonalmatrizen

$$D_j = \begin{pmatrix} I_{jN_g} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & I_{jN_c} & I_{jN_c} \\ \mathbf{0} & I_{jN_c} & -I_{jN_c} \end{pmatrix} \quad (j = 1, 2)\,,$$

wobei $I_k$ die Einheitsmatrix in $\mathbb{R}^{k\times k}$ ist. Die Inversen von $D_j$ besitzen ebenfalls eine einfache Darstellung:

$$D_j^{-1} = \text{blockdiag}(I_{jN_g}, \frac{1}{2}\begin{pmatrix} I_{jN_c} & I_{jN_c} \\ I_{jN_c} & -I_{jN_c} \end{pmatrix})\,.$$

Die Anwendung dieser Basistransformation ermöglicht es, eine Vorkonditionierung für die Matrizen bezüglich der speziellen Basen $\tilde{\Phi}$ und $\tilde{\Psi}$ zu konstruieren, während für den Rest der Rechnung wie FEM-Elementroutinen, Postprozessing sowie Fehlerschätzung unter Nutzung der Basen $\Phi$ und $\Psi$ die gewöhnlichen Methoden genutzt werden können.
Wir bezeichnen der Notation in (4.11) folgend mit $\mathbf{C}$, $\mathbf{B}$ und $\mathbf{K}$ die Matrizen bezüglich der Basen $\Phi$ und $\Psi$, ferner mit $\tilde{\mathbf{C}}$, $\tilde{\mathbf{B}}$ und $\tilde{\mathbf{K}}$ die Matrizen bezüglich der Basen $\tilde{\Phi}$ und $\tilde{\Psi}$. Die Basistransformation liefert

$$\tilde{\mathbf{C}} = D_2\mathbf{C}D_2\,, \quad \tilde{\mathbf{K}} = D_1\mathbf{K}D_1\,, \quad \tilde{\mathbf{B}} = D_2\mathbf{B}D_1\,. \tag{6.3}$$

Ist also $\tilde{\mathbf{C}}_0$ ein Vorkonditionierer für $\tilde{\mathbf{C}}$, dann gilt mit $\mathbf{C}_0 := D_2^{-1}\tilde{\mathbf{C}}_0 D_2^{-1}$:

$$\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C} = D_2\tilde{\mathbf{C}}_0^{-1}\tilde{\mathbf{C}}D_2^{-1}$$

spektraläquivalent zu $\tilde{\mathbf{C}}_0^{-1}\tilde{\mathbf{C}}$ und folglich ist $\mathbf{C}_0$ ein Vorkonditionierer gleicher Güte für $\mathbf{C}$. Analog liefert ein guter Vorkonditionierer $\tilde{\mathbf{K}}_0$ für $\tilde{\mathbf{K}}$ sofort einen guten Vorkonditionierer $\mathbf{B}_0 := D_1^{-1}\tilde{\mathbf{K}}_0 D_1^{-1}$ für $\mathbf{K}$.

**Ideen zu Änderungen bei Annahme permeabler Risse**

Unter der vereinfachenden Modellannahme daß sich die Rißufer nicht wesentlich gegeneinander verschieben, ist die Einarbeitung der Bedingung (6.1) sehr effektiv möglich, indem einfach aus der Basis $\tilde{\Psi}$ die Funktionen $\tilde{\psi}_{N_g+i}$ der entsprechenden Rißknoten entfernt werden. Damit erzwingt man automatisch gleiches Potential auf beiden Rißufern. Etwas diffiziler stellt sich das Problem dar wenn eine Verschiebung der Rißufer gegeneinander stattfindet, d.h. ein Knoten $N_i^+$ an einem Punkt irgendwo auf einer Kante $s_j^-$ gegenüber zum liegen kommen kann. In diesem Falle müssen auf jeden Fall auch die Verschiebungen berücksichtigt werden, es können ähnlich zur Bearbeitung von Kontaktproblemen Unterraum-Projektionstechniken zum Einsatz kommen, welche wiederum leichter in der Basis $\Psi$ betrachtet werden können. Im Falle eines Rißkontaktes müssen zusätzlich auch noch an den Rißrändern Kontaktbedingungen für die Verschiebungen angesetzt werden, wobei die kontaktverdächtige Zone im Normalfall auf den Riß eingeschränkt werden kann.

### 6.1.4 Effiziente DD-Vorkonditionierer für die Steifigkeitsmatrizen in der alternativen Basis

Einen Vorkonditionierer für $\tilde{\mathbf{C}}$ kann man wie in [39] beschrieben mit Hilfe einer Gebietszerlegungsmethode (**D**omain **D**ecomposition approach) gewinnen. Diese Methode eignet sich auch in Modifikation zur Anwendung bei der Vorkonditionierung der Matrix $\tilde{\mathbf{K}}$, dieser Fall soll hier zuerst beschrieben werden weil aufgrund der skalaren Ansatzfunktionen für das Potential die Darstellung etwas einfacher ist.
Betrachte die Struktur der Matrizen $\mathbf{K}$ und $\tilde{\mathbf{K}}$:

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} K_g & J^- & J^+ \\ (J^-)^T & T^- & \mathbf{0} \\ (J^+)^T & \mathbf{0} & T^+ \end{pmatrix} \quad \overset{(6.3)}{\Longrightarrow} \quad \tilde{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} K_g & J^- + J^+ & J^- - J^+ \\ \text{sym.} & T^- + T^+ & T^- - T^+ \\ \text{sym.} & T^- - T^+ & T^- + T^+ \end{pmatrix},$$

wobei

- $K_g \in \mathbb{R}^{N_g \times N_g}$ mit den Einträgen $k_{ij}^g = k(\psi_i, \psi_j)$,
- $T^-, T^+ \in \mathbb{R}^{N_c \times N_c}$ mit den Einträgen $t_{ij}^{-/+} = k(\psi_{N_g+i}^{-/+}, \psi_{N_g+j}^{-/+})$ sowie
- $J^-, J^+ \in \mathbb{R}^{N_g \times N_c}$ mit den Einträgen $\iota_{ij}^{-/+} = k(\psi_i, \psi_{N_g+j}^{-/+})$.

Der führende $(N_g + N_c) \times (N_g + N_c)$-Block von $\tilde{\mathbf{K}}$ wird hier mit

$$\hat{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} K_g & J^- + J^+ \\ (J^- + J^+)^T & T^- + T^+ \end{pmatrix}$$

bezeichnet, dieser beinhaltet gerade alle Funktionswerte der Bilinearform $k(\psi_i, \psi_j)$ mit den Funktionen

$$\psi_i,\, \psi_j \,\in \tilde{\Psi}, \quad i,j = 1,\ldots,N_g + N_c$$

aus der alternativen Basis untereinander[1] und entspricht somit der dielektrischen Steifigkeitsmatrix für das Netz ohne Beachtung des Risses. Es ergibt sich die vereinfachte Struktur

$$\tilde{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{K}} & J \\ J^T & T \end{pmatrix} \qquad \text{mit } J = \begin{pmatrix} J^- - J^+ \\ T^- - T^+ \end{pmatrix} \quad \text{sowie } T = T^- + T^+ \,.$$

Für den Hauptblock $\hat{\mathbf{K}}$ ist jetzt ein Standard-Multilevel Vorkonditionierer anwendbar, bezeichnet mit $\hat{\mathbf{K}}_0$. Insbesondere eignet sich im betrachteten 2D-Fall der Hierarchische-Basen Vorkonditionierer [74]. Der kleinere Diagonalblock $T$ (symmetrisch mit Dimension $N_c$) lässt sich bei geschickter Anordnung der Rissknoten sogar exakt invertieren. Numeriert man die Rißknoten $N_g+1,\ldots N_g+N_c$ in einer eindimensionalen Kette entlang der Rißlinie, besitzt $T$ im Fall linearer Elemente eine tridiagonale Struktur, im Fall quadratischer Elemente pentadiagonale Struktur. Eine Cholesky-Faktorisierung liefert damit eine direkte Anwendung von $T^{-1}$ mit dem Aufwand $\mathcal{O}(N_c)$.
Um für die gesamte Matrix $\tilde{\mathbf{K}}$ einen DD-artigen Vorkonditionierer zu konstruieren, betrachten wir folgende Blockfaktorisierung:

$$\tilde{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} I & JT^{-1} \\ \mathbf{0} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_k & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & \mathbf{0} \\ T^{-1}J^T & I \end{pmatrix} \tag{6.4}$$

mit der (inneren) Schurkomplementmatrix

$$S_k = \hat{\mathbf{K}} - JT^{-1}J^T \,,$$

welche einer Rang-$N_c$-Störung von $\hat{\mathbf{K}}$ entspricht. Approximiert man die Inverse von $S_k$ durch den Vorkonditionierer $\hat{\mathbf{K}}_0^{-1}$, erhält man als näherungsweise Inverse von $\tilde{\mathbf{K}}$ den Vorkonditionierer

$$\tilde{\mathbf{K}}_0^{-1} = \begin{pmatrix} I & \mathbf{0} \\ -T^{-1}J & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{K}}_0^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & T^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & -JT^{-1} \\ \mathbf{0} & I \end{pmatrix} .$$

Zu bemerken ist dabei, daß alle weiteren Inversen exakt sind und inklusive der Multiplikationen mit $T^{-1}$ direkt durchgeführt werden können. Eine geeignete Skalierung des Vorkonditionierers $\hat{\mathbf{K}}_0$ vorausgesetzt, ergibt sich für $\tilde{\mathbf{K}}_0^{-1}\tilde{\mathbf{K}}$ eine ebensogute Kondition wie für $\hat{\mathbf{K}}_0^{-1}S_k$.

## Vorkonditionierung für linear-elastischen Block

Für die Vorkonditionierung der Matrix $\tilde{\mathbf{C}}$ erweitert man die eben beschriebene Methode auf Vektoransatzfunktionen mit 2 Freiheitsgraden pro Knoten. Es gilt analog zum dielek-

[1] Diese entsprechen gerade den gewöhnlichen Hutfunktionen.

trischen Block

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} C_u & J_2^- & J_2^+ \\ (J_2^-)^T & T_2^- & \mathbf{0} \\ (J_2^+)^T & \mathbf{0} & T_2^+ \end{pmatrix} \quad \overset{(6.3)}{\Longrightarrow} \quad \tilde{\mathbf{C}} = \begin{pmatrix} C_u & J_2^- + J_2^+ & J_2^- - J_2^+ \\ \text{sym.} & T_2^- + T_2^+ & T_2^- - T_2^+ \\ \text{sym.} & T_2^- - T_2^+ & T_2^- + T_2^+ \end{pmatrix},$$

wobei der führende $2(N_g + N_c) \times 2(N_g + N_c)$-Block von $\tilde{\mathbf{C}}$

$$\hat{\mathbf{C}} = \begin{pmatrix} C_u & J_2^- + J_2^+ \\ (J_2^- + J_2^+)^T & T_2^- + T_2^+ \end{pmatrix}$$

der elastischen Steifigkeitsmatrix ohne Beachtung des Risses entspricht. Für diese sind ebenfalls gute Multilevelvorkonditionierer bekannt. Übrig bleiben in $\tilde{\mathbf{C}}$ die Blöcke

$$J_2 = \begin{pmatrix} J_2^- - J_2^+ \\ T_2^- - T_2^+ \end{pmatrix} \quad \text{sowie} \quad T_2 = T_2^- + T_2^+ .$$

Aufgrund der oben beschriebenen Rißknotenanordnung sowie der pärchenweisen Aneinanderreihung der Verschiebungsfreiheitsgrade pro Knoten besitzt $T_2$ im Fall linearer Elemente blocktridiagonale Struktur, im Fall quadratischer Elemente blockpentadiagonale Struktur (jeweils mit $2 \times 2$-Blöcken). Es ist also ebenfalls eine Cholesky-Faktorisierung möglich, welche eine direkte Anwendung von $T_2^{-1}$ mit dem Aufwand $\mathcal{O}(N_c)$ liefert. Blockfaktorisierung wie in (6.4) und die Verwendung eines Vorkonditionierers $\hat{\mathbf{C}}_0^{-1}$ für das innere Schurkomplement

$$S_c = \hat{\mathbf{C}} - J_2 T_2^{-1} J_2^T$$

($S_c$ entspricht einer Rang-$2N_c$-Störung von $\hat{\mathbf{C}}$) führt zu dem Vorkonditionierer

$$\tilde{\mathbf{C}}_0^{-1} = \begin{pmatrix} I & \mathbf{0} \\ -T_2^{-1} J_2 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{C}}_0^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & T_2^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & -J_2 T_2^{-1} \\ \mathbf{0} & I \end{pmatrix}$$

für $\tilde{\mathbf{C}}$.
Nutzt man den für $\mathbf{K}$ resultierenden Vorkonditionierer für das gesamte äußere Schurkomplement $\mathbf{S}$, so ergeben sich als Vorkonditionierer für die Blöcke $\mathbf{C}$ und $\mathbf{S}$ unter Beachtung von (6.3):

$$\mathbf{C}_0^{-1} = D_2 \tilde{\mathbf{C}}_0^{-1} D_2 , \quad \mathbf{B}_0^{-1} = D_1 \tilde{\mathbf{K}}_0^{-1} D_1 .$$

Aufgrund der mehrmaligen Approximation mit Schurkomplementbildung (wobei in $\mathbf{S}$ auch nochmals $\mathbf{C}_0^{-1}$ und somit das Schurkomplement aus dem Rissvorkonditionierer für den mechanischen Teil versteckt ist) ist ein gewisser Verlust an Effektivität der Gesamtvorkonditionierung durch Aufschaukelungseffekte zu erwarten.

## 6.2 Numerische Beispiele zum piezoelektrischen Riß

### 6.2.1 Beispiel: Künstlich wachsender gerader Riß

Um die Netzanpassungsalgorithmen und die Vorkonditionierung im Fall eines wachsenden Risses zu testen, wurde zunächst ein Beispiel mit einem geraden, in ein Rechteckgebiet hineinwachsenden Riß konstruiert. Wegen dem noch fehlenden Bruchkriterium wurde dabei

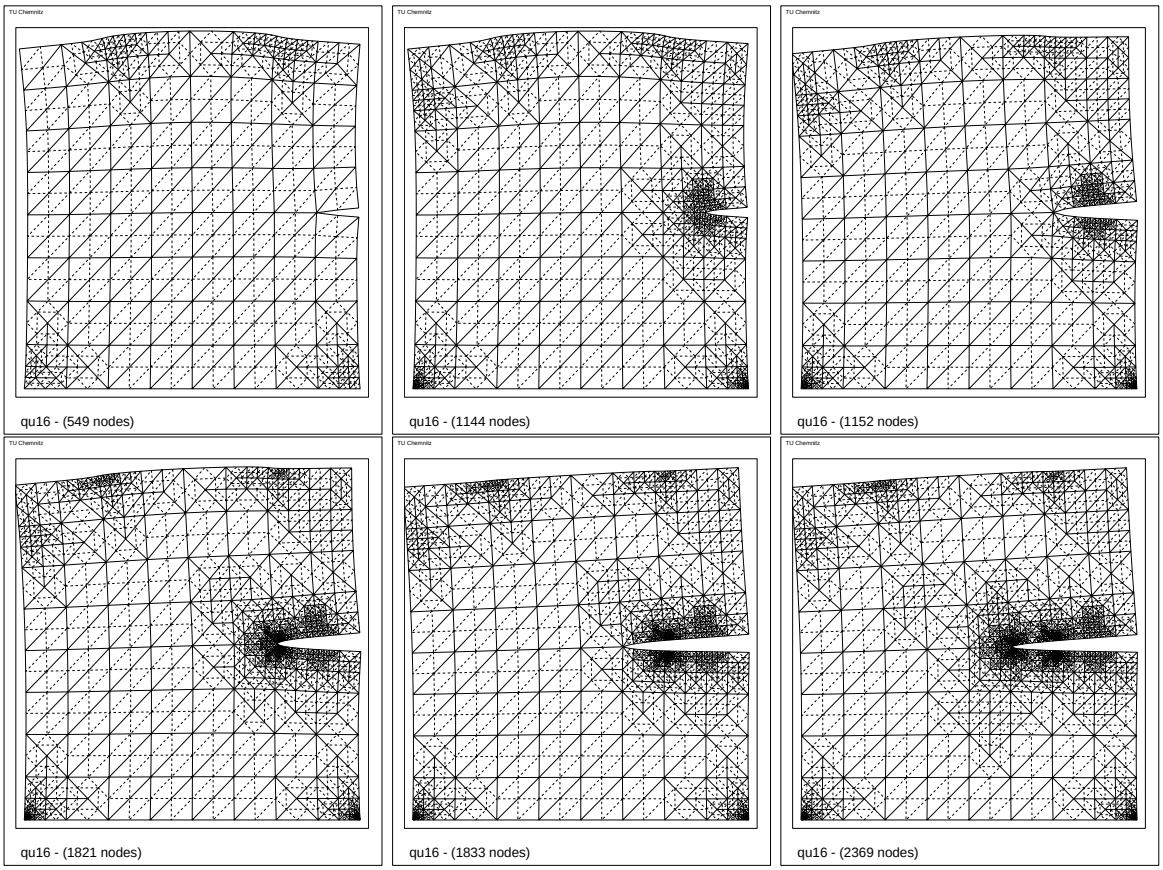



Abbildung 6.5: Verformte Netze bei künstlich gerade wachsendem Riß

zunächst ein künstliches Rißwachstum implementiert, wobei in jedem Wachstumsschritt einfach der Riß entlang einer vorher definierten Richtung um eine vorgegebene Länge (Inkrement $\Delta a$) weiterwächst. Zwischen den Wachstumsschritten schließen sich eine Anzahl von adaptiven Verfeinerungsschritten an, welche das Netz immer hauptsächlich um die neue Rißspitze verfeinern. Der Einfachheit halber wurden hier immer 3 Verfeinerungsschritte und anschließend ein Wachstumsschritt simuliert. Abbildung 6.5 zeigt die deformierten Netze nach den ersten 3 Rißwachstumsschritten sowie 3 Verfeinerungsschritte nach jedem der Wachstumsschritte. In Abbildung 6.6 wird der Verlauf der Iterationszahlen im betrachteten Beispiel dargestellt. Zu beobachten ist, daß in jedem Wachstumsschritt beim ersten Lösen mit dem aufgerissenen Netz zunächst eine drastisch hohe Zahl an Iterationen notwendig ist, um eine ausreichende Genauigkeitsverbesserung zu erzielen. In den folgenden Verfeinerungsschritten fallen die Iterationszahlen aber im wesentlichen wieder auf das Level von vor dem Wachstumsschritt zurück. Somit bleibt die Anzahl an Iterationen, die für die Berechnung jedes weiteren Rißinkrementes benötigt wird, in der Tendenz beschränkt.

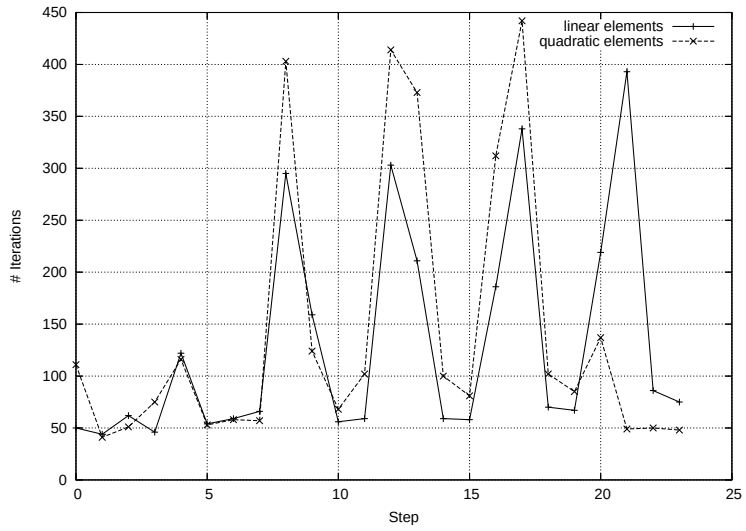



Abbildung 6.6: Iterationszahlen bei künstlich gerade wachsendem Riß

### 6.2.2 Beispiel: Künstlich abknickender Riß

Als weiteres Beispiel wurde ein Riß betrachtet, der zunächst gerade in ein Rechteckgebiet hineinwächst und dann abknickt um in verändertem Winkel weiterzuwachsen. Am Beginn der Rechnung sowie immer zwischen 2 Wachstumsschritten wurden wieder jeweils 3 adaptive Verfeinerungsschritte durchgeführt. Abbildung 6.7 zeigt die resultierenden Netze nach dem abknickenden Wachstumsschritt, einem folgenden geraden Weiterwachsen sowie einem nochmaligen abknickenden Wachstum. Zusätzlich jeweils die Netze nach dreimaliger adaptiver Verfeinerung. Das künstlich krumme Wachstum des Risses erzeugt im Unterschied zum geraden Riß eine Rißlinie die nicht wie im vorigen Beispiel entlang Elementkanten wächst, so daß die volle Rißwachstumsalgorithmik getestet wird. Der Einfachheit halber wurde sich hier auf quadratische Dreieckselemente beschränkt. Die resultierenden Iterationszahlen zeigt Abbildung 6.8.

## 6.3 Nutzung zur Bestimmung bruchmechanischer Kenngrößen

### 6.3.1 Vergleich mittels FEM erhaltener Kenngrößen mit Referenzbeispielen

Das erstellte FEM-Experimentalprogramm *SPC-Pm2AdPiez* wurde im Rahmen einer Kooperation mit der TU BA Freiberg vom Kooperationspartner um die Berechnung bruchmechanische Kenngrößen aus der FEM-Lösung zum Programm **Π**ezoCrack bzw. kurz **Π**Crack erweitert. Die Zielstellung ist dabei, ähnlich wie im linear-elastischen Fall [40] zu einer Si-

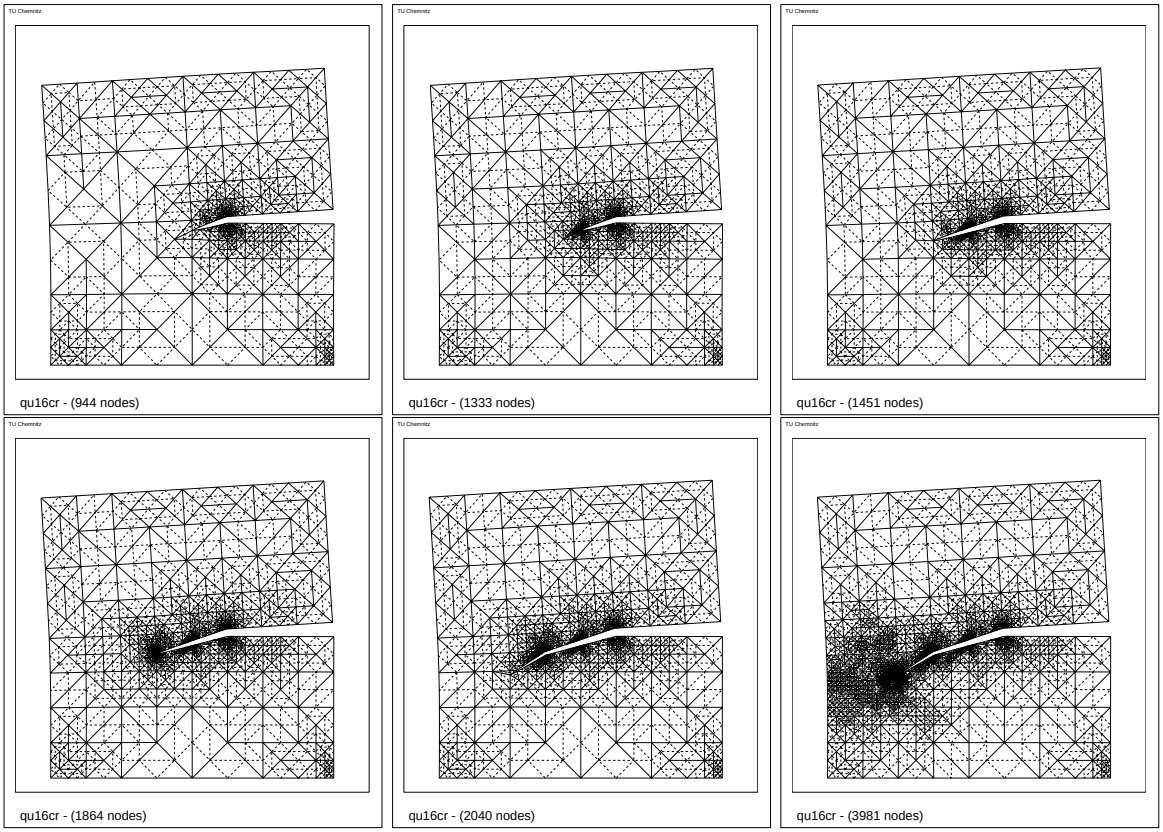



Abbildung 6.7: Verformte Netze bei künstlich krumm wachsendem Riß

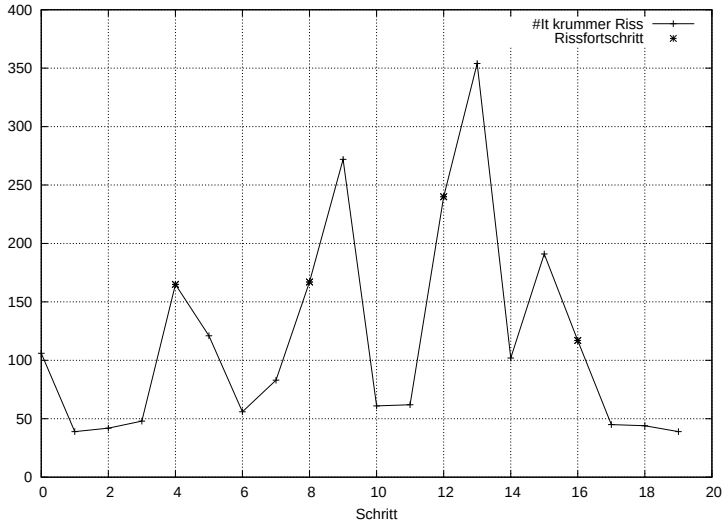



Abbildung 6.8: Iterationszahlen bei künstlich krumm wachsendem Riß

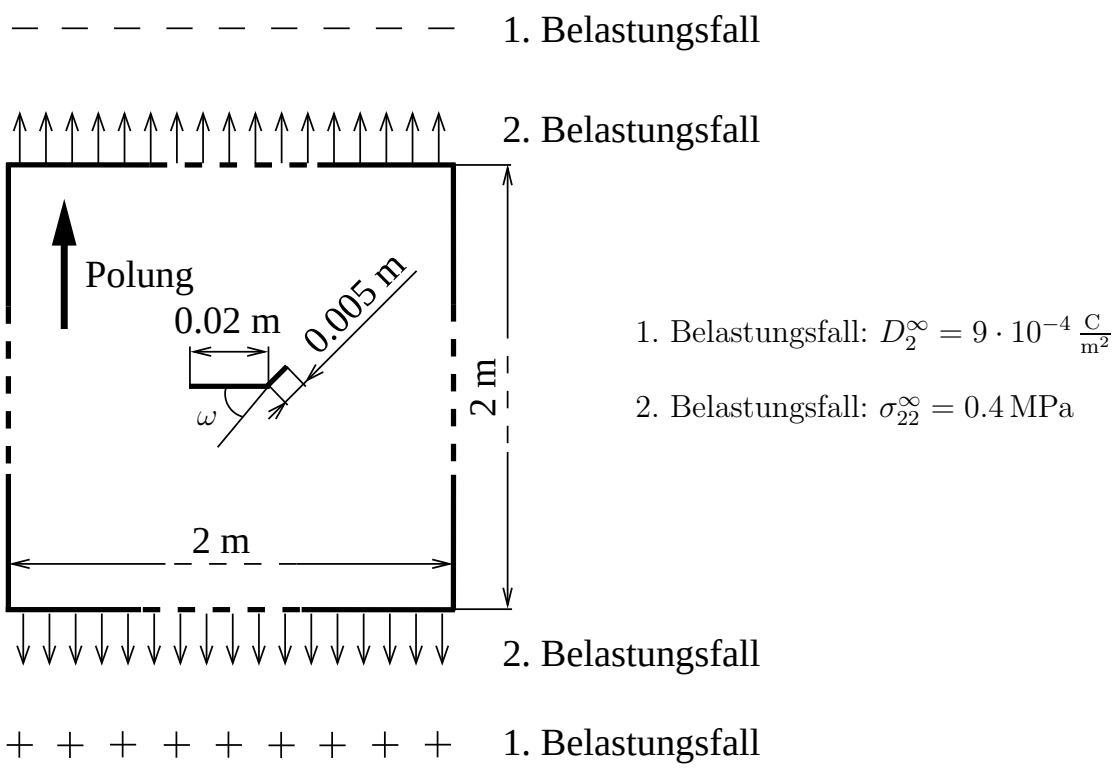



Abbildung 6.9: Rißanordnung mit Knick, Quelle: [30]

mulation des zweidimensionalen Ermüdungsrißwachstums in Piezomaterialien zu gelangen. Die nachfolgend aufgeführten Ergebnisse befinden sich in der Publikation [30] von Janski et.al. Zunächst wurden für das Beispiel elektromechanischer Griffith-Riß wie in [29] dargestellt die Intensitätsfaktoren $K_I$, $K_{II}$ sowie $K_{IV}$ der Rißsingularität mithilfe der Interaction-Integral-Technik [19] berechnet und mit den aus der analytischen Lösung [64],[47] für das asymptotische Problem bekannten Werten verglichen. Hierbei zeigte sich eine schnelle Annäherung der numerisch bestimmten an die analytischen Werte mit der adaptiven Netzverfeinerung, ab dem vierten Verfeinerungsschritt beträgt die Abweichung weniger als 0.5%. Ebenso wurde eine Unabhängigkeit der numerisch berechneten Intensitätsfaktoren vom Radius der Integrationskontur beobachtet.
Als weiteres Beispiel wurde in [30] eine als Modifikation des Griffith-Risses betrachtbare Rißkonfiguration mit einem Knick untersucht, dargestellt in Abbildung 6.9.
Die FEM-Lösungen für verschiedene Abknickwinkel $\omega$ wurden mit den von Xu und Rajapakse [73] ermittelten Lösungen für einen abgeknickten Riß in der unendlichen Ebene verglichen. Dabei zeigte sich ebenfalls eine befriedigende Übereinstimmung der Größen

$$K_I^b,\ K_{II}^b \text{ sowie } K_{IV}^b$$

sowohl im rein elektrischen Belastungsfall (Mode IV, im Bild 1. Belastungsfall) als auch im rein mechanischen Belastungsfall (Mode I, im Bild 2. Belastungsfall). Eine Darstellung der Resultate bezogen auf die Intensitätsfaktoren im Griffith-Riß ist in Abbildung 6.10 gegeben. Die Punkte entsprechen dabei den numerisch ermittelten Ergebnissen für die 7 Werte von $\omega = -90°, -60°, -30°, 0°, 30°, 60°, 90°$ des Abknickwinkels. Die durchgezogenen Linien stellen die analytischen Lösungen aus [73] dar.

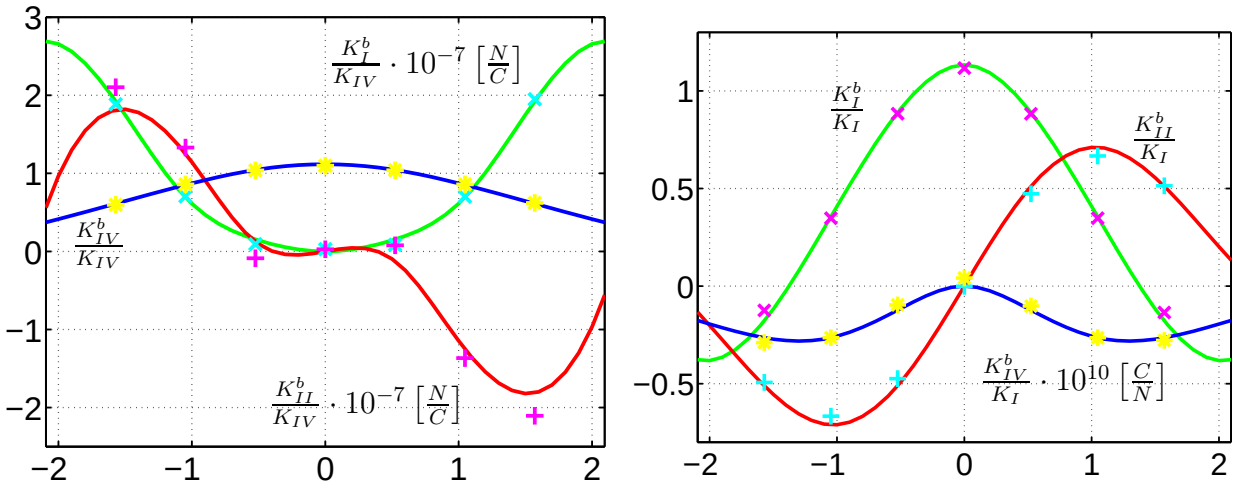



Abbildung 6.10: FEM-Lösung und analytische Lösung für relative Intensitätsfaktoren bei Riß mit Knick im rein elektrischen (links) und rein mechanischen (rechts) Belastungsfall. Quelle: [30]

Anhand der Bilder ist zu erkennen, daß $K_{II}^b$ in diesem Beispiel weniger genau approximiert wird als $K_I^b$ und $K_{IV}^b$.

### 6.3.2 Rißwachstumskriterien

Die Diskussion um geeignete Bruchkriterien ist aktuell noch nicht abgeschlossen, vergleiche dazu beispielsweise [11]. In der Literatur werden verschiedene Bruchkriterien für lineares piezoelektrisches Materialverhalten diskutiert, genannt seien hier:

- Totale Energiefreisetzungsrate (Pak [45])
- Mechanische Verzerrungsenergiefreisetzungsrate (Park/Sun [47])
- Stressintensitätsfaktoren (Suo et al. [64])
- Lokale Energiefreisetzungsrate (Gao et al.)

In linear-elastischen Materialien sind noch weitere bewährte Bruchkriterien bekannt, wie zum Beispiel die maximale Umfangsspannung [20]. Die Anwendbarkeit einiger Kriterien (eventuell mit Modifikationen) auf piezoelektrisches Materialverhalten ist momentan noch ungeklärt.

Bis jetzt hat sich noch kein international anerkannter Zugang herauskristallisiert, der in allen möglichen Belastungsfällen eine korrekte Bruchvorhersage liefert. Eine große Schwierigkeit besteht darin, daß im Vergleich zum gut erforschten linear-elastischen Fall der Einfluß des elektrischen Feldes als zusätzliche zu beachtende Komponente mit nicht allgemein geklärter Wirkung eine Erweiterung der Methoden erfordert. Für Erweiterungen gibt es allerdings eine Vielzahl von denkbaren Varianten. Das erstellte Simulationswerkzeug bietet eine Möglichkeit Bruchkriterien zu testen, indem unter Anwendung eines zu testenden Bruchkriteriums Rißpfade von Benchmark-Beispielen mit vordefinierten Materialparametern sowie Randbedingungen berechnet werden und mit vorhandenen Daten aus Bruchversuchen verglichen werden. In dieser Hinsicht kann günstigenfalls ein Beitrag geleistet werden, ein realitätsnahes Bruchkriterium zu finden.
Eine generelle Ungenauigkeitsquelle bei der numerischen Simulation von Rißverläufen besteht darin, daß durch die starken Felder nahe der Rißspitzensingularität lokal nichtlineares Materialverhalten mit Hysteresen durch Domänenumklappen usw. zu erwarten ist. Außerdem kann auch die mikromechanische Struktur das konkrete Bruchverhalten beeinflussen, so könnte etwa ein Riß bevorzugt entlang von Korngrenzen weiterwachsen. Diese Effekte lassen sich im verwendeten linearen Materialmodell und selbst in der allgemeineren makroskopisch-phänomenologischen Herangehensweise nicht vollständig erfassen, an dieser Stelle wäre möglicherweise eine Hinzunahme stochastischer Betrachtungen sinnvoll.

# Anhang A

# Umrechnungsformeln zum inversen Materialgesetz im 2D-Fall

Ausgehend vom Materialgesetz (Matrizen und Vektoren hier ohne Unterstriche)

$$\begin{pmatrix}\sigma\\ D\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C & -B \\ B^T & K\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon\\ E\end{pmatrix} \tag{A.1}$$

erhält man:

$$\begin{aligned}
\varepsilon &= C^{-1}\sigma + C^{-1}BE \\
\Longrightarrow\ E &= K^{-1}(D - B^T\varepsilon) = K^{-1}D - K^{-1}B^TC^{-1}\sigma - K^{-1}B^TC^{-1}BE \\
\Longrightarrow\ E &= (I + K^{-1}B^TC^{-1}B)^{-1}K^{-1}D - (I + K^{-1}B^TC^{-1}B)^{-1}K^{-1}B^TC^{-1}\sigma \\
&= (K + B^TC^{-1}B)^{-1}D - (K + B^TC^{-1}B)^{-1}B^TC^{-1}\sigma\,,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E &= K^{-1}D - K^{-1}B^T\varepsilon \\
\Longrightarrow\ \varepsilon &= C^{-1}\sigma + C^{-1}BE = C^{-1}\sigma + C^{-1}BK^{-1}D - C^{-1}BK^{-1}B^T\varepsilon \\
\Longrightarrow\ \varepsilon &= (I + C^{-1}BK^{-1}B^T)^{-1}C^{-1}\sigma + (I + C^{-1}BK^{-1}B^T)^{-1}C^{-1}BK^{-1}D \\
&= (C + BK^{-1}B^T)^{-1}\sigma + (C + BK^{-1}B^T)^{-1}BK^{-1}D\,.
\end{aligned}$$

Folglich gilt also

$$\begin{pmatrix}\varepsilon\\ E\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathfrak{A} & \mathfrak{B} \\ -\mathfrak{B}^T & \mathfrak{D}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sigma\\ D\end{pmatrix} \tag{A.2}$$

mit

$$\begin{aligned}
\mathfrak{A} &= (C + BK^{-1}B^T)^{-1}\,, \\
\mathfrak{D} &= (K + B^TC^{-1}B)^{-1}\,, \\
\mathfrak{B} &= (C + BK^{-1}B^T)^{-1}BK^{-1} = C^{-1}B(K + B^TC^{-1}B)^{-1}\,.
\end{aligned}$$

Mit der Definition von $C$, $B$ und $K$ gemäß Gleichung (2.44) erhält man leicht die Inversen

$$C^{-1} = \text{blockdiag}(C_2^{-1}, \frac{1}{c_{33}}) \quad \text{mit } C_2^{-1} = \frac{1}{c_{11}c_{22} - c_{12}^2}\begin{pmatrix} c_{22} & -c_{12} \\ -c_{12} & c_{11}\end{pmatrix}, \qquad K^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\kappa_{11}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\kappa_{22}}\end{pmatrix}.$$

Ausrechnen ergibt schließlich

$$\mathfrak{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{12} & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} \end{pmatrix}, \ \mathfrak{B} = \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ 0 & b_{22} \\ b_{31} & 0 \end{pmatrix}, \ \mathfrak{D} = \begin{pmatrix} \delta_{11} & 0 \\ 0 & \delta_{22} \end{pmatrix}$$

mit

$$a_{11} = \frac{1}{\alpha}(c_{22}\kappa_{22} + e_{22}^2)\,, \ a_{22} = \frac{1}{\alpha}(c_{11}\kappa_{22} + e_{12}^2)\,, \ a_{12} = -\frac{1}{\alpha}(c_{12}\kappa_{22} + e_{12}e_{22})\,, \ a_{33} = \frac{\kappa_{11}}{\beta}\,,$$

$$b_{12} = \frac{1}{\alpha}(c_{22}e_{12} - c_{12}e_{22})\,, \ b_{22} = \frac{1}{\alpha}(c_{11}e_{22} - c_{12}e_{12})\,, \ b_{31} = \frac{e_{31}}{\beta}\,,$$

$$\delta_{11} = \frac{c_{33}}{\beta}\,, \delta_{22} = \frac{1}{\alpha}(c_{11}c_{22} - c_{12}^2)\,.$$

Dabei sind

$$\alpha = c_{11}(c_{22}\kappa_{22} + e_{22}^2) - c_{12}(c_{12}\kappa_{22} + 2e_{12}e_{22}) + c_{22}e_{12}^2\,, \quad \beta = c_{33}\kappa_{11} + e_{31}^2\,.$$

# Literaturverzeichnis


[1] M. Ainsworth, J.T. Oden: *A posteriori estimation in finite element analysis.* Wiley, New York, Weinheim, 2000.

[2] T. Anderson: *Fracture Mechanics.* CRC Press, Boca Raton, Ann Arbor London, Tokyo, 1995.

[3] Th. Apel and S. Nicaise: *The inf-sup condition for some low order elements on anisotropic meshes.* Calcolo, 41:89-113, 2004.

[4] Th. Apel, S. Nicaise and J. Schöberl: *A non-conforming finite element method with anisotropic mesh grading for the Stokes problem in domains with edges.* IMA J. Numer. Anal., 21:843-856, 2001.

[5] Th. Apel and H. M. Randrianarivony: *Stability of discretizations of the Stokes problem on anisotropic meshes.* Mathematics and Computers in Simulation, 61:437–447, 2003.

[6] I. Babuška and W.C. Rheinboldt: *Error Estimates for Adaptive Finite Element Computations.* SIAM J. Numer. Anal., 15:736-754, 1978.

[7] D.M. Barnett, J. Lothe: *Dislocations and line charges in anisotropic piezoelectric insulators.* Phys. stat. sol. 67:105-111, 1975.

[8] D. Braess: *Finite Elemente.* 3. Auflage, Springer, 2003.

[9] J.H. Bramble and J.E. Pasciak: *A Preconditioning Technique for Indefinite Systems resulting from Mixed Approximations of Elliptic Problems.* Math. Comput., 50(181):1-17, 1988.

[10] J.H. Bramble, J.E. Pasciak and J.Xu: *Parallel Multilevel Preconditioners.* Math. Comput., 55(191):1-22, 1990.

[11] S. Braun and A.-M. Sändig. *Griffith's fracture criterion in piezoelectric ceramics.* Preprint IANS 2007/015, Universität Stuttgart, 2007.

[12] F. Brezzi and M. Fortin: *Mixed and Hybrid Finite element methods.* Springer, 1991.

[13] I. N. Brönstein und K. A. Semendjajew: *Taschenbuch der Mathematik.* 10. Auflage, B.G.Teubner, Leipzig, 1969.

[14] A. Bucher, U.-J. Görke, P. Steinhorst, R. Kreißig, A. Meyer: *Ein Beitrag zur adaptiven gemischten Finite-Elemente-Formulierung der nahezu inkompressiblen Elastizität bei großen Verzerrungen.* Preprint CSC/07-06, TU Chemnitz, 2007.

[15] C. Carstensen and R. Verfürth: *Edge Residuals dominate a posteriori Error Estimates for Low Order Finite Element Methods.* SIAM J. Numer. Anal., 36:1571-1587, 1999.

[16] Ph. Ciarlet: *The finite-element method for elliptic problems.* North-Holland, Amsterdam, 1978.

[17] Ph. Ciarlet: *Mathematical Elasticity. Volume I: Three-Dimensional Elasticity.* North-Holland, Amsterdam, 1988.

[18] M. Crouzeix and P.A. Raviart: *Conforming and nonconforming finite element methods for solving the stationary Stokes equations.* RAIRO Anal. Numer. 7, R-3, 33-76, 1973.

[19] M. Enderlein, A. Ricoeur and M. Kuna: *Finite element techniques for dynamic crack analysis in piezoelectrics.* Int. J. Fracture 134:191-208, 2005.

[20] F. Erdogan and G.C. Sih: *On the crack extension in plates under plane loading and transverse shear.* J. Basic Eng.-T Asme, 85:519-527, 1963.

[21] V. Girault and P.A. Raviart: *Finite element methods for Navier-Stokes equations.* Springer, 1986.

[22] J. Glänzel: *Kurzvorstellung der 3D-FEM Software SPC-PM3AdH-XX.* Preprint CSC/09-03, TU Chemnitz, 2009.

[23] U.-J. Görke, S. Kaiser, A. Bucher, R. Kreißig: *Ein Beitrag zur gemischten Finite-Elemente-Formulierung der Theorie gesättigter poröser Medien bei großen Verzerrungen.* Preprint CSC/09-02, TU Chemnitz, 2009.

[24] A. Görnandt, U. Gabbert: *Finite element analysis of thermopiezoelectric smart structures.* Acta Mechanica, 154:129-140, 2002.

[25] T. Granzow, A.B. Kounga, E. Aulbach and J. Roedel: *Electromechanical poling of piezoelectrics.* Appl. Phys. Lett. 88, 252907, 2006.

[26] Ch. Großmann und H.G. Roos: *Numerik partieller Differentialgleichungen.* Teubner, 1994.

[27] W. Geis, A. Sändig and G. Mishuris: *Piezoelectricity in multi-layer actuators. Modelling and analysis in two and three dimensions.* Preprint IANS 2003/023, Universität Stuttgart, 2003.

[28] U. Groh: *Entwicklung von Randelementen zur elektromechanischen Festigkeitsanalyse von piezoelektrischen Strukturen mit Defekten.* Forschungsbericht zum DFG-Vorhaben KU929/4-1/2, IMFD, TU Bergakademie Freiberg, 2002.

[29] Ł. Janski, M. Kuna, A. Meyer, M. Scherzer und P. Steinhorst: *Modellierung von Risswachstum in piezoelektrischen Materialien mittels moderner adaptiver FEM-Lösungsstrategien.* In: Bruchmechanik und Bauteilsicherheit (Hrsg. M. Kuna), DVM-Bericht 239:297-306, 39.Tagung des DVM-Arbeitskreises Bruchvorgänge, Dresden, 2007.

[30] Ł. Janski, M. Kuna, A. Meyer, M. Scherzer, P. Steinhorst: *Ein effizientes Finite-Elemente-Werkzeug zur Simulation von Rissausbreitung in piezoelektrischen Strukturen.* in: Absicherung der Systemzuverlässigkeit (Hrsg. H. Hanselka), DVM-Bericht 902:149-158, 2. Tagung des DVM-Arbeitskreises Zuverlässigkeit mechatronischer und adaptronischer Systeme, Koblenz, 2008.

[31] M. Jung, U. Langer: *Methode der finiten Elemente für Ingenieure.* B. G. Teubner, 2001.

[32] B. Kaltenbacher and M. Kaltenbacher: *Modelling and iterative identification of hysteresis via Preisach operators in PDEs.* in: J.Kraus and U.Langer (Eds.), „Lectures on Advanced Computational Methods in Mechanics“, Volume 1 of Radon Series on Computational and Applied Mathematics, pages 1-50, de Gruyter, Berlin, 2007.

[33] M. Kamlah: *Ferroelectric and ferroelastic piezoceramics - modeling of electromechanical hysteresis phenomena.* Continuum Mech. Thermodyn., 13:219–268, 2001.

[34] A.B. Kounga Njiwa, E. Aulbach, T. Granzow, J. Roedel and C.S. Lynch: *Influence of radial stress on the poling behaviour of lead zirconate titanate ceramics.* Acta Materialia 55:675-680, 2007.

[35] G. Kunert and R. Verfürth: *Edge Residuals dominate a posteriori Error Estimates for Linear Finite Element Methods on anisotropic triangular and tetrahedral meshes.* Numer. Math., 86:283-303, 2000.

[36] C.G. Lekhnitzkij: *Elasticity theory of the anisotropic solid.* Mir Publishers, Moscow, 1981.

[37] H.-J. Martin: *Die Ferroelektrika.* Akad. Verl.-Ges., Leipzig, 1964.

[38] R.-M. McMeeking: *Electrostrictive stresses near crack-like flaws.* Journal of applied mathematics and physics (ZAMP) 40:615-627, 1989.

[39] A. Meyer: *Efficient Preconditioners for Special Situations in Finite Element Computations.* in „Lecture Notes in Computational Science and Engineering“, Parallel Algorithms and Cluster Computing (K.-H. Hoffmann, A. Meyer (Eds.)), Springer, 2006.

[40] A. Meyer, F. Rabold and M. Scherzer: *Efficient Finite Element Simulation of Crack Propagation using Adaptive Iterative Solvers.* Communications in Numerical Methods in Engineering, 22:93-108, 2006.

[41] A. Meyer and T. Steidten: *Improvements and Experiments on the Bramble-Pasciak Type CG for Mixed Problems in Elasticity.* Preprint SFB393/01-13, TU Chemnitz, 2001.

[42] A. Meyer und P. Steinhorst: *Überlegungen zur Parameterwahl im Bramble-Pasciak-CG für gemischte FEM.* Preprint SFB393/05-07, TU Chemnitz, 2005.

[43] A. Meyer und P. Steinhorst: *Betrachtungen zur Spektraläquivalenz für das Schurkomplement im Bramble-Pasciak-CG bei piezoelektrischen Problemen.* Preprint CSC/07-08, TU Chemnitz, 2007.

[44] N.I. Mußchelichwili: *Einige Grundaufgaben zur mathematischen Elastizitätstheorie.* VEB Fachbuchverlag, Leipzig, 1971.

[45] Y.E. Pak: *Crack extension force in a piezoelectric material.* Journal of Applied Mechanics, 57:647-653, 1990.

[46] Y.E. Pak: *Linear electro-elastic fracture mechanics of piezoelectric materials.* International Journal of Fracture, 54:79-100, 1992.

[47] S.B. Park, C.T. Sun: *Effect of electric field on fracture of piezoelectric ceramics.* International Journal of Fracture, 70:203-216, 1995.

[48] Q.-H. Qin: *Fracture Mechanics of Piezoelectric Materials.* WIT Press, Southampton, Boston, 2001.

[49] M. Randrianarivony: *Stabile Diskretisierungen des Stokes-Problems auf anisotropen Netzen.* Masterarbeit, TU Chemnitz, 2001.

[50] R. Rannacher and S. Turek: *Simple nonconforming quadrilateral Stokes element.* Numerical Methods for Partial Differential Equations, 8:97-111, 1992.

[51] A. Ricoeur: *Theoretische Untersuchungen zum Bruchverhalten ferroelektrischer Keramiken bei elektromechanischer Beanspruchung.* Habilitationsschrift in: Freiberger Forschungshefte, TU Bergakademie Freiberg, 2007.

[52] H.P. Rossmanith (Hrsg.): *Fracture Research in Retrospect.* A. A. Balkema, Rotterdam, Brookfield, 1997.

[53] M. Scherzer: *About solutions of a crack inside an infinite 2D piezoelectric solid.* Unvollständiges Manuskript (vermutlich nicht veröffentlicht), TU Bergakademie Freiberg, 2006.

[54] M. Scherzer: *Elektromechanische Modellierung und Bewertung der Festigkeit von Verbundwerkstoffen mit integrierten Piezokeramiken.* Forschungsbericht Projekt Az: 4-7533-70-0390-98/4, TU Bergakademie Freiberg, 2001.

[55] M. Scherzer and M. Kuna: *Combined Analytical and numerical solution of 2D interface corner configurations between dissimilar piezoelectric materials.* TU Bergakademie Freiberg, 2003 and Int. J. Fracture 127:61-99, 2004

[56] D. Schrade, R. Mueller, B. Xu, D. Gross: *Domain evolution in ferroelectric materials: A continuum phase field model and finite element implementation.* Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 196:4365-4374, 2007.

[57] J. Schroeder and H. Romanowski: *A thermodynamically and microscopically motivated constitutive modeling for piezoceramics.* Arch. Appl. Mech., 74:863–877, 2005.

[58] J. Schroeder, H. Romanovski and I. Kurzhöfer: *Meso-Macro-Modelling of Nonlinear Ferroelectric Ceramics.* Online Proceedings of the 5th International Conference on Computation of Shell and Spatial Structures, Eds.: E. Ramm, W.A. Wall, K. Bletzinger and M. Bischoff, Salzburg (Austria), June 1-4, 2005.

[59] F. Shang, M. Kuna and M. Scherzer: *A Finite Element Procedure for Three-dimensional Analyses of Thermopiezoelectric Structures in Static Applications.* Technische Mechanik, Band 22, Heft 3:235-243, 2002.

[60] H. Sosa: *Plane problems in piezoelectric media with defects.* Int. J. Solids Struct., 28(4):491-505, 1991.

[61] H. Sosa: *On the fracture mechanics of piezoelectric solids.* Int. J. Solids Struct., 29:2613-2622, 1992.

[62] P. Steinhorst: *Rotationssymmetrie für piezoelektrische Probleme.* Preprint CSC/07-03, TU Chemnitz, 2007.

[63] A.N. Stroh: *Dislocations and cracks in anisotropic elasticity.* Philosophical Magazine 3:625-646, 1958.

[64] Z. Suo, C.-M. Kuo, D.M. Barnett, J.R. Willis: *Fracture mechanics for piezoelectric ceramics.* J. Mech. Phys. Solids, 40:739-765, 1992.

[65] T.R. Tauchert: *Plane piezothermoelastic response of a hybrid laminate – a benchmark problem.* Composite Structures, 39:329-336, 1997.

[66] R.L. Taylor, K.S. Pister and L.R. Herrmann: *On a variational theorem for incompressible and nearly-incompressible orthotropic elasticity.* Int. J. Solids Struct., 4:875-883, 1968.

[67] H. Theilig, M. Wünsche, und R. Bergmann: *Numerische und experimentelle Untersuchungen zur Entwicklung gekrümmter Ermüdungsrisse bei proportionaler zyklischer Belastung.* DVM-Bericht 235:239-248, Deutscher Verband für Materialforschung und -prüfung, Berlin, 2003.

[68] R. Unger: *Unterraum-CG-Techniken zur Bearbeitung von Kontaktproblemen.* Dissertationsschrift, TU Chemnitz, 2007.

[69] R. Verfürth: *Error estimates for a mixed finite element approximation of the Stokes equations.* RAIRO Anal. Numer. 18:175-182, 1984.

[70] R. Verfürth: *A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques.* Wiley-Teubner series advances in numerical mathematics, Chichester, Stuttgart, 1996.

[71] W. Voigt: *Lehrbuch der Kristallphysik.* Teubner, Leipzig, 1910.

[72] B.X. Xu, D. Schrade, R. Mueller, D. Gross, T. Granzow and J. Roedel: *Electro-mechanical behavior of ferroelectrics – Phase field simulation and experiments.* Submitted to Mechanics of Materials, 2008.

[73] X.-L. Xu, R.K.N.D. Rajapakse: *A theoretical study of branched cracks in piezoelectrics.* Acta mater., 48:1865-1882, 2000.

[74] H. Yserentant: *Two Preconditioners Based on the Multilevel Splitting of Finite Element Spaces.* Numer. Math., 58:163-184, 1990.

[75] O.C. Zienkiewicz and J.Z. Zhu: *A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis.* Int. J. Num. Meth., 24:337-357, 1987.

# Danksagung

Abschließend möchte ich nicht versäumen, mich für die mir zugekommene Unterstützung beim Zustandekommen dieser Arbeit herzlich zu bedanken. Insbesondere bei meinem Betreuer, Herrn Prof. Dr. Arnd Meyer, der mir mit Rat, Tat und offenem Ohr zur Seite stand und mir in kritischen Phasen Mut zugesprochen hat. Ebenfalls Dank gebührt dem inzwischen leider verstorbenen Kollegen Dr. Dr. Matthias Scherzer sowie Dr. Łukasz Janski von der TU BA Freiberg, welche mir im Zuge der Zusammenarbeit im DFG-Projekt in so mancher Frage zur mechanisch/elektrischen Seite der Piezomaterialien weiterhelfen konnten. Ferner meinen Kollegen aus den Numerik-Arbeitsgruppen für verschiedene hilfreiche Hinweise sowohl in fachlichen als auch in LaTeX-Fragen, sowie den Teilnehmern und Organisatoren der seit 2006 stattgefundenen Piezo-Workshops für interessante Ideen und Diskussionen.
Für die finanzielle Unterstützung durch die DFG im Sonderforschungsbereich 393 sowie im Kooperations-Paketprojekt Mathematik-Mechanik, welcher das Zustandekommen der vorliegenden Arbeit unter anderem zu verdanken ist, sei an dieser Stelle ebenfalls gedankt.

# Thesen zur Dissertation

1. Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich ausführlich mit der Simulation linearer piezoelektrischer Probleme mithilfe der Finite-Element-Methode. In Teilen wird dabei gleichzeitig auch auf spezielle mechanische Probleme mit inkompressiblen Materialverhalten eingegangen, da die Struktur der entstehenden Gleichungssysteme

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^T & -\mathbf{K} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{pmatrix}$$

   und somit auch die möglichen Lösungsmethoden Gemeinsamkeiten zum Piezoproblem aufweisen.

2. Für die behandelten Problemklassen „Lineare Piezoelektrizität“ sowie „Lineare inkompressible Elastizität“ wurden im Zuge dieser Arbeit auf der Basis einer adaptiven FEM-Simulation die Experimentalprogrammvarianten SPC-Pm2AdPiez sowie SPC-Pm2AdMix implementiert. Diese bilden eine Grundlage für Beispielrechnungen und Erweiterungen unter anderem in Richtung Rißwachstum.

3. Der vorgeschlagene und verwendete Löser (ein modifizierter Bramble-Pasciak-CG) wurde untersucht und die Anwendung einer speziellen Vorkonditionierung für den piezoelektrischen Fall theoretisch unterfüttert. Fernerhin wurde eine Strategie zur Wahl eines löserspezifischen Parameters vorgeschlagen, theoretisch untersucht und an ausgewählten Beispielen erfolgreich auf ihre Wirksamkeit getestet.

4. Die effektive Behandlung rotationssymmetrischer Probleme im Rahmen einer zweidimensionalen FEM mit geringen Erweiterungen konnte für das lineare Piezoproblem theoretisch hergeleitet und zunächst für den Fall axialer Polung als Zusatzvariante implementiert werden. Eine Erweiterung auf radiale Polung, welche beipielsweise in Hohlzylinderanwendungen vorkommt, wurde ebenfalls theoretisch untersucht und ist bei Bedarf mit überschaubarem Zeitaufwand implementierbar.

5. Zum Zwecke einer adaptiven Netzverfeinerungsstrategie wurde ein für linear-elastische Probleme vielfach bewährter Fehlerschätzer auf piezoelektrisches Materialverhalten erweitert und die Zuverlässigkeit theoretisch nachgewiesen.

6. Besondere Randbedingungen wie leitfähige Ränder oder Kontakt mit festen Hindernissen wurden in die Theorie eingebettet und konnten als Varianten in die Implementierung mit aufgenommen werden. Desweiteren wurde ein ausführlicher Vergleich der

mit adaptiver FEM erzeugten Näherungslösung eines ebenen geraden Rißproblems mit der analytischen Lösung für das zugehörige asymptotische Problem in der unendlichen Ebene (elektromechanischer Griffithriß) angestellt. Hier zeigt sich, daß ausgehend von einem Startnetz mit etwa 100 Knoten dank der Adaptivität schon bei einem Netz mit etwa 1000 Knoten die asymptotische Lösung vergleichsweise sehr gut angenähert wird.

7. Eine interessante und sehr aktuelle Thematik ist das Wachstum von Ermüdungsrissen. Der Einbau von wachsenden Rißstrukturen sowie die Anpassung einer geeigneten Vorkonditionierung auf aufreißende Netze im zweidimensionalen Fall für das lineare Piezoproblem konnte im Rahmen dieser Arbeit erfolgen.

8. Das in Kooperation mit der TU BA Freiberg erstellte Simulationswerkzeug **ΠCrack** nutzt wesentliche Ergebnisse dieser Arbeit und kann als Grundlage dienen, mögliche Bruchkriterien für zweidimensionale Rißwachstumsprobleme in Piezomaterialien zu testen. Im Hinblick auf eine realitätsnahe Simulation sind dabei noch Möglichkeiten zur Erweiterung zu beachten. Zum Beispiel sei hier die Einbeziehung des Zusammenspiels von Rißwachstum und Kontakt zwischen den Rißflanken bei möglicher (teilweiser) Rißschließung genannt, im Hinblick auf Modellierung und Implementierung der dabei auftretenden elektrischen und mechanischen Wirkungen.

# Wissenschaftlicher Lebenslauf

| | |
|---|---|
| Name: | Peter Steinhorst |
| Geburtsdatum: | 01.06.1978 |
| Geburtsort: | Schleiz |
| Familienstand: | ledig |
| Staatsangehörigkeit: | deutsch |

- Schulische Ausbildung (1984 - 1996)
  - 09/84 - 07/91 Besuch der polytechnischen Oberschule „Geschwister Scholl“, Saalburg/Saale.
  - 09/91 - 06/96 Besuch des staatlichen Gymnasiums „Dr. Konrad Duden“, Schleiz (Thüringen).
    Abschluß: Abitur (Gesamtnote 1.5).
- 07/96 - 07/97 Zivildienst im Altenpflegeheim Emmaus, Ebersdorf/Thür.
- Studium (1997 - 2003)
  - 10/97 - 10/03 Studium der Technomathematik mit Nebenfach Elektrotechnik an der TU Chemnitz
    Abschluß: Diplom (Prädikat - sehr gut), Diplomthema:
    *Simulation des instationären Wärmetransport durch Hitzeschutztextilien.*
- Wissenschaftliche Tätigkeit (seit 2003)
  Seit 10/03 Beschäftigung als wissenschaftlicher Mitarbeiter an der TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik.
  - 10/03 - 12/05 Mitarbeit im Sonderforschungsbereich 393, Teilprojekt A11 (Gemischte Formulierungen: adaptive anisotrope finite Elemente und parallele Löser).
  - 01/06 - 12/07 und seit 10/08 Mitarbeit im Paketprojekt „Numerische Simulation gekoppelter Aufgaben der Mechanik“.

# Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides Statt, daß ich die vorliegende Arbeit selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt habe.

Chemnitz, den 16. Juli 2009