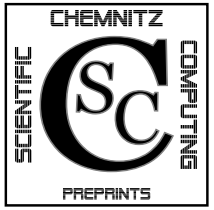
TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ

Arnd Meyer Peter Steinhorst

Modellierung und Numerik wachsender Risse bei piezoelektrischem Material

CSC/10-01



Chemnitz Scientific Computing Preprints

Chemnitz Scientific Computing Preprints – ISSN 1864-0087

Impressum:

Chemnitz Scientific Computing Preprints — ISSN 1864-0087
(1995–2005: Preprintreihe des Chemnitzer SFB393)

Herausgeber:
Professuren für
Numerische und Angewandte Mathematik
an der Fakultät für Mathematik
der Technischen Universität Chemnitz

Postanschrift:
TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik
09107 Chemnitz
Sitz:
Reichenhainer Str. 41, 09126 Chemnitz

http://www.tu-chemnitz.de/mathematik/csc/

TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ

Chemnitz Scientific Computing Preprints

Arnd Meyer Peter Steinhorst

Modellierung und Numerik wachsender Risse bei piezoelektrischem Material

CSC/10-01

CSC/10-01 ISSN 1864-0087 **Mai 2010**

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung **1**
- 1.1 Problembeschreibung Piezoelektrizität . . . 1
- 1.2 Abgeleitete Größen, Materialgesetz, Gleichungen . . . 2
- 1.3 Bilinearformen, schwache Formulierung . . . 4

2 Implementierung **4**
- 2.1 Sattelpunktsproblem . . . 4
- 2.2 FE-Formulierung . . . 5
- 2.3 Löser und Vorkonditionierung . . . 6
- 2.4 Adaptivität . . . 8

3 Besonderheiten von Randbedingungen **9**
- 3.1 Konstantes Potential auf Teilrändern . . . 9
- 3.2 Rißproblem . . . 12

4 Rißschließen und Kontaktproblem **14**
- 4.1 Motivation für Rißkontaktbetrachtung . . . 14
- 4.2 Bezeichnungen . . . 15
- 4.3 Kontaktproblem für Verschiebung und Behandlung des Potentials . . . 15
- 4.4 FEM-Implementierung des Rißkontaktes . . . 16
- 4.5 Numerische Beispiele . . . 19

Author's addresses:

Arnd Meyer
TU Chemnitz
Fakultät für Mathematik
D-09107 Chemnitz

Peter Steinhorst
Karl-Franzens-Universität Graz
Institut für Mathematik u. wiss. Rechnen
Heinrichstraße 36, A-8010 Graz

`http://www.tu-chemnitz.de/mathematik/`

Literatur

[1] 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.

[2] R. Courant: *Variational Methods for the Solution of Problems of Equilibrium and Vibrations,* Bull. Amer. Math. Soc., 49:1-23, 1943.

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

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

[5] 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.

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

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

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

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

[10] M. Scherzer, M. Kuna, *Combined Analytical and numerical solution of 2D interface corner configurations between dissimilar piezoelectric materials,* Part I: Asymptotic eigenfunction expansions. Int. J. Fracture 127:61-99, 2004

[11] P. Steinhorst: *Anwendung adaptiver FEM für piezoelektrische und spezielle mechanische Probleme.* Dissertation, TU Chemnitz, 2009

[12] R. Unger: *Unterraum-CG-Techniken zur Bearbeitung von Kontaktproblemen.* Dissertation, TU Chemnitz, 2007.

[13] W. Voigt: *Lehrbuch der Kristallphysik.* Teubner, Leipzig, 1910.

[14] H. Yserentant: *Two Preconditioners Based on the Multilevel Splitting of Finite Element Spaces.* Numer. Math., 58:163-184, 1990.

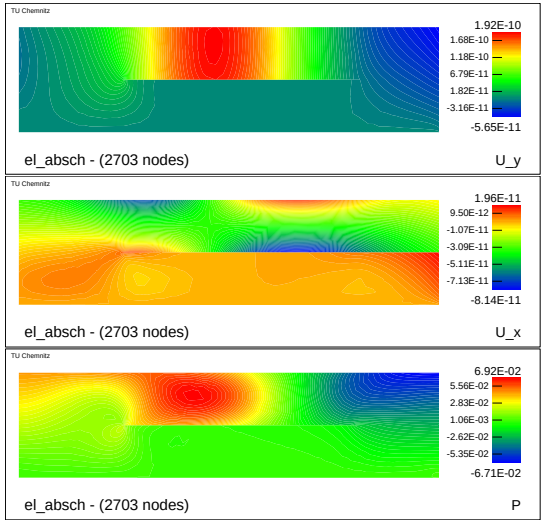


Abbildung 11: Verschiebungskomponenten und elektrisches Potential in Beispiel 2

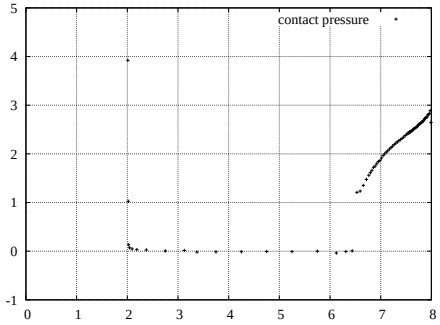


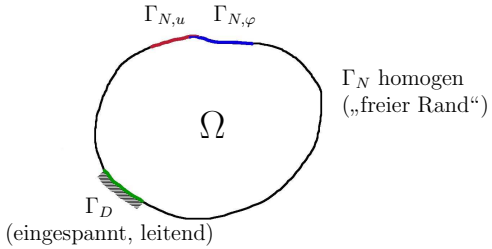
Abbildung 12: Kontaktdruck auf Ligament nach adaptiver Rechnung in Beispiel 2

1 Einführung

1.1 Problembeschreibung Piezoelektrizität

Piezoelektrische Materialien besitzten die Eigenschaft, daß zwischen dem elastischen Materialverhalten (ausgehend vom Verschiebungsfeld u als vektorielles Primärfeld mit den Komponenten u_i) und dem elektrostatischen Verhalten (ausgehend vom elektrischen Potential φ als skalares Primärfeld) eine Kopplung besteht. Entdeckt wurde der Piezoeffekt Ende des 19.Jahrhunderts von den Brüdern Curie, welche feststellten daß an Turmalinkristallen bei mechanischer Beanspruchung Oberflächenladungen auftreten. Dieser Effekt wird als direkter Piezoeffekt bezeichnet. Gleichzeitig weisen piezoelektrische Materialien einen inversen Piezoeffekt auf, das bedeutet Verformungen beim Anlegen elektrischer Spannung. Piezoeffekte treten bei verschiedenen Kristallen mit unsymmetrischer Struktur auf. Für den technischen Einsatz verwendet man heutzutage gesinterte und gepolte Keramiken, welche einen stärkeren Piezoeffekt aufweisen als die natürlichen Kristalle. Sehr gebräuchlich ist dabei die Gruppe der Blei-Zirkonat-Titanate (PZT).

Mathematisch gesehen wird ein Körper bzw. Gebiet Ω betrachtet, in welchem aus der Elastizitätstheorie sowie aus der Elektrostatik bekannte Bilanzgleichungen erfüllt sein müssen und an dessem Rand geforderte Randbedingungen erfüllt werden sollen. Eine Skizze liefert das folgende Bild:



In der linearen Elektromechanik werden als Voraussetzung kleine Deformationen und lineares Materialverhalten verwendet, weicht man davon ab müßten Hystereseeffekte berücksichtigt werden. In Piezomaterialien liegt allgemein keine Isotropie vor, vielmehr existiert eine definierte Materialachse (Polungsrichtung), bezüglich dieser ein transversalisotropes Materialverhalten vorliegt. Eine Einführung in die lineare Piezoelektrizität findet man in der Literatur, z.B. [8],[9].

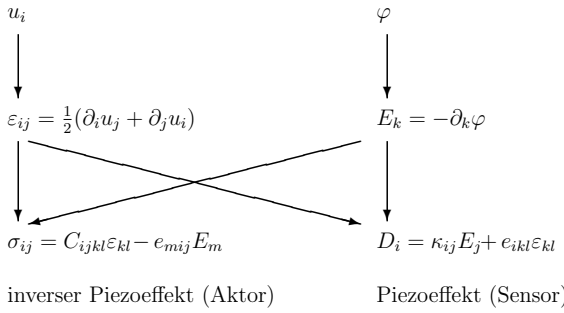


Abbildung 1: Darstellung der Abhängigkeiten bei elektromechanischen Feldgrößen

1.2 Abgeleitete Größen, Materialgesetz, Gleichungen

Das Schema in Abbildung 1 verdeutlicht die Abhängigkeiten ausgehend von den Primärfeldern sowie die Kopplung zwischen elastischen und elektrischen Feldgrößen. Dabei wird die Einsteinsche Summenkonvention benutzt. Läßt man die Kopplung weg, ergeben sich auf der linken Seite die Gleichungen des rein elastostatischen Problems, auf der rechten Seite des rein elektrostatischen Problems.

Dabei bezeichnen:

- ε – Verzerrungstensor
- σ – Spannungstensor
- E – Elektrische Feldstärke
- D – Dielektrische Verschiebung

sowie die Materialkonstanten

- C – Linear-elastischer Tensor (4.Stufe)
- κ – Dielektrischer Tensor (2.Stufe)
- $\mathbf{e}$ – piezoelektrischer Kopplungstensor (3.Stufe)

Aus dem Kräftegleichgewicht und dem Ladungsgleichgewicht folgen die Differentialgleichungen

$$\begin{array}{rcl} \operatorname{div}\sigma \quad +\vec{f} & = & \mathbf{0}\,, \\ \operatorname{div} D \quad -\omega_v & = & 0\,. \end{array} \tag{1}$$

Als Randbedingungen werden verwendet:

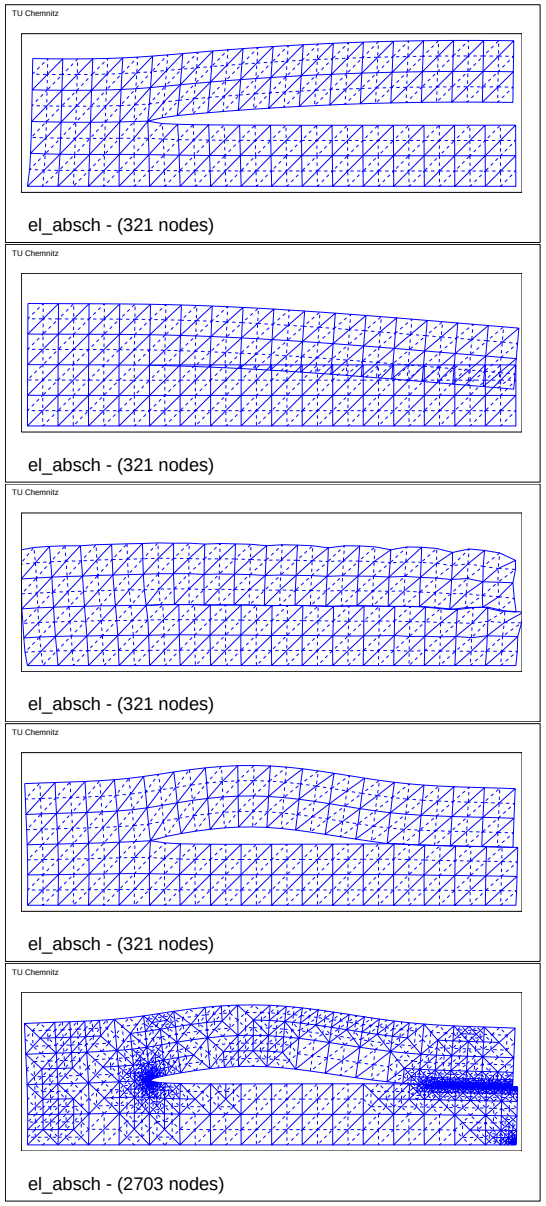


Abbildung 10: Deformierte Netze bei Rechnung in Beispiel 2

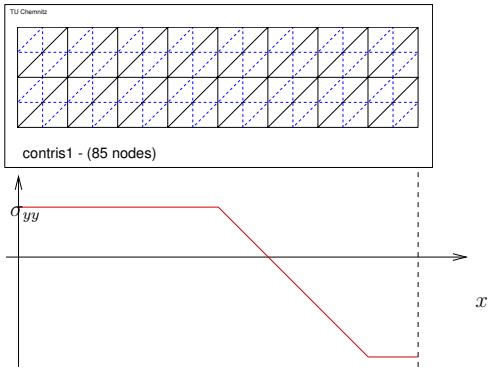


Abbildung 9: Startnetz und Randbedingung σ_{yy} am oberen Rand in Beispiel 2

Abbildung 10 enthält die folgenden deformierten Netze:

- Nach einmaliger Totalverfeinerung und künstlichem Rißwachstum bis zu $x = 2$.
- Nach anschließendem Abschalten der elektrischen Randbedingung und erster neuer Lösungsberechnung. Hier kommt es zur Durchdringung, da der Kontakt erst in der apostiori-Rechnung erkannt wird und die entsprechenden Knoten bzw. Kanten für die nächste Lösungsiteration markiert werden.
- Nach einem weiteren Lösungsschritt mit unverändertem Netz. Hier wurde der Kontakt erkannt und die Lösung entsprechend restringiert, allerdings sind noch keine Knoten wieder freigegeben worden da die Kontaktdruckberechnung nebst entsprechender Markierung wiederum im Nachgang erfolgt und erst im folgenden Lösungsschritt wirksam wird.
- Nach nochmaliger Rechnung mit unverändertem Netz, hier wurde nun auch die Freigabe von Knoten mit negativem Kontaktdruck wirksam.
- Genauere Lösungsapproximation nach einigen Schritten adaptiver Verfeinerung im Anschluß.

Die primären Lösungskomponenten sind in Abbildung 11 dargestellt.

Abbildung 12 zeigt den Verlauf des Kontaktdrucks auf der Rißlinie.

- Dirichlet-Randbedingungen:

$$u = u_0 \text{ auf } \Gamma_{D,u}, \quad \varphi = \varphi_0 \text{ auf } \Gamma_{D,\varphi} \tag{2}$$

- Neumann-Randbedingungen:

$$\sigma \cdot \mathfrak{n} = \overline{T} \text{ auf } \Gamma_{N,u}, \quad D \cdot \mathfrak{n} = -\overline{\omega}_s \text{ auf } \Gamma_{N,\varphi} \tag{3}$$

Dabei entsprechen $\vec{f}$ den Volumenkräften, ω_v den Volumenladungen, u_0 und φ_0 Verschiebungen und elektrischem Potential auf dem Rand, $\overline{T}$ Randkräften bzw. Randspannungen sowie $\overline{\omega}_s$ Randladungen.

Materialgesetz in Matrix-Vektor-Notation

In Tensorschreibweise lautet das Materialgesetz gemäß Abbildung 1 wie folgt:

$$\sigma(u,\varphi) = C : \varepsilon(u) + \mathbf{e}^T \cdot \nabla\varphi\,, \qquad D(u,\varphi) = \mathbf{e} : \varepsilon(u) - \kappa \cdot \nabla\varphi\,. \tag{4}$$

Zur handlicheren Darstellung verwendet man stattdessen aber oft eine Darstellung bei der alle Materialtensoren als Matrizen, sowie abgeleiteten Größen als Vektoren geschrieben werden. Man definiert (aufgrund Symmetrie der Tensoren σ, ε mit reduzierter Anzahl Freiheitsgrade):

$$\begin{array}{lll} \underline{\sigma} := (\sigma_{11},\sigma_{22},\sigma_{33},\sigma_{12},\sigma_{23},\sigma_{13})^T\,, & \underline{\varepsilon} := (\varepsilon_{11},\varepsilon_{22},\varepsilon_{33},2\varepsilon_{12},2\varepsilon_{23},2\varepsilon_{13})^T & \text{in 3D}\,, \\ \underline{\sigma} := (\sigma_{11},\sigma_{22},\sigma_{12})^T\,, & \underline{\varepsilon} := (\varepsilon_{11},\varepsilon_{22},2\varepsilon_{12})^T & \text{in 2D}\,, \end{array} \tag{5}$$

wobei der zweidimensionale Fall der elektromechanischen Erweiterung des ebenen Verzerrungszustandes entspricht. Damit läßt sich das Materialgesetz wie folgt darstellen:

$$\begin{pmatrix} \underline{\sigma} \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{C}} & \underline{\underline{B}} \\ \underline{\underline{B}}^T & -\underline{\underline{K}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\varepsilon} \\ \nabla\varphi \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Die Materialmatrizen in 3D mit x_3 als Polungsrichtung sehen wie folgt aus:

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

wobei $c_{44} = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})$ gilt. Im zweidimensionalen Fall ist entsprechend mit verkürzter Darstellung

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

Bemerkung: Die vektorielle Anordnung der gemischten Komponenten im 3D-Fall wird in der Literatur häufig anders vorgenommen, gebräuchlich ist vor allem die sogenannte Voigt-Notation [13]:

$$\underline{\sigma} := (\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{23}, \sigma_{13}, \sigma_{12})^T\,, \quad \underline{\varepsilon} := (\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, 2\varepsilon_{23}, 2\varepsilon_{13}, 2\varepsilon_{12})^T\,.$$

Je nach Notation sind dann die entsprechenden Zeilen und Spalten von $\underline{\underline{C}}$ sowie Zeilen von $\underline{\underline{B}}$ zu permutieren.

1.3 Bilinearformen, schwache Formulierung

Wir definieren zunächst die Räume $\mathbb{M} = H^1(\Omega)$ sowie $\mathbb{V} = (H^1(\Omega))^3$ im 3D-Fall, $\mathbb{V} = (H^1(\Omega))^2$ im 2D-Fall. Unter Beachtung der Dirichlet-Randbedingungen erzeugt man die folgenden Ansatz- und Testräume:

$$\begin{array}{rcllll} \mathbb{V}_0 & = & \{v \in \mathbb{V} & \text{mit} & v = \mathbf{0} & \text{auf } \Gamma_{D,u}\}\,, \\ \mathbb{V}_D & = & \{v \in \mathbb{V} & \text{mit} & v = u_0 & \text{auf } \Gamma_{D,u}\}\,, \\ \mathbb{M}_0 & = & \{\psi \in \mathbb{M} & \text{mit} & \psi = 0 & \text{auf } \Gamma_{D,\varphi}\}\,, \\ \mathbb{M}_D & = & \{\psi \in \mathbb{M} & \text{mit} & \psi = \varphi_0 & \text{auf } \Gamma_{D,\varphi}\}\,. \end{array} \tag{7}$$

Aus den Differentialgleichungen (1), den Randbedingungen (2) und (3) sowie dem Materialgesetz (4) bzw. (6) gewinnt man die schwache Formulierung des Problems:

$$\text{Finde } u \in \mathbb{V}_D,\, \varphi \in \mathbb{M}_D \qquad \text{mit} \quad \left\{ \begin{array}{rcrcll} c(u,v) & + & b(\varphi,v) & = & F(v) & \forall v \in \mathbb{V}_0\,, \\ b(\psi,u) & + & k(\varphi,\psi) & = & -G(\psi) & \forall \psi \in \mathbb{M}_0\,. \end{array} \right. \tag{8}$$

Hierbei sind die Bilinearformen und Linearformen definiert gemäß

$$\begin{array}{rcccl} c(u,v) & = & \int_\Omega \varepsilon(u) : C : \varepsilon(v)\, d\Omega & = & \int_\Omega (\underline{\varepsilon}(u))^T \underline{\underline{C}}\, \underline{\varepsilon}(v)\, d\Omega\,, \\ b(\psi,v) & = & \int_\Omega \nabla\psi \cdot \mathbf{e} : \varepsilon(v)\, d\Omega & = & \int_\Omega (\nabla\psi)^T \underline{\underline{B}}^T\, \underline{\varepsilon}(v)\, d\Omega\,, \\ k(\varphi,\psi) & = & \int_\Omega \nabla\phi \cdot \kappa \cdot \nabla\psi\, d\Omega & = & \int_\Omega (\nabla\varphi)^T \underline{\underline{K}}\, \nabla\psi\, d\Omega\,, \end{array} \tag{9}$$

$$\begin{array}{rcl} F(v) & = & \int_\Omega \vec{f}\cdot v\, d\Omega + \int_{\Gamma_{N,u}} \overline{T}\cdot v\, d\Gamma\,, \\ G(\psi) & = & \int_\Omega \omega_v \psi\, d\Omega + \int_{\Gamma_{N,\varphi}} \overline{\omega}_s \psi\, d\Gamma\,. \end{array} \tag{10}$$

2 Implementierung

2.1 Sattelpunktsproblem

Die schwache Formulierung des Problems (8) weist eine Sattelpunktstruktur auf. Ebendiese Sattelpunktstruktur tritt unter anderem auch auf bei der Behandlung des Stokes-Problems

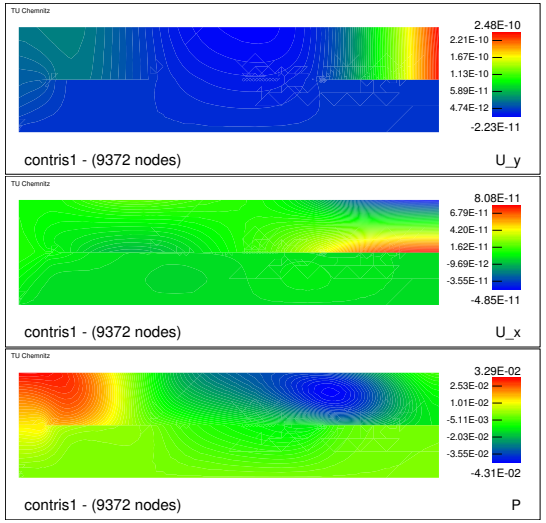


Abbildung 7: Verschiebungskomponenten und elektrisches Potential in Beispiel 1

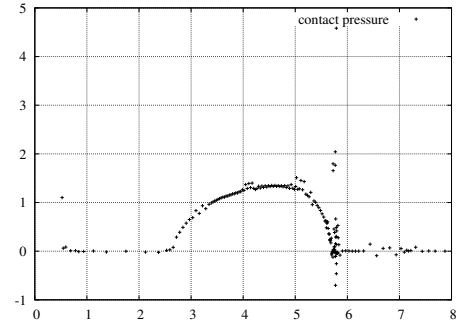


Abbildung 8: Kontaktdruck auf Ligament nach adaptiver Rechnung in Beispiel 1

also eine nach beiden Seiten hin begrenzte Kontaktzone erwartet. Abbildung 6 zeigt das deformierte Netz nach Hineinwachsen des Risses bis zu $x = 1$ und läßt eine entstandene Kontaktzone erkennen, die sich sichtbar innerhalb des Bereiches $x \in [2, 7]$, in welchem Druckrandkräfte wirken, befindet. Auch die in Abbildung 7 dargestellten Werte der Ver-

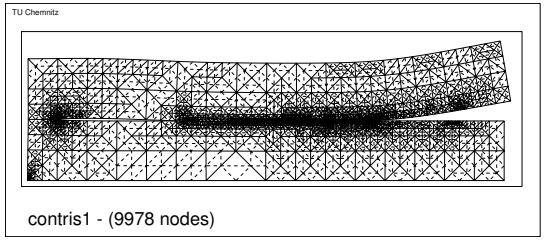


Abbildung 6: Deformiertes Netz nach adaptiver Rechnung in Beispiel 1

schiebung u_y (senkrecht zur Rißlinie) sowie des Potentials ϕ (im Bild: P) zeigen einen stetigen Verlauf in der Kontaktzone, dagegen einen Sprung über den Riß außerhalb der Kontaktzone. Die Tangentialverschiebung u_x hingegen weist einen, wenn auch geringeren, Sprung über den gesamten Riß einschließlich der Kontaktzone auf. In Abbildung 8 wird der aus der FEM-Approximationslösung berechnete Kontaktdruck dargestellt, aus welchem einigermaßen genau die Grenzen der Kontaktzone erkennbar sind. Der Theorie nach sollte der Kontaktdruck einen stetigen Verlauf aufweisen und außerhalb der Kontaktzone aufgrund der dort geltenden Rißrandbedingung $\sigma \cdot \mathfrak{n} = \mathbf{0}$ verschwinden. Die Ergebnisse der Rechnung lassen dies auch im Groben erkennen, zeigen allerdings an einigen Stellen ein instabiles Verhalten, insbesondere um den Beginn der Kontaktzone bei etwa $x = 5.75$ herum. Da eine Überverfeinerung in der gesamten Kontaktzone und insbesondere an derem vorderen Rand erkennbar ist, hilft möglicherweise schon eine geeignete Anpassung des Fehlerschätzers zur Überwindung der Instabilität.

Beispiel 2. Rißwachstum mit anschließendem Umschalten der Randbedingungen

In diesem Beispiel wird wieder das Gebiet Ω von oben betrachtet mit gleichem Startpunkt und (künstlicher) Wachstumsrichtung eines geraden Risses. Dabei findet das Rißwachstum unter einem Auseinanderziehen durch elektrische Belastung statt, danach werden diese elektrischen Randbedingungen abgeschaltet und es werden schwächere mechanische Randbedingungen wirksam, die den Riß vom Start her auf einem Teilabschnitt wieder zusammendrücken. Dabei wurde der Verlauf der Randkräfte (vgl. Abb. 9) derart gewählt, daß ein Kontakt im hinteren Teilabschnitt eintritt sowie eine Rißöffnung im Teil nahe der Rißspitze bestehenbleibt.

sowie gemischten Formulierungen in der Elastizität, die insbesondere bei inkompressiblen Materialien Anwendung finden [11]. Bei diesen Problemklassen ergab sich die Notwendigkeit einer zusätzlichen Bedingung (inf-sup-Bedingung) an die Ansatzräume $\mathbb{V}$ und $\mathbb{M}$, um Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung zu sichern. Was sich bei Diskretisierung mittels FEM dann auch in einer Einschränkung an die Wahl der endlichdimensionalen FE-Räume und somit zulässigen Elementepaare äußert. Diese Bedingung wird auch als LBB-Bedingung (nach Ladyšenskaya-Babuška-Brezzi) bezeichnet.

Im piezoelektrischen Fall liegt die Sache aber anders, hier benötigt man keine inf-sup- bzw. LBB-Bedingung. Vielmehr gewinnt man Existenz und Eindeutigkeit der Lösung aus der Betrachtung der zusammengefaßten Größen

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

mit einer zusammengesetzten unsymmetrischen Bilinearform

$$a(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = c(u, v) + b(\varphi, v) - b(\psi, u) + k(\psi, \varphi)\,, \tag{11}$$

welche mit Einführung einer geeigneten Norm elliptisch ist und zusammen mit der ohnehin vorliegenden Beschränktheit die Voraussetzungen des Lax-Milgram-Lemmas erfüllt. Für den Beweis wird hier auf [3] und [11] verwiesen.

2.2 FE-Formulierung

Wir suchen nun eine Approximation der Lösung in endlichdimensionalen Teilräumen

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

Dazu wird eine FE-Diskretisierung des Gebietes Ω in ein Netz $\mathcal{T}$ betrachtet, welches sich aus endlich vielen Elementen $T \in \mathcal{T}$ zusammensetzt. Die Räume $\mathbb{V}_h$ und $\mathbb{M}_h$ enthalten nun gerade die (in jeder Komponente) stetigen und elementweise polynomialen Ansatzfunktionen. Die verwendeten Polynomgrade können prinzipiell beliebig gewählt werden, aufgrund der gleichen Ordnung der Differentialoperatoren ist es allerdings sinnvoll, für beide Felder gleiche Polynomgrade zu wählen (beide linear oder beide quadratisch). Durch Wahl einer Vektorbasis Φ für die Verschiebungsfelder und einer skalaren Basis Ψ für die Potentialfelder erhält man die Darstellung

$$\begin{aligned} \mathbb{V}_h = span\,\Phi &= span(\vec{\phi}_1, \vec{\phi}_2, \ldots, \vec{\phi}_{n_u})\,, \\ \mathbb{M}_h = span\,\Psi &= span(\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_{n_p})\,. \end{aligned}$$

Damit ist es möglich, Koeffizientenvektoren $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_u}$, $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^{n_p}$ einzuführen und damit die FE-Ansatzfunktionen wie folgt darzustellen:

$$u_h = \Phi\mathbf{u} := \sum_{j=1}^{n_u} u^j \vec{\phi}_j\,, \qquad \varphi_h = \Psi\mathbf{p} := \sum_{j=1}^{n_p} p_j \psi_j\,.$$

Üblicherweise wählt man die Basisfunktionen in Φ und Ψ gerade so, daß diese in einem Knoten der Vernetzung (im Falle Φ nur in einer Komponente) den Wert 1 aufweisen, in allen sonstigen Knoten dagegen den Wert 0. In dieser knotenbasierten Basis entsprechen die u^i und p_j gerade den Werten von u_h (Komponente) bzw. ϕ_h am dazugehörigen Knoten. Aufschreiben von (8) für jede der Testfunktionen $\vec{\phi}_i$ und ψ_j nebst geeigneter Einarbeitung der Dirichletrandbedingungen führt schließlich auf ein Gleichungssystem der Form

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^T & -\mathbf{K} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{pmatrix}, \tag{12}$$

welches eine zur Schwachen Formulierung äquivalente Sattelpunktstruktur besitzt. Dabei ist die gesamte Systemmatrix symmetrisch, aber nicht positiv definit. Allerdings sind sowohl $\mathbf{C}$ als auch $\mathbf{K}$ positiv definit.

2.3 Löser und Vorkonditionierung

Zur Lösung des entstandenen linearen Gleichungssystems (12) kann nicht der gewöhnliche CG verwendet werden, da bei der Systemmatrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^T & -\mathbf{K} \end{pmatrix}$$

zwar Symmetrie, aber keine positive Definitheit vorliegt. Stattdessen wird eine Modifikation des von Bramble und Pasciak eingeführten Bramble-Pasciak-CGs [1] verwendet, der Abkürzung halber im Folgenden als BPCG bezeichnet. Hierbei wird auf eine von Meyer et.al. beschriebene Variante zurückgegriffen, siehe [5],[6],[11]. Der Grundgedanke des BPCG fußt darauf, mittels einer geeignet gewählten Vorkonditionierung unter Ausnutzung der Blockstruktur das Gleichungssystem (12) so zu transformieren, daß die neue Systemmatrix $\mathcal{A}$ bezüglich eines speziell gewählten Skalarprodukts $\langle .,. \rangle$ symmetrisch und positiv definit ist. Konkret multipliziert man $\mathbf{A}$ und rechte Seite von links mit

$$\mathcal{K} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_0^{-1} & \mathbb{0} \\ \delta \mathbf{B}_0^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{C}_0^{-1} & -\gamma\delta \mathbf{B}_0^{-1} \end{pmatrix},$$

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

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

Dabei sollen $\mathbf{C}_0$ und $\mathbf{B}_0$ symmetrisch sein sowie γ klein genug, daß $\mathbf{C} - \gamma \mathbf{C}_0$ positiv definit bleibt. Die vorkonditionierte Systemmatrix $\mathcal{A} = \mathcal{K}\mathbf{A}$ ist damit symmetrisch und positiv definit im Skalarprodukt

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle := ((\mathbf{C} - \gamma \mathbf{C}_0)\mathbf{u}, \mathbf{v}) + (\delta^{-1} \mathbf{B}_0 \mathbf{p}, \mathbf{q}) =: \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle_o + \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} \rangle_u, \tag{13}$$

Normal- und einen Tangentialanteil und läßt in die Fehlerschätzung lediglich den Tangentialanteil einfließen. Die Werte von $D \cdot \mathfrak{n}$ hätte man bei Verwendung der Kontakt-Übergangsbedingungen (25) schon abgeglichen und könnte man damit in diesem Fall ignorieren. Auf dem restlichen Riß wäre dann im einfachsten Fall gegen die homogene Neumannbedingung abzugleichen, beim semipermeablen Riß verkompliziert sich die Betrachtung entsprechend.

4.5 Numerische Beispiele

An ersten einfachen Beispielen soll getestet werden, ob die Kontaktroutinen arbeiten und die Rechnung zu einem plausiblen Ergebnis führt. Verwendet wurden jeweils Materialkonstanten eines Piezomaterials PZT4$_b$ [7],[10].

Beispiel 1. Langes Bauteil mit gewaltsamem Durchwachsen unter Druck

Hier wurde ein längliches Rechteckgebiet $\Omega = [0,8] \times [0,2]$ verwendet, mit homogenen Dirichletbedingungen $u = \varphi = 0$ auf dem unteren Rand ($y = 0$), sowie einwirkenden mechanischen Kräften in Normalenrichtung auf dem oberen Rand ($y = 2$) mit einem Ortsverlauf gemäß Abbildung 5. Ausgehend vom Punkt $(8,1)$ am rechten Rand wird nun

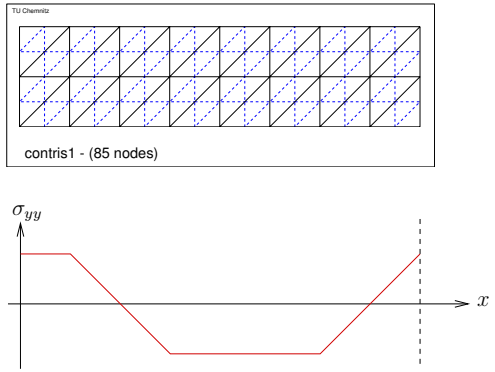


Abbildung 5: Startnetz und Darstellung der Randbedingung σ_{yy} am oberen Rand

künstlich ein gerader Riß waagerecht in das Gebiet hineingetrieben. Dabei ziehen die wirkenden Randkräfte den Riß zunächst lediglich nahe des Starts bei $x = 8$ auseinander, weiter im Gebietsinneren wirkt dagegen eine Druckkraft welche die entstehenden Rißufer aufeinanderdrückt. In diesem Bereich soll eine Kontaktzone erzeugt werden. Läßt man den Riß weit genug durch Ω hindurchwachsen, so treten ungefähr ab $x < 2$ wieder Zugkräfte auf, die in diesem Bereich eine Rißöffnung herbeiführen sollten. Im Ergebnis wird

Dabei ist $\mathfrak{n}$ als Normale der deformierten Kante aus den mittels (26) erhaltenen Knoten definiert.

- elektrisches Potential: Verwendung eines einfachen Mittelungsprojektors P_φ mit

$$P_\varphi \begin{pmatrix} \varphi_i^+ \\ \varphi_i^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_i^+ \\ \varphi_i^- \end{pmatrix} .$$

Hierbei wird die als vergleichsweise gering angenommene Verschiebung längs der Rißrichtung für das Potential in Vereinfachung erst einmal ignoriert.

Kontaktdruckberechnung

Schließlich stellt sich das Problem wie mit den Knoten bzw. Kanten, für die einmal ein Kontakt festgestellt wurde und Projektoren gesetzt wurden, in weiteren Verfeinerungsschritten verfahren wird. Läßt man die Kontaktkanten einfach auf Kontakt stehen und vererbt diese Information bei Verfeinerung an die Tochterkanten weiter, kann es dazu kommen daß Knoten aufgrund einer im groben Level erhaltenen Kontaktinformation aneinander "kleben", obwohl in der inzwischen feineren Auflösung der Kontaktzone diese Knoten keinen Kontakt mehr hätten (Rißöffnen). Das heißt, der Riß würde durch die Projektion künstlich zusammengehalten.

Man braucht also eine Zusatzinformation ob ein einmal erkannter Kontakt bestehenbleibt, falls dies nicht der Fall ist können die Projektoren wieder abgeschalten und die entsprechenden Knoten freigegeben werden. Für diesen Test eignet sich die Berechnung des Kontaktdruckes p_{cont} aus der Näherungslösung $\forall$ Kontaktkanten S_i:

$$p_{\text{cont}} = -\mathfrak{n}^T \sigma \mathfrak{n} .$$

Falls $p_{\text{cont}} < 0$, werden die Knoten auf der entsprechenden Rißkante freigegeben.

Anpassung des Fehlerschätzers

Es stellt sich die Frage, wie die Kontaktkanten (die ja weder zum Dirichlet- noch zum Neumannrand gehören) bei der Fehlerschätzung zu betrachten sind. Von einer Behandlung als Dirichletkanten ist abzuraten, da hierdurch verhindert wird daß eine Verfeinerung an den Rändern der Kontaktzone erfolgt, welche gerade für eine jedenfalls gewünschte bessere Auflösung der Kontaktzone im Zuge der Adaptivität notwendig ist. Eine Behandlung als (homogene) Neumannränder ist möglich, führt allerdings leicht zu einer Überverfeinerung des gesamten Kontaktrandes. Ursache hierfür ist, daß etwa durch den Kontaktdruck die Werte von $\sigma \cdot \mathfrak{n}$ auf den Kontakträndern nicht verschwinden. Eine Möglichkeit besteht darin, bei Kontakt und positivem Kontaktdruck für die entsprechenden Kanten eine Rutschrandbedingung anzusetzen. Wie in [12] beschrieben, zerlegt man dann zunächst $\sigma \cdot \mathfrak{n}$ in einen

wobei $(.,.)$ das übliche euklidische Skalarprodukt im $\mathbb{R}^{n_u}$ bzw. $\mathbb{R}^{n_p}$ bezeichnet und die folgende Blockschreibweise benutzt wird:

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

Der (modifizierte) BPCG entspricht schließlich dem üblichen CG mit $\mathcal{A}$ und $\langle .,. \rangle$.

Vorkonditionierung und Parameterwahl

Entscheidend für die Benutzbarkeit des BPCG ist die Wahl guter Vorkonditionierer $\mathbf{C}_0$ und $\mathbf{B}_0$. Während als $\mathbf{C}_0$ analog zum linear-elastischen Fall eine übliche Multilevel-Vorkonditionierung verwendet werden kann, ist dies für $\mathbf{B}_0$ zunächst nicht gesichert gewesen. Allerdings konnte in [11] gezeigt werden, daß es genügt, einen guten Vorkonditionierer für $\mathbf{K}$ zu finden, da eine Spektraläquivalenzabschätzung zwischen $\mathbf{K}$ und dem gesamten Schurkomplement $\mathbf{S}$ existiert. Somit kann aber als $\mathbf{B}_0$ wiederum einfach eine Multilevel-Vorkonditionierung für $\mathbf{K}$ verwendet werden. Aufgrund der durch die Adaptivität ohnehin vorhandenen Netzhierarchie bietet sich dabei im 2D-Fall insbesondere der Hierarchische-Basen-Vorkonditionierer nach Yserentant [14] an. Bei echten 3D-Problemen sollte für optimale Kondition besser der etwas schwieriger zu implementierende BPX-Vorkonditionierer zum Einsatz kommen.

Eine weitere Voraussetzung für vernünftige Konvergenz des BPCG ist die Wahl geeigneter Parameter γ und δ. Hierzu wurden einige Überlegungen angestellt, siehe dazu [11], [6]. Für γ konnte dabei lediglich die Aussage getroffen werden, daß ein relativ großer Wert nahe der zulässigen Beschränkung günstig ist (für die man den kleinsten Eigenwert von $\mathbf{C}_0^{-1}\mathbf{C}$ bestimmen müßte oder einfach ein empirisch gewähltes γ auf Zulässigkeit testet und gegebenenfalls verkleinert). Für die Wahl von δ kann dagegen mit relativ begrenztem Rechenaufwand (entspricht etwa einer CG-Iteration) ein Tip mittels Berechnung von Rayleigh-Quotienten getroffen werden.

Einbindung von Projektoren

Viele Problemstellungen führen zu zusätzlichen Restriktionen, die eine spezielle Behandlung notwendig machen. Eine Möglichkeit ist es dabei, Unterraum-Projektionstechniken einzusetzen (ausführlich beschrieben in [12]). Dabei werden Projektionen direkt in den CG-Löser eingebettet, diese Techniken sind für verschiedene Restriktionen einsetzbar wie beispielsweise hängende Knoten, periodische sowie Rutschrandbedingungen oder eben Kontaktprobleme. Dafür müssen geeignete Projektoren P konstruiert werden, die dann mit der Vorkonditionierung in den Löser eingebettet werden. So verwendet man bei Projektoren für die Verschiebungsfelder statt $\mathbf{C}_0^{-1}$ den modifizierten Vorkonditionierer

$$\tilde{\mathbf{C}}_0^{-1} = P \mathbf{C}_0^{-1} P^T . \tag{14}$$

Der Projektor links sichert dabei die Projektion in den gewünschten Unterraum, während der transponierte Projektor wieder die gewünschte Symmetrie erzeugt.

2.4 Adaptivität

Eine adaptive Netzverfeinerung bietet ausgehend von einem Grobnetz erheblich bessere Möglichkeiten, die Lösung vor allem an kritischen Stellen (Singularitäten, Randschichten usw.) aufzulösen, ohne dabei die Gesamtzahl der Freiheitsgrade unverhältnismäßig anwachsen zu lassen. Bei einer Totalverfeinerung (uniforme Netzverfeinerung) hingegen ist für jede Verdopplung der Auflösungsschärfe näherungsweise eine Vervierfachung in 2D, sogar eine Verachtfachung in 3D der Knotenzahl bzw. Freiheitsgrade notwendig. Womit schnell die Grenzen von Rechenleistung und Speicherkapazität erreicht wären.

Prinzipiell existieren 2 Zugänge zur adaptiven Verfeinerung:

- **Nutzung von a-priori Informationen über die Lösung**
  Man verfeinert das Netz gerade an den Stellen besonders stark, die von besonderem Interesse sind. Meist sind das diejenigen wo bekannt ist oder erwartet wird, daß die Lösung eine verminderte Glattheit aufweist. Beispiele hierfür wären graduelle Netzverfeinerung um Singularitäten an einspringenden Ecken, Rißspitzen oder Sprüngen in den Randbedingungen.

- **Gütebewertung des Netzes anhand Näherungslösung**
  Man berechnet für ein bestehendes Netz eine numerische Lösung, und erzeugt nun aus dieser lokalisierte Fehlerindikatoren, welche eine Information darüber liefern an welchen Stellen das Netz besonders verfeinerungsbedürftig wäre um eine bessere Auflösung der berechneten Felder zu erzielen. Hierzu werden Fehlerschätzer verwendet. Der Vorteil dieser Methode liegt darin, daß sie für allgemeinere Probleme anwendbar ist und automatisch auch an nichtvorhergesehenen Stellen eine Verfeinerung erzeugen kann, falls sich dies im Laufe der Approximation als sinnvoll erweist.

Für das lineare piezoelektrische Problem wurde ein residualer Fehlerschätzer verwendet, welcher auf Kantensprüngen von $\sigma \cdot \mathfrak{n}$ sowie $D \cdot \mathfrak{n}$ basiert und als Erweiterung des für linear-elastische Probleme bekannten Fehlerschätzers ist. Eine Herleitung mit Nachweis der Zuverlässigkeit dieses Fehlerschätzers findet man recht ausführlich in [11]. Man definiert dazu für jede innere Kante S mit dem Einheitsnormalenvektor $\mathfrak{n}$ den Sprung einer Funktion v über S an einer Stelle $x \in S$ durch

$$[\![v(x)]\!]_S = \lim_{h \to +0} (v(x + h\mathfrak{n}) - v(x - h\mathfrak{n})) \,. \tag{15}$$

Aus der Näherungslösung (u_h, φ_h) gewinnt man nun für jede Kante S_j eine vektorielle und

Abbildung 4: Ausschnittskizze eines deformierten Netzes mit Riß bei kleinen (links) und größeren Verschiebungen (rechts)

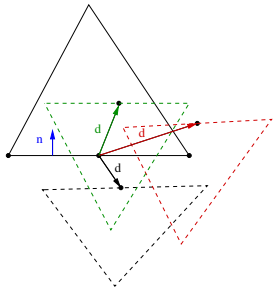
sogar das gesamte gegenüberliegende Rißufer auszudehnen. Der folgende Algorithmus untersuchet, ob ein Kantenmittenknoten $\tilde{x}^-_{i,m}$ in das Element $\tilde{T}^+_i$ eingedrungen ist oder über die Verlängerung der Rißkante $\tilde{S}_i$ von $\tilde{T}^+_i$ verschoben wurde. Die Anfangs- und Endknoten gehören zu mehreren Kanten und werden erstmal nicht extra getestet, werden aber im Kontaktfall der Mittenknoten einer Kante mitbehandelt.

Algorithmus 4.1
$\forall$ *Elemente* T^+_i *tue:*

1. *Berechne Innennormale* $\mathfrak{n}_i$ *zu* $\tilde{T}^+_i$
2. *Bilde* $d_{i,m} = u^-_{i,m} - u^+_{i,m} \Longrightarrow$ *Eindringung, falls* $\measuredangle(\mathfrak{n}_i, d_{i,m}) < 90°$
3. *Falls* $d_{i,m} \cdot \mathfrak{n}_i > 0$*, Kontaktmarkierung und Erzeugung zulässiger Startwerte für Verschiebungen an der Kontaktkante, hier exemplarisch für die Anfangsknoten:*

$$u_{i,A} = \frac{1}{2}\left(u^-_{i,A} + u^+_{i,A}\right) \tag{26}$$

Die Startwerte für die Endknoten werden analog gewählt, die Mittenknoten können mit linearer Interpolation einer geraden Kante erhalten werden. (Dies stimmt im Fall quadratischer Elemente nicht automatisch mit der Mittelung gemäß (26) überein!)



Projektoren

Nach Feststellung eines Kontaktes und Setzung zulässiger Startwerte der Verschiebung u werden für alle Knoten der Kontaktkante Projektoren für die Verschiebung sowie das elektrische Potential gesetzt:

- Verschiebung: Einschalten eines Rutschprojektors P_u mit

$$P_u \begin{pmatrix} u^+_i \\ u^-_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I - \frac{\mathfrak{n}\mathfrak{n}^T}{2} & \frac{\mathfrak{n}\mathfrak{n}^T}{2} \\ \frac{\mathfrak{n}\mathfrak{n}^T}{2} & I - \frac{\mathfrak{n}\mathfrak{n}^T}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^+_i \\ u^-_i \end{pmatrix}.$$

gegeneinander kontaktverdächtig sind. Kommt es zum Kontakt, ist also aus mechanischer Sicht zu sichern:

$$u^+ \cdot \mathfrak{n} = u^- \cdot \mathfrak{n} \,. \tag{23}$$

Das heißt, ein Eindringen von Knoten in Normalenrichtung wird verhindert. Eine Gegeneinanderverschiebung der Rißufer in Tangentialrichtung ist dagegen zulässig.

Zusätzlich ist es bei piezoelektrischem Material naheliegend, daß bei Auftreten von Kontakt ein elektrischer Potentialausgleich stattfindet. Man fordert daher zusätzlich für die Kontaktzone

$$\varphi^+ = \varphi^- \,. \tag{24}$$

Um Stetigkeit des elektrischen Flusses zu sichern, empfiehlt es sich sogar mit einer weiteren Übergangsbedingung in der Kontaktzone den Normalenfluß $D \cdot \mathfrak{n}$ auszugleichen:

$$D^+ \cdot \mathfrak{n} = D^- \cdot \mathfrak{n} \,. \tag{25}$$

4.4 FEM-Implementierung des Rißkontaktes

Um eine Behandlung der Kontaktzone gemäß Gleichungen (23)-(25) in die Finite-Element-Rechnung einbetten zu können, ist es zunächst notwendig die approximierte Kontaktzone zu ermitteln. Anschließend können, wie in [12] für linear-elastisches Materialverhalten beschrieben, Projektoren genutzt werden mit entsprechender Erweiterung auf den piezoelektrischen Fall.

Eindringungstest

Um die Kontaktzone zu ermitteln, sollen zunächst aus der Näherungslösung heraus eingedrungene Knoten bestimmt werden. Wir gehen von der Situation aus, daß ein Riß mit Teilungskanten und gedoppelten Knoten (+/−) vorliegt. Um die Betrachtung nicht unnötig zu verkomplizieren, soll ein Kontakt im Weiteren nur zwischen den Rißufern untersucht werden.

Als weitere Vereinfachung soll zunächst angenommen werden, daß die Elemente zwischen denen ein Kontakt auftritt, direkt gegenüber des Risses liegen (im Ausgangsnetz also eine gemeinsame Kante S_j besitzen). Diese Annahme kann dadurch motiviert werden, daß im linearen Modell ohnehin eine Beschränkung auf kleine Deformationen vorliegt, demzufolge auch die Tangentialverschiebung u_t in Rißrichtung klein ist, woraus wiederum folgt daß sich die aus der Verdopplung des Knotens x_i heraus entstandenen Knoten x_i^+ und x_i^- im deformierten Gebiet etwa gegenüber befinden. Siehe dazu auch Abbildung 4. (die dick gezeichneten Kanten resultieren dabei jeweils aus Teilung einer Beispielkante). Der Eindringungstest wird deswegen in einem ersten Schritt auf gegenüberliegende Elemente beschränkt. Es ist allerdings ebenso möglich, die Suche auf benachbarte Elemente oder

eine skalare Fehlergröße:

$$R_{j,\sigma} = \begin{cases} [\![\sigma(u_h,\varphi_h)\cdot\mathfrak{n}]\!]_{S_j} & S_j \text{ innere Kante} \\ \overline{T} - \sigma(u_h,\varphi_h)\cdot\mathfrak{n} & S_j \subset \Gamma_{N,u} \\ \mathbf{0} & S_j \subset \Gamma_{D,u}\,. \end{cases} \tag{16}$$

$$R_{j,D} = \begin{cases} [\![D(u_h,\varphi_h)\cdot\mathfrak{n}]\!]_{S_j} & S_j \text{ innere Kante} \\ \overline{\omega}_s + D(u_h,\varphi_h)\cdot\mathfrak{n} & S_j \subset \Gamma_{N,\varphi} \\ 0 & s_j \subset \Gamma_{D,\varphi}\,. \end{cases} \tag{17}$$

Mit deren Hilfe definiert man schließlich Fehlerfunktionale

$$\eta_{j,\sigma}^2 = \mathrm{meas}(S_j) \int_{S_j} \|R_{j,\sigma}\|^2 \, ds \,, \qquad \eta_{j,D}^2 = \mathrm{meas}(S_j) \int_{S_j} R_{j,D}^2 \, ds \,. \tag{18}$$

Die Theorie besagt nun, daß

$$\eta^2 := \sum_{S_j} \left(c_1 \eta_{j,\sigma}^2 + c_2 \eta_{j,D}^2 \right)$$

den Fehler nach oben abschätzt, wobei allerdings eine korrekte Wahl der Gewichtungskonstanten c_1 und c_2 schwierig ist. Diese Problematik umschifft man mit der folgenden Verfeinerungsstrategie: Vergleiche nun für jede Kante S_j die Werte $\eta_{j,*}$ mit den Maximalwerten und markiere S_j zur

– Verfeinerung, falls $\frac{\eta_{i,\sigma}}{\eta_{\max,\sigma}}$ **oder** $\frac{\eta_{i,D}}{\eta_{\max,D}}$ groß,
– Vergröberung, falls $\frac{\eta_{i,\sigma}}{\eta_{\max,\sigma}}$ **und** $\frac{\eta_{i,D}}{\eta_{\max,D}}$ klein.

3 Besonderheiten von Randbedingungen

3.1 Konstantes Potential auf Teilrändern

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 oder mehreren Teilrändern Teilrand $\Gamma_k \subset \Gamma$ (als Beispiel Innenrand von Löchern) ein konstantes elektrisches Potential vorliegt, d.h.

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

Diese Art Randbedingungen wurde schon 1943 von Courant in einem Problem zur Torsion langer Säulen mit mehrfach zusammenhängenden Querschnitten erwähnt [2]. Im Gegensatz zu einer Dirichletrandbedingung ist allerdings der Wert von φ_k nicht vorgegeben, sondern ergibt sich bei der Berechnung als Lösung. Genauer gesagt reduziert sich die Anzahl der φ-Freiheitsgrade auf dem Teilrand Γ_k von ursprünglich n_k auf 1. Eventuell zu erwartende mechanische Auswirkungen der leitfähigen Schicht werden vorerst nicht berücksichtigt.

Dies wäre in anderen Fällen wie etwa mit leitfähiger Flüssigkeit gefüllten Löchern oder erst recht festen metallischen Inklusionen unbedingt angezeigt.

Die numerische Behandlung solcher Randbedingungen kann mit vergleichsweise geringem Zusatzaufwand gemäß (14) durch Einbettung einer Projektion in den Löser erfolgen. Die Projektion erfolgt dabei am einfachsten durch eine (eventuell gewichtete) Mittelung über die beteiligten Knoten. Der zugehörige Projektor P_k würde damit wie folgt wirken:

$$P_k \begin{pmatrix} \varphi_1^{(k)} \\ \vdots \\ \varphi_{n_k}^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} (\omega_1^{(k)}, \ldots, \omega_{n_k}^{(k)}) \begin{pmatrix} \varphi_1^{(k)} \\ \vdots \\ \varphi_{n_k}^{(k)} \end{pmatrix} ,$$

wobei die positiven Gewichte ω die Bedingung

$$\sum_{i=1}^{n_k} \omega_i^{(k)} = 1$$

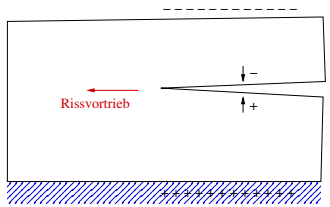
erfüllen müssen, bei einfacher Mittelung wählt man $\omega_i^{(k)} = \frac{1}{n_k}$ für $i = 1, \ldots, n_k$.

Numerisches Beispiel mit Äquipotential auf Teilrand

Es wird ein piezoelektrisches Bauteil in Form eines liegenden U 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, welche man sich als aufgedampfte Elektroden vorstellen kann. Wir betrachten also $\Omega = (0,3)^2 \setminus [1,3) \times [1,2]$, mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} u = \mathbf{0} \quad &\text{auf} \quad \Gamma_{D,u} = (0,3) \times 0 , \\ \varphi = 0 \quad &\text{auf} \quad \Gamma_{D,\varphi} = (1,3) \times 1 , \\ \varphi = \varphi_1 \quad &\text{auf} \quad \Gamma_1 = (1,3) \times 2 , \\ \sigma \cdot \mathfrak{n} = \sigma_0 \quad &\text{auf} \quad \Gamma_{N,u} = (0,3) \times 3 . \end{aligned}$$

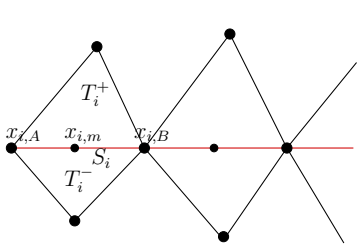
Die Startvernetzung der Anordnung mit Viereckselementen ist in Abbildung 2 dargestellt. Durch die einwirkende Kraft entsteht mittels piezoelektrischer Kopplung zwischen den beiden Elektrodenrändern Γ_1 und $\Gamma_{D,\varphi}$ eine elektrische Spannung, welche der Potentialdifferenz entspricht. Zur eindeutigen Bestimmtheit ist das Potential der Dirichletbedingung entsprechend an der unteren Elektrode auf Null gesetzt, während es an der oberen einen konstanten Wert aufweist, welcher als Näherungslösung ermittelt wird. Zum Vergleich wurde auch eine Modifikation des Beispiels gerechnet, bei der die Leitfähigkeitsrandbedingung auf Γ_1 einfach weggelassen bzw. in eine homogene Neumannrandbedingung umgewandelt wurde.

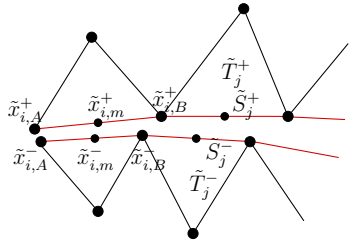


Es existieren theoretische Betrachtungen und Rechnungen zu Rißwachstum unter elektrischer Belastung (z.B. Janski et. al., Sändig et. al.), bei denen tatsächlich ein Überlappen der Rißufer eintritt bzw. vorhergesagt wird. Daher stellt sich die Aufgabe, derartige physikalisch nicht zulässige Durchdringungen in der FEM-Rechnung zu verhindern. Es ist also eine Erweiterung des Piezoproblems zu einem Kontaktproblem notwendig, wobei hier der Kontakt eines Körpers mit sich selbst als Spezialfall des Mehrkörperkontaktes vorliegt.

4.2 Bezeichnungen

Zunächst werden einige Bezeichnungen eingeführt für Elemente, Kanten und Knoten am Riß. Dabei wird vereinbart, daß alle Bezeichnungen mit Tilde das deformierte Netz betreffen, die ohne Tilde das undeformierte Ausgangsnetz.





Insbesondere gilt für die Koordinaten der verschobenen Rißknoten:

$$\tilde{x}_i^+ = x_i + u_i^+ , \qquad \tilde{x}_i^- = x_i + u_i^- .$$

4.3 Kontaktproblem für Verschiebung und Behandlung des Potentials

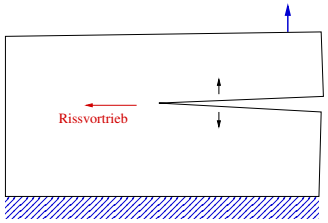
Um eine physikalisch unzulässige Durchdringung des anderen Gebietsrandes durch Knoten zu vermeiden, wird die Verschiebung potentieller Kontaktknoten mit Restriktionen belegt, vergleiche dazu die Dissertationsschrift von R. Unger [12]. Der Riß ist dabei ein Spezialfall, wo gerade die auf gegenüberliegenden Ufern befindlichen Knoten und Kanten

4 Rißschließen und Kontaktproblem

4.1 Motivation für Rißkontaktbetrachtung

Rißwachstum im linear elastischen Fall

Im elastischen Material ist die typische Situation, daß ein Rißwachstum nur dann auftritt, wenn sich der Riß durch entsprechende Krafteinwirkung öffnet, wie die folgende Darstellung illustriert.



Der Rißvortrieb hängt von der Spannung σ ab, entscheidend sind allerdings nicht Werte von σ an einzelnen Punkten, sondern sogenannte Intensitätsfaktoren (K-Faktoren) der auftretenden Singularitäten. Diese weisen an der Rißspitze ein asymptotisches Verhalten der Form

$$\sigma_{ij} \sim r^{-1/2}$$

auf, mit Koeffizienten K_I, K_{II} bei Darstellung in Polarkoordinaten mit Ursprung in der Rißspitze.

Rißschließen bei Piezomaterial

Bei piezoelektrischen Materialien besitzt das elektrische Feld durch die Verkopplung einen Einfluss auf die Rißentwicklung. Zudem finden Anwendungen von Piezo-Sensoren und -Aktoren häufig unter zyklischer Belastung statt. Beides kann zu einem (vollständigen oder teilweisen) Schließen des Risses mit Kontakt zwischen den gegenüberliegenden Rißufern führen.

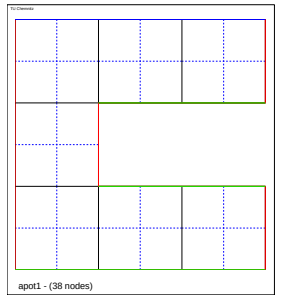


Abbildung 2: Startnetz des Beispiels

Nach einigen Schritten adaptiver Verfeinerung sind die verformten Netz sowie die elektrische Potentialverteilung und ihre Isolinien in Abbildung 3 dargestellt, die oberen Bilder gehören dabei zu dem Problem mit Äquipotential auf Γ_1, die unteren Bilder zur modifizierten Vergleichsvariante.

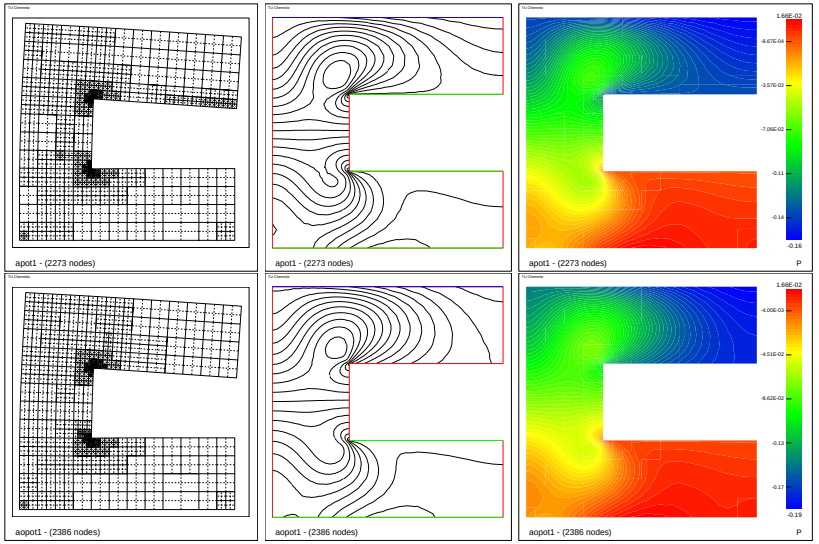


Abbildung 3: Deformiertes Netz und Potential nach Verfeinerung mit (oben) und ohne (unten) Äquipotentialrand

Die numerischen Ergebnisse zeigen vor allem bei der Äquipotentialvariante 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. An den Ergebnissen zum modifizierten Vergleichsbeispiel kann man beobachten, daß auf dem nun freien Randstück die Isopotentiallinien nicht mehr alle zur inneren Ecke abzweigen, sondern in den inneren Rand hineinlaufen. Die Verformung des Rechengebietes ändert sich dabei allerdings nur geringfügig.

3.2 Rißproblem

An den Rißufern im Gebiet gelten Rand- bzw. Übergangsbedingungen. In der Literatur werden dazu verschiedene Modelle diskutiert, siehe z.B. [9],[4]. Für den elastischen Teil der Randbedingungen ist die Annahme normalspannungsfreier Rißränder üblich ($\sigma \cdot \mathfrak{n} = \mathbf{0}$). Im Fall daß es zur Rißöffnungkommt und kein Kontakt zwischen den Rißufern auftritt, ist diese Annahme bei elastischem Material auch sehr realistisch. Piezomaterialien stellen hier insofern eine Besonderheit dar, daß zwischen den Rißufern eine Potentialdifferenz auftreten kann, welche zur elektrischen Anziehung führt. Diesen Effekt könnte man in die elastischen Randbedingungen mit einfließen lassen, und somit vom homogenen Neumannrand abweichen.

Nomenklatur am Riß: Wir bezeichnen die beiden Rißufer als "+"-Ufer und "−"-Ufer, entsprechend Verschiebung, Potential und abgeleitete Größen auf den Ufern mit den Indizes + und −.

Modellierung der Rißrandbedingungen

Für die elektrischen Randbedingungen existieren 3 gebräuchliche Modelle: Der impermeable Riß, der vollständig permeable Riß und der semipermeable Riß.

- **Impermeable Rißrandbedingungen**
  Die impermeable Modellierung des Risses geht von der Annahme aus, daß das zwischen den Rißufern befindliche Medium ideal impermeabel ist, also elektrisch nicht durchlässig. Die entsprechende Randbedingung wäre damit in Analogie zur elastischen Normalspannungsfreiheit
  $$D \cdot \mathfrak{n} = 0\,. \tag{19}$$
  Da die üblicherweise vorhandenen Rißmedien Luft und Vakuum eine um mindestens 3 Größenordnung kleinere Permeabilität κ besitzen als die Piezokeramik selbst, erscheint dies zunächst als gute Näherung. Dieses wird allerdings dadurch relativiert, daß im Normalfall nur eine im Verhältnis zur Gebietsgröße sehr kleine Rißöffnung stattfindet, und durch den geringen Abstand zwischen den Rißufern doch mit einer merkbaren elektrischen Beeinflussung gerechnet werden muß. Aus diesem Grund wird auch mit semipermeablen und (ideal) permeablen Randbedingungen gearbeitet.

- **Vollständig permeable Rißrandbedingungen**
  Das Modell des permeablen Risses fußt auf der Annahme, daß der Riß nur eine geringe Öffnung aufweist und somit den Durchgang des elektrischen Feldes nicht wesentlich stört. Dieses Modell betrachtet faktisch den Riß im elektrischen Sinne als gar nicht vorhanden. Man erhält dabei stetige Übergangsbedingungen für Potential und elektrischen Fluß (dielektrische Verschiebung):
  $$\varphi^-(x) = \varphi^+(x)\,, \qquad D^- \cdot \mathfrak{n} = D^+ \cdot \mathfrak{n}\,. \tag{20}$$

- **Semipermeabler Riß**
  Die Modellierung als semipermeabler Riß kommt der Realität am nächsten, da sie innerhalb des Risses ein realistisches Medium mit einer definierten Permeabilität postuliert. Konkret wird ein Rißmedium (gewöhnlicherweise Luft) angenommen mit einer Permeabilitätskonstante κ_L. In die entsprechende Übergangsbedingung fließt im Unterschied zu den beiden idealisierten Modellen auch die Rißöffnungsweite $u^+ - u^-$ zwischen den Rißufern bzw. deren Normalkomponente mit ein. Man erhält:
  $$D^+ \cdot \mathfrak{n} = D^- \cdot \mathfrak{n} = \kappa_L \frac{\varphi^+ - \varphi^-}{u_n^+ - u_n^-}\,. \tag{21}$$
  Zu beachten ist, daß diese Bedingung eine Abhängigkeit von der Lösung besitzt, die als Nichtlinearität eine geeignete Behandlung erfordert. Eine erste und einfachste Idee wäre hierbei, diese semipermeable Randbedingung als elektrische Neumannbedingung auf dem Rißrand einzuspeisen, und darauf zu hoffen daß durch Einbettung in die adaptive Iteration eine Konvergenz eintritt. Allerdings geht gerade bei nahezu verschwindender Rißöffnung der Nenner in (21) gegen Null, was numerische Instabilitäten befürchten läßt.

- **Weiteres**
  Um auch noch die elektrische Anziehung zwischen den Rißufern als mechanische Wirkung zu erfassen, ist eine Erweiterung des semipermeablen Modelles in Abkehr von den spannungsfreien Rißrandbedingungen möglich. Dazu kann die folgende Gleichung verwendet werden:
  $$\sigma^+ \cdot \mathfrak{n} = \sigma^- \cdot \mathfrak{n} = \frac{1}{2}\kappa_L \left(\frac{\varphi^+ - \varphi^-}{u_n^+ - u_n^-}\right)^2 \mathfrak{n}\,. \tag{22}$$