

ECKENSINGULARITÄTEN BEI RÄUMLICHEN  
PROBLEMEN DER ELASTIZITÄTSTHEORIE:  
NUMERISCHE BERECHNUNG UND  
ANWENDUNGEN

Zur Erlangung des akademischen Grades eines  
DOKTORS DER INGENIEURWISSENSCHAFTEN  
von der Fakultät für Maschinenbau der  
Universität Karlsruhe (TH)  
genehmigte

DISSERTATION

von

Dipl.-Ing. Atanas Dimitrov  
aus Plovdiv, Bulgarien

|                             |                                                   |
|-----------------------------|---------------------------------------------------|
| Tag der mündlichen Prüfung: | 25.10.2002                                        |
| Hauptreferent:              | Prof. Dr.-Ing. E. Schnack                         |
| Korreferenten:              | Prof. Dr.-Ing. D. Gross<br>Prof. Dr.-Ing. G. Kuhn |



# Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Technische Mechanik der Universität Karlsruhe. Ich möchte mich an dieser Stelle bei all denjenigen bedanken, die mich dabei unterstützt haben.

Mein besonderer Dank gilt vor allem Prof. Dr.-Ing. E. Schnack für die Anregung und die Möglichkeit zur Durchführung dieser Arbeit, sowie für die Übernahme des Hauptreferats. Recht herzlich bedanken möchte ich mich auch bei Prof. Dr.-Ing. D. Gross und Prof. Dr.-Ing. G. Kuhn für die Übernahme des Korreferats.

Einen wesentlichen Anteil am Gelingen der Dissertation, insbesondere was die experimentellen Untersuchungen betrifft, hatte Dr. F.-G. Buchholz aus der Fachgruppe Angewandte Mechanik (FAM) der Universität Paderborn. Ihm möchte ich für die fruchtbare Zusammenarbeit ganz besonders danken. Darüber hinaus fühle ich mich Prof. Dr.-Ing. W. Wendland, Prof. Dr. V. Maz'ya, Prof. Dr. A.-M. Sändig, Prof. Dr. D. Leguillon und Dr. T. Apel für ihr fortwährendes Interesse an meiner Arbeit zum Dank verpflichtet — die zahlreichen Workshops und Vorträge der, wenn ich sie so nennen darf, “Interessengemeinschaft Singularitäten” waren sicherlich eine wertvolle Bereicherung für mich als Ingenieur und haben mir tiefere Einblicke in den (nicht-trivialen) mathematischen Hintergrund des Problems gewährt.

Ebenso möchte ich mich recht herzlich bei allen Kolleginnen und Kollegen am Institut für das hervorragende Arbeitsklima bedanken. Die vielen Diskussionen mit PD Dr. H. Andrä und Dr. S. Dimitrov waren für mich stets Freude und Motivation zugleich.

Und nicht zuletzt möchte ich meiner Frau Vessela und meiner Tochter Nevena für ihre Geduld und Rücksichtnahme danken, ihnen ist diese Arbeit gewidmet.

Karlsruhe, im Mai 2002

Atanas Dimitrov

# Abstract

In this work a general numerical procedure for the efficient computation of three-dimensional corner singularities in elasticity is presented. Such singularities appear in the linear-elastic solution if non-smooth domains or multi-material structures are considered. For obtaining the order and mode of singularity, a neighborhood of the singular point is considered with only local boundary conditions. The weak formulation of the problem is approximated by a Galerkin-Petrov finite element method and a quadratic eigenvalue problem  $(\mathbf{P} + \lambda\mathbf{Q} + \lambda^2\mathbf{R})\mathbf{u} = \mathbf{0}$  is obtained. For the solution of this quadratic eigenvalue problem a iterative technique based on the Arnoldi method is submitted. For not too large systems this technique needs only one direct factorization of the banded matrix  $\mathbf{P}$  for finding all eigenvalues in the interval  $\Re(\lambda) \in (-0.5, 1.0)$  as well as the corresponding eigenvectors. For large systems a variant of the algorithm with an incomplete factorization of  $\mathbf{P}$  is implemented to avoid the appearance of too much fill-in. For illustrating the effectiveness and applicability of the present method several numerical examples of problems with corners, edges and cracks in  $\mathbb{R}^3$  are presented. In general they show the dependence of the singular exponent on different geometrical parameters and the material properties. Considered are not only isotropic, but also general orthotropic materials. As an application of corner singularities in the fracture mechanics the surface-breaking crack problem is investigated. First, the singular exponents and corresponding singular modes are calculated for arbitrarily-inclined crack geometries in order to obtain the asymptotics for the energy release rate near the free surface from a theoretical point of view, according to the concept of weak and strong singularity. Furthermore, detailed three-dimensional numerical results for the energy release rate distribution along the crack front of a single edge notched specimen under a different kind of loading are presented in a number of case studies. And finally, related fracture experiments are discussed under the special consideration of some 3D-effects near the free surface. It is shown that all 3D-effects predicted by the asymptotical theory are in good agreement with the numerical and experimental findings.

# Inhaltsverzeichnis

|          |                                                                        |           |
|----------|------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung und Übersicht</b>                                        | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Problemstellung</b>                                                 | <b>8</b>  |
| 2.1      | Regularität der Lösung . . . . .                                       | 8         |
| 2.2      | Der LAPLACE Operator im $\mathbb{R}^2$ . . . . .                       | 10        |
| 2.3      | Das Elastizitätsproblem im $\mathbb{R}^3$ . . . . .                    | 13        |
| <b>3</b> | <b>Berechnung von Eckensingularitäten im <math>\mathbb{R}^3</math></b> | <b>19</b> |
| 3.1      | Schwache Formulierung . . . . .                                        | 19        |
| 3.2      | Approximation mit Finiten Elementen . . . . .                          | 21        |
| 3.3      | Die Lösung des Eigenwertproblems . . . . .                             | 27        |
| 3.4      | Fehlerschätzung und Adaptivität . . . . .                              | 31        |
| 3.4.1    | Der <i>A-posteriori</i> Fehlerschätzer . . . . .                       | 31        |
| 3.4.2    | Adaptive Netzverfeinerung . . . . .                                    | 34        |
| 3.5      | Benchmark-Tests, Konvergenzrate . . . . .                              | 36        |
| <b>4</b> | <b>Numerische Beispiele</b>                                            | <b>45</b> |
| 4.1      | Der keilförmige Riss . . . . .                                         | 45        |

|          |                                                            |           |
|----------|------------------------------------------------------------|-----------|
| 4.2      | Der Oberflächenriss . . . . .                              | 47        |
| 4.3      | Inhomogene, anisotrope Probleme . . . . .                  | 56        |
| 4.3.1    | Winkelschicht Laminate . . . . .                           | 57        |
| 4.3.2    | Kreuzschicht Laminate . . . . .                            | 60        |
| 4.3.3    | Vergleich zwischen Ecken- und Kantensingularität . . . . . | 61        |
| <b>5</b> | <b>Anwendungen</b>                                         | <b>63</b> |
| 5.1      | Die Asymptotik von Bruchparametern an einer Ecke . . . . . | 65        |
| 5.1.1    | Asymptotik des Spannungsintensitätsfaktors . . . . .       | 66        |
| 5.1.2    | Asymptotik der Energiefreisetzungsrate . . . . .           | 68        |
| 5.1.3    | Starke und schwache Singularitäten . . . . .               | 70        |
| 5.2      | Fallstudien für den Oberflächenriss . . . . .              | 72        |
| 5.2.1    | Drei-Punkte-Biegung, normale Rissebene . . . . .           | 73        |
| 5.2.2    | Drei-Punkte-Biegung, geneigte Rissebene . . . . .          | 77        |
| 5.2.3    | Vier-Punkte-Schub . . . . .                                | 81        |
| <b>6</b> | <b>Zusammenfassung</b>                                     | <b>84</b> |
| <b>A</b> | <b>Begriffe und Bezeichnungen</b>                          | <b>86</b> |
| A.1      | Funktionsräume . . . . .                                   | 86        |
| A.2      | Operatorbündel . . . . .                                   | 88        |
| A.3      | Matrizen . . . . .                                         | 89        |
| <b>B</b> | <b>Konstitutive Gleichungen</b>                            | <b>91</b> |

# Kapitel 1

## Einleitung und Übersicht

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit Singularitäten in der Lösung von dreidimensionalen Randwertproblemen der Elastizitätstheorie. Solche Singularitäten entstehen häufig falls nicht ausreichend glatte Gebiete mit Ecken, Kanten oder Rissen betrachtet werden [50, 26, 40, 62, 51]. Sie können jedoch auch bei Verbundstrukturen auftreten, bei denen sich die Materialeigenschaften am Interface zwischen verschiedenen Teilgebieten sprunghaft ändern [83, 57, 66]. Im Zuge der rasanten Entwicklung von faserverstärkten Werkstoffen gewinnen solche Probleme immer mehr an Bedeutung.

In allen genannten Fällen hat das Auftreten von Singularitäten weitreichende Konsequenzen. Aus bruchmechanischer Sicht treten hohe Spannungskonzentrationen auf, die die Festigkeit des Körpers wesentlich beeinträchtigen und die Lebensdauer verkürzen. So sind beispielsweise qualitative und quantitative Aussagen über das zukünftige Verhalten von Bauteilen mit Rissen nur dann möglich, wenn die Singularität bekannt ist. Einzelheiten zu diesem klassischen Anwendungsgebiet der Bruchmechanik sind in vielen Standardwerken zu finden [17, 46, 2, 41]. Singularitätenbasierte Bruchkonzepte werden in letzter Zeit jedoch auch erfolgreich zur Behandlung von solchen Problemen angewendet, bei denen die Spannungskonzentration zunächst nicht auf einen Riss zurückzuführen ist [45, 48, 49]. Diese Ansätze verdeutlichen noch einmal, dass der gemeinsame Ursprung von Spannungskonzentrationsproblemen sicherlich in den singulären Eigenschaften der Lösung zu suchen ist.

Andererseits werden viele numerische Berechnungsverfahren wie die Methode der Finiten Elemente (FEM) ebenfalls entschieden von der Regularität der Lösung beeinflusst. Diese Tatsache hängt damit zusammen, dass nach CÉA's Lemma die

Konvergenzeigenschaften eines solchen Verfahrens davon abhängen, ob und inwieweit die Ansatz- und Testfunktionen die genaue Lösung approximieren [23]. Bei den standardmäßig verwendeten Polynomansätzen, die offensichtlich nicht geeignet sind, Singularitäten zu erfassen, können somit Konvergenzprobleme auftreten [6]. Solche Schwierigkeiten können im allgemeinen vermieden werden, indem beispielsweise geeignete Netztopologien [5], bzw. Funktionen vom Typ der Singularität als Erweiterung für die polynomialen Ansatz- und Testräume benutzt werden [35, 16]. Die genauen Eigenschaften singulärer Lösungen sind somit von zentraler Bedeutung für viele Anwendungen.

Singularitäten treten in der Ebene nahe an isolierten Punkten auf, die allgemein als *Ecken* bezeichnet werden. Ein Beispiel für eine solche Ecke ist der ebene Winkelsektor. Im Raum können Singularitäten entweder an isolierten Punkten, die wieder traditionell als *Ecken* bezeichnet werden, oder aber in der Umgebung von kontinuierlichen Punkt-Sequenzen in Form von *Kanten* auftreten. Ein Beispiel für eine “reine” Ecke im  $\mathbb{R}^3$  ist der Kegel mit kreisförmigem Querschnitt. Ein reines Kanten-Problem ergibt sich beispielsweise bei der Extrusion eines ebenen Winkelsektors senkrecht zu seiner Ebene, bei der ein räumlicher Keil-Körper entsteht. Kombinationen aus Ecken und Kanten sind im  $\mathbb{R}^3$  ebenfalls möglich, ein Beispiel hierfür ist die Polyeder-Ecke.

Um die auftretenden Singularitäten im folgenden näher beschreiben zu können, wollen wir an dieser Stelle annehmen, dass die Verschiebungen in der Umgebung eines singulären Punktes in einer asymptotischen Reihe entwickelt werden können. Der theoretische Hintergrund hierfür wird im Kapitel 2 mit der erforderlichen Ausführlichkeit behandelt. Die Ordnung der Singularität lässt sich somit durch die Ordnung des dominanten Gliedes dieser Reihe eindeutig charakterisieren. Eine zentrale Aussage der allgemeinen Theorie besteht nun darin, den Typ der Entwicklung anzugeben. Es lässt sich zeigen, dass bei vielen (jedoch nicht bei allen [65]) Problemen, die einzelnen Glieder in der asymptotischen Reihe durch Ausdrücke der Form

$$|\mathbf{x}|^\lambda \sum_{n=0}^N \log^n |\mathbf{x}| \mathbf{U}_n(\mathbf{x}/|\mathbf{x}|), \quad (1.1)$$

beschrieben werden können, wobei  $\mathbf{x}$  den Ortsvektor vom singulären Punkt zu einem beliebigen Punkt im Raum bezeichnet. Dies gilt insbesondere für *ebene* Probleme, die lokal mit einem Winkelsektor zusammenfallen, sowie für *räumliche* Probleme, die durch einen Kegel mit beliebigem Querschnitt beschrieben werden können. In dieser Kategorie fallen also alle praktisch relevanten Probleme, wie polygonale Gebiete in  $\mathbb{R}^2$ , sowie konische und polyedrische Gebiete in  $\mathbb{R}^3$ . Risse werden als Grenzfall einspringender Ecken und Kanten ebenfalls miterfasst.



Im folgenden werden nur solche Probleme behandelt, die die obige Potenz-logarithmische Form der Singularität aufweisen. Wir verstehen somit unter ‘‘Singularität’’ asymptotische Lösungen vom Typ (1.1), bei denen  $\lambda$  kleiner als 1.0 ist und damit unendlich grosse Verschiebungsgradienten auftreten.

Offensichtlich werden alle Glieder in einer asymptotischen Reihe vom Typ (1.1) eindeutig durch den *Singulärexponenten*  $\lambda$  und den *Winkelfunktionen*  $U_n(\mathbf{x}/|\mathbf{x}|)$  beschrieben — während der im allgemeinen *komplexe* Singulärexponent das Verhalten der Lösung in radialer Richtung angibt, spiegeln die Winkelfunktionen ihre Richtungsabhängigkeit wieder. Die Aufgabe, eine solche Reihe zu konstruieren, bedeutet somit zunächst die Berechnung von  $\lambda$  und  $U_n$  für jedes einzelne Glied. Da jedoch nur singuläre Lösungen von Interesse sind, kann angenommen werden, dass nur wenige Glieder mit  $\Re(\lambda) < 1.0$  in der Umgebung des singulären Punktes dominieren werden, so dass nur für diese  $\lambda$  und  $U_n$  berechnet werden müssen. Eine untere Schranke für  $\lambda$  ergibt sich aus der Forderung, dass die Lösung eine begrenzte Verzerrungsenergie haben muss. Wie im Kapitel 2 später noch gezeigt wird, folgt daraus folgender Interessensbereich für den Exponenten:  $-0.5 < \Re(\lambda) < 1.0$ . Nachdem die ersten dominanten Terme in der asymptotischen Reihe berechnet wurden, ist eine geeignete Linearkombination aus diesen Gliedern zu bilden, die auch die Randbedingungen eines konkreten Randwertproblems erfüllt. Die Koeffizienten in dieser Linearkombination heissen *Spannungsintensitätsfaktoren* und spielen bei vielen Anwendungen eine wichtige Rolle.

Die Bestimmung von Singulärexponenten und Winkelfunktionen kann nur in Spezialfällen analytisch durchgeführt werden [85, 86, 12, 13, 53]. Dies ist vor allem für ebene Probleme möglich, bei denen die Ermittlung der Singulärexponenten auf die Lösung einer transzendenten Gleichung reduziert werden kann. So konnte in den frühen 60-ern Jahren gezeigt werden, dass das Spannungsfeld um eine Kerbe singular ist [85, 86]. Für den Grenzfall eines Risses wurde ausserdem die bekannte  $1/\sqrt{r}$ -Abhängigkeit der Spannungen nachgewiesen [85], die aus früheren Arbeiten bereits bekannt war [84]. Darüber hinaus wurde für eine ganze Reihe von 3D-Problemen, darunter der halb-unendliche Riss mit gerader Rissfront, der sogenannte Penny-förmige Riss und der elliptische Innenriss gezeigt, dass die hier auftretende Form der Singularität exakt mit der erwähnten  $1/\sqrt{r}$ -Verteilung übereinstimmt, siehe dazu [47, 43]. Diese Feststellung wurde schliesslich auch für beliebige Risse mit *glatter*, kurvenförmiger Rissfront verallgemeinert [43], bei denen *keine* Ecken auftreten, so dass sie als reine Kantenprobleme eingeordnet werden können.

Ausser den erwähnten klassischen Ansätzen existieren mittlerweile auch sehr ef-

fiziente numerische Methoden für die Behandlung ebener Probleme [90, 80] bzw. räumlicher Kanten-Probleme [67, 25]. Beide Problemklassen, die im gewissen Sinne auch äquivalent sind, scheinen somit aus heutiger Sicht ausreichend erforscht und werden hier nicht weiter behandelt. Wir konzentrieren uns im folgenden auf reine 3D-Ecken mit eventuell zusätzlich auftretenden Kanten.

Für komplexe räumliche Probleme ist die explizite Bestimmung der Singulärexponenten und der Winkelfunktionen eine schwerwiegende Aufgabe, für die im allgemeinen numerische Algorithmen benötigt werden, da eine analytische Bestimmung nicht mehr möglich ist. Die numerischen Ansätze hierfür können in drei Gruppen unterteilt werden:

Die erste und naheliegendste Vorgehensweise besteht darin, ein konkretes Randwertproblem zu betrachten und die Ordnung der Singularität anhand verschiedener Techniken zu “extrahieren” [10, 14, 75]. Dies ist jedoch mit einer Reihe von Nachteilen verbunden. So müssen meist sehr feine Diskretisierungen in der Nähe des singulären Punktes vorgenommen werden, damit die Lösung genau erfasst werden kann, so dass der numerische Aufwand entsprechend hoch ist [14]. Ein generelles Problem ist auch die Tatsache, dass immer nur die dominante Singularität berechnet werden kann. Weitere, gleichzeitig auftretende singuläre Glieder in der Asymptotik können nicht erfasst werden. Somit ist die Aufspaltung der Lösung in Moden (wie in der Bruchmechanik allgemein üblich) sowie die Berechnung der Winkelfunktionen nicht möglich.

Eine weitere Methode besteht darin, durch anwenden der MELLIN - Transformation auf eine Integralgleichung im  $\mathbb{R}^3$  das Problem auf eine eindimensionale Randintegralgleichung zurückzuführen [74, 37]. Die Singulärexponenten, sowie die Winkelfunktionen können näherungsweise aus einem Spektralproblem berechnet werden. Obwohl das resultierende algebraische Problem hier klein ist und damit effektiv gelöst werden kann, ist die Anwendbarkeit dieser Methode begrenzt, da sie sehr komplizierte analytische Berechnungen erfordert. Die Behandlung von Problemen mit anisotropen Materialeigenschaften ist ebenfalls schwierig, da Fundamentallösungen gebraucht werden, die im allgemeinen für anisotrope Probleme nicht existieren.

Die dritte Gruppe von Methoden benutzt die bekannte Technik der Variablentrennung um das ursprüngliche drei-dimensionale Problem auf ein zwei-dimensionales zu reduzieren und letzteres mit Finiten Elementen numerisch zu lösen [11, 78, 36, 55, 89]. Die Singulärexponenten, sowie die Winkelfunktionen werden hier als Eigenpaare aus einem nicht-linearen Eigenwertproblem berechnet. Diese Methode ist allgemein anwendbar und erfordert die Betrachtung nur eines reduzierten, zwei-dimensionalen Problems. Ein weiterer wichtiger Vorteil besteht darin, dass

dieses reduzierte Problem die singuläre Ecke nicht mehr enthält, so dass eine aufwendige Netzverfeinerung nicht erforderlich ist. Die Hauptschwierigkeit dieser Methode besteht darin, das resultierende nicht-lineare Eigenwertproblem effektiv zu lösen.

Die im Kapitel 3 vorgestellte Methode für die Berechnung von Singularitäten in der Lösung linear-elastischer Aufgaben (vgl. auch DIMITROV et al. [29] und DIMITROV & SCHNACK [33]) basiert ebenfalls auf Trennung der Variablen mit anschliessender GALERKIN-PETROV FE-Approximation, sie ist daher der dritten Gruppe von Methoden zuzurechnen. Diese Vorgehensweise führt zu einem quadratischen Eigenwertproblem

$$(\mathbf{P} + \lambda\mathbf{Q} + \lambda^2\mathbf{R}) \mathbf{d} = \mathbf{0}, \quad (1.2)$$

bei dem eine explizite analytische Darstellung der Matrizen  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{Q}$ ,  $\mathbf{R}$  erreicht wird. Ausserdem haben diese nun eine optimale Struktur, bei der  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{R}$  symmetrisch und  $\mathbf{Q}$  schief-symmetrisch ist. Diese Formulierung wird somit entscheidende Vorteile bei der späteren Implementierung und der Wahl eines Auflösungsalgorithmus mit sich bringen.

Quadratische Eigenwertprobleme vom Typ (1.2) rufen in letzter Zeit ein reges Interesse in der Numerischen Forschungsgemeinde hervor, da sie offensichtlich mit vielen praktisch-wichtigen Anwendungen verbunden sind, siehe [81] für eine ganz aktuelle Übersicht. Auf dem Gebiet der Singularitäten wurden hingegen aufgrund allgemeiner numerischer Schwierigkeiten nur wenige Methoden zur Lösung von (1.2) vorgeschlagen. Der am weitesten verbreitete Ansatz verwendet einen Bisektionsalgorithmus, um jene Exponenten  $\lambda$  zu finden, bei denen die Determinante der Matrix  $\mathbf{P} + \lambda\mathbf{Q} + \lambda^2\mathbf{R}$  verschwindet [11, 78, 57, 55]. Dabei muss bei jedem Bisektionsschritt das Vorzeichen der Determinante zum Beispiel durch eine LU-Faktorisierung der Matrix berechnet werden. Ein weiterer Nachteil besteht darin, dass immer nur ein Exponent gleichzeitig berechnet werden kann. Exponenten können auch “verloren” werden, falls ungünstige Anfangsnäherungen für  $\lambda$  benutzt werden. Diese Methode resultiert daher in sehr aufwendigen Berechnungen. Es sollte ebenfalls erwähnt werden, dass die meisten direkten Faktorisierungstechniken wie LU in der Nähe der Lösung zunehmend instabiler werden, da eine nahezu singuläre Matrix faktorisiert werden muss. Eine stabile Faktorisierung wie SVD erfordert hingegen einen noch grösseren numerischen Aufwand.

Ein weiterer Lösungsansatz besteht darin, das quadratische Problem zuerst zu linearisieren und das resultierende lineare Eigenwertproblem, welches jedoch die doppelte Dimension besitzt, anschliessend direkt durch Standardalgorithmen wie QR zu lösen [36, 42, 88, 89]. Diese Vorgehensweise eignet sich allerdings nur für

sehr kleine Systeme, da die ursprünglich dünnbesetzten FE-Matrizen  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{Q}$ ,  $\mathbf{R}$  so in voll-besetzte Matrizen der doppelten Dimension umgewandelt werden [88, 89]. Ausserdem sind die meisten der berechneten Eigenwerte nicht von Bedeutung, da nur jene wenige mit einem Realteil kleiner 1.0 gesucht werden. Aus numerischer Sicht ist diese Methode somit nicht akzeptabel.

Der im Kapitel 3.3 vorgeschlagene Lösungsalgorithmus (vgl. auch DIMITROV et al. [29, 33]) versucht die beschriebenen Schwierigkeiten zu überwinden. Eine Linearisierungstechnik mit anschliessender Spektraltransformation führt zu einem verallgemeinerten Eigenwertproblem

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \theta \mathbf{B}\mathbf{u}, \quad (1.3)$$

welches iterativ nach der ARNOLDI-Methode gelöst wird. Mit Hilfe dieser Methode werden nur jene wenige Eigenwerte  $\Re(\lambda) \in (-0.5, +1.0)$  berechnet, die auch tatsächlich von Interesse sind. Alle Eigenpaare werden ausserdem *simultan* berechnet, so dass kein Eigenwert verloren werden kann. Hauptvorteil dieser Methode ist jedoch die Tatsache, dass die Matrix  $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$  für die Lösung des Eigenwertproblems *nicht* explizit gebraucht wird, so dass die Inverse  $\mathbf{B}^{-1}$  (die voll-besetzt ist, auch wenn  $\mathbf{B}$  eine dünn-besetzte Bandmatrix ist) nicht berechnet werden muss und damit die dünn-besetzte Struktur des ursprünglichen Problems beibehalten werden kann. Die Methode verwendet nur *eine* direkte Faktorisierung von  $\mathbf{P}$  sowie wenige Matrix-Vektor Produkte mit  $\mathbf{Q}$ ,  $\mathbf{R}$ , um alle Eigenwerte aus dem Intervall  $\Re(\lambda) \in (-0.5, +1.0)$ , sowie die zugehörigen Eigenvektoren gleichzeitig zu berechnen. Ein ähnlicher Ansatz wird auch in [3] verfolgt, jedoch wird dort eine besondere Lösungstechnik angewendet, bei der die HAMILTON-Struktur des Problems erhalten wird.

Ein wichtiger Gesichtspunkt bei der numerischen Berechnung von Singularitäten spielt die Tatsache, dass die Winkelfunktionen  $\mathbf{U}_n$  bei Ecken-Problemen mit zusätzlichen Kanten nicht glatt sind. Dies kann leicht nachvollzogen werden wenn man bedenkt, dass die Lösung in der Nähe der Kante das typische, singuläre Ecken-Verhalten eines entsprechenden Problems im  $\mathbb{R}^2$  in einer Ebene senkrecht zur Kante aufweisen muss. Deshalb kann eine ausreichende Genauigkeit bei den Berechnungen von den Winkelfunktionen und den Singulärexponenten nur durch die Anwendung geeigneter Netzverfeinerungsstrategien auf der Basis einer Fehlersteuerung erreicht werden. Im Kapitel 3.4 stellen wir einen solchen *a-posteriori* Fehlerschätzer sowie den zugehörigen adaptiven Algorithmus für Netzverfeinerung vor (vgl. auch DIMITROV & SCHNACK [33]). Dieser Ansatz führt anschliessend zur Implementierung einer *h*-Methode, deren Effizienz anhand von Benchmark-Tests im Kapitel 3.5 eingehend belegt wird.

Im Kapitel 4 werden eine Reihe von praktisch relevanten numerischen Beispie-

len behandelt, die die Anwendbarkeit der vorgestellten Methode bei Problemen mit Ecken, Kanten und Rissen illustrieren. Einen besonderen Augenmerk richten wir dabei auf inhomogene Probleme, bei denen in verschiedenen Teilgebieten der Struktur unterschiedliche Materialeigenschaften definiert werden (sogenannte Komposite). Berücksichtigt werden dabei sowohl isotrope, als auch allgemeine orthotrope Materialmodelle. Weitere Beispiele können in [29, 33, 30, 31, 32, 34] gefunden werden.

Kapitel 4 beinhaltet darüber hinaus eine ausführliche Untersuchung des Oberflächenrissproblems, welches von besonderer Bedeutung ist, da Risse in der Praxis sehr oft an der Oberfläche eines Bauteils entstehen. Eine prinzipielle Schwierigkeit bei der Modellierung solcher Risse stellen bekannte 3D- bzw. Mode-Kopplungseffekte dar [21, 19, 28], die an der Rissfront lokal in der Nähe der Oberfläche auftreten und im Rahmen einer ebenen Betrachtung völlig ausser Acht gelassen werden. Eine daraus resultierende negative Folge ist, dass der in der Bruchmechanik übliche konservative Ansatz für räumliche Rissprobleme oft nicht aufrechterhalten werden kann. Der Ursprung dieser Phänomene ist insbesondere unter gemischter (mixed-Mode) Beanspruchung, weitgehend ungeklärt [28], unter reiner Mode-I-Belastung liegen vereinzelt Untersuchungsergebnisse vor [11]. Eine interessante Anwendung von Singularitäten in der Bruchmechanik stellt nun die im Kapitel 5 vorgeschlagene Erklärung dieser Effekte aus Sicht der asymptotischen Theorie.

Wir beginnen im Kapitel 5.1 mit der Zusammenfassung einiger neuerer Erkenntnisse bezüglich der Asymptotik von Bruchparametern in der Umgebung einer Ecke [58, 59]. Auf dieser Basis wird anschliessend das Konzept der *starken und schwachen Singularitäten* vorgestellt [58], welches in Abhängigkeit des auftretenden Ecken-Singulärexponenten  $\lambda$  sehr anschaulich das Zusammenspiel von Ecke und Kante bei einem Oberflächenrissproblem (und nicht nur dort) beschreibt. Die im Rahmen dieses Konzeptes gewonnenen theoretischen Vorstellungen über das Verhalten eines Oberflächenrisses werden anschliessend im Kapitel 5.2 anhand von zahlreichen Fallstudien einerseits mit den Ergebnissen numerischer Simulationen und andererseits mit verschiedenen experimentellen Untersuchungen verglichen. Mittels einer solchen detaillierten Gegenüberstellung kann nun eine gute Übereinstimmung zwischen den theoretischen Erwartungen und den numerischen und experimentellen Beobachtungen festgestellt werden. Weitere Einzelheiten zu diesem Thema finden sich in DIMITROV et al. [31, 32].

Das letzte Kapitel 6 beinhaltet eine Zusammenfassung der Ergebnisse dieser Arbeit. Im Anhang werden schliesslich einige der im Text benutzten Begriffe und Bezeichnungen systematisch eingeführt und definiert.

# Kapitel 2

## Problemstellung

Wir geben in diesem Kapitel einige theoretische Hintergründe hinsichtlich dem Auftreten von Singularitäten in der Lösung elastischer Randwertprobleme. Wir fangen zunächst mit allgemeinen Aussagen über die Regularität der Lösung an und verdeutlichen den Zusammenhang zwischen Singularitäten und einem assoziierten Spektralproblem anhand des LAPLACE Operators im  $\mathbb{R}^2$ . Anschliessend widmen wir uns dem Elastizitätsproblem im  $\mathbb{R}^3$ .

### 2.1 Regularität der Lösung

Es ist aus klassischen Arbeiten über reguläre elliptische Randwertprobleme bekannt [61], dass die Lösung dem SOBOLEV'schen Funktionenraum  $H^{n+2}$  angehört, wenn der Rand des Gebietes und die Koeffizienten der Differentialgleichung genug glatt (zum Beispiel unendlich oft differenzierbar) sind und die rechte Seite aus  $H^n$  ist<sup>1</sup>. Anschaulich gesprochen hängt also die Regularität der Lösung im Falle glatter Ränder und Koeffizienten nur von der rechten Seite der Differentialgleichung ab. Eine wichtige Folgerung ist, dass, falls die rechte Seite ausreichend glatt ist, der Gradient der Lösung beschränkt bleibt.

Die Ergebnisse dieser Theorie können verständlicherweise im Falle von irregulären Gebieten mit nicht ausreichend glatten Rändern nicht angewendet werden. Die elliptischen Randwertprobleme in nicht-glatten Gebieten wurden seit der Pionierarbeit von KONDRATIEV [50] in einer Vielzahl von theoretischen Arbeiten

---

<sup>1</sup>Die Definitionen der hier systematisch benutzten Funktionenräume befinden sich im Anhang.

behandelt, eine kurze Liste [57, 26, 40, 62, 51, 52], sei hier zum Zwecke der Übersicht erwähnt. Dabei bietet das Buch von LEGUILLON & SANCHEZ-PALENCIA [57], welches wir an dieser Stelle besonders erwähnen möchten, zugleich eine hervorragende Einführung in die Thematik.

Die Theorie bietet aus heutiger Sicht viele Sätze über Existenz und Regularität der Lösung bei verschiedenen Klassen von Problemen. Die Kernfrage lautet dabei immer, wie sich die Regularität im Falle nicht-glatte Gebiete ändert. Für die schwache Lösung eines Problems aus der linearen Elastizitätstheorie in einem polyedrischen Gebiet im  $\mathbb{R}^3$  gilt nach GRISVARD [40] allgemein, dass

$$\mathbf{u} \in [H^S(\Omega)]^3 \subset [H^1(\Omega)]^3, \quad (2.1)$$

wobei eine wichtige theoretische Aufgabe darin besteht, für eine bestimmte Problemklasse den grösst-möglichen Exponenten  $S$  zu finden, so dass (2.1) gerade noch gilt. Die schwache Lösung wird dabei aus energetischen und anderen Gründen immer *a-priori* aus  $H^1$  angenommen, was jedoch *sehr schwache* Anforderungen an ihrer Regularität stellt — im schlimmsten Fall kann diese im  $\mathbb{R}^3$  sogar unbeschränkt sein, wie leicht aus dem SOBOLEV'schen Einbettungssatz (siehe Anhang) entnommen werden kann. Es sind zwar keine Beispiele von solchen Singularitäten bekannt [33], und für die meisten praktisch relevanten Probleme kann

$$\mathbf{u} \in [H^S(\Omega)]^3, \quad \forall S < S_0, \quad S_0 \in (3/2, 2] \quad (2.2)$$

angenommen werden (Satz 4.4.2 und 4.5.1 in [40]), so dass die Lösung in  $C^0$  liegt. Theoretisch kann dies jedoch aufgrund technischer Schwierigkeiten bei gewissen Problemen mit nicht-LIPSCHITZ-Rändern nicht nachgewiesen werden [52]. Obwohl eine numerische Untersuchung solcher Probleme sicherlich nicht zum Beweis irgendwelcher fundamentaler Aussagen beitragen kann, könnten die hier gewonnenen Einsichten erste Ansätze für weitergehende theoretische Untersuchungen liefern. Weitere Einzelheiten zu diesem Thema sind in [33] aufgeführt.

Auch wenn für die meisten Probleme (2.2) angenommen werden kann, heisst dies lediglich, dass die Lösung in  $C^0$ , nicht jedoch in  $C^1$  liegt, so dass unendlich grosse Gradienten auftreten können. Dies ist sogar sehr oft der Fall, insbesondere bei polygonalen oder polyedrischen Gebieten im  $\mathbb{R}^2$  und  $\mathbb{R}^3$ , so dass das Abschätzen von  $S$  auch eine wichtige praktische Rolle spielen kann. Insbesondere wären Kriterien für das Auftreten unbegrenzter Gradienten von grossem Interesse, solche können jedoch nur in Einzelfällen aufgestellt werden [57].

Die Ergebnisse der allgemeinen Theorie bleiben im gewissen Sinne jedoch unbefriedigend, da der Exponent  $S$  nur unter besonderen a-priori Annahmen bezüglich den Spektraleigenschaften assoziierter Operatorbündeln abgeschätzt werden kann.

Diese assoziierten Spektralprobleme können nur in Einzelfällen ohne Schwierigkeiten gelöst werden und stellen insbesondere im  $\mathbb{R}^3$  ein Problem an für sich dar. Im folgenden Kapitel wird anhand des LAPLACE Operators im  $\mathbb{R}^2$  der Zusammenhang zwischen Singularitäten, Operatorbündeln und Eigenwertproblemen verdeutlicht.

## 2.2 Der LAPLACE Operator im $\mathbb{R}^2$

Es sei  $\Omega = \{(r, \varphi) \in \mathbb{R}^2 : r > 0, 0 < \varphi < \alpha\}$  ein ebener Winkelsektor,  $r, \varphi$  die polaren Koordinaten und  $0 < \alpha < 2\pi$  ein fester Parameter. Wir interessieren uns für die Lösung des Randwertproblems

$$\begin{aligned} \Delta u &= 0 & \text{auf } \Omega, \\ u &= 0 & \text{auf } \partial\Omega. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Wir wollen für die Lösung dieses Problems die Methode von FOURIER verwenden und stützen uns dabei im wesentlichen auf die Arbeiten [57, 52]. Wir suchen die Lösung in Form einer harmonischen Reihe

$$u(r, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n(r) \sin(\lambda_n \varphi), \quad \lambda_n = n\pi/\alpha, \tag{2.4}$$

welche die Randbedingungen in (2.3) offensichtlich erfüllt. Wir wenden ausserdem einen Separationsansatz an, bei dem die FOURIER-Koeffizienten  $u_n(r)$  Funktionen von  $r$  sind. Für die weiteren Berechnungen brauchen wir auch die Darstellung des LAPLACE-Operators in polaren Koordinaten:

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \tag{2.5}$$

Einsetzen von (2.4) in (2.3) unter Berücksichtigung von (2.5) liefert eine Differentialgleichung vom EULER-Typ

$$\left[ r \frac{d}{dr} \right]^2 u_n(r) - \lambda_n^2 u_n(r) = 0, \tag{2.6}$$

welche durch die Variablensubstitution

$$\rho = \log r, \quad r \frac{d}{dr} = \frac{d}{d\rho} \tag{2.7}$$



in eine Differentialgleichung mit konstanten Koeffizienten umgewandelt werden kann. Deren Lösung ergibt sofort die FOURIER-Koeffizienten

$$\begin{aligned} u_0(r) &= a_0 \log r + b_0, \\ u_n(r) &= a_n r^{-\lambda_n} + b_n r^{+\lambda_n}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Damit wäre das Problem im Prinzip gelöst. Wir sind jedoch nur an solche Lösungen interessiert, deren Energie in einer beliebigen Umgebung

$$\Omega_R = \{(r, \varphi) \in \mathbb{R}^2 : 0 < r \leq R, 0 < \varphi < \alpha\} \quad (2.9)$$

des Koordinatenursprungs endlich ist. Wir fordern mit anderen Worten, dass  $u$  aus dem Raum  $H^1(\Omega_R)$  sein soll, so dass

$$\int_0^R r \, dr \int_0^\alpha u^2(r, \varphi) \, d\varphi < +\infty \quad (2.10)$$

für die Lösung selbst und

$$\int_0^R r \, dr \int_0^\alpha \left[ \frac{\partial u}{\partial r} \right]^2 + \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \varphi} \right]^2 \, d\varphi < +\infty \quad (2.11)$$

für deren Gradient gelten soll — beide müssen quadratisch integrierbar sein. Daraus folgen weitere Bedingungen für die Koeffizienten:

$$\int_0^R u_n^2(r) \, r \, dr < +\infty, \quad (2.12)$$

$$\int_0^R \left[ \frac{du_n}{dr} \right]^2 + \left[ \frac{\lambda_n}{r} u_n(r) \right]^2 \, r \, dr < +\infty. \quad (2.13)$$

Aus der stärkeren Forderung (2.13) folgt  $a_n = 0$ ,  $n \geq 0$  und wir haben damit folgenden Satz bewiesen:

**Theorem 1:** Sei  $u(r, \varphi) \in H^1(\Omega_R)$  eine Lösung von (2.3). Dann gilt für  $u(r, \varphi)$  folgende asymptotische Entwicklung

$$u(r, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n r^{\lambda_n} \sin(\lambda_n \varphi), \quad \lambda_n = n\pi/\alpha. \quad (2.14)$$

Die freien Koeffizienten  $b_n$  müssen ebenfalls die Bedingung (2.13) erfüllen. Sie werden *Spannungsintensitätsfaktoren* genannt und spielen bei vielen Anwendungen eine wichtige Rolle.

Der Zusammenhang zwischen Singularitäten und einem assoziierten Spektralproblem kann ebenfalls anhand dieses simplen harmonischen Modellproblems studiert werden. Nehmen wir an, die Lösung von (2.3) sei von der Form

$$u(r, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n r^{\lambda_n} U_n(\varphi). \quad (2.15)$$

Einsetzen von (2.15) in (2.3) unter der Berücksichtigung von (2.5) liefert das Spektralproblem

$$\frac{d^2}{d\varphi^2} U_n(\varphi) + \lambda_n^2 U_n(\varphi) = 0, \quad (2.16)$$

aus dem entnommen werden kann, dass  $\lambda_n$  und  $U_n(\varphi)$  aus (2.15) entsprechend ein Eigenwert bzw. die zugehörige Eigenfunktion sein müssen. Sei nun

$$\mathfrak{A}(\lambda) = \frac{d^2}{d\varphi^2} + \lambda^2 \quad (2.17)$$

das zu (2.16) gehörende *Operatorbündel*, welches polynomial von dem Spektralparameter  $\lambda$  abhängt<sup>2</sup>. Damit können wir folgende Aussage formulieren:

**Theorem 2:** Die Funktion  $u(r, \varphi)$ , welche in einer asymptotischen Reihe (2.15) entwickelt werden kann ist dann und nur dann eine Lösung von (2.3), falls  $\lambda_n$  und  $U_n(\varphi)$  zugehörige Eigenpaare des in (2.17) definierten Operatorbündels  $\mathfrak{A}(\lambda)$  sind.

Der Beweis kann z.B. in [52], Seite 37, gefunden werden. Mit diesem Satz ist ebenfalls klar, warum wir in (2.4) gerade Funktionen  $\sin(\lambda\varphi)$  für die FOURIER-Reihe gewählt haben — diese sind Eigenfunktionen von  $\mathfrak{A}(\lambda)$ , wie leicht durch Einsetzen in (2.16) gezeigt werden kann.

Anhand dieses einleitenden Beispiels haben wir verdeutlicht, dass die Untersuchung von Singularitäten in der Lösung eines Randwertproblems eng mit den Spektraleigenschaften eines Operatorbündels  $\mathfrak{A}(\lambda)$  verbunden ist — die Größen  $\lambda_n, U_n(\varphi)$ , welche die asymptotische Reihe der Lösung definieren, können als Eigenpaare eines assoziierten Eigenwertproblems berechnet werden. Leider ist die Behandlung und insbesondere die Lösung des entsprechenden Spektralproblems für den LAMÉ Operator im  $\mathbb{R}^3$  bei weitem nicht so trivial, wie das hier behandelte Beispiel. Deshalb ist im allgemeinen eine Formulierung anzustreben, die eine spätere numerische Approximation des Problems erlauben würde. Eine solche Formulierung wird nun im folgenden Kapitel vorgestellt.

---

<sup>2</sup>Einige Definitionen zum Thema Operatorbündeln finden sich im Anhang.

## 2.3 Das Elastizitätsproblem im $\mathbb{R}^3$

Wir kommen nun zu dem eigentlichen Thema dieser Arbeit — dem Elastizitätsproblemen im  $\mathbb{R}^3$ . Wir beginnen unsere Betrachtungen mit einigen Definitionen, die die einheitliche Behandlung von verschiedenen Problemen mit singulärer Lösung ermöglichen sollen.

Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  ein beschränktes Gebiet, welches mit dem Kegel

$$\mathcal{K} := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : 0 < |\mathbf{x}| < \infty, \mathbf{x}/|\mathbf{x}| \in \mathcal{S}\} \quad (2.18)$$

in eine  $\epsilon$ -Umgebung  $\mathcal{U}_O^\epsilon := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : 0 < |\mathbf{x}| < \epsilon\}$  des Koordinatenursprungs  $O$  zusammenfällt, so dass

$$\Omega^\epsilon := \mathcal{K} \cap \mathcal{U}_O^\epsilon = \Omega \cap \mathcal{U}_O^\epsilon, \quad (2.19)$$

siehe Bild 2.1. Wir bezeichnen mit  $\mathbf{x}$  den Ortsvektor von  $O$  zu einem beliebigen Punkt im Raum und mit  $\mathcal{S}$  den Schnitt von  $\mathcal{K}$  mit der Einheitssphäre. Den Rand von  $\mathcal{S}$  bezeichnen wir mit  $\partial\mathcal{S}$ , dieser kann entweder glatt sein, oder aber stückweise glatt mit  $N$  Ecken  $\delta_i$ . Im letzteren Fall wird der Kegel  $\mathcal{K}$  zusätzliche Kanten  $\overrightarrow{O\delta_i}$  aufweisen. Es sei an dieser Stelle ausdrücklich darauf hingewiesen, dass keine weiteren Vorgaben für  $\mathcal{K}$  gemacht werden, so dass ganz unterschiedliche Probleme durch geeignete Wahl von  $\mathcal{S}$  beschrieben werden können, darunter alle konischen oder polyedrischen Gebiete mit oder ohne zusätzliche Kanten, sowie diverse Probleme mit Rissen. Die einzige wesentliche Voraussetzung ist, dass das Gebiet  $\Omega$  *lokal* konisch ist, d.h. dass die Geometrie sowie die Materialeigenschaften innerhalb von  $\mathcal{U}_O^\epsilon$  nur von  $\mathbf{x}/|\mathbf{x}|$  und nicht von  $|\mathbf{x}|$  abhängen.

Wir betrachten zunächst ein allgemeines, gemischtes Randwertproblem der linearen Elastizität auf  $\Omega$ :

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}\mathbf{u} &:= \mathfrak{D}^T \mathbf{C} \mathfrak{D} \mathbf{u} = \mathbf{f} \quad \text{auf } \Omega, \\ \mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} \quad \text{auf } \partial\Omega_0, \\ \mathfrak{T}\mathbf{u} &:= \mathbf{t}(\mathbf{u}) = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{auf } \partial\Omega_1, \end{aligned} \quad (2.20)$$

wobei  $\mathfrak{D}(\partial_x, \partial_y, \partial_z)$  den symmetrischen Gradientenoperator in Matrix-Form<sup>3</sup>,  $\mathbf{C}$  die Matrix der elastischen Moduli und  $\mathbf{t}$  die Randspannungen bezeichnen. Wir definieren mit  $\partial\Omega_0$  und  $\partial\Omega_1$  entsprechend den DIRICHLET- bzw. NEUMANN-Teil des Randes von  $\Omega$  und nehmen an, dass innerhalb von  $|\mathbf{x}| < \epsilon$  nur *homogene* Randbedingungen vorgegeben sind, so dass dort  $\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$  und  $\bar{\mathbf{t}} = \mathbf{0}$  gilt. Wir bezeichnen desweiteren mit  $\mathfrak{L}$  den LAMÉ Operator und mit  $\mathfrak{T}$  den Randspannungsoperator.

<sup>3</sup>Matrizen, die im Text aus Gründen der besseren Lesbarkeit nicht explizit definiert werden, sind im Anhang aufgeführt.

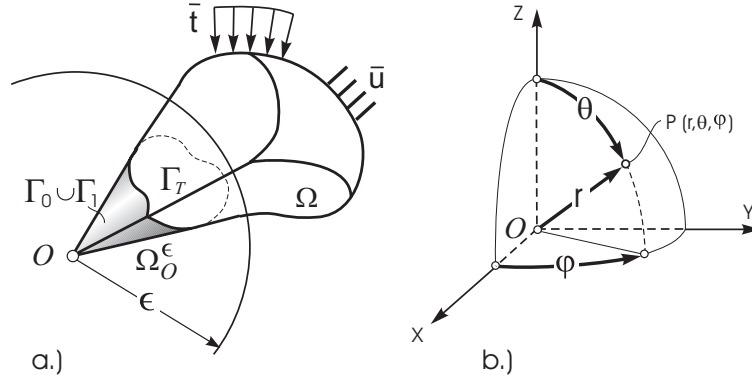


ABBILDUNG 2.1: Körper mit singulärem, konischen Punkt  $O$  (a).  
Kartesische und sphärische Koordinaten in  $O$  (b).

Da wir eigentlich nur an den lokalen Eigenschaften der Lösung nahe  $O$  interessiert sind, betrachten wir im folgenden ein äquivalentes gemischtes Randwertproblem auf  $\Omega_O^\epsilon$ , bei dem auf dem Transmissionsrand  $|\mathbf{x}| = \epsilon$  solche DIRICHLET Randbedingungen  $\hat{\mathbf{u}}$  vorgeschrieben werden, die sich aus der Lösung von (2.20) ergeben würden, so dass die Lösung dieses Problems lokal mit der Lösung von (2.20) zusammenfällt und sich daraus keine weiteren Einschränkungen ergeben. Wir definieren somit

**Problem 1:** *Gesucht ist ein Verschiebungsfeld  $\mathbf{u} = u \mathbf{e}_x + v \mathbf{e}_y + w \mathbf{e}_z$ , welches das LAMÉ-Differentialgleichungssystem sowie folgende Randbedingungen erfüllt:*

$$\begin{aligned}
 \mathfrak{L}\mathbf{u} &= \mathbf{f} && \text{auf } \Omega_O^\epsilon, \\
 \mathbf{u} &= \hat{\mathbf{u}} && \text{auf } \Gamma_T, \\
 \mathbf{u} &= \mathbf{0} && \text{auf } \Gamma_0, \\
 \mathfrak{T}\mathbf{u} &= \mathbf{0} && \text{auf } \Gamma_1.
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

Falls  $\Omega_O^\epsilon$  nicht homogen ist, dann wird  $\mathbf{C}$  als unabhängig von  $|\mathbf{x}|$  betrachtet. Die DIRICHLET-, NEUMANN- und Transmission-Teile des Randes  $\partial\Omega_O^\epsilon$  werden definiert mit

$$\begin{aligned}
 \Gamma_0 &:= \{\mathbf{x} : 0 < |\mathbf{x}| < \epsilon, \mathbf{x}/|\mathbf{x}| \in \gamma_0\}, \\
 \Gamma_1 &:= \{\mathbf{x} : 0 < |\mathbf{x}| < \epsilon, \mathbf{x}/|\mathbf{x}| \in \gamma_1\}, \\
 \Gamma_T &:= \partial\Omega_O^\epsilon \setminus \{\Gamma_0 \cup \Gamma_1\},
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

wobei  $\gamma_0 \cup \gamma_1 = \partial\mathcal{S}$ ,  $\gamma_0 \cap \gamma_1 = \emptyset$  entsprechende Teile des Randes  $\partial\mathcal{S}$  bezeichnen.

Es ist bekannt, dass die lokalen Eigenschaften der Lösung in  $\Omega_O^\epsilon$  durch Betrachtung eines Modellproblems auf  $\mathcal{K}$  untersucht werden können, in welchem nur der

Hauptteil des LAMÉ Differentialoperators berücksichtigt wird. Dies kann folgendermassen verdeutlicht werden: Da in der Umgebung des Punktes  $O$  der Rand des betrachteten Gebietes irregulär ist, erwarten wir dort das Auftreten einer Randschicht in der Lösung des Randwertproblems, die sich stark von der Lösung im Inneren des Gebietes  $\Omega$  unterscheidet. Zur Behandlung dieser Randschicht ist die Anwendung einer bekannten Technik aus der Störungstheorie angebracht [22], bei der durch Einführung neuer skaliertes Koordinaten  $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\epsilon$  und nach einem Grenzübergang  $\epsilon \rightarrow 0$  das Gebiet  $\Omega_\epsilon^O$  auf das unbeschränkte Gebiet  $\mathcal{K}$  “gestreckt” wird. Anschaulich gesprochen betrachten wir die nähere Umgebung von  $O$  wie mit einem “Mikroskop” um nur die lokalen Eigenschaften der Lösung zu ermitteln. Bei dem Übergang werden die Differentialoperatoren ebenfalls transformiert:

$$D_{\mathbf{x}}, D_{\mathbf{x}}^2, \dots \rightarrow D_{\mathbf{y}} = \epsilon D_{\mathbf{x}}, D_{\mathbf{y}}^2 = \epsilon^2 D_{\mathbf{x}}^2, \dots \quad (2.23)$$

wobei unter  $D_{\mathbf{x}}$  und  $D_{\mathbf{x}}^2$  folgende Vektoren zu verstehen sind:

$$D_{\mathbf{x}} := [\partial_{x_1}, \dots, \partial_{x_3}] \quad (2.24)$$

$$D_{\mathbf{x}}^2 := [\partial_{x_1 x_1}^2, \dots, \partial_{x_3 x_3}^2, \partial_{x_1 x_2}^2, \dots, \partial_{x_2 x_3}^2], \quad (2.25)$$

und entsprechendes auch für  $D_{\mathbf{y}}$  und  $D_{\mathbf{y}}^2$  gilt. Eine allgemeine lineare Differentialgleichung 2. Grades

$$\mathfrak{F}(D_{\mathbf{x}}, D_{\mathbf{x}}^2)\mathbf{u} = \mathbf{f} \quad \text{auf } \Omega_\epsilon^O \quad (2.26)$$

kann somit nach multiplizieren mit  $\epsilon^2$  in den neuen Koordinaten wie folgt dargestellt werden:

$$\mathfrak{F}(\epsilon D_{\mathbf{y}}, D_{\mathbf{y}}^2)\mathbf{u} = \epsilon^2 \mathbf{f} \quad \text{auf } \Omega_\epsilon^O. \quad (2.27)$$

Nach einem Grenzübergang  $\epsilon \rightarrow 0$ ,  $\Omega_\epsilon^O \rightarrow \mathcal{K}$  ergibt sich offensichtlich ein Modellproblem

$$\mathfrak{F}(D_{\mathbf{y}}^2)\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad \text{auf } \mathcal{K}, \quad (2.28)$$

bei dem nur der Hauptteil des Operators  $\mathfrak{F}$  zu berücksichtigen ist und ausserdem die rechte Seite  $\mathbf{f}$  verschwindet.

Da der LAMÉ Operator  $\mathfrak{L}$  mit seinem Hauptteil übereinstimmt (es treten keine Ableitungen erster Ordnung auf, so dass  $D_{\mathbf{x}} = \mathbf{0}$ ) kann das Modellproblem der linearen Elastizitätstheorie wie folgt formuliert werden:

**Problem 2:** *Gesucht wird ein Verschiebungsfeld  $\mathbf{u} = u \mathbf{e}_x + v \mathbf{e}_y + w \mathbf{e}_z$ , welches das LAMÉ-System und folgende Randbedingungen erfüllt:*

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}\mathbf{u} &= \mathbf{0} \quad \text{auf } \mathcal{K}, \\ \mathbf{u} &= \mathbf{0} \quad \text{auf } \partial\mathcal{K}_0, \\ \mathfrak{T}\mathbf{u} &= \mathbf{0} \quad \text{auf } \partial\mathcal{K}_1, \end{aligned} \quad (2.29)$$

wobei  $\partial\mathcal{K}_0 := \{\mathbf{x} \in \partial\mathcal{K} : \mathbf{x}/|\mathbf{x}| \in \gamma_0\}$ ,  $\partial\mathcal{K}_1 := \{\mathbf{x} \in \partial\mathcal{K} : \mathbf{x}/|\mathbf{x}| \in \gamma_1\}$  den DIRICHLET- und NEUMANN-Teil des Randes  $\partial\mathcal{K}$  bezeichnen.

Wie bereits erläutert, kann die Lösung von (2.29) in Form einer asymptotischen Reihe aus einem assoziierten Spektralproblem erhalten werden. Dieses Spektralproblem ergibt sich durch das Einsetzen eines Verschiebungsansatzes

$$\mathbf{u}(r, \theta, \varphi) = r^\lambda \mathbf{U}(\theta, \varphi), \quad (2.30)$$

in (2.29), wobei die Komponenten des Verschiebungsfeldes immer noch in Richtung von  $(x, y, z)$  verstanden werden, so dass der LAMÉ Operator *nicht* in sphärische Koordinaten aufgestellt werden muss. Die Verschiebungskomponenten stellen nun jedoch Funktionen von  $(r, \theta, \varphi)$  dar, so dass die in (2.29) vorkommenden Ableitungen

$$[\partial_x, \partial_y, \partial_z]^T = \hat{\mathbf{J}}^{-1} [\partial_r, \partial_\theta, \partial_\varphi]^T \quad (2.31)$$

im Sinne von zusammengesetzten Funktionen zu verstehen sind, wobei  $\hat{\mathbf{J}}^{-1}$  die Inverse JAKOBI-Matrix des Übergangs  $(x, y, z) \rightarrow (r, \theta, \varphi)$  bezeichnet.

Durch anwenden des LAMÉ Operators  $\mathfrak{L}$  sowie des Randoperators  $\mathfrak{T}$  auf (2.30) erhalten wir somit

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}(\partial_x, \partial_y, \partial_z) r^\lambda \mathbf{U}(\theta, \varphi) &= r^{\lambda-2} \hat{\mathfrak{L}}(\partial_\theta, \partial_\varphi; \lambda) \mathbf{U}(\theta, \varphi), \\ \mathfrak{T}(\partial_x, \partial_y, \partial_z) r^\lambda \mathbf{U}(\theta, \varphi) &= r^{\lambda-1} \hat{\mathfrak{T}}(\partial_\theta, \partial_\varphi; \lambda) \mathbf{U}(\theta, \varphi), \end{aligned} \quad (2.32)$$

wobei  $\hat{\mathfrak{L}}(\partial_\theta, \partial_\varphi; \lambda)$  und  $\hat{\mathfrak{T}}(\partial_\theta, \partial_\varphi; \lambda)$  zwei neue Operatoren bezeichnen, die auf  $\mathcal{S}$  bzw.  $\partial\mathcal{S}$  definiert werden. Damit kommen wir zu

**Problem 3:** *Gesucht ist ein Verschiebungsfeld*

$$\mathbf{U} = U(\theta, \varphi) \mathbf{e}_x + V(\theta, \varphi) \mathbf{e}_y + W(\theta, \varphi) \mathbf{e}_z, \quad (2.33)$$

welches folgende Gleichungen erfüllt

$$\begin{aligned} \hat{\mathfrak{L}}(\lambda) \mathbf{U} &= \mathbf{0} \quad \text{auf } \mathcal{S}, \\ \mathbf{U} &= \mathbf{0} \quad \text{auf } \gamma_0, \\ \hat{\mathfrak{T}}(\lambda) \mathbf{U} &= \mathbf{0} \quad \text{auf } \gamma_1, \end{aligned} \quad (2.34)$$

wobei mit  $\gamma_0$  und  $\gamma_1$  der DIRICHLET- bzw. NEUMANN-Teil des Randes  $\partial\mathcal{S}$  bezeichnet wurde.

Der mit (2.34) assoziierte Operator hängt polynomial vom komplexen Parameter  $\lambda \in \mathbb{C}$  ab und wird wie auch im Falle des LAPLACE Operators *Operatorbündel* genannt. Wir bezeichnen ihn im folgenden mit  $\mathfrak{A}(\lambda)$ . Ähnliche Ausdrücke für das Bündel können durch Anwendung der MELLIN Transformation erhalten werden, siehe dazu [52].

Die Spektraleigenschaften des Operatorbündels sind von grösster Bedeutung für die spätere numerische Approximation, wir fassen sie deshalb im folgenden Satz zusammen:

**Theorem 3:** (Satz 4.1.1 in [52]) Sei  $\mathfrak{A}(\lambda)$  das zu (2.34) gehörende Operatorbündel. Dann gelten folgende Aussagen:

1.  $\mathfrak{A}(\lambda)$  ist ein FREDHOLM-Operator für alle  $\lambda \in \mathbb{C}$ .
2. Das Spektrum von  $\mathfrak{A}(\lambda)$  besteht aus isolierten Eigenwerten mit endlicher algebraischer Multiplizität.
3. Falls  $\lambda_0$  ein Eigenwert von  $\mathfrak{A}(\lambda)$  ist, dann sind dies auch  $\bar{\lambda}_0$ ,  $-1 - \lambda_0$ ,  $-1 - \bar{\lambda}_0$ , wobei die geometrische und algebraische Multiplizität von  $\lambda_0$  und  $-1 - \bar{\lambda}_0$  übereinstimmt.

Der Beweis dieses Satzes kann in [52] eingesehen werden.

Wie bereits angedeutet, ist ein zentrales Thema der allgemeinen Theorie von Randwertproblemen in nicht-glatten Gebieten die Frage nach dem asymptotischen Verhalten der Lösung in der Umgebung eines konischen Punktes. Diesbezüglich gilt folgender Satz:

**Theorem 4:** (Satz von KONDRATIEV, siehe auch Lemma 1.4.4 in [52].) Es sei  $\mathbf{u} \in [H^1(\Omega)]^3$  eine Lösung von (2.21). In einer Umgebung von  $O$  gilt folgende asymptotische Entwicklung

$$\mathbf{u} = \sum_{i=0}^I \sum_{k=0}^{k_j} K_{ik} r^{\lambda_i} \ln^k(r) \mathbf{U}_{ik}(\theta, \varphi), \quad (2.35)$$

wobei  $\lambda_i$  Eigenwerte des Bündels  $\mathfrak{A}(\lambda)$  sind und Singulärexponenten genannt werden,  $\mathbf{U}_{ik}$  die entsprechenden (generalisierten) Eigenvektoren sind und Winkelunktionen genannt werden und  $K_{ik}$  Amplituden darstellen und Spannungsfaktoren genannt werden.

Der Beweis kann z.B. in [52] gefunden werden.

Abschliessend, soll noch die Frage des Interessenbereichs für die Exponenten  $\lambda$  diskutiert werden. Wie bereits erwähnt, wird die schwache Lösung  $\mathbf{u}$  immer *a priori* aus dem SOBOLEV-Raum  $[H^1(\Omega_O^c)]^3$  angenommen, da nur jene Lösungen physikalisch sinnvoll sind, die eine begrenzte elastische Verzerrungsenergie ergeben. Daraus ergeben sich weitere Beschränkungen für die Exponenten  $\lambda$ . Die Lösung selbst, sowie deren Gradient sollten quadratisch integrierbar sein:

$$\int_0^\epsilon r^2 dr \int_{\theta, \varphi} |\mathbf{u}(r, \theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi < +\infty, \quad (2.36)$$

$$\int_0^\epsilon r^2 dr \int_{\theta,\varphi} \left| \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial r} \right|^2 + \left| \frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \theta} \right|^2 + \left| \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \varphi} \right|^2 \sin \theta d\theta d\varphi < +\infty, \quad (2.37)$$

wobei wir unter  $|\cdot|$  die EUKLID'sche Norm eines Vektors verstehen. Unter Beachtung der speziellen Form der Lösung  $\mathbf{u}(r, \theta, \varphi) = r^\lambda \mathbf{U}(\theta, \varphi)$  führt die stärkere Forderung (2.37) zu

$$\int_0^\epsilon r^{2\lambda-2} r^2 dr = \left[ \frac{r^{2\lambda+1}}{2\lambda+1} \right]_0^\epsilon < +\infty \quad \Rightarrow \quad 2\lambda+1 > 0. \quad (2.38)$$

Ausserdem sind wir prinzipiell nur an dem *singulären* Teil der Lösung interessiert, bei dem der Gradient unbeschränkt ist. Dies ist offensichtlich gegeben bei  $\Re(\lambda) < 1$ , so dass unter Berücksichtigung von (2.38) folgender Bereich für die Exponenten  $\lambda \in \mathbb{C}$  für die weiteren Berechnungen von Interesse ist:

$$-0.5 < \Re(\lambda) < 1 \quad (2.39)$$

An dieser Stelle sollte nochmals unterstrichen werden, dass *alle* Eigenpaare aus diesem Intervall eine wichtige Rolle spielen und nicht nur jenes mit der dominanten Singularität. In der linear-elastischen Bruchmechanik zum Beispiel müssen im Falle einer mixed-Mode-Belastung alle singulären Moden in einem Bruchkriterium berücksichtigt werden [21]. Aus numerischer Sicht kann eine optimale Konvergenzordnung ebenfalls nur dann erreicht werden, wenn nicht nur die dominante Singularität, sondern alle singuläre Terme auf geeignete Weise approximiert werden.

Damit ist der Zusammenhang zwischen den Spektraleigenschaften des Operatorbündels und der Asymptotik der Lösung hinreichend geklärt — die Singulärexponenten  $\lambda_i$  und die Winkelfunktionen  $\mathbf{U}_{ik}$  können als Eigenpaare von  $\mathfrak{A}(\lambda)$  berechnet werden. Eine denkbare Vorgehensweise würde darin bestehen,  $\mathfrak{A}(\lambda)$  unter Zuhilfenahme der Finite-Differenzen-Methode zu approximieren und das so erhaltene diskrete Eigenwertproblem mit geeigneten Mitteln zu lösen [79]. Da wir jedoch aus Gründen der Flexibilität generell an einer Näherung mit Finiten Elementen interessiert sind, stellen wir im nächsten Kapitel eine schwache Formulierung des Problems vor, die als Ausgangspunkt der FE-Approximation benutzt werden kann.



# Kapitel 3

## Berechnung von Eckensingularitäten im $\mathbb{R}^3$

In diesem Kapitel stellen wir zunächst eine schwache Form des ursprünglichen Problems (2.29) vor, die anschliessend als Ausgangspunkt für eine Approximation nach der Methode der Finiten Elemente benutzt werden kann. Die zugehörige GALERKIN-PETROV Methode ist im Kapitel 3.2 aufgeführt. Diese Vorgehensweise liefert ein quadratisches Eigenwertproblem, welches im Kapitel 3.3 mit Hilfe der ARNOLDI-Methode iterativ gelöst wird. Die hier verwendete Darstellung des Problems beruht auf den Arbeiten DIMITROV et al. [29] und DIMITROV & SCHNACK [33], Alternativen findet man in [11, 36, 55, 89]. Ein ähnlicher Ansatz zur Lösung des Eigenwertproblems wird in [3] behandelt.

Im Kapitel 3.4 wird darüber hinaus eine geeignete *a-posteriori* Fehlersteuerung mit integrierter adaptiver Netzverfeinerungsstrategie vorgeschlagen (vgl. auch DIMITROV & SCHNACK [33]). Die Effizienz der sich daraus ergebenden *h*-Methode wird anschliessend im Kapitel 3.5 anhand von Benchmark-Tests eingehend belegt.

### 3.1 Schwache Formulierung

Unser Ziel ist nun, das Randwertproblem (2.29) in eine schwache Form zu bringen. Wir führen zunächst den Raum der mit den Randbedingungen kompatiblen Verschiebungsfunktionen

$$[H_0^1(\Omega_\mathcal{O}^\epsilon)]^3 := \{\mathbf{v} \in [H^1(\Omega_\mathcal{O}^\epsilon)]^3 : \mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ auf } \Gamma_0 \cup \Gamma_T\}. \quad (3.1)$$

ein. Mit den Testfunktionen  $\mathbf{v} \in [H_0^1(\Omega_O^\epsilon)]^3$  kann nun wie üblich das folgende Problem definiert werden:

**Problem 4:** Gesucht ist eine Lösung  $\mathbf{u} \in [H^1(\Omega_O^\epsilon)]^3$ , so dass

$$\mathfrak{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = 0, \quad \forall \mathbf{v} \in [H_0^1(\Omega_O^\epsilon)]^3, \quad (3.2)$$

wobei die Bilinearform  $\mathfrak{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$  im Falle eines Elastizitätsproblems durch

$$\mathfrak{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \int_{\Omega_O^\epsilon} \boldsymbol{\sigma}^T(\mathbf{u}) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \, d\Omega \quad (3.3)$$

definiert ist. Die rechte Seite in (3.2) verschwindet, da nur homogene Randbedingungen zu berücksichtigen sind. Der Spannungs- bzw. Verzerrungsvektor

$$\boldsymbol{\sigma}^T := [\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \tau_{xy}, \tau_{xz}, \tau_{yz}], \quad (3.4)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^T := [\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z, 2\varepsilon_{xy}, 2\varepsilon_{xz}, 2\varepsilon_{yz}], \quad (3.5)$$

enthält alle unabhängigen Komponenten des Spannungs- bzw. Verzerrungstensors.

Das mit der obigen Formulierung assoziierte Operatorbündel lässt sich durch die Einführung spezieller Ansatz- und Testfunktionen

$$\mathbf{u} = r^\lambda \mathbf{U}(\theta, \varphi) \in [H^1(\Omega_O^\epsilon)]^3, \quad (3.6)$$

$$\mathbf{v} = \Phi(r) \mathbf{V}(\theta, \varphi) \in [H_0^1(\Omega_O^\epsilon)]^3, \quad (3.7)$$

ableiten [55], wobei  $\Phi(r)$  eine skalare Funktion mit kompaktem Träger bezeichnet. Dies führt sofort zum

**Problem 5:** Gesucht ist eine Funktion  $\mathbf{U} \in [H^1(\mathcal{S})]^3$ , so dass

$$\hat{\mathfrak{B}}(\mathbf{U}, \mathbf{V}; \lambda) = 0, \quad \forall \mathbf{V} \in [H_0^1(\mathcal{S})]^3, \quad (3.8)$$

wobei  $\hat{\mathfrak{B}}(\mathbf{U}, \mathbf{V}; \lambda)$  polynomial von dem Parameter  $\lambda$  abhängt.

Die Bilinearform  $\hat{\mathfrak{B}}(\mathbf{U}, \mathbf{V}; \lambda)$  repräsentiert somit die schwache Form des Operatorbündels  $\mathfrak{A}(\lambda)$  — es kann gezeigt werden, dass  $(\lambda_i, \mathbf{U}_{ik})$  dann und nur dann Eigenpaare von  $\mathfrak{A}(\lambda)$  sind, wenn sie auch zugleich schwache Lösungen von (3.8) darstellen [52].

Eine diskrete Approximation von (3.8) kann leicht durch Finite Elemente erhalten werden, jedoch sollte dafür  $\mathfrak{B}(\cdot, \cdot)$  explizit berechnet werden [55]. Wir schlagen vor, diesen Schritt zu überspringen und die Diskretisierung unmittelbar auf die ursprüngliche Form (3.2) anzuwenden. Eine Trennung der Variablen kann im Nachhinein durch das Anwenden spezifischer semi-diskreter Basen für die Ansatz-

und Testräume erreicht werden, wie wir später zeigen werden. Ein wesentlicher Vorteil dieser Vorgehensweise besteht darin, dass eine explizite analytische Darstellung des diskreten Problems ermöglicht wird, was die nachfolgende Implementierung sehr vereinfacht und die Anwendung eines effizienten Lösungsalgorithmus gestattet.

## 3.2 Approximation mit Finiten Elementen

Wir kommen nun zur Finiten-Elemente-Approximation von (3.2). Diese kann zunächst ganz abstrakt beschrieben werden durch

**Problem 6:** *Gesucht ist eine Lösung  $\mathbf{u}^h \in U_h \subset [H^1(\Omega_O^\epsilon)]^3$ , so dass*

$$\mathfrak{B}(\mathbf{u}^h, \mathbf{v}^h) = 0, \quad \forall \mathbf{v}^h \in V_h \subset [H_0^1(\Omega_O^\epsilon)]^3, \quad (3.9)$$

wobei  $U_h \neq V_h$  den endlich-dimensionalen Ansatz- bzw. Testraum der Approximation bezeichnet.

Diese Vorgehensweise, bei der verschiedene Ansatz- und Testräume benutzt werden ist auch als GALERKIN-PETROV Methode bekannt.

Wir konstruieren zunächst den Raum  $U_h$  und setzen dafür die Diskretisierung von  $\mathcal{S}$  in  $N$  Dreiecks-Elemente  $\Delta_i$  voraus (Zur Erinnerung:  $\mathcal{S}$  war die Schnittmenge von dem Kegel  $\mathcal{K}$  mit der Einheitskugeloberfläche). Die Basis  $\mathbf{w}_i$  eines endlich-dimensionalen Unterraums

$$H_h^1(\mathcal{S}) := \text{span}\{\mathbf{w}_i(\theta, \varphi); \quad i = 1, \dots, M\}, \quad H_h^1(\mathcal{S}) \subset [H^1(\mathcal{S})]^3 \quad (3.10)$$

kann wie üblich so eingeführt werden, dass  $\mathbf{w}_i$  nur im Knoten  $(\theta_i, \varphi_i)$  gleich 1 ist, ansonsten überall verschwindet und sich wie ein Polynom gegebenen Grades zwischen den Knoten verhält. Wir bezeichnen dabei mit  $M$  die Anzahl der Knoten. In Anlehnung an Satz 4 und unter der Annahme, dass keine logarithmischen Terme in der Lösung vorkommen, definieren wir den Raum  $U_h$  mit der folgenden spezifischen semi-diskreten Basis

$$U_h := \text{span}\{r^\lambda \mathbf{w}_i(\theta, \varphi); \quad i = 1, \dots, M\}. \quad (3.11)$$

Wir kommen nun zum Testraum  $V_h$ . Entsprechend der Forderung, dass  $V_h$  in dem Raum  $[H_0^1(\Omega_O^\epsilon)]^3$  enthalten sein muss und somit alle Funktionen  $\mathbf{v} \in V_h$  auf dem DIRICHLET-Teil  $\Gamma_0 \cup \Gamma_T$  des Randes verschwinden müssen (was von (3.11) nicht erfüllt wird), definieren wir den Raum  $V_h$  mit

$$V_h := \text{span}\{\Phi(r) \mathbf{w}_i(\theta, \varphi); \quad i = 1, \dots, M\}, \quad (3.12)$$

| $K$ | Ordnung     | $N_i, i = 1, \dots, K$                                                                  |
|-----|-------------|-----------------------------------------------------------------------------------------|
| 3   | linear      | $N_1 = L_1, N_2 = L_2, N_3 = L_3$                                                       |
| 6   | quadratisch | $N_i = (2L_i - 1)L_i, i = 1, \dots, 3$<br>$N_4 = 4L_1L_2, N_5 = 4L_2L_3, N_6 = 4L_1L_3$ |

TABELLE 3.1: Formfunktionen für Dreieckselemente bei unterschiedlicher Approximationsordnung.

wobei  $\Phi(r)$  eine implizit definierte, skalare Funktion mit kompaktem Träger

$$\text{supp}(\Phi) \subset [0, \epsilon] \quad (3.13)$$

bezeichnet. Darin liegt auch die Begründung der GALERKIN-PETROV Methode: es ist nicht möglich, die Testfunktionen aus dem gleichen Raum wie die Ansatzfunktionen zu wählen, da diese nicht zu den DIRICHLET-Randbedingungen kompatibel sind.

Wir kommen nun zur expliziten Darstellung der FE-Approximation unseres Problems. Für die Verschiebungen lokal in einem Sektor  $(r, \theta, \varphi) \in [0, \epsilon] \times \Delta_i$  werden folgende FE-Ansätze gemacht

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_i^h(r, \theta, \varphi) &= r^\lambda \mathbf{N}(\theta, \varphi) \mathbf{T}_d^{-1} \mathbf{d}_i, \\ \mathbf{v}_i^h(r, \theta, \varphi) &= \Phi(r) \mathbf{N}(\theta, \varphi) \mathbf{T}_d^{-1} \mathbf{b}_i, \end{aligned} \quad (3.14)$$

mit der block-diagonalen Matrix

$$\mathbf{N} = [\hat{\mathbf{N}}, \hat{\mathbf{N}}, \hat{\mathbf{N}}], \quad (3.15)$$

und dem Vektor

$$\mathbf{d}_i = [u_1^i, v_1^i, w_1^i, \dots, u_K^i, v_K^i, w_K^i]^T, \quad (3.16)$$

welcher alle Verschiebungskomponenten der  $K$  Knoten des  $i$ -ten Dreieckselements  $\Delta_i$  enthält.  $r, \theta, \varphi$  bezeichnet dabei ein sphärisches Koordinatensystem mit Ursprung im singulären Punkt  $O$ , und  $\lambda$  den zu ermittelnden Singulärexponenten. Der Vektor

$$\hat{\mathbf{N}} = [N_1, N_2, \dots, N_K] \quad (3.17)$$

enthält  $K$  Formfunktionen, die bezüglich der Dreieckskoordinaten  $L_{1,2,3}(\theta, \varphi)$  (siehe [91], Seite 129), wie in Tabelle 3.1 dargestellt, definiert werden können. Die Matrix  $\mathbf{T}_d$  hat die Aufgabe, die Einträge des Knotenverschiebungsvektors auf geeignete Weise umzuordnen:

$$[u_1^i, v_1^i, w_1^i, \dots, u_K^i, v_K^i, w_K^i]^T = \mathbf{T}_d [u_1^i, \dots, u_K^i, v_1^i, \dots, v_K^i, w_1^i, \dots, w_K^i]^T. \quad (3.18)$$

Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass die Verschiebungen immer noch in Richtung der entsprechenden kartesischen Koordinaten  $(x, y, z)$  verstanden werden, so dass für Spannungen und Verzerrungen später keine Tensortransformation vorzunehmen ist.

Der Vektor des Verschiebungsgradienten

$$\mathbf{g}_i^h = [\partial_x u, \partial_y u, \partial_z u, \dots, \partial_x w, \partial_y w, \partial_z w]^T, \quad (3.19)$$

welcher alle Orts-Ableitungen von Verschiebungskomponenten im  $i$ -ten Element enthält, kann aus (3.14) durch Differentiation berechnet werden:

$$\mathbf{g}_i^h = r^{\lambda-1} \mathbf{J}^{-1} \mathbf{B} \mathbf{T}_d^{-1} \mathbf{d}_i, \quad (3.20)$$

wobei die block-diagonalen Matrizen

$$\mathbf{J}^{-1} = [\hat{\mathbf{J}}^{-1}, \hat{\mathbf{J}}^{-1}, \hat{\mathbf{J}}^{-1}], \quad (3.21)$$

$$\mathbf{B} = [\hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{B}}] \quad (3.22)$$

über die Submatrizen

$$\hat{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} \lambda \hat{\mathbf{N}} \\ r \hat{\mathbf{N}}_\theta \\ r \hat{\mathbf{N}}_\varphi \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

und

$$\hat{\mathbf{J}}^{-1} = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \varphi & r^{-1} \cos \theta \cos \varphi & -r^{-1} \sin \varphi / \sin \theta \\ \sin \theta \sin \varphi & r^{-1} \cos \theta \sin \varphi & r^{-1} \cos \varphi / \sin \theta \\ \cos \theta & -r^{-1} \sin \theta & 0 \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

definiert werden können. Für die partiellen Ableitungen  $\partial_\theta \hat{\mathbf{N}}$  und  $\partial_\varphi \hat{\mathbf{N}}$  wurde dabei die verkürzte Notation  $\hat{\mathbf{N}}_\theta$ ,  $\hat{\mathbf{N}}_\varphi$  benutzt. Die Matrix  $\hat{\mathbf{J}}^{-1}$  bezeichnet die Inverse der JAKOBI-Funktionalmatrix des Übergangs

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi, \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi, \\ z &= r \cos \theta, \end{aligned} \quad (3.25)$$

von kartesischen  $(x, y, z)$  in sphärische  $(r, \theta, \varphi)$  Koordinaten, bei dem die Differentialoperatoren durch

$$[\partial_r, \partial_\theta, \partial_\varphi]^T = \hat{\mathbf{J}} [\partial_x, \partial_y, \partial_z]^T \quad (3.26)$$

transformiert werden. Die Abhängigkeit zwischen den Elementarvolumen in beiden Koordinatensystemen ist gegeben durch:

$$dx dy dz = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi. \quad (3.27)$$

Die Matrix  $\hat{\mathbf{J}}^{-1}\hat{\mathbf{B}}$  in (3.20) kann leicht in  $\lambda$ -Potenzen zerlegt werden:

$$\hat{\mathbf{J}}^{-1}\hat{\mathbf{B}} = \hat{\mathbf{J}}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ r \hat{\mathbf{N}}_\theta \\ r \hat{\mathbf{N}}_\varphi \end{bmatrix} + \lambda \hat{\mathbf{J}}^{-1} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{N}} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \hat{\mathbf{F}}_0 + \lambda \hat{\mathbf{F}}_1, \quad (3.28)$$

wobei

$$\hat{\mathbf{F}}_0 = \begin{bmatrix} \cos \theta \cos \varphi \hat{\mathbf{N}}_\theta \\ \cos \theta \sin \varphi \hat{\mathbf{N}}_\theta \\ -\sin \theta \hat{\mathbf{N}}_\theta \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\sin \varphi / \sin \theta \hat{\mathbf{N}}_\varphi \\ \cos \varphi / \sin \theta \hat{\mathbf{N}}_\varphi \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.29)$$

$$\hat{\mathbf{F}}_1 = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \varphi \hat{\mathbf{N}} \\ \sin \theta \sin \varphi \hat{\mathbf{N}} \\ \cos \theta \hat{\mathbf{N}} \end{bmatrix}. \quad (3.30)$$

Der Gradientenvektor kann also ausgedrückt werden als

$$\mathbf{g}_i^h = r^{\lambda-1} [\mathbf{F}_0 + \lambda \mathbf{F}_1] \mathbf{T}_d^{-1} \mathbf{d}_i, \quad (3.31)$$

wobei

$$\mathbf{F}_0 = [\hat{\mathbf{F}}_0, \hat{\mathbf{F}}_0, \hat{\mathbf{F}}_0], \quad (3.32)$$

$$\mathbf{F}_1 = [\hat{\mathbf{F}}_1, \hat{\mathbf{F}}_1, \hat{\mathbf{F}}_1]. \quad (3.33)$$

Die Verzerrungsvektoren  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_i^h)$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_i^h)$  können aus  $\mathbf{g}_i^h$  durch Umsortierung erhalten werden:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_i^h) = r^{\lambda-1} \mathbf{T}_\varepsilon [\mathbf{F}_0(\theta, \varphi) + \lambda \mathbf{F}_1(\theta, \varphi)] \mathbf{T}_d^{-1} \mathbf{d}_i, \quad (3.34)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_i^h) = \mathbf{T}_\varepsilon \left[ \frac{\Phi(r)}{r} \mathbf{F}_0(\theta, \varphi) + \Phi'(r) \mathbf{F}_1(\theta, \varphi) \right] \mathbf{T}_d^{-1} \mathbf{b}_i. \quad (3.35)$$

Mit der konstitutiven Gleichung

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_i^h) = \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_i^h) \quad (3.36)$$

wird die lineare Beziehung zwischen Spannungen und Verzerrungen eingeführt<sup>1</sup>. Die Spannungen  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_i^h)$  ergeben sich also zu

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_i^h) = r^{\lambda-1} \mathbf{C} \mathbf{T}_\varepsilon [\mathbf{F}_0(\theta, \varphi) + \lambda \mathbf{F}_1(\theta, \varphi)] \mathbf{T}_d^{-1} \mathbf{d}_i. \quad (3.37)$$

Einsetzen von (3.37) und (3.35) in die Gleichung der diskreten Bilinearform (3.9) liefert

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{d}_i^T \mathbf{K}_i^e \mathbf{b}_j = 0, \quad \forall \mathbf{b}_j, j = 1, \dots, M, \quad (3.38)$$

---

<sup>1</sup>Die Definition der Matrix  $\mathbf{C}$  für verschiedene Materialmodelle befindet sich im Anhang.

was dem folgenden System linearer Gleichungen äquivalent ist:

$$\sum_{i=1}^N [\mathbf{K}_i^e]^T \mathbf{d}_i = \mathbf{0}, \quad (3.39)$$

wobei die Element-Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{K}_i^e$  wie folgt definiert werden kann:

$$\mathbf{K}_i^e := \mathbf{T}_d^{-T} \mathbf{A}_i \mathbf{T}_d^{-1}, \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_i &:= \int_{\Omega_i} r^{\lambda-1} [\mathbf{F}_0 + \lambda \mathbf{F}_1]^T \mathbf{Z} \left[ \frac{\Phi(r)}{r} \mathbf{F}_0 + \Phi'(r) \mathbf{F}_1 \right] r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\varphi \\ &= \int_{\Omega_i} r^{\lambda+1} \Phi'(r) [\mathbf{F}_0 + \lambda \mathbf{F}_1]^T \mathbf{Z} \mathbf{F}_1 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\varphi + \\ &\quad + \int_{\Omega_i} r^\lambda \Phi(r) [\mathbf{F}_0 + \lambda \mathbf{F}_1]^T \mathbf{Z} \mathbf{F}_0 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\varphi, \end{aligned} \quad (3.41)$$

$$\mathbf{Z} := \mathbf{T}_\varepsilon^T \mathbf{C} \mathbf{T}_\varepsilon. \quad (3.42)$$

Wir erhalten somit das übliche FE-Gleichungssystem, allerdings nun mit verschwindender rechter Seite. Die Summation in (3.39) wird über  $N$  Sektoren  $\Omega_i$  ausgeführt. Ausserdem ist das Transponierten-Zeichen wichtig, da  $\mathbf{K}_i^e$  nicht symmetrisch ist.

Damit wieder eine Trennung der Variablen  $r$  und  $\theta, \varphi$  durchgeführt werden kann, ist eine partielle Integration des ersten Terms in (3.41) notwendig:

$$\int_0^\varepsilon r^{\lambda+1} \Phi'(r) \, dr \, I = [r^{\lambda+1} \Phi(r)]_0^\varepsilon I - \int_0^\varepsilon (\lambda+1) r^\lambda \Phi(r) \, dr \, I, \quad (3.43)$$

wobei

$$I = \int_{\Delta_i} [\mathbf{F}_0 + \lambda \mathbf{F}_1]^T \mathbf{Z} \mathbf{F}_1 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi. \quad (3.44)$$

Da  $\Phi(r)$  einen kompakten Träger in  $[0, \varepsilon)$  hat, ist der integral-freie Term in (3.43) gleich Null und der Ausdruck  $r^\lambda \Phi(r)$  kann in (3.41) wieder ausgeklammert werden. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_i &= \int_0^\varepsilon r^\lambda \Phi(r) \, dr \int_{\Delta_i} [-(\lambda+1)(\mathbf{F}_0^T + \lambda \mathbf{F}_1^T) \mathbf{Z} \mathbf{F}_1 + \\ &\quad + (\mathbf{F}_0^T + \lambda \mathbf{F}_1^T) \mathbf{Z} \mathbf{F}_0] \sin \theta \, d\theta \, d\varphi. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Das Integral über  $r$  liefert für alle Sektoren  $\Omega_i$  eine Konstante  $C$ . Durch umgruppieren der Terme in (3.45) nach  $\lambda$ -Potenzen erhalten wir

$$\mathbf{K}_i^e = \mathbf{T}_d^{-T} \mathbf{A}_i \mathbf{T}_d^{-1} = C [(\mathbf{K}_i - \mathbf{D}_i) + \lambda(\mathbf{D}_i^T - \mathbf{D}_i - \mathbf{M}_i) - \lambda^2(\mathbf{M}_i)], \quad (3.46)$$

mit den Definitionen

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_i &:= \mathbf{T}_d^{-T} \int_{\Delta_i} \mathbf{F}_1^T \mathbf{Z} \mathbf{F}_1 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \, \mathbf{T}_d^{-1}, \\ \mathbf{D}_i &:= \mathbf{T}_d^{-T} \int_{\Delta_i} \mathbf{F}_0^T \mathbf{Z} \mathbf{F}_1 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \, \mathbf{T}_d^{-1}, \\ \mathbf{K}_i &:= \mathbf{T}_d^{-T} \int_{\Delta_i} \mathbf{F}_0^T \mathbf{Z} \mathbf{F}_0 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \, \mathbf{T}_d^{-1}.\end{aligned}\tag{3.47}$$

Die Konstante  $C$  kann nun gekürzt werden und wir erhalten

$$[(\mathbf{K} - \mathbf{D}) + \lambda(\mathbf{D}^T - \mathbf{D} - \mathbf{M}) - \lambda^2(\mathbf{M})]^T \mathbf{d} = \mathbf{0},\tag{3.48}$$

wobei

$$\mathbf{M} := \sum_{i=1}^N \mathbf{M}_i, \quad \mathbf{D} := \sum_{i=1}^N \mathbf{D}_i, \quad \mathbf{K} := \sum_{i=1}^N \mathbf{K}_i.\tag{3.49}$$

Gleichung (3.48) definiert ein diskretes quadratisches (in Bezug auf  $\lambda$ ) Eigenwertproblem (EWP). Wie später noch verdeutlicht werden soll, ist das zugehörige, lineare EWP nicht symmetrisch, so dass erwartungsgemäss komplexe Eigenwerte  $\lambda$  möglich sind. Es sei in diesem Zusammenhang daran erinnert, dass komplexe Lösungen für  $\lambda$  in Spezialfällen bekannt sind [86], im Umkehrschluss verdeutlicht dies, dass das lineare Eigenwertproblem nicht symmetrisch sein *kann*.

Der Grund, dass ein nicht-symmetrisches Problem vorliegt, ist darin zu finden, dass die diskrete Bilinearform (3.9), von der dieses abgeleitet wurde, weder symmetrisch (in Bezug auf  $\mathbf{u}^h$  und  $\mathbf{v}^h$ ), noch positiv-definit ist. Dies mag auf den ersten Blick recht erstaunlich für ein Elastizitätsproblem sein, ist jedoch die Konsequenz aus der nicht-Eindeutigkeit des gelösten Problems (nur die lokalen Randbedingungen werden erfüllt). Ausserdem benutzen wir für die Approximation eine GALERKIN-PETROV Methode, bei der die Ansatz- und Testräume nicht übereinstimmen, so dass die Voraussetzungen des LAX-MILGRAM Satzes nicht erfüllt sind [23]. Die Existenz der Lösung in diesem nicht-symmetrischen Fall wird jedoch von der Arbeit von BABUSKA & AZIZ [8] sichergestellt.

Bezüglich der gesuchten Singulärexponenten ist ganz allgemein auch eine Situation denkbar, bei der die algebraische und die geometrische Multiplizität eines Eigenwertes nicht übereinstimmt, so dass generalisierte Eigenvektoren auftreten. In diesem Fall können logarithmische Terme in der Lösung eine Rolle spielen [57], die bei dem hier vorgestellten Ansatz nicht erfasst werden, so dass die tatsächliche Lösung “etwas stärker” singular sein wird, als die numerische Approximation.



### 3.3 Die Lösung des Eigenwertproblems

Das Ergebnis der bisherigen Betrachtungen war ein diskretes quadratisches Eigenwertproblem (3.48). Wir beschreiben nun einen geeigneten Lösungsalgorithmus, welcher im wesentlichen auf den Arbeiten DIMITROV et al. [29] und DIMITROV & SCHNACK [33] beruht. Ein ähnlicher Ansatz wird auch in [3] verfolgt, die dort angewendete spezielle Lösungstechnik berücksichtigt jedoch noch zusätzlich die HAMILTON-Struktur des Problems.

Aus Gleichung (3.48) kann als erstes festgestellt werden, dass die Formulierung keine besonderen Symmetrien aufweist. Wir streben nun eine Umformung an, die möglichst viel “Struktur” in das Problem bringen soll, d.h. eine Formulierung, bei der die darin vorkommenden Matrizen möglichst symmetrisch sind. Für diese Umformung kann die Substitution  $\lambda = \bar{\lambda} - 1/2$  benutzt werden, so dass aus (3.48) das neue Eigenwertproblem

$$[\mathbf{P} + \bar{\lambda}\mathbf{Q} + \bar{\lambda}^2\mathbf{R}] \mathbf{d} = \mathbf{0}, \quad (3.50)$$

mit den Definitionen

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \mathbf{K} + \frac{1}{4}\mathbf{M} - \frac{1}{2}(\mathbf{D} + \mathbf{D}^T), \\ \mathbf{Q} &= [\mathbf{D}^T - \mathbf{D}]^T, \\ \mathbf{R} &= -\mathbf{M}, \end{aligned} \quad (3.51)$$

erhalten wird. Die Matrizen  $\mathbf{P}, \mathbf{R}$  sind jetzt symmetrisch und die Matrix  $\mathbf{Q}$  ist schief-symmetrisch, was zur Reduktion des Rechenaufwands ausgenutzt werden kann.

Für die Lösung dieses Eigenwertproblems schlagen wir folgenden Algorithmus vor. Wir transformieren zunächst (3.50) in ein generalisiertes Eigenwertproblem mit Hilfe folgender Linearisierung: Wir führen den neuen Vektor  $\mathbf{x}$  ein, so dass  $\bar{\lambda}\mathbf{x} = \bar{\lambda}^2\mathbf{R}\mathbf{d}$  und setzen ihn in (3.50) ein, dies führt zu

$$\begin{bmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{d} \\ \mathbf{x} \end{bmatrix} = \bar{\lambda} \begin{bmatrix} -\mathbf{Q} & -\mathbf{I} \\ \mathbf{R} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{d} \\ \mathbf{x} \end{bmatrix}, \quad (3.52)$$

wobei  $\mathbf{I}$  die Einheitsmatrix darstellt.

Für die Lösung von (3.52) wird ein iteratives Schema auf der Basis der ARNOLDI Methode [73, 60] angewendet. Diese ist für grosse, strukturierte Matrizen besonders geeignet, da die Komplexität (Anzahl der Rechenoperationen) in diesem

Fall lediglich bei  $\mathcal{O}(n)$  und nicht wie üblich bei  $\mathcal{O}(n^2)$  liegt. Ausserdem ist der Speicherplatzbedarf für die Berechnungen proportional zu  $2n \cdot \mathcal{O}(k) + \mathcal{O}(k^2)$  und damit relativ gering ( $k \ll n$  bezeichnet die Dimension des KRYLOV-Unterraums,  $n$  die Dimension von  $\mathbf{P}, \mathbf{Q}, \mathbf{R}$ ). Eine konkrete Implementierung liegt mit der FORTRAN-Bibliothek ARPACK vor [60].

Da wir generell nur an den kleinsten Eigenwerten in der Nähe der imaginären Achse interessiert sind (oder exakt im Intervall  $0 < \Re(\bar{\lambda}) < 1.5$ ), eine schnelle Konvergenz der ARNOLDI-Methode jedoch nur für die grössten Eigenwerte zu erwarten ist (eine generelle Eigenschaft aller KRYLOV Unterraum Projektionsalgorithmen), wird zum Zwecke der Konvergenzbeschleunigung eine Spektraltransformation  $\bar{\lambda} = 1/\theta$  durchgeführt. Wir multiplizieren Gleichung (3.52) mit  $\bar{\lambda}^{-1} = \theta$  und erhalten

$$\underbrace{\begin{bmatrix} -\mathbf{Q} & -\mathbf{I} \\ \mathbf{R} & \mathbf{0} \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \begin{bmatrix} \mathbf{d} \\ \mathbf{x} \end{bmatrix} = \theta \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix}}_{\mathbf{B}} \begin{bmatrix} \mathbf{d} \\ \mathbf{x} \end{bmatrix}. \quad (3.53)$$

In diesem Eigenwertproblem sind nun die Eigenwerte  $\theta$  mit dem grössten Realteil von Interesse, welche exakt diejenigen sind, die auch effektiv berechnet werden können. Nach Ende der Berechnungen muss natürlich eine Rücksubstitution durchgeführt werden, die Eigenvektoren sind hingegen von der Transformation nicht betroffen.

Gleichung (3.53) kann nun in ein Standard-Eigenwertproblem überführt werden:

$$\mathbf{X} \hat{\mathbf{d}} - \theta \hat{\mathbf{d}} = \mathbf{0}, \quad (3.54)$$

mit den Bezeichnungen  $\mathbf{X} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$  und  $\hat{\mathbf{d}} = [\mathbf{d}, \mathbf{x}]^T$ .

Die grundlegende Idee des ARNOLDI-Verfahrens besteht darin, in  $k$  Schritten aus einem beliebigen Startvektor  $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}$  den sogenannten KRYLOV-Unterraum

$$\mathcal{K}_k(\mathbf{X}, \mathbf{y}) := \text{span}\{\mathbf{y}, \mathbf{X}^1\mathbf{y}, \mathbf{X}^2\mathbf{y}, \dots, \mathbf{X}^{k-1}\mathbf{y}\}, \quad (3.55)$$

zu erzeugen und die best-mögliche Näherung der Eigenvektoren von  $\mathbf{X}$  in diesem Unterraum zu suchen. Wir wenden zunächst die RITZ-GALERKIN Methode an und fordern, dass das Residuum von (3.54) orthogonal zu  $\mathcal{K}_k$  sein soll:

$$(\mathbf{X}\hat{\mathbf{d}} - \theta\hat{\mathbf{d}})^T \mathbf{w} = 0, \quad \forall \mathbf{w} \in \mathcal{K}_k. \quad (3.56)$$

Dieses Residuum verschwindet somit für  $k \rightarrow \infty$ , so dass eine Lösung  $(\theta, \hat{\mathbf{d}})$  von (3.56) bei ausreichend grossem  $k$  eine Näherung für die Eigenpaare von  $\mathbf{X}$  darstellt. Es ist üblich,  $\theta$  als RITZ-Wert und  $\hat{\mathbf{d}}$  als RITZ-Vektor zu bezeichnen.

Aus Stabilitätsgründen wollen wir nun annehmen, dass eine ortho-normierte Basis von  $\mathcal{K}_k$  vorliegt. Dies kann immer durch einen GRAM-SCHMIDT Orthogonalisierungsalgorithmus erreicht werden und stellt keine prinzipielle Schwierigkeit dar: Wir nehmen an, dass  $\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_j$  bereits ortho-normale Vektoren sind. Die Orthogonalisierung von  $\mathbf{w}_{j+1}$  lässt sich dadurch erreichen, dass zuerst  $\mathbf{w}_{j+1} = \mathbf{X}\mathbf{w}_j$  berechnet wird und anschliessend folgende Iterationen durchgeführt werden

$$\mathbf{w}_{j+1} \leftarrow \mathbf{w}_{j+1} - (\mathbf{w}_i^T, \mathbf{w}_{j+1})\mathbf{w}_i, \quad \forall i = 1, \dots, j, \quad (3.57)$$

wobei mit  $(\cdot, \cdot)$  das Skalarprodukt zweier Vektoren bezeichnet wird. Als letztes kann nun die Normierung vorgenommen werden:

$$\mathbf{w}_{j+1} \leftarrow \frac{1}{\|\mathbf{w}_{j+1}\|_2} \mathbf{w}_{j+1}. \quad (3.58)$$

Die ortho-normale Basis von  $\mathcal{K}_k$  sei nun spaltenweise in  $\mathbf{W}$  abgelegt, so dass  $\hat{\mathbf{d}} \in \mathcal{K}_k$  als eine Linearkombination

$$\hat{\mathbf{d}} = \mathbf{W}\mathbf{s} \quad (3.59)$$

berechnet werden kann. Einsetzen von (3.59) in (3.56) liefert

$$\mathbf{H}_k\mathbf{s} - \theta\mathbf{s} = \mathbf{0}, \quad (3.60)$$

wobei  $\mathbf{H}_k = \mathbf{W}^T\mathbf{X}\mathbf{W}$ , eine obere HESSENBERG Matrix der Ordnung  $k$  ist, dessen Spektrum einen Teil des Spektrums von  $\mathbf{X}$  approximiert:

$$\sigma(\mathbf{H}_k) \subset \sigma(\mathbf{X}), \quad (3.61)$$

so dass (3.60) als eine Projektion des ursprünglichen Eigenwertproblems angesehen werden kann. Nachdem  $\mathbf{H}_k$  berechnet wurde, kann ein gewöhnlicher QR-Iterationsalgorithmus

$$\mathbf{H}_k \leftarrow \hat{\mathbf{Q}}^H \mathbf{H}_k \hat{\mathbf{Q}} \quad (3.62)$$

mit einer unitären Matrix  $\hat{\mathbf{Q}}$  angewendet werden, bis alle sub-diagonalen Elemente von  $\mathbf{H}_k$  verschwinden. Die Eigenwerte von  $\mathbf{H}_k$  befinden sich nun auf der Hauptdiagonalen.

Diese Methode liefert normalerweise auch bei moderaten Werten von  $k \ll n$  sehr gute Näherungen für die grössten Eigenwerte von  $\mathbf{X}$ . Ein Vorteil ist ebenso, dass die Eigenvektoren praktisch mitgeliefert werden — sie können ohne nennenswerten Aufwand aus (3.59) berechnet werden. Für weitere Einzelheiten, insbesondere was die Implementierung angeht, verweisen wir auf [73, 60].

Für das Aufstellen des KRYLOV-Unterraums  $\mathcal{K}_k$  in (3.55) muss das Produkt  $\mathbf{z} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{y}$  mit einer gegebenen rechten Seite  $\mathbf{y}$  mehrmals berechnet werden. Diese Aufgabe kann in drei Schritten ohne explizite Berechnung der  $2n \times 2n$  Matrix  $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$  durchgeführt werden:

1. Berechne  $\mathbf{w} = \mathbf{A} \mathbf{y}$ :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{w}_1 \\ \mathbf{w}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{Q} & -\mathbf{I} \\ \mathbf{R} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{Q} \mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2 \\ \mathbf{R} \mathbf{y}_1 \end{bmatrix}. \quad (3.63)$$

2. Löse das Lineare System

$$\mathbf{P} \mathbf{z}_1 = \mathbf{w}_1 \quad (3.64)$$

bezüglich  $\mathbf{z}_1$ .

3. Die Lösung  $\mathbf{z}$  ist gegeben durch

$$\mathbf{z} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}^{-1} \mathbf{w}_1 \\ \mathbf{w}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{z}_1 \\ \mathbf{w}_2 \end{bmatrix}. \quad (3.65)$$

Damit muss die Inverse  $\mathbf{B}^{-1}$  (die im allgemeinen dicht-besetzt ist, auch wenn  $\mathbf{B}$  eine Bandmatrix ist) nicht explizit berechnet werden, so dass die dünn-besetzte Struktur des ursprünglichen Problems erhalten werden kann. Dies stellt einen grossen Vorteil im Vergleich zu anderen möglichen Algorithmen dar, insbesondere was den Speicherplatzbedarf und die Komplexität angeht.

Die hier vorgeschlagene Vorgehensweise besteht also darin, zunächst die drei Matrizen  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{Q}$ ,  $\mathbf{R}$  zu berechnen und abzuspeichern und anschliessend den oben beschriebenen ARNOLDI Algorithmus für die Berechnung der Eigenwerte anzuwenden. Für nicht allzugrosse Probleme, für die das fill-in in  $\mathbf{P}$  bei einer Faktorisierung akzeptabel scheint, wird die günstigste Alternative sein, einmal vorab eine LU-Zerlegung von  $\mathbf{P}$  durchzuführen und anschliessend mehrmals lediglich eine Rückeinsetzung bei der Lösung von (3.64) durchzuführen, wenn der Arnoldi Prozess die Berechnung eines Produktes  $\mathbf{B}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{y}$  anfordert. Allerdings ist es auch vorstellbar, dass für Probleme über eine gewisse Dimension die mehrmalige komplette Auflösung mittels einem iterativen Verfahren die bessere Variante ist. Als eine Alternative wird deshalb ein vorkonditioniertes Verfahren der konjugierten Gradienten (PCG) mit einer inkompletten LU-Zerlegung (ILU) als Vorkonditionierer vorgeschlagen, mit dessen Hilfe Gl. (3.64) und damit die Produkte  $\mathbf{B}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{y}$  berechnet werden können [29]. Als konkrete Implementierung von PCG und ILU wurde die Softwarebibliothek PETSc benutzt [9]. Welche Technik geeigneter ist, muss in jedem Einzelfall anhand von numerischen Experimenten entschieden werden.

Die vorgeschlagene Lösungsmethode braucht somit nur *eine* direkte bzw. eine inkomplette Faktorisierung von  $\mathbf{P}$ , sowie einige wenige Matrix-Vektor-Produkte mit  $\mathbf{Q}$ ,  $\mathbf{R}$ , um alle gesuchten Eigenwerte  $\Re(\lambda) \in (-0.5, 1.0)$  sowie die zugehörigen Eigenvektoren zu ermitteln.

## 3.4 Fehlerschätzung und Adaptivität

Wie bereits erwähnt, sind die Winkelfunktionen  $\mathbf{U}_{ik}$  in Gl. (2.35) bei Problemen mit zusätzlichen Kanten nicht glatt. Dass kann leicht nachvollzogen werden, wenn man bedenkt, dass in diesem Fall das Gebiet  $\mathcal{S}$  auf der Einheitskugel, welches zur Berechnung von  $\mathbf{U}_{ik}$  diskretisiert werden muss, zusätzliche Ecken  $\delta_i$  enthält, so dass es ganz natürlich erscheint, wenn die Lösung in der Nähe dieser Ecken das typische, singuläre Kanten-Verhalten aufweist, welches von der Analyse des entsprechenden 2D-Problems bekannt ist. Deshalb kann eine ausreichende Genauigkeit bei den Berechnungen der Winkelfunktionen (und der Singulärexponenten) nur durch die Anwendung geeigneter Netzverfeinerungsstrategien auf der Basis einer Fehlersteuerung erreicht werden.

In diesem Kapitel stellen wir nun einen *a-posteriori* Fehlerschätzer sowie den zugehörigen adaptiven Algorithmus für Netzverfeinerung vor, welcher anschliessend in einer *h*-Methode realisiert wurde. Die folgenden Ausführungen basieren auf der Arbeit DIMITROV & SCHNACK [33], weitere Veröffentlichungen zur Berechnung von 3D-Eckensingularitäten mittels Fehlerschätzung und adaptiver Netzverfeinerung sind dem Autor nicht bekannt.

### 3.4.1 Der *A-posteriori* Fehlerschätzer

Ein Fehlerschätzer für die hier behandelten Probleme muss offensichtlich speziell auf die benutzte semi-diskrete Formulierung zugeschnitten sein, da nur ein Teil der Lösung (nämlich dieser, der ihre Winkelabhängigkeit beschreibt) durch einen diskreten Ansatz berechnet wird und somit auch einen Beitrag für den Diskretisierungsfehler leisten kann. In radialer Richtung hingegen wird ein *kontinuierlicher* Ansatz vom Typ  $r^\lambda$  benutzt, deshalb findet hier auch keine Diskretisierung statt. Ein allgemeiner Fehlerschätzer wie der populäre ZZ, welcher von ZIENKIEWICZ & ZHU [92, 93] vorgeschlagen wurde, kann somit nicht direkt angewendet werden. Wir benutzen hier jedoch die Idee des ZZ — die Mittelwertbildung als Basis für Superkonvergenz und formulieren auf dieser Grundlage eine spezifische, für unsere Zwecke geeignete Grösse als Fehlerschätzer. Die Effizienz und Zuverlässigkeit dieser Technik wurde in vielen Studien bestätigt, siehe z.B. [1, 7].

Sei  $\mathbf{e} = \mathbf{u} - \mathbf{u}^h$  der Fehler, dessen Energie-Norm wie folgt definiert wird:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{e}\|^2 &:= \int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{u}^h)^T \mathfrak{D}^T \mathbf{C} \mathfrak{D} (\mathbf{u} - \mathbf{u}^h) \, d\Omega \\ &= \int_{\Omega} (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^h)^T \mathbf{C}^{-1} (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^h) \, d\Omega, \end{aligned} \quad (3.66)$$

wobei wir mit  $\mathbf{u}$  die genaue Lösung und mit  $\mathbf{u}^h$  deren FE-Approximation bezeichnen.

Die zentrale Idee aller auf Superkonvergenz basierenden Fehlerschätzer ist, die tatsächlichen Spannungen  $\boldsymbol{\sigma}$  in (3.66) durch eine andere Grösse  $\boldsymbol{\sigma}^*$  zu ersetzen, welche eine bessere Näherung als die FE-Approximation  $\boldsymbol{\sigma}^h$  darstellt, so dass

$$\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^h \approx \boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}^h. \quad (3.67)$$

Der Fehler kann somit in der Energie-Norm wie folgt berechnet werden:

$$\|\mathbf{e}\|^2 \approx \int_{\Omega} (\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}^h)^T \mathbf{C}^{-1} (\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}^h) \, d\Omega. \quad (3.68)$$

Die “geglätteten” Spannungen  $\boldsymbol{\sigma}^*$  können bezüglich  $\theta, \varphi$  als  $C^0$ -stetige Funktionen (sie wären damit um eine Ordnung bessere Näherungen als  $\boldsymbol{\sigma}^h$ ) durch Projizieren von  $\boldsymbol{\sigma}^h$  in die Basis (3.10) erhalten werden, in die selbe Basis also, die auch für die Approximation der Lösung  $\mathbf{u}^h$  selbst benutzt wurde. Wir fordern somit, dass über einen typischen Raumsektor  $(r, \theta, \varphi) \in [0, \epsilon] \times \Delta_i$  folgendes gilt:

$$\boldsymbol{\sigma}_i^* = r^{\lambda-1} \mathbf{N}_{\sigma}(\theta, \varphi) \mathbf{T}_{\sigma}^{-1} \bar{\boldsymbol{\sigma}}_i^*, \quad (3.69)$$

wobei

$$\mathbf{N}_{\sigma}(\theta, \varphi) = [\hat{\mathbf{N}}, \hat{\mathbf{N}}, \hat{\mathbf{N}}, \hat{\mathbf{N}}, \hat{\mathbf{N}}, \hat{\mathbf{N}}] \quad (3.70)$$

und  $\hat{\mathbf{N}}$  bereits in (3.17) eingeführt wurde. Der Vektor  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_i^*$  beinhaltet  $K$  Knotenwerte der Spannungen in dem  $i$ -ten Dreieckselement und somit  $6K$  Komponenten, die BOOLE’sche Matrix  $\mathbf{T}_{\sigma}$  hat die Aufgabe, diese in einer geeigneten Form umzusortieren.

Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass laut Gleichung (3.69) nur ein Teil der Lösung einen Fehlerbeitrag leistet, dieser nämlich, der die Winkelabhängigkeit beschreibt, da in radialer Richtung keine Diskretisierung vorgenommen wird, obwohl in dem kontinuierlichen Ansatz  $r^{\lambda}$  eigentlich nur eine Näherung  $\lambda^h$  des tatsächlichen Singulärexponenten  $\lambda$  berücksichtigt werden kann. Dieser Ansatz ist, wie wir im folgenden zeigen werden, die einzige Möglichkeit, erneut eine Trennung der Variablen durchzusetzen, er wird ebenfalls durch verschiedene numerische Benchmark-Tests (siehe Kapitel 3.5) bestätigt.

Die Knotenspannungen  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*$  können mittels einer RITZ-GALERKIN Technik anhand der Forderung, dass das Residuum  $(\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}^h)$  verschwinden soll wie folgt berechnet werden:

$$\int_{\Omega_\epsilon} (\boldsymbol{\sigma}^* - \boldsymbol{\sigma}^h)^T \mathbf{w} \, d\Omega = 0, \quad \forall \mathbf{w} \in W_h, \quad (3.71)$$

wobei der endlich-dimensionale Raum  $W_h$  mit

$$W_h := \text{span}\{r^{\lambda-1} \mathbf{w}_i(\theta, \varphi); \quad i = 1, \dots, M\}, \quad (3.72)$$

definiert werden kann. Die Grösse  $\mathbf{w}_i$  ist die selbe, wie bereits bei der Approximation der Verschiebungen in (3.10) definiert.

Einsetzen von (3.69) und (3.37) in (3.71) liefert

$$\int_0^\epsilon r^{2\lambda} \, dr \sum_{i=1}^N \int_{\Delta_i} \mathbf{T}_\sigma^{-T} \mathbf{N}_\sigma^T \left[ \mathbf{N}_\sigma \mathbf{T}_\sigma^{-1} \bar{\boldsymbol{\sigma}}_i^* + \right. \\ \left. - \mathbf{C} \mathbf{T}_\epsilon [\mathbf{F}_0 + \lambda \mathbf{F}_1] \mathbf{T}_d^{-1} \mathbf{d}_i \right] \sin \theta \, d\theta \, d\varphi = \mathbf{0}, \quad (3.73)$$

oder nach Kürzen der Konstante, die sich aus dem  $r$ -Integral ergibt

$$\mathbf{A} \bar{\boldsymbol{\sigma}}^* = \mathbf{b}, \quad (3.74)$$

mit

$$\mathbf{A} := \sum_{i=1}^N \mathbf{T}_\sigma^{-T} \int_{\Delta_i} \mathbf{N}_\sigma^T \mathbf{N}_\sigma \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \mathbf{T}_\sigma^{-1}, \quad (3.75)$$

$$\mathbf{b} := \left[ \sum_{i=1}^N \mathbf{T}_\sigma^{-T} \int_{\Delta_i} \mathbf{N}_\sigma^T \mathbf{C} \mathbf{T}_\epsilon [\mathbf{F}_0 + \lambda \mathbf{F}_1] \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \mathbf{T}_d^{-1} \right] \mathbf{d}. \quad (3.76)$$

Es ist offensichtlich, dass die separable Form obiger Gleichung (und damit die Reduzierung der Dimension) nur durch die Annahme (3.69), d.h. durch den selben Ansatz von  $\boldsymbol{\sigma}^*$  und  $\boldsymbol{\sigma}^h$  bezüglich  $r$  sichergestellt wird.

Das lineare System (3.74) kann durch einen iterativen Algorithmus wie das Verfahren der konjugierten Gradienten (PCG) effektiv gelöst werden. Nachdem  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*$  berechnet wurde, kann der lokale Elementfehler  $\|\mathbf{e}\|_i$  durch

$$\|\mathbf{e}\|_i^2 \approx \int_{\Omega_i} (\boldsymbol{\sigma}_i^* - \boldsymbol{\sigma}_i^h)^T \mathbf{C}^{-1} (\boldsymbol{\sigma}_i^* - \boldsymbol{\sigma}_i^h) \, d\Omega, \quad (3.77)$$

erhalten und zu dem globalen Fehlerschätzer

$$\|\mathbf{e}\|^2 = \sum_{i=1}^N \|\mathbf{e}\|_i^2 \quad (3.78)$$

aufsummiert werden.

Schliesslich sei noch vermerkt, dass auch, wenn die numerische Methode zur Berechnung von Singularitäten, so wie sie in den Kapiteln 3.2-3.3 beschrieben wurde, die Behandlung von allgemeinen Problemen mit inhomogenen Materialeigenschaften erlaubt, ist der hier definierte Fehlerschätzer (3.77) zunächst nur auf homogene Probleme beschränkt. Die Mittelungstechnik, die die zentrale Idee dieses Fehlerschätzers beinhaltet, macht für ein inhomogenes Problem, bei dem die Tangentialspannungen am Materialinterface diskontinuierlich sind, keinen Sinn. Ausserdem ist die Energie-Norm, die für die Fehlerschätzung eingeführt wurde, für Probleme mit sich stark unterscheidenden Materialkonstanten nicht angebracht, da das “feste” Untergebiet (dieses mit den grösseren Werten für die Materialkonstanten) von dem Fehlerschätzer nicht erfasst werden kann. Dies sind jedoch keine prinzipiellen Schwierigkeiten, so dass für die Zukunft die Entwicklung eines Fehlerschätzers angestrebt wird, der die angedeuteten Probleme angemessen berücksichtigt.

### 3.4.2 Adaptive Netzverfeinerung

Der im vorhergehenden Kapitel vorgestellte Fehlerschätzer erlaubt die Anwendung eines iterativen Schemas für adaptive Netzverfeinerung, das im folgenden skizziert werden soll.

Wir führen zunächst den *relativen* Fehler  $\eta$  ein, welcher auf Element- bzw. Globalebene durch

$$\eta_i^2 \approx \frac{\|\mathbf{e}\|_i^2}{\|\mathbf{u}^h\|^2 + \|\mathbf{e}\|^2}, \quad \eta^2 \approx \frac{\|\mathbf{e}\|^2}{\|\mathbf{u}^h\|^2 + \|\mathbf{e}\|^2}. \quad (3.79)$$

approximiert werden kann. Bei einem *optimalen Netz*, welches wir anstreben, wird erwartet, dass der Element-Fehler  $\|\mathbf{e}\|_i$  gleichmässig verteilt und gleich dem *mittleren* Fehler  $\|\bar{\mathbf{e}}\|$  ist. Daraus folgt

$$\|\mathbf{e}\|^2 = \sum_{i=1}^N \|\mathbf{e}\|_i^2 = N \|\bar{\mathbf{e}}\|^2. \quad (3.80)$$



Wir nehmen nun an, dass das optimale Netz einen gegebenen relativen Gesamtfehler  $\bar{\eta}$  aufweist, so dass

$$\|\bar{\mathbf{e}}\|^2 = \frac{\bar{\eta}^2}{(1 - \bar{\eta}^2)} \frac{\|\mathbf{u}^h\|^2}{N}. \quad (3.81)$$

Unter der Annahme, dass der Fehler proportional zu  $\mathcal{O}(h^q)$  bzw.  $\mathcal{O}(A^{q/2})$  ist, wobei mit  $h$  der übliche Netzparameter und mit  $A$  die Fläche eines Dreieckselements bezeichnet wurde, kann folgende Beziehung zwischen der momentanen Fläche  $A_i$  und der optimalen Fläche  $A_{opt,i}$  eines jeden Dreieckselements aufgestellt werden

$$\frac{\|\mathbf{e}\|_i}{\|\bar{\mathbf{e}}\|} = \left( \frac{h_i}{h_{opt,i}} \right)^q = \left( \frac{A_i}{A_{opt,i}} \right)^{q/2}. \quad (3.82)$$

Einsetzen von (3.81) in (3.82) liefert eine obere Schranke für die Fläche

$$A_{opt,i} = \left[ \frac{\bar{\eta}^2}{(1 - \bar{\eta}^2)} \frac{\|\mathbf{u}^h\|^2}{N \|\mathbf{e}\|_i^2} \right]^{1/q} A_i, \quad (3.83)$$

die jedes Dreieckselement nicht überschreiten darf, damit eine quasi-optimale Netzverfeinerung durchgeführt werden kann. In dieser Gleichung bezeichnet  $\|\mathbf{e}\|_i$  den momentanen Elementfehler,  $\bar{\eta}$  den angestrebten relativen Gesamtfehler, der bei der nächsten Diskretisierung unterschritten werden soll, sowie  $q$  die bei dieser adaptiven Netzverfeinerung zu erwartende Konvergenzordnung, die *a-priori* abgeschätzt werden muss.

Daraus ergibt sich ein Schema für adaptive Netzverfeinerung, welches wie folgt zusammengefasst werden kann:

1. Gegeben sei der angestrebte relative Gesamtfehler  $\bar{\eta}_0$ , sowie eine obere Schranke für die Fläche der Dreieckselemente  $A_0$ . Führe eine uniforme Anfangstriangulierung des Gebietes durch, so dass keine Elementfläche grösser als  $A_0$  ist. Schätze die erwartete Konvergenzordnungsrate  $q$ .
2. Löse das Problem mit FEM und berechne den Elementfehler  $\|\mathbf{e}\|_i$  nach (3.77), den Gesamtfehler nach (3.78), sowie den Relativfehler  $\eta$  nach (3.79).
3. Falls der relative Gesamtfehler  $\eta$  grösser ist als  $\bar{\eta}_0$ :
  - (a) Berechne eine obere Schranke  $A_{opt,i}$  für die neue Fläche eines jeden Elements nach (3.83). Benutze dazu  $\bar{\eta} = \bar{\eta}_0$ , falls ein Problem ohne Kanten vorliegt oder  $\bar{\eta} = 1/2\eta$ , falls ein Kantenproblem vorliegt.

- (b) Führe eine neue Triangulierung durch: Teile jene Elemente, für die  $A_i > A_{opt,i}$  gilt in Sub-Elemente, deren Fläche näherungsweise  $A_{opt,i}$  ist.
- (c) Gehe zu Punkt 2.

Das externe Modul TRIANGLE [76], welches hier für die Netzgenerierung benutzt wird, erlaubt die Vorgabe einer oberen Schranke für die Flächen der Sub-Elemente bei Netzverfeinerung, so dass das obige Schema leicht implementiert werden kann. Die Sub-Elemente haben garantiert kleinere Fläche als die Schranke, ihre tatsächlichen Abmessungen liegen jedoch möglichst nahe daran, so dass ein quasi-optimales Netz erwartet wird. Mit einem relativ groben homogenen Ausgangsnetz reicht normalerweise ein Verfeinerungsschritt, um den angestrebten relativen Fehler  $\bar{\eta}_0$  bei Problemen ohne Kanten zu erreichen. Für Fälle mit Kanten sind hingegen einige wenige Schritte erforderlich, da bei jedem Verfeinerungsschritt nur eine gleichmässige Unterteilung eines Elementen in Sub-Dreiecke möglich ist. In diesem Fall ist die beste Strategie, die Hälfte des tatsächlichen Fehlers aus dem vorhergehenden Schritt für  $\bar{\eta}$  des folgenden Schritts vorzugeben, bis  $\bar{\eta}_0$  unterschritten wird. Wie im folgenden Kapitel gezeigt wird, reichen damit wenige Schritte, um einen Exponenten  $\lambda$  auf sechs und mehr Stellen genau zu berechnen, auch bei Problemen mit Kanten.

Schliesslich sei darauf hingewiesen, dass aufgrund des Integrationsbereiches alle absoluten Fehlernormen von der radialen Abmessung  $\epsilon$  des konischen Gebiets  $\Omega_{\mathcal{O}}^\epsilon$  abhängig sind. Damit ist nicht sinnvoll, solche absolute Fehlergrössen zu diskutieren, bevor nicht ein festes  $\epsilon$  betrachtet wird. Diese  $\epsilon$ -Wahl beeinflusst jedoch nicht die adaptive Netzverfeinerung: Gl. (3.83) sowie der globale Relativfehler  $\bar{\eta}_0$ , welcher als Abbruch-Kriterium für den Algorithmus benutzt wird, hängen nicht von  $\epsilon$  ab. In den obigen Ausdrücken kann erneut eine Trennung der Variablen vorgenommen und die Integrale über  $r$  gekürzt werden, da das zu diskretisierende Gebiet  $\mathcal{S}$  immer auf der Einheitskugel liegt.

### 3.5 Benchmark-Tests, Konvergenzrate

In diesem Kapitel soll die Implementierung der so vorgestellten Methode auf Genauigkeit und Effizienz untersucht werden. Dazu vergleichen wir die numerische Lösung mit solchen Problemen, die eine bekannte analytische Lösung besitzen. Im Falle einer  $\mathbb{R}^3$ -Ecke trifft dies nur auf den Kreiskegel zu. Wir untersuchen deshalb auch zu Testzwecken das Kanten-Problem eines halb-unendlichen Risses

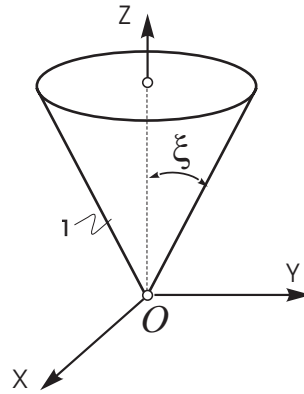


ABBILDUNG 3.1: Kegel mit Kreisquerschnitt.

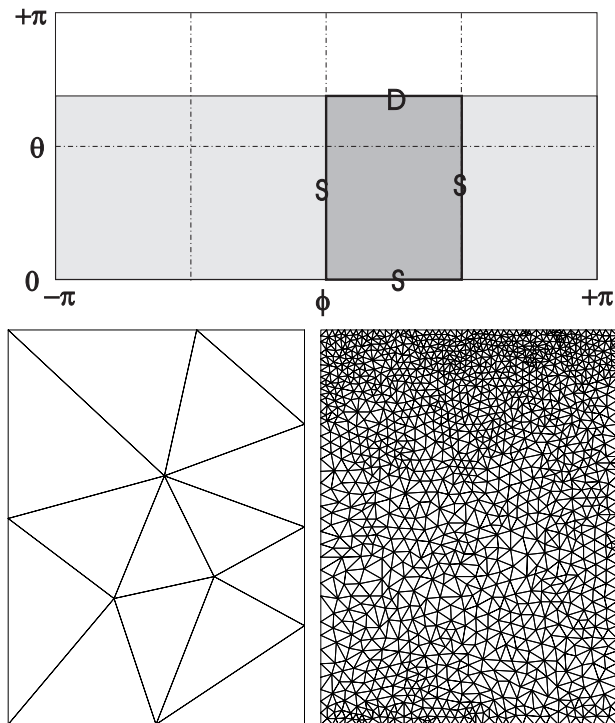


ABBILDUNG 3.2: Gebiet  $\mathcal{S}$ , welches für den Kreiskegel mit DIRICHLET-Randdaten und  $\xi = 2/3\pi, \nu = 0.3$  diskretisiert werden muss (oben), sowie für die Berechnungen in Tabelle 3.2 benutzte Anfangs- und Endtriangulierung dieses Gebietes (unten).

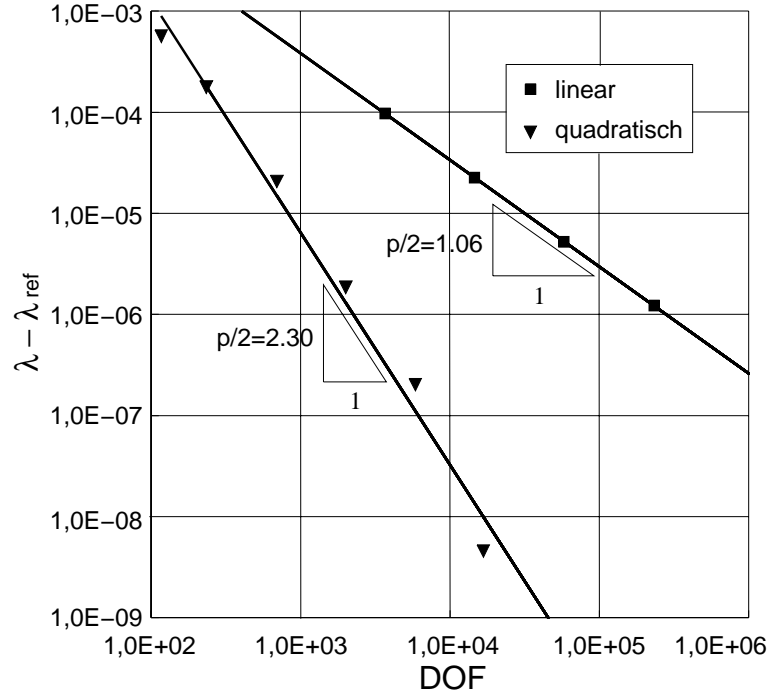


ABBILDUNG 3.3: Konvergenzrate  $|\lambda - \lambda_{\text{ref}}| \sim h^p$  für den Kreiskegel mit  $\xi = 2/3\pi, \nu = 0.3$  und DIRICHLET-Randdaten.

| DOF   | $\lambda$    | $\ \mathbf{u} - \mathbf{u}^h\ _E / \ \mathbf{u}\ _E$ |
|-------|--------------|------------------------------------------------------|
| 117   | 0.5425262237 | 1.79e-02                                             |
| 234   | 0.5417832380 | 7.41e-03                                             |
| 696   | 0.5419398018 | 2.09e-03                                             |
| 2010  | 0.5419586011 | 6.57e-04                                             |
| 5868  | 0.5419602526 | 2.16e-04                                             |
| 16746 | 0.5419604594 | 7.41e-05                                             |
| exakt | 0.5419604548 | $\sim h^{2.20}$                                      |

TABELLE 3.2: Kleinster Singulärexponent  $\lambda$ , sowie zugehöriger Relativfehler für den Kreiskegel mit  $\xi = 2/3\pi, \nu = 0.3$  und DIRICHLET-Randdaten. Quadratische Approximation mit adaptiver Netzverfeinerung. Die im ersten bzw. letzten Schritt benutzte Diskretisierung ist im Bild 3.2 aufgeführt.

im elastischen Raum. Es wird immer eine Diskretisierung mit quadratischen, sub-parametrischen Dreieckselemente verwendet, sowie eine anschliessende adaptive Netzverfeinerung, die als  $h$ -Methode implementiert wurde. Die Ergebnisse werden gegebenenfalls mit den Daten einer linearen Approximation mit gleichmässiger Netzverfeinerung verglichen.

Wir fangen zuerst mit dem Problem einer konischen Nut mit Kreisquerschnitt  $(\theta, \varphi) \in (0, \xi) \times (-\pi, +\pi)$  mit homogenen DIRICHLET-Daten am Rand  $\theta = \xi$  an, Bild 3.1. Es ist bekannt, dass das zugehörige Operatorbündel im Intervall  $\Re(\lambda) \in (-0.5, 1.0)$  exakt drei reelle Eigenwerte besitzt, welche durch das Lösen einer transzendenten Gleichung berechnet werden können, siehe [13, 53] bzw. [52], Seite 97ff. Wir nehmen hier als Referenz die sehr genaue, quasi-analytische Lösung, die von Dr. T. Apel, Universität Chemnitz auf der Basis der in [13] vorgestellten Methode berechnet wurde.

Aufgrund der vorhandenen Symmetrie muss nur ein-Viertel des Gebietes diskretisiert werden:  $(\theta, \varphi) \in (0, \xi) \times (0, \pi/2)$ , Bild 3.2 oben. Die drei Eigenwerte werden in unterschiedlichen Rechenschritten mit entsprechenden Symmetrie- bzw. Antisymmetrie-Randbedingungen in der  $x$ - $z$  und der  $y$ - $z$  Ebene berechnet, d.h. die entsprechenden Verschiebungskomponenten an den Rändern  $\varphi = 0$ ,  $\varphi = +\pi/2$  und  $\theta = 0$  werden gleich Null gesetzt. Die Randbedingungen am künstlichen Rand  $\theta = 0$  in den restlichen Richtungen sind im Falle eines homogenen Problems wie hier irrelevant, es können z.B. homogene NEUMANN Randdaten vorgegeben werden, es können jedoch auch Starrkörper-Koppelbedingungen  $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 = \dots = \mathbf{u}_m$  für die  $m$  Knoten am Pol vorgegeben werden [29].

Zur Abschätzung der Genauigkeit der Methode wurde für  $\xi = 120^\circ, \nu = 0.3$  die  $h$ -Methode mit einer Reihe von adaptiven Verfeinerungsschritten angewendet, die Werte des berechneten kleinsten Exponenten  $\lambda$  sind in Tabelle 3.2 aufgeführt. Diese entsprechen einer Lösung, die symmetrisch in der  $x$ - $z$  Ebene und anti-symmetrisch in der  $y$ - $z$  Ebene ist. Im Bild 3.2 unten ist die benutzte Diskretisierung im ersten bzw. letzten Schritt des adaptiven Prozesses aufgeführt. Wie im Fall eines Problems ohne Kanten zu erwarten, ergab sich eine quasi-gleichmässige Netzverfeinerung.

Aus Tabelle 3.2 kann entnommen werden, dass  $\lambda$  mit sehr hoher Genauigkeit berechnet wurde — bei der anfänglichen groben Diskretisierung mit wenigen Elementen wurden zwei, bei der feinsten Diskretisierung acht Stellen des Exponenten exakt ermittelt. Diese Genauigkeit wurde auch mit einer sehr hohen Konvergenzrate von 4.60 erreicht, wie aus Bild 3.3 zu entnehmen ist, d.h. der absolute Fehler  $|\lambda - \lambda_{\text{ref}}|$  war proportional zu  $h^{4.60}$ . Im Vergleich mit einer linearen Approximation scheint dies eine wesentliche Verbesserung zu sein. Der Wert für die Konver-

| $\pi h^{-1}$ | DOF    | Band-<br>breite | $k$ | $tol$   | Methode für die<br>Lösung von (3.64) | Lösung von (3.53) | Zeit für<br>$\mathbf{P} \rightarrow \mathbf{LU}$ | Speicher-<br>bedarf, MB |
|--------------|--------|-----------------|-----|---------|--------------------------------------|-------------------|--------------------------------------------------|-------------------------|
| 60           | 3690   | 96              | 14  | 1.0e-06 | LU                                   | 1.1s              | 0.7s                                             | 6.3                     |
| 120          | 14580  | 183             | 15  | 1.0e-07 | LU                                   | 7.7s              | 5.6s                                             | 32.5                    |
| 240          | 57960  | 363             | 17  | 1.0e-07 | LU                                   | 55.4s             | 44.8s                                            | 160.1                   |
| 480          | 231840 | 1443            | 20  | 1.0e-07 | LU                                   | 6m:51.4s          | 5m:54.5s                                         | 769.9                   |
| 480          | 231840 | 1443            | 20  | 1.0e-07 | ILU(0)+CG                            | 2h:00m:43.7s      | —                                                | 244.1                   |
| 480          | 231840 | 1443            | 20  | 1.0e-07 | ILU(4)+CG                            | 1h:01m:44.0s      | —                                                | 364.3                   |
| 480          | 231840 | 1443            | 20  | 1.0e-07 | ILU(8)+CG                            | 48m:23.4s         | —                                                | 500.5                   |

TABELLE 3.3: Benutzte Computer-Ressourcen für die Berechnung des kleinsten Eigenwertes  $\lambda$  bei dem Kreis-  
gelproblem mit  $\xi = 2/3\pi$ ,  $\nu = 0.3$  und DIRICHLET-Randdaten. Lineare Approximation mit unformer Netzver-  
feinerung.  $k$  – Dimension des benutzten KRYLOV Unterraums,  $tol$  – ARNOLDI Abbruch-Kriterium, (das PCG  
Abbruch-Kriterium wurde immer gleich  $tol/10$  gewählt). Die angegebenen CPU-Zeiten beziehen sich auf einer  
IBM RS-6000 mit 77 MHz Power-2 Prozessor und 2 GB RAM.

genzordnung eines linearen Approximationsansatzes  $h^{2.12}$  (Bild 3.3) ist in guter Übereinstimmung mit der theoretischen Abschätzung  $h^2$  [4]. Die Verdoppelung bei quadratischer Approximation scheint plausibel, jedoch existieren hierzu keine weitergehenden theoretischen Untersuchungen.

Um einen Überblick über die Effizienz der Methode zu bekommen, wurde eine Serie von Berechnungen am selben Problem mit uniformer Netzverfeinerung und linearer Approximation durchgeführt. Der Netzparameter  $h$  wurde dabei in jedem Schritt halbiert. Die für die Berechnungen des kleinsten Exponenten gebrauchten Computer-Ressourcen sind in Tabelle 3.3 aufgeführt.

Wie zu erwarten war, vervierfachte sich die Anzahl der Freiheitsgrade (DOF) in jedem Schritt näherungsweise. Da alle diskreten Probleme in dem Arbeitsspeicher passten, wurde zunächst die Variante getestet, bei der Gleichung (3.64) durch eine einmalige direkte LU-Faktorisierung mit anschliessender mehrmaliger Rückeinsetzung gelöst wurde. Wie aus der Tabelle zu entnehmen ist, war diese Vorgehensweise sehr effektiv — das grösste Problem mit ca. eine Viertelmillion Freiheitsgraden wurde in knapp 7 Minuten berechnet<sup>2</sup>, allerdings wurden dafür auch ca. 770 MB vom Arbeitsspeicher für die LU-Faktorisierung benutzt. Alle anderen Probleme brauchten zwischen 1 Sekunde und knapp 1 Minute, dabei wurde der grösste Teil der Rechenzeit für die LU-Faktorisierung benutzt.

Die Tabelle zeigt ausserdem, dass die Variante mit der kompletten PCG-Lösung von Gleichung (3.64) bei jedem ARNOLDI Schritt zwar den erforderlichen Speicherplatzbedarf erheblich verringert (kein fill-in, da keine LU-Faktorisierung), dies jedoch nur auf Kosten der Rechenzeit — es wurden bis zu 2 Stunden für die Berechnungen des grössten Problems gebraucht. Für Probleme dieser Grössenordnung, die in dem Arbeitsspeicher passen, ist demnach die Variante mit der LU-Zerlegung von  $\mathbf{P}$  zu bevorzugen. Falls nicht ausreichend Arbeitsspeicher zur Verfügung steht, kann eine interessante Alternative darin bestehen, zwar die PCG Variante zu benutzen, bei der ILU-Vorkonditionierung jedoch einen fill-in gegebenem Grades zuzulassen und zwar so, dass das Problem gerade noch in dem Arbeitsspeicher passt. In Tabelle 3.3 ist diese Variante mit ILU(0,4,8)+CG bezeichnet, damit ist gemeint, dass das Auffüllen von Matrixeinträgen in der nullten, vierten bzw. achten Generation zugelassen wird. Damit ist ein kontinuierlicher Übergang zwischen der LU und der PCG Variante möglich, so dass eine an die Problemgrösse angepasste Lösungsstrategie gewählt werden kann.

Die aufwendige PCG-Alternative hat sicherlich damit zu tun (was in den Tests

---

<sup>2</sup>Die angegebenen CPU-Zeiten beziehen sich auf einer IBM RS-6000 mit 77 MHz Power-2 Prozessor und 2 GB RAM.

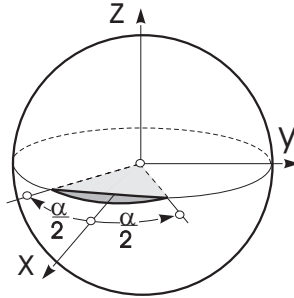


ABBILDUNG 3.4: Der halb-unendliche, ebene Riss im  $\mathbb{R}^3$ .

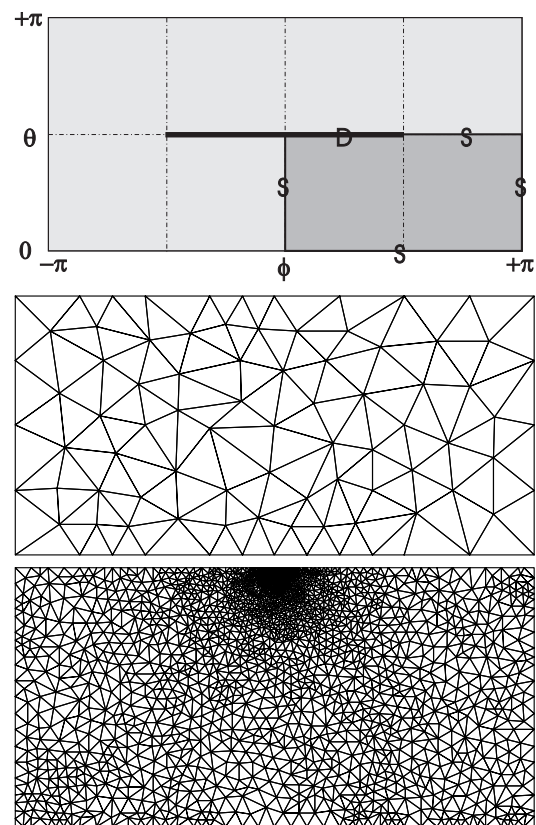


ABBILDUNG 3.5: Gebiet  $\mathcal{S}$ , welches für den halb-unendlichen, ebenen Riss mit DIRICHLET-Randdaten und  $\alpha = \pi, \nu = 0.3$  diskretisiert werden muss (oben), sowie für die Berechnungen in Tabelle 3.4 benutzte Anfangs- und Endtriangulierung dieses Gebietes (mitte, unten).



auch bestätigt wurde), dass die unvollständige LU-Zerlegung als Vorkonditionierer nicht geeignet ist. Eine interessante Aufgabe für die Zukunft würde darin bestehen, einen an das konkrete Problem angepassten Vorkonditionierer zu entwickeln, welcher die Effizienz der Lösung weiter steigern würde.

Wir betrachten als nächstes den halb-unendlichen ebenen Riss im  $\mathbb{R}^3$ , Bild 3.4. Obwohl dies ein reines Kantenproblem darstellt (die Kante ist die Rissfront), ist es als Benchmark für den Fall nicht-glatte Winkelfunktionen geeignet, da eine analytische Lösung existiert [85]. Die drei Singulärexponenten  $\lambda_{1,2,3} = 0.5$  sind die einzigen nicht-trivialen Lösungen im Intervall  $\Re(\lambda) \in (-0.5, 1.0)$ , diese hängen ausserdem nicht von den elastischen Eigenschaften des Problems ab [85].

Aufgrund der Symmetrie kann erneut nur ein Viertel des Problems betrachtet werden, und das zu diskretisierende Gebiet ist  $(\theta, \varphi) \in (0, \pi/2) \times (0, \pi)$  mit entsprechenden symmetrischen bzw. anti-symmetrischen Randdaten, Bild 3.4. Der Riss befindet sich bei  $(\theta, \varphi) \in \{\pi/2\} \times (0, \pi/2)$  und wird als fixiert (DIRICHLET-Riss) betrachtet.

Für die Abschätzung des Fehlers wird erneut eine  $h$ -Methode mit adaptiv verfeinerten Netzen verwendet, siehe Bild 3.5. Wie im Falle eines Problems mit Kanten zu erwarten ist, führte die adaptive Netzverfeinerung innerhalb weniger Schritte zu einer starken Konzentration des Netzes in der Umgebung der Kante (die Rissfront). Die Ergebnisse für den Exponenten  $\lambda$  in Tabelle 3.4 zeigen, dass diese Konzentration erneut die hohe Genauigkeit der Berechnungen sicherstellt — die Exponenten wurden mit bis zu 6 exakte Stellen bei dem feinsten Netz erhalten. Die Konvergenzrate von  $h^{5.8}$  in Bezug auf  $|\lambda - \lambda_{\text{ref}}|$  (Bild 3.6) ist ebenfalls beeindruckend, besonders für ein Problem mit zusätzlichen Kanten. Im Bild 3.6 sind ausserdem zum Vergleich Ergebnisse einer linearen Approximation mit gleichmässiger bzw. lokaler *a-priori* Verfeinerung aufgeführt, wie sie ohne Fehlerschätzung und Adaptivität typischerweise erzielt werden. Diese stimmen gut mit den theoretisch erwarteten Werten für die Konvergenzrate bei linearer Approximation überein [4].

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass durch die vorgestellte  $h$ -Methode sehr effektiv Singularitäten in der Lösung linear-elastischer Aufgaben berechnet werden können — Probleme mit bis zu einer Viertelmillion Freiheitsgraden wurden in wenigen Minuten gelöst, wobei die berechneten Singulärexponenten auf 6 und mehr Stellen genau bestimmt werden konnten. Dies gilt dabei sowohl für Probleme ohne Kanten, bei denen die Winkelfunktionen glatt sind, als auch für Probleme mit zusätzlichen Kanten, bei denen die Winkelfunktionen ebenfalls Singularitäten enthalten.

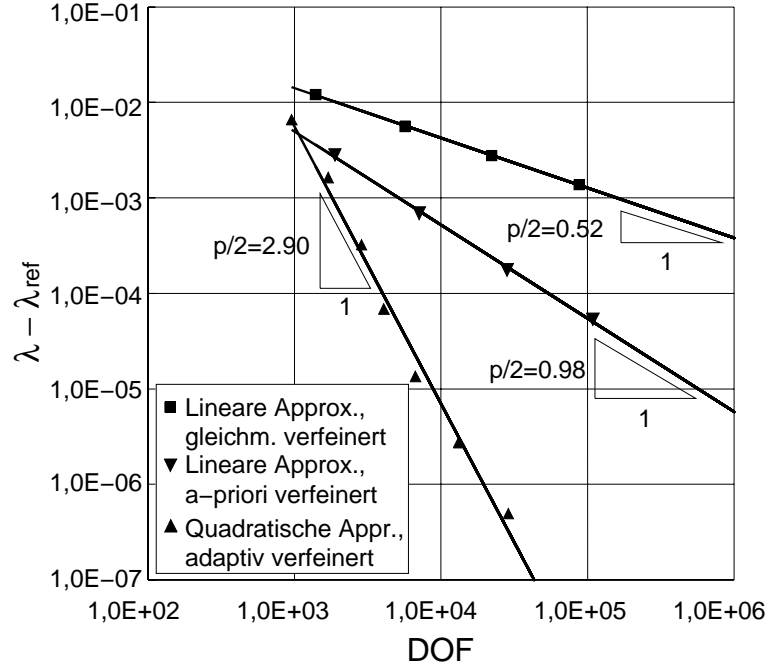


ABBILDUNG 3.6: Konvergenzrate  $|\lambda - \lambda_{\text{ref}}| \sim h^p$  für den halb-unendlichen, ebenen Riss mit  $\alpha = \pi, \nu = 0.3$  und DIRICHLET-Randdaten.

| DOF   | $\lambda$    | $\ \mathbf{u} - \mathbf{u}^h\ _E / \ \mathbf{u}\ _E$ |
|-------|--------------|------------------------------------------------------|
| 957   | 0.5066093660 | 6.81e-02                                             |
| 1698  | 0.5016316246 | 3.31e-02                                             |
| 2871  | 0.5003219796 | 1.67e-02                                             |
| 4077  | 0.5000687316 | 7.87e-03                                             |
| 6693  | 0.5000135116 | 3.57e-03                                             |
| 13176 | 0.5000027218 | 1.49e-03                                             |
| 28800 | 0.5000004924 | 6.11e-04                                             |
| exakt | 0.5000000000 | $\sim h^{2.87}$                                      |

TABELLE 3.4: Kleinster Singulärexponent  $\lambda$ , sowie zugehöriger Relativfehler für den halb-unendlichen, ebenen Riss mit  $\alpha = \pi, \nu = 0.3$  und DIRICHLET-Randdaten. Quadratische Approximation mit adaptiver Netzverfeinerung. Die im ersten bzw. letzten Schritt benutzte Diskretisierung ist im Bild 3.5 aufgeführt.

# Kapitel 4

## Numerische Beispiele

In diesem Kapitel werden einige praktisch-relevante Beispiele von Problemen mit Singularitäten in der Lösung behandelt, darunter auch solche mit inhomogenen und anisotropen Materialeigenschaften. Die Singulärexponenten und die Winkelfunktionen werden in Abhängigkeit dieser Materialdaten und geeigneten geometrischen Parametern berechnet. Diese sowie weitere Beispiele können in [29, 30, 33, 31, 32, 34] gefunden werden.

Für die Berechnungen wird typischerweise eine Serie von verfeinerten Netzen verwendet, bei der der relative Fehler des feinsten Netzes in der Energie-Norm weniger als 1% beträgt. Dies führt zu Netzen mit ca. 7000 Freiheitsgraden, die sehr effektiv mit der LU-Variante des Verfahrens aufgelöst werden können. Mit einem Abbruchkriterium von  $10^{-4}$  für den ARNOLDI-Prozess (welches kleiner ist als die erwartete Genauigkeit für  $\lambda$  und deshalb zur Reduzierung des Rechenaufwands verwendet werden kann), sowie 40 für die Dimension des KRYLOV-Unterraums können die ersten 9 Eigenwerte eines Problems normalerweise in nur einem ARNOLDI-Schritt berechnet werden. Diese haben typischerweise 3 exakte Stellen.

### 4.1 Der keilförmige Riss

Wir betrachten zunächst einen flachen Riss mit V-förmiger Rissfront in  $\mathbb{R}^3$ . Die Singulärexponenten werden als Funktion des Öffnungswinkels der Rissfront sowie der Materialdaten bestimmt. Der Riss befindet sich bei  $(\theta, \varphi) \in \{\pi/2\} \times (-\alpha/2, +\alpha/2)$  und ist spannungsfrei. Aus Gründen der Symmetrie wird nur die

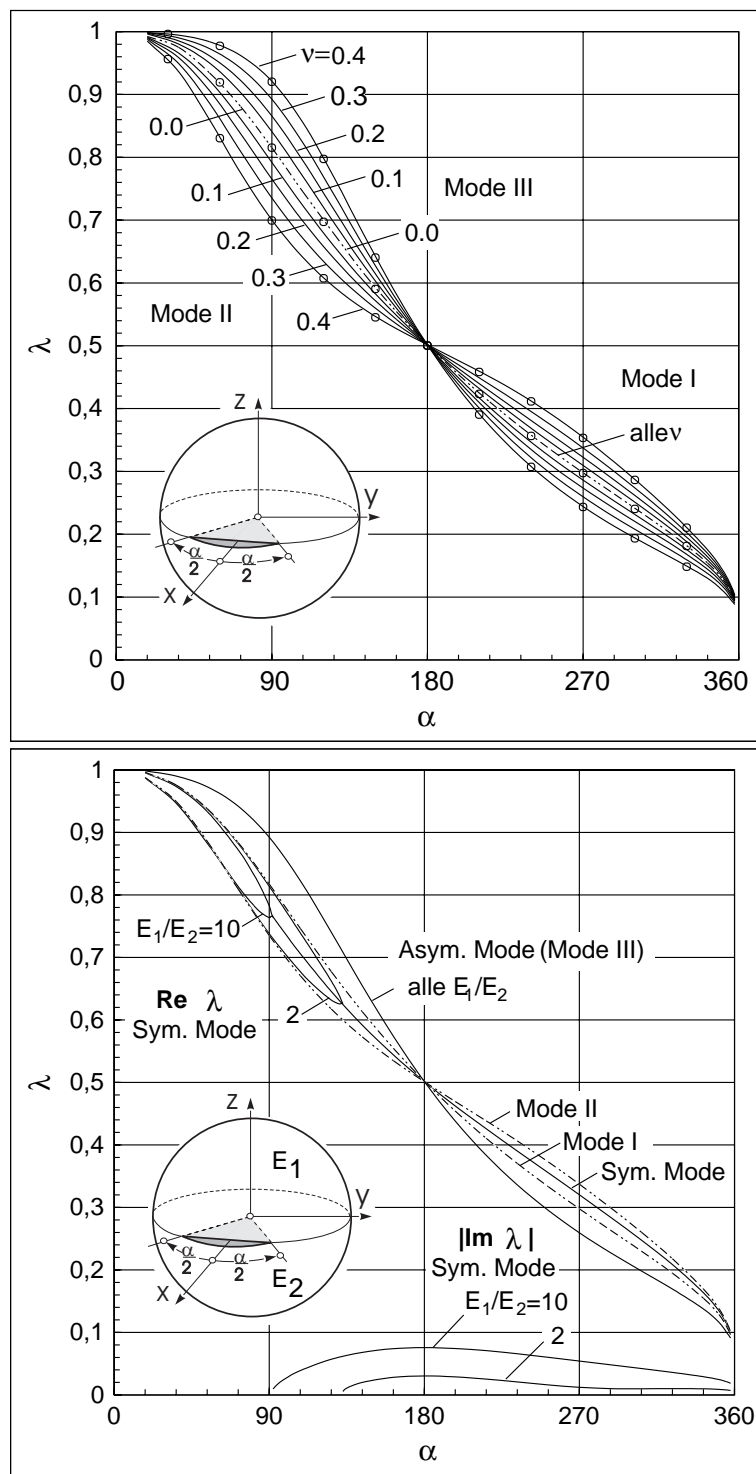


ABBILDUNG 4.1: Der keilförmige Riss bei homogenem (oben) und inhomogenem Material (unten). Die Referenzlösung findet man in [37].

Hälfte des Bereiches  $(\theta, \varphi) \in (0, \pi) \times (0, \pi)$  diskretisiert (obwohl ein Viertel ausreichend wäre), damit die selben Netze auch für den inhomogenen Fall benutzt werden können, bei dem verschiedene Materialien in den Gebieten  $\theta \in (0, \pi/2)$  und  $\theta \in (\pi/2, \pi)$  auftreten. Wir benutzen entsprechende Randbedingungen an den Symmetrieflächen.

Im homogenen Fall hängen die Exponenten nur von der Querkontraktionszahl  $\nu$  ab. Im Intervall  $\Re(\lambda) \in (-0.5, 1.0)$  treten insgesamt drei nicht-triviale  $\lambda$ -Werte auf (Bild 4.1), die mit den Rissmoden I, II und III assoziiert werden können. Die Exponenten sind im gesamten  $\alpha$ -Bereich und für alle  $\nu$  reell und positiv. Für kleine Winkel  $\alpha < \pi$  dominieren die Mode-II-Exponenten, für grosse Winkel  $\alpha > \pi$  die Mode-III-Exponenten. Für  $\nu = 0$  fallen die Exponentenkurven aller drei Moden in eine Kurve zusammen, die identisch ist mit der Kurve für die Mode-I-Exponenten für beliebige  $\nu$ -Werte. Diese Ergebnisse stimmen mit den Daten aus [37] und [55] gut überein. Sie bestätigen ebenfalls die Asymptotik

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \lambda(\alpha) = 1, \quad \lim_{\alpha \rightarrow 2\pi} \lambda(\alpha) = 0, \quad (4.1)$$

mit jeweils horizontaler bzw. vertikaler Tangente der Kurven, welche aufgrund theoretischer Überlegungen in [63] abgeleitet wurde.

Im Bild 4.1 sind ebenfalls Ergebnisse für den inhomogenen Fall aufgeführt. Wir betrachten den obigen Riss im (perfekten) Interface zweier Materialien mit  $\nu = 0.3$  und  $E_1/E_2 = 2$  bzw. 10. Da nun keine entsprechende Symmetrie mehr existiert, können die Moden nicht mit I/II/III bezeichnet werden, sondern lediglich mit “symmetrisch” bzw. “anti-symmetrisch” in Bezug auf eine Ebene senkrecht zur Rissebene. Bei einem gewissen Wert für den Winkel  $\alpha$ , der von  $E_1/E_2$  abhängt, treffen sich die Exponentenkurven der beiden symmetrischen Moden. Ab hier treten nun zwei konjugiert-komplexe Exponenten mit gleichem Realteil und betragsmässig gleichem Imaginärteil auf. Der Realteil ist unabhängig von  $E_1/E_2$ , der imaginäre Teil wird mit wachsendem Verhältnis  $E_1/E_2$  betragsmässig grösser. Die anti-symmetrische Lösung bleibt anscheinend unberührt, deren Exponenten sind dieselben, wie beim homogenen Fall.

## 4.2 Der Oberflächenriss

Wir untersuchen als nächstes einen Riss, dessen Front eine freie Oberfläche des Körpers durchstösst. Die dominanten Eigenwerte werden als Funktion des Austrittswinkels und der Materialdaten bestimmt. Dies ist ein besonders wichtiges praktisches Problem, insbesondere aus Sicht der Bruchmechanik, da viele Risse

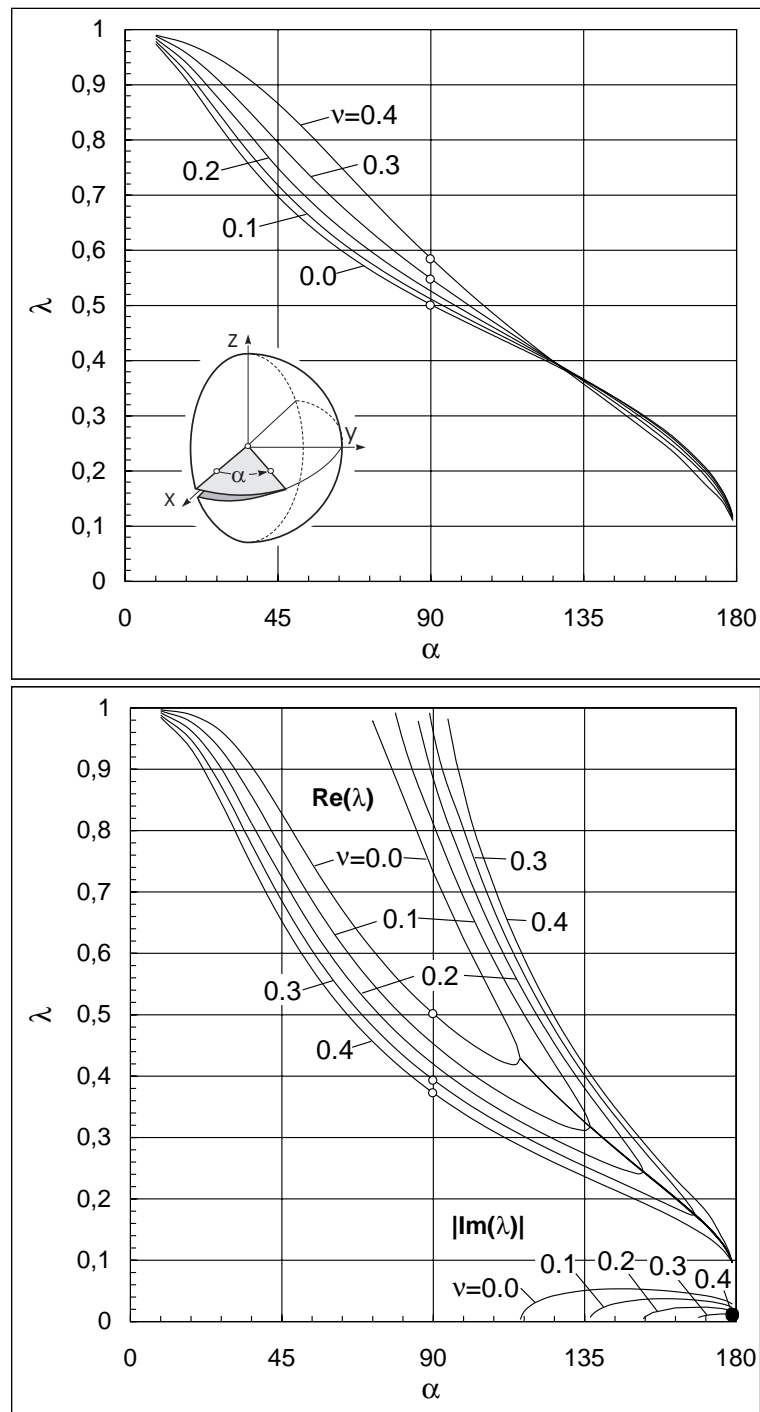


ABBILDUNG 4.2: Der Oberflächenriss, symmetrische (oben) und anti-symmetrische Lösung (unten). Die Referenz-Lösung findet man in [15].

an der Oberfläche eines Bauteils beginnen. Die bruchmechanischen Aspekte dieses Problems werden noch ausführlich in Kapitel 5 diskutiert.

Wir betrachten das Gebiet  $(\theta, \varphi) \in (0, \pi) \times (0, \pi)$ , mit einem spannungsfreien Riss  $(\theta, \varphi) \in \{\pi/2\} \times (0, +\alpha)$ . Die Ebene  $x - z$  bildet die freie Oberfläche. Da eine Symmetrie in Bezug auf die Rissebene nur im homogenen Fall existiert wird das ganze Gebiet diskretisiert. Die Ergebnisse für verschiedene Materialien und Winkel  $\alpha$  sind im Bild 4.2 aufgeführt.

Bezüglich der Rissebene erhalten wir im homogenen Fall eine symmetrische und zwei anti-symmetrische Lösungen (Moden). Die Exponenten der symmetrischen Lösung sind für alle  $\alpha$  und  $\nu$  reell. Die Exponenten der anti-symmetrischen Lösung sind anfangs ebenfalls reell, ab einem bestimmten Winkel  $\alpha_0(\nu)$  treffen sich die Exponentenkurven beider anti-symmetrischen Lösung jedoch, so dass ab hier zwei komplex-konjugierte Exponenten mit gleichem Realteil und betragsmässig gleichem Imaginärteil auftreten. Der reelle Teil ist unabhängig von den Materialeigenschaften, der Imaginärteil wächst betragsmässig für sinkende  $\nu$ -Werte und ist am grössten für  $\nu = 0.0$ .

Die Ergebnisse weisen die Asymptotik

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \lambda(\alpha) = 1, \quad \lim_{\alpha \rightarrow \pi} \lambda(\alpha) = 0, \quad (4.2)$$

für alle drei Moden auf und stimmen gut mit den Daten aus [59, 15, 11, 78, 36] für Teilwerte von  $\alpha$  überein. Eine Diskussion hinsichtlich einiger Unterschiede zu den Ergebnissen in [37] findet man in [29].

Wir betrachten als nächstes einen Oberflächenriss mit geneigter Rissebene (Winkel zwischen Rissebene und Oberfläche  $\beta$ ) und zusätzlich geneigter Rissfront (Winkel in der Rissebene zwischen Rissfront und Oberfläche  $\alpha$ ), Bild 4.3.

Das Gebiet, welches im  $\theta, \varphi$  Raum diskretisiert werden muss, ist

$$(\theta, \varphi) \in \{(0, \pi/2) \times (0, \pi)\} \setminus \{(0, \alpha) \times \beta\}. \quad (4.3)$$

Die Rissflanken  $(\theta, \varphi) \in (0, \alpha) \times \beta$  wurden als spannungsfrei betrachtet. Die Berechnungen wurden mit der adaptiven  $h$ -Methode durchgeführt, so dass für den relativen Fehler  $\bar{\eta}_0 < 1.0\%$  gilt. Konvergenzuntersuchungen haben gezeigt [31], dass die Singulärexponenten damit auf 3 Stellen genau berechnet werden können. Die Berechnungen für  $(\alpha, \beta) \in (\pi/40, 38\pi/40) \times (\pi/40, 20\pi/40)$  und  $\nu = 0.3$  wurden mit einer Sampling-rate von  $\pi/40 = 4.5^\circ$  durchgeführt, ausgewählte Ergebnisse sind im Bild 4.3 aufgeführt.

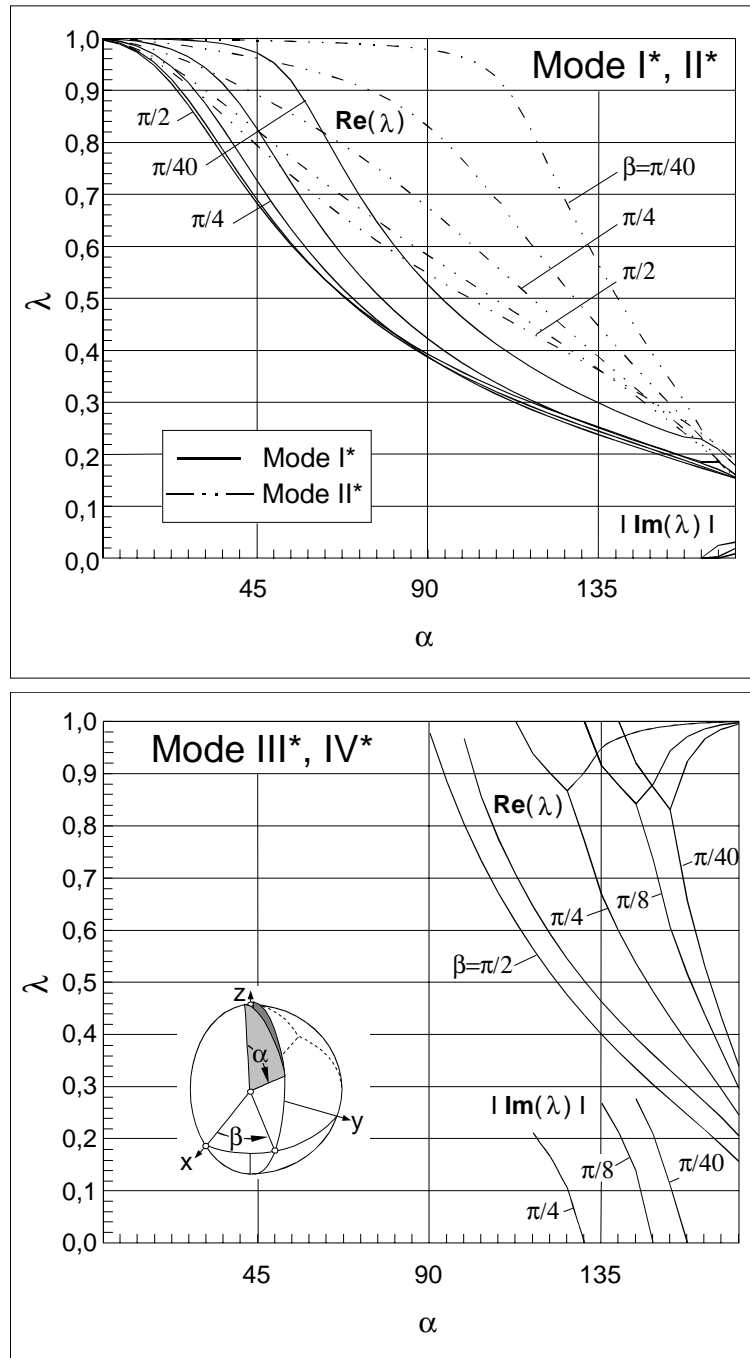


ABBILDUNG 4.3: Singuläre Exponenten  $\lambda$  für den Oberflächenriss mit geneigter Rissebene bzw. Rissfront. Ausgewählte Ergebnisse für  $40\beta/\pi = 1, 5, 10, 15, 20$  und  $\alpha \in (\pi/40, 38\pi/40)$ . Querkontraktionszahl  $\nu = 0.3$ .



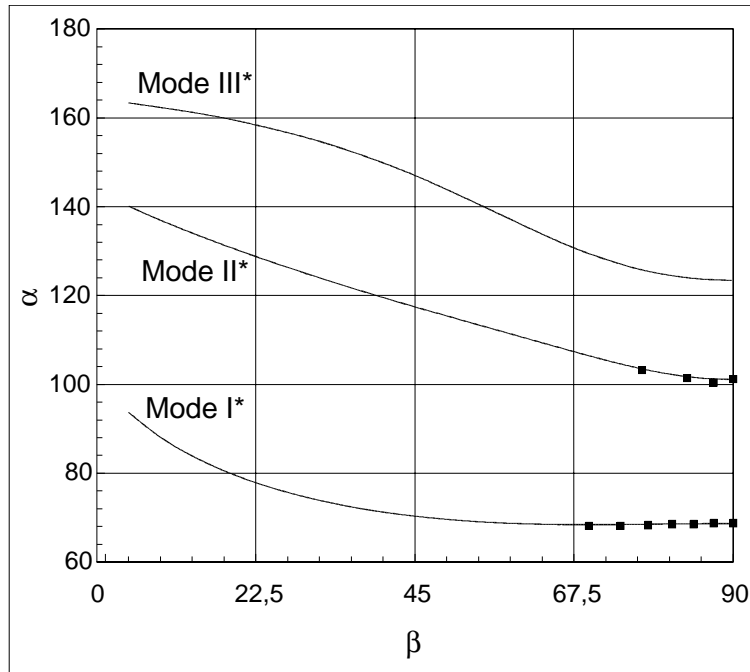


ABBILDUNG 4.4: Kritische Winkelkombination  $\alpha, \beta$  für  $\nu = 0.3$ , bei der der Singulärexponent  $\lambda = 0.5$ . Die Referenzwerte (kleine Rechtecke) beziehen sich auf [11].

Wie aus den Ergebnissen ersichtlich, treten bis zu vier unterschiedliche Moden auf, die wir mit Mode  $I^* - IV^*$  bezeichnen, so dass Mode  $I^*$  dem kleinsten Singulärexponenten  $\Re e(\lambda)$  entspricht usw. Die Exponenten für Mode  $I^*, II^*$  sind fast im gesamten untersuchten  $\alpha, \beta$ -Bereich reell. Die Ausnahme bilden die grossen Werte des Winkels  $\alpha$ , bei denen komplex-konjugierte Exponenten mit gleichem Realteil auftreten. Der Betrag des zugehörigen imaginären Teils ist unten rechts im Bild 4.3 oben aufgeführt.

Die Moden  $III^*, IV^*$  treten nur für  $\alpha > \alpha_0(\beta)$  auf. Die Singulärexponenten sind für kleine Winkel  $\beta$  zwei komplex-konjugierte Werte mit gleichem reellen Teil, der Imaginärteil ist unten rechts im Bild 4.3 unten aufgeführt. Die Kurve der Realteile dieser komplexen Exponenten verzweigt sich im weiteren Verlauf bei einem bestimmten Winkel  $\alpha_1(\beta)$ , so dass nun zwei verschiedene reelle Exponenten auftreten. Dies findet für grosse  $\beta$ -Werte ausserhalb des Bereiches  $-0.5 < \Re(\lambda) < 1.0$  statt, daher ist in diesem Fall im Bild 4.3 unten nur ein reeller Wert aufgeführt.

Die Kombination  $(\alpha, \beta)$ , bei der der Singulärexponent gleich 0.5 ist, hat eine besondere Bedeutung für die Bruchmechanik als Wendepunkt zwischen schwacher

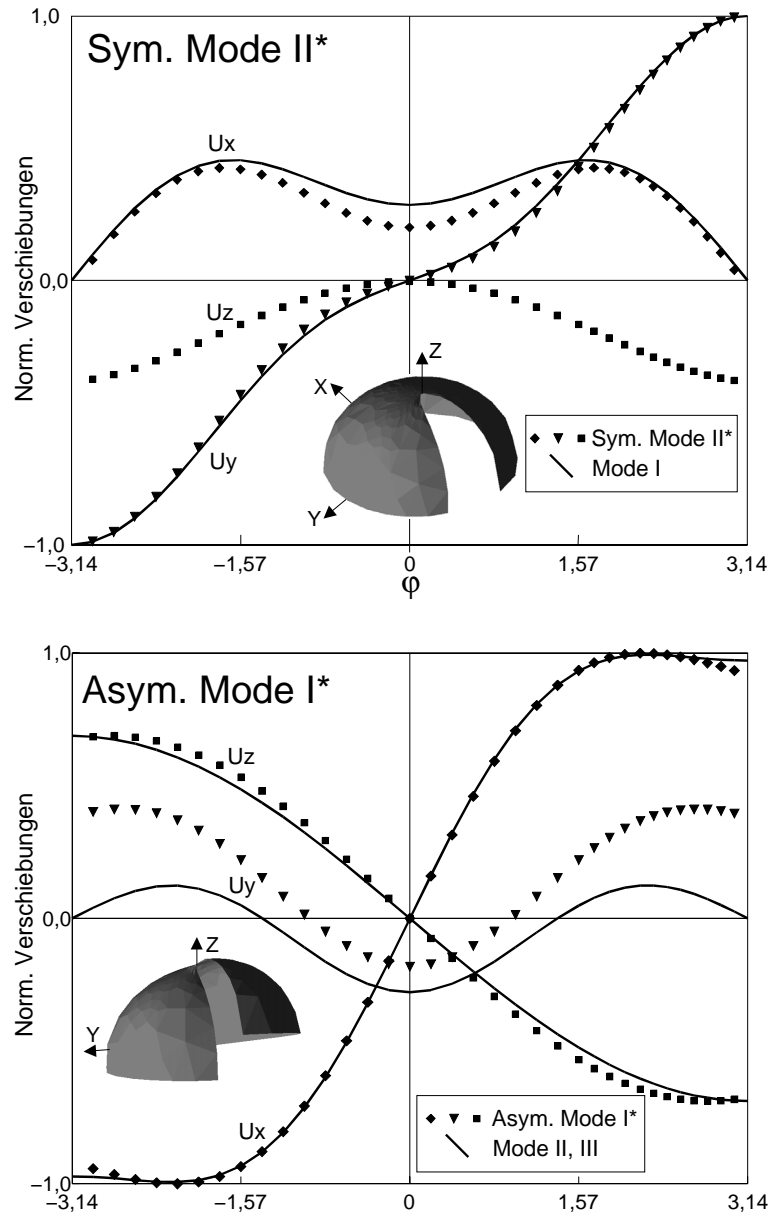


ABBILDUNG 4.5: Vergleich zwischen den räumlichen Moden eines Oberflächenrissproblems ( $\alpha = \pi/2, \beta = \pi/2, \nu = 0.3$ ) mit den bekannten ebenen EVZ-Moden I,II,III. Dargestellt sind die normierten Verschiebungen von Punkten in der  $x$ - $y$ -Ebene (hier die freie Oberfläche) die als  $U_x, U_y, U_z$  bezeichnet wurden. Die Normalisierung wurde mit dem maximalen Verschiebungswert durchgeführt, das Verhältnis zwischen den Normalisierungsfaktoren von Mode II und III beträgt 0.5.  $\varphi$  bezeichnet den Winkel zu der positiven  $x$ -Achse.

und starker Singularität (siehe dazu Kapitel 5). Falls wir  $\alpha$  als eine Funktion von dem Winkel zwischen der Rissebene und der freien Oberfläche  $\beta$  betrachten, hängt der kritische  $\alpha$ -Wert von der Querkontraktionszahl  $\nu$  und natürlich von  $\beta$  ab. Dieser kritische Winkel  $\alpha_c$  bei dem  $\Re(\lambda(\alpha_c)) = 0.5$  wurde für  $\nu = 0.3$  und alle Winkel  $\beta$  durch lineare Interpolation aus den Ausgangsdaten berechnet, die Ergebnisse sind im Bild 4.4 aufgeführt. Da die Kurven im Bild 4.3 keine ausgeprägte Krümmung im Bereich  $\Re(\lambda) \approx 0.5$  aufweisen, wird eine hinreichende Genauigkeit bei der Interpolation erwartet. Ein Vergleich mit den Ergebnissen in [11] (dies sind die einzigen anderen, dem Autor bekannten Ergebnissen zu diesem Problem) bestätigt dies — eine gute Übereinstimmung kann festgestellt werden, siehe die markierten Punkte im Bild 4.4. Die Kurven überschneiden sich bemerkenswerterweise nicht, dies hat zur Folge, dass die Rissausbreitung an der Oberfläche immer nur durch die dominante Singularität kontrolliert wird, (vgl. Kapitel 5).

Da die Moden  $I^* - IV^*$  einen räumlichen Zustand repräsentieren, ist im allgemeinen keine Übereinstimmung zwischen ihnen und den bekannten Moden I,II,III des ebenen Verzerrungs- bzw. Spannungszustandes möglich. Obwohl dies plausibel erscheint, wird der Zustand an der Oberfläche in der Literatur oft als ebener Spannungszustand (ESZ) bezeichnet. Der ESZ ist jedoch kein Grenzfall eines dreidimensionalen Zustands (mit oder ohne Riss), im Unterschied zum ebenen Verzerrungszustand, da er die Kompatibilitätsbedingungen nicht erfüllt [77]. Ausserdem führt der ebene Spannungszustand zu unendlichen grossen Verschiebungen normal zur Oberfläche, was physikalisch gesehen keinen Sinn ergibt [77].

In vielen Arbeiten wird der Zustand an der Oberfläche auch als eine Kombination aus den Moden I/II/III des ebenen Verzerrungszustandes (EVZ) angesehen. Dies kann im allgemeinen ebenfalls nicht zutreffen, da für einen beliebigen  $\alpha, \beta$ -Wert keine entsprechende Symmetrie vorhanden wäre, die den Vergleich von den Moden  $I^* - IV^*$  mit den ebenen Moden I-III erlauben würde. Wir erinnern in diesem Zusammenhang daran, dass die ebenen Moden spezielle Symmetrien hinsichtlich der Rissebene und einer Ebene normal zur Rissfront aufweisen: Mode I ist symmetrisch hinsichtlich beider Ebenen, Mode II ist symmetrisch bezüglich der Ebene normal zur Rissfront aber anti-symmetrisch bezüglich der Rissebene und Mode III ist schliesslich anti-symmetrisch in Bezug auf beide Ebenen. Eine analoge Symmetrie existiert nur für den Fall  $\alpha = \pi/2, \beta = \pi/2$ . Bild 4.5 zeigt jedoch, dass auch hier Mode  $II^*$  *nicht* mit Mode I übereinstimmt (beide sind symmetrisch in diesem Fall): Der Verschiebungssprung über die Rissflanken bezüglich  $U_y$  suggeriert zwar ein Mode-I-Verhalten, aufgrund der Querkontraktion ist im räumlichen Fall jedoch auch eine Verschiebung  $U_z$  präsent, die im ebenen Fall fehlt, Bild 4.5. Beide Moden stimmen nur für  $\nu = 0.0, \alpha = \pi/2, \beta = \pi/2$  überein,

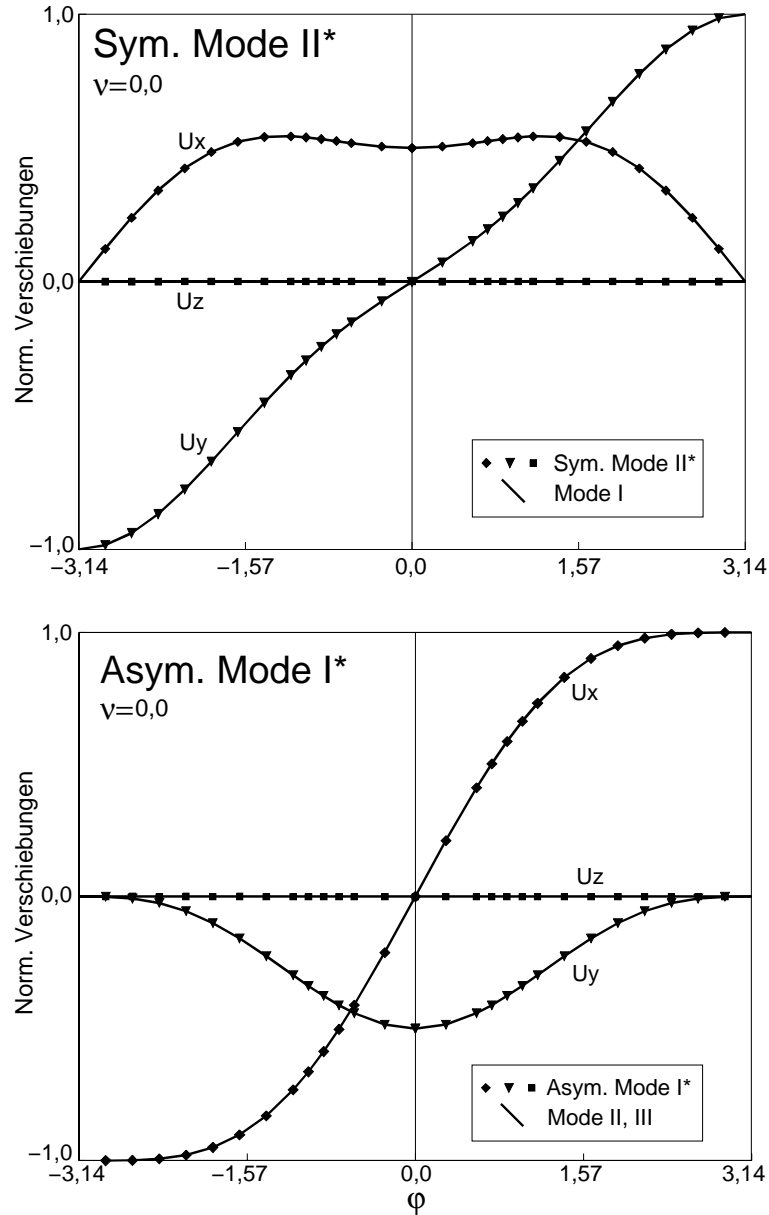


ABBILDUNG 4.6: Vergleich zwischen den räumlichen Moden eines Oberflächenrissproblems ( $\alpha = \pi/2, \beta = \pi/2, \nu = 0.0$ ) mit den bekannten ebenen EVZ-Moden I,II,III. Dargestellt sind die normierten Verschiebungen von Punkten in der  $x$ - $y$ -Ebene (hier die freie Oberfläche) die als  $U_x, U_y, U_z$  bezeichnet wurden. Die Normalisierung wurde mit dem maximalen Verschiebungswert durchgeführt.  $\varphi$  bezeichnet den Winkel zu der positiven  $x$ -Achse.

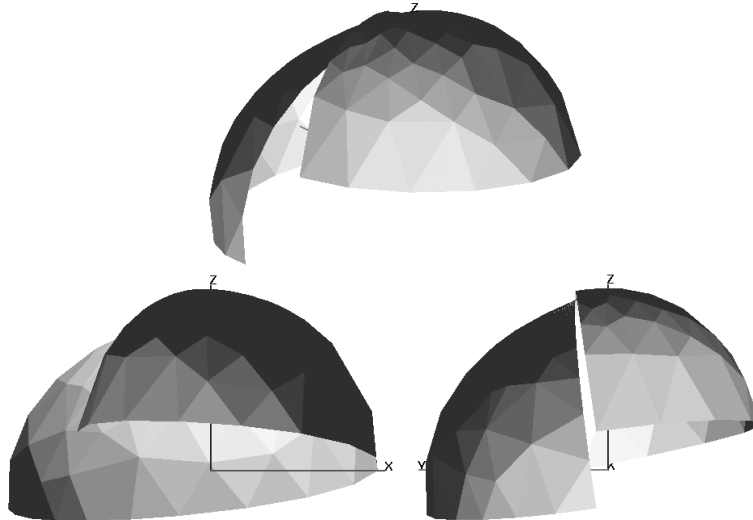


ABBILDUNG 4.7: Mode  $III^*$  mit Singulärexponent  $\lambda = 0.731$  eines Oberflächenrissproblems ( $\alpha = \pi/2, \beta = \pi/2$ ). Querkontraktionszahl  $\nu = 0.0$ . Die Winkelfunktionen (der Winkelanteil an den Verschiebungen der Einheitskugeloberfläche) sind aus verschiedenen Blickpunkten gezeigt.

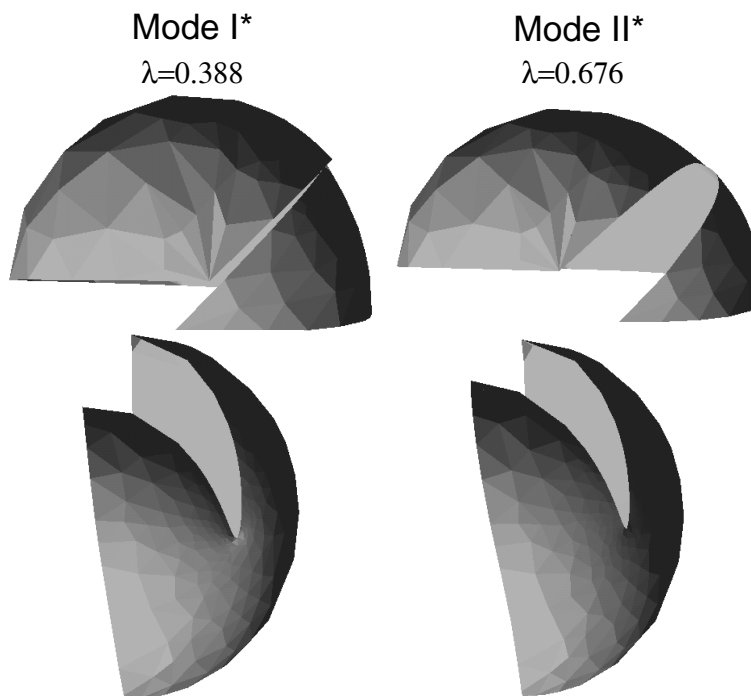


ABBILDUNG 4.8: Die Winkelfunktionen der ersten zwei Moden eines Oberflächenrissproblems mit geneigter Rissebene ( $\alpha = \pi/2, \beta = \pi/4, \nu = 0.3$ ). Die Winkelfunktionen (der Winkelanteil an den Verschiebungen der Einheitskugeloberfläche) sind aus verschiedenen Blickpunkten gezeigt.

was unsere Überlegungen bestätigt, Bild 4.6

Eine andere weitverbreitete Meinung beschreibt Mode  $I^*$  als Kombination aus den EVZ-Moden II und III — der sogenannte “Kopplungseffekt” der Moden an der Oberfläche. Dies könnte jedoch ebenfalls nur im Spezialfall  $\alpha = \pi/2, \beta = \pi/2$  richtig sein, da für andere Winkelkombinationen keine entsprechende Symmetrie präsent ist. Bild 4.5 zeigt jedoch, dass auch hier dies nicht zutrifft: Mode  $I^*$  weist einen räumlichen  $U_y$ -Verschiebungsverlauf auf, welcher an der Oberfläche nicht verschwindet, ganz im Gegensatz zu Mode II, auch wenn der Verschiebungssprung in  $U_z$  und  $U_x$  eine Kombination aus Mode II und III suggeriert. Dieser Effekt ist erneut eine Folge der Querkontraktion und verschwindet für  $\nu = 0.0$ , siehe Bild 4.6, so dass nur in diesem Fall die Moden  $I^*$  und II übereinstimmen. Die Situation für Mode  $III^*$  ist etwas anders — der Unterschied zu Mode III ist auch im Falle  $\nu = 0.0$  vorhanden, siehe Bild 4.7.

Und schliesslich ist für den allgemeinen Fall  $\alpha \neq \pi/2, \beta \neq \pi/2$  keine entsprechende Symmetrie präsent, über die räumlichen Moden mit den ebenen verglichen werden können. Im Bild 4.8 ist als Beispiel der Fall  $\alpha = \pi/2, \beta = \pi/4$  aufgeführt: es sind gleichzeitig Sprünge in allen drei Verschiebungskomponenten  $U_x, U_y, U_z$  zu sehen, was wie eine “Kombination” aus allen drei EVZ-Moden I/II/III aussieht.

Im Hinblick auf die obigen Bemerkungen scheint es inkorrekt, die räumlichen Moden und damit auch den Zustand an der Oberfläche als eben (EVZ oder ESZ oder eine Kombination aus EVZ) zu bezeichnen. Die Moden  $I^* - IV^*$  beschreiben einen räumlichen Zustand, der von EVZ und ESZ unabhängig ist.

### 4.3 Inhomogene, anisotrope Probleme

Wir behandeln in diesem Abschnitt einen Keilkörper aus zwei Materialien, siehe Bild 4.9. Den Öffnungswinkel des Keils bezeichnen wir mit  $\alpha$ , das materielle Interface liegt in der  $x - y$  Ebene. Der Keil ist so orientiert, dass er den Raum-Abschnitt zwischen  $-\alpha/2$  und  $+\alpha/2$  bezüglich der positiven  $x$ -Achse einnimmt.

Wir benutzen für die nachfolgenden Berechnungen ein orthotropes Materialmodell mit folgenden Eigenschaften

$$\begin{aligned} E_1 &= 13.8 * 10^4 \text{ MPa}, & E_2 &= E_3 = 1.45 * 10^4 \text{ MPa}, \\ G_{12} &= G_{13} = G_{23} = 0.586 * 10^4 \text{ MPa}, \\ \nu_{12} &= \nu_{13} = \nu_{23} = 0.21, \end{aligned} \tag{4.4}$$

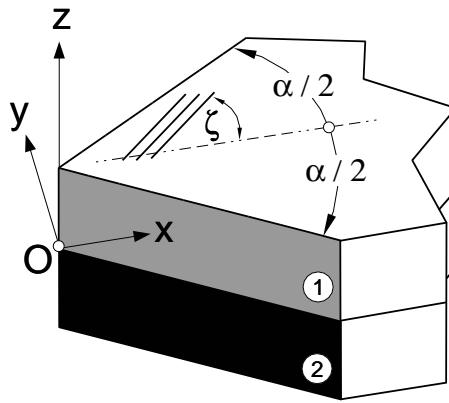


ABBILDUNG 4.9: Keil aus zwei Materialien mit dem Öffnungswinkel  $\alpha$ . Der Winkel  $\zeta$  definiert die Orientierung der Fasern bezüglich der  $x$ -Achse.

welches typisch ist für einige Graphitfaser-verstärkte Komposite. Die Materialkonstanten sind im Materialkoordinatensystem  $(1, 2, 3)$  definiert (siehe Anhang). Wir untersuchen den Effekt unterschiedlicher Faser-Orientierungen und führen deshalb den Winkel  $\zeta$  von der positiven  $x$ -Achse zur Faserrichtung 1 ein, welcher eine Drehung um die  $z$ -Achse definiert. Folgende Fälle für  $[\zeta_1/\zeta_2]$  werden betrachtet:

- Winkelschicht Laminate für  $[\pm 30^\circ], [\pm 45^\circ], [\pm 60^\circ]$  und alle Winkel  $\alpha \in (0, 2\pi)$ .
- Kreuzschicht Laminate für  $[0^\circ/90^\circ], [-30^\circ/+60^\circ]$  und alle Winkel  $\alpha \in (0, 2\pi)$ .
- Ein Vergleich zwischen den Fällen  $\alpha = \pi/2$  und  $\alpha = \pi$  für alle Faser-Orientierungen  $[\pm\zeta]$ ,  $\zeta \in (0, \pi/2)$ .

### 4.3.1 Winkelschicht Laminate

Wir betrachten zunächst verschiedene Faser-Orientierungen  $[\pm\zeta]$  in beiden Schichten, ein solches Material wird üblicherweise als Winkelschicht Laminate bezeichnet. Das Gebiet, welches diskretisiert werden muss ist

$$(\theta, \varphi) \in (0, \pi) \times (-\alpha/2, +\alpha/2). \quad (4.5)$$

Beide Sub-Gebiete mit den unterschiedlichen Faserorientierungen liegen im Winkelbereich  $\theta \in (0, \pi/2)$  und  $\theta \in (\pi/2, \pi)$ . Es werden homogene NEUMANN - Randbedingungen definiert, d.h. der Keil ist spannungsfrei.

Die Exponenten  $\lambda$  für verschiedene Winkel  $\alpha$  und  $\zeta$  sind im Bild 4.10 oben aufgeführt. Sie sind im gesamten Bereich reell und positiv.

Im Bereich  $\alpha \in (0, \pi)$  tritt nur ein Exponent  $\lambda < 1$  auf, der sehr nahe an 1.0 liegt, so dass die Singularität relativ schwach ist. Wir bezeichnen die entsprechende Lösung mit Mode  $IV^*$ . Im Bereich  $\alpha \in (\pi, 2\pi)$  treten jedoch weitere Eigenwerte auf, zwei davon unmittelbar nach  $\alpha = \pi$ . Die entsprechenden Moden wurden mit  $I^*, II^*, III^*$  bezeichnet, damit sie nicht mit den bekannten Moden I,II,III verwechselt werden, wobei Mode  $I^*$  zu dem kleinsten Singulärexponenten gehört usw. Die Singulärexponenten von den Moden  $I^*, II^*, III^*$  sind viel kleiner (und damit stärker) als die von Mode  $IV^*$ . Deren Wert erreicht ausserdem sehr schnell 0.5, was der Singularität eines Risses entspricht. Diesbezüglich ist die scharfe konkave Kante einer Laminat-Platte genauso gefährlich wie ein Riss, da sie ähnliche Spannungsgradienten aufweist, was sicherlich eine hohe Delaminationsgefahr bedeutet.

Wie aus Bild 4.10 oben ersichtlich, spielt die Faser-Orientierung auch eine wichtige Rolle — je grösser die Differenz zwischen den Faserwinkeln in beiden Schichten ist, desto stärker wird die Singularität. Dies gilt jedoch nicht für Mode  $II^*$ , deren Exponent ist von der Faserorientierung unabhängig.

Die Winkelfunktionen der Moden  $I^* - III^*$  für  $\alpha = 1.5\pi, \zeta = \pm 45^\circ$  sind im Bild 4.11 aufgeführt. Gezeigt wird die deformierte Einheitskugel (jedem Punkt der Einheitskugeloberfläche wurde die berechnete Verschiebung zugeordnet). Die Verschiebungen wurden ausserdem mit einem Faktor  $> 1.0$  skaliert, damit die Deformation besser sichtbar wird.

Mode  $I^*$  scheint vor allem eine Verschiebung der Keilflächen in entgegengesetzter  $y$ -Richtung aufzuweisen, ähnlich wie bei einem Mode-I-Riss. Aufgrund der Anisotropie ist diese Deformation jedoch mit einer gleichzeitigen Verschiebung in  $z$ -Richtung verbunden. Analog ähnelt das Verschiebungsfeld von Mode  $III^*$  dem eines Mode-II-Risses (anti-symmetrische in-plane Verschiebung der Keilflächen). Mode  $II^*$  zeigt eine ausschliessliche  $z$ -Verschiebung der Keilflächen in entgegengesetzte Richtung und würde somit einem Mode-III-Riss entsprechen. Dies kann eine Erklärung für die Unabhängigkeit des entsprechenden Mode- $II^*$ -Singulärexponenten von  $\zeta$  bedeuten — eine in-plane Variation von  $\zeta$  kann die reine out-of-plane Lösung nicht beeinflussen.



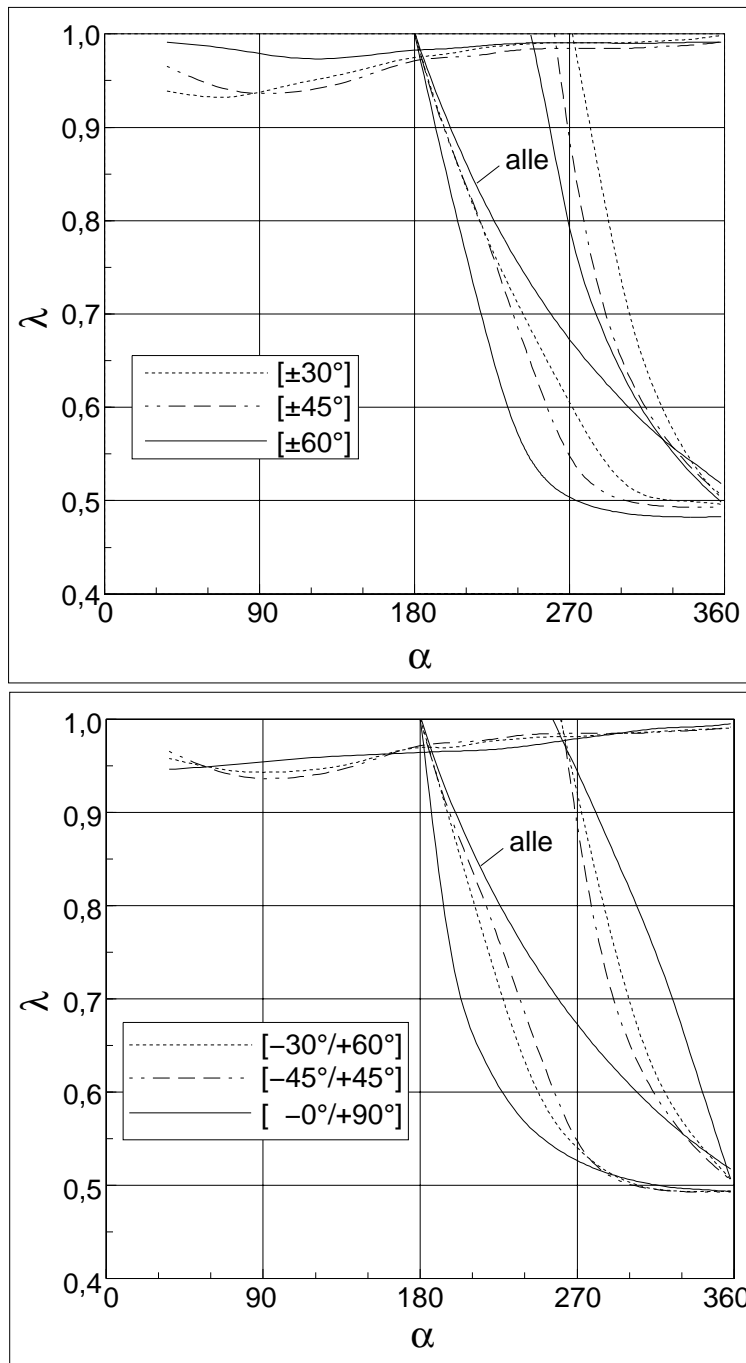


ABBILDUNG 4.10: Eigenwerte  $\lambda$  in Abhängigkeit des Keilwinkels  $\alpha$  für verschiedene Winkelschicht Laminate  $[\pm\zeta]$  (oben) und Kreuzschicht Laminate  $[-\zeta_1/+ \zeta_2]$ ,  $\zeta_1 + \zeta_2 = \pi/2$  (unten).

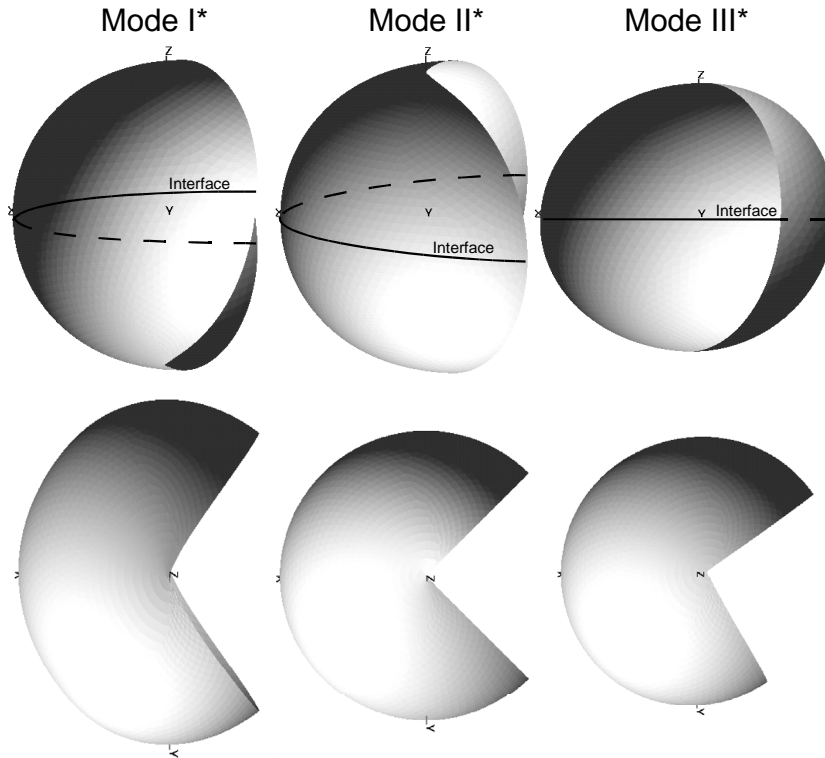


ABBILDUNG 4.11: Winkelfunktionen für  $\alpha = 1.5\pi, \zeta = \pm 45^\circ$ . Die Moden I\*/II\*/III\* entsprechen  $\lambda_1 = 0.548, \lambda_2 = 0.673$  und  $\lambda_3 = 0.887$ .

### 4.3.2 Kreuzschicht Laminate

Analoge Berechnungen wie im vorhergehenden Kapitel wurden auch für den Fall sogenannter Kreuzschicht Laminate  $[0^\circ/90^\circ]$  und  $[-30^\circ/+60^\circ]$  durchgeführt. Es wurden ausserdem die selben Netze und Randbedingungen wie auch bei den Winkelschicht Laminaten benutzt.

Die berechneten Eigenwerte  $\lambda$  für verschiedene Winkel  $\alpha$  sind im Bild 4.10 unten aufgeführt, die Ergebnisse für  $[\pm 45^\circ]$  sind ebenfalls zum Vergleich angegeben. Die Exponenten sind erneut reell und positiv im gesamten untersuchten Bereich.

Wie im vorigen Fall existiert für  $\alpha \in (0, \pi)$  nur ein Eigenwert  $\lambda < 1$ . Die Singularität ist relativ schwach. Im Bereich  $\alpha \in (\pi, 2\pi)$  treten drei zusätzliche Eigenwerte auf, wobei der mittlere mit dem Exponenten des Winkelschicht Problems übereinstimmt. Für  $\alpha \approx \pi$  ist der kleinste Eigenwert stärker als im Winkelschicht Fall. Das bedeutet, dass nicht nur die Differenz in den Faser-Winkeln eine Rolle für die

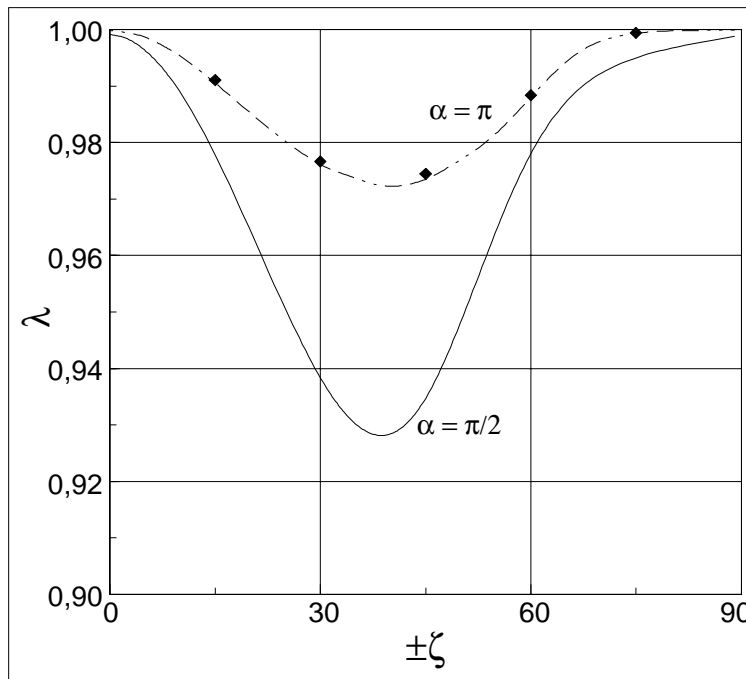


ABBILDUNG 4.12: Vergleich zwischen den Eigenwerten  $\lambda$  für das Kantenproblem ( $\alpha = \pi$ ) und dem Eckenproblem ( $\alpha = \pi/2$ ) für verschiedene Faserorientierungen  $[\pm\zeta]$ , Siehe Referenzlösung in [88].

Singularität spielt, sondern auch die relative Faser-Orientierung zur Oberfläche des Körpers.

### 4.3.3 Vergleich zwischen Ecken- und Kantensingularität

Um die aus praktischer Sicht wichtigen Fälle  $\alpha = 0.5\pi$  bzw.  $\alpha = \pi$  zu studieren, wurden entsprechende Berechnungen für  $\zeta \in (0, \pi/2)$  durchgeführt. Die Ergebnisse sind im Bild 4.12 aufgeführt. Der Fall  $\alpha = \pi$  ist ein typisches zweidimensionales Kantenproblem, mit bekannten numerischen [88] und analytischen Lösungen [83]. Aus Bild 4.12 kann entnommen werden, dass die Eckensingularität stärker als die Kantensingularität ist und zwar im gesamten Bereich  $\zeta$ , auch wenn beide Singularitäten relativ schwach sind (Exponenten nahe an 1.0). Dieses wichtige Ergebnis wird durch andere numerische und experimentelle Untersuchungen bestätigt [39, 38], in denen gezeigt worden ist, dass Platten aus Verbundwerkstoffen eine Tendenz zur Delamination an den *Ecken* aufweisen können. Dieser Effekt ist rein drei-dimensional und kann nicht mit den Mitteln der üblichen

ebenen Analyse berücksichtigt werden, die in diesem Fall die Spannungsgradienten unterschätzt. Diese Tatsache zeigt deutlich, dass drei-dimensionale Effekte durchaus eine wichtige Rolle spielen können und deshalb im allgemeinen nicht vernachlässigt werden dürfen.

# Kapitel 5

## Anwendungen

Innerhalb der linearen Bruchmechanik (LBM) existiert ein wohldefiniertes System von Konzepten und Methoden zur Behandlung von Bruchvorgängen in rissbehafteten Strukturen. Im Unterschied zu den Ansätzen in der Festigkeitslehre werden nicht die maximalen Spannungen sondern andere — bruchmechanische — Parameter wie der IRWIN'sche Spannungsintensitätsfaktor (SIF)  $k$ , bzw. die GRIF-FITH'sche Energiefreisetzungsrate (EFR)  $G$  mit einem kritischen Materialkennwert  $k_{Ic}$  bzw.  $G_c$  genannt *Bruchzähigkeit* verglichen. Den Hintergrund dazu liefert die Tatsache, dass, wie seit langem bekannt [84], die Spannungen an der Rissspitze unendlich gross sind

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}} [k_I f_{ij}^I(\varphi) + k_{II} f_{ij}^{II}(\varphi) + k_{III} f_{ij}^{III}(\varphi)], \quad (5.1)$$

und somit nicht die maximalen Spannungen, sondern die “Amplitude” der Singularität  $k$  als Bruchparameter benutzt werden kann.  $\rho, \varphi$  bezeichnen hier ein polares Koordinatensystem mit Ursprung in der Rissspitze und  $f_{ij}$  die sogenannten *Winkelfunktionen*, welche die Richtungsabhängigkeit der Spannungsverteilung beschreiben. Es wird im allgemeinen postuliert, dass Risswachstum einsetzt, falls

$$f(k_I, k_{II}, k_{III}) > k_{Ic} \quad \text{oder} \quad \sum_{i=I}^{III} G_i > G_c. \quad (5.2)$$

Aus historischer Sicht wurde dieses Konzept für ebene Probleme eingeführt, da die Behandlung drei-dimensionaler Spannungszustände zunächst zu komplex erschien. Der SIF  $k_I$  eines *Mode-I*-Risses, beansprucht durch ein ein-dimensionales Spannungswertfeld  $\sigma_0$ , ist zum Beispiel gegeben durch

$$k_I = \sigma_0 \sqrt{\pi a} Y, \quad (5.3)$$

wobei  $a$  die Risslänge definiert. Die dimensionslose *Formfunktion*  $Y$  beschreibt, wie der Name schon sagt, die Form des Risses (Innenriss, Aussenriss etc.), so dass eine Reihe von Problemen einfach durch Bestimmung von  $Y$  gelöst werden können. Zahlreiche Beispiele hierzu können in Handbüchern über SIFen gefunden werden [64].

Da sich diese Vorgehensweise als sehr nützlich herausstellte, war auch deren Erweiterung auf drei-dimensionale Probleme nichts unnatürliches. Dazu wurde in einer Reihe von Arbeiten gezeigt (siehe [47] und die dortige Literaturliste für eine Übersicht), dass viele räumliche Probleme, einschliesslich der halb-unendliche Innenriss, der Kreisriss und der Ellipsen-förmige Riss auf der Basis der ebenen Theorie behandelt werden können, dass jedoch hier der SIF eine Funktion der Position  $s$  auf der Rissfront ist

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}} [k_I(s)f_{ij}^I(\varphi) + k_{II}(s)f_{ij}^{II}(\varphi) + k_{III}(s)f_{ij}^{III}(\varphi)]. \quad (5.4)$$

Tatsächlich entspricht dieses Konzept der Rückführung eines räumlichen Problems auf eine Reihe von 2D-Problemen in Ebenen normal zur Rissfront. Dadurch konnte auch eine Reihe von räumlichen Rissphänomenen anhand einer analytisch berechneten SIF-Verteilung entlang der Rissfront erfolgreich behandelt werden [47].

Mit zunehmender Verbreitung von numerischen Berechnungsverfahren wie die Methode der Finiten Elemente wurde diese Vorgehensweise schliesslich auch auf Problemen angewendet, die bis dahin nicht analytisch gelöst werden konnten, wie zum Beispiel auf den Oberflächenriss. Numerische Studien zur Verteilung eines Bruchparameters entlang der drei-dimensionalen Rissfront sind heute sehr verbreitet, wie aus der unüberschaubaren Menge von Veröffentlichungen dazu ersichtlich wird [68].

Leider kann die Rissausbreitung in räumlichen Strukturen nicht allgemein auf ebene Probleme zurückgeführt werden, wie bereits anhand der allgemeinen Theorie elliptischer Randwertprobleme in nicht-glaten Gebieten gezeigt wurde [50, 57, 26, 62, 40, 51]. Dies ist damit zu erklären, dass bei räumlichen Problemen sogenannte *Ecken* auftreten können, in deren Umgebung auch ein räumlicher Spannungszustand herrscht. Ein wichtiges Beispiel dazu ist der Punkt, in dem ein Riss an der Oberfläche eines Körpers endet.

Einerseits herrscht in der Umgebung dieses Punktes ein räumlicher Zustand, andererseits kann die Singularität von der bekannten ebenen Verteilung  $1/\sqrt{\rho}$  abweichen [11, 36, 55, 29]. Dies hat zur Konsequenz, dass der SIF hier nicht mehr

wohldefiniert erscheint (es sei daran erinnert, dass der SIF als die Amplitude einer ganz bestimmten  $1/\sqrt{\rho}$  Singularität definiert wurde). Die oben erwähnte Behandlung von räumlichen Problemen innerhalb der ebenen Theorie war nur deshalb möglich, weil in sich geschlossene, weit von der Oberfläche entfernte, *glatte* Rissfronten betrachtet wurden, bei denen Ecken nicht auftreten.

Diese Anmerkungen werfen nun offensichtlich die Frage auf, ob die bekannte einparametrische Beschreibung von Bruchvorgängen auch auf Probleme mit Ecken angewendet werden kann, bei denen eine ganz andere Singularität als  $1/\sqrt{\rho}$  vorliegt. Wir haben in den vorangegangenen Kapiteln gezeigt, dass der räumliche Zustand an einer Ecke, ähnlich wie der ebene Zustand an einer Kante, mit einer asymptotischen Reihe beschrieben werden kann, deren Amplituden nun *Ecken-Spannungsintensitätsfaktoren* (ESIFen) genannt werden. Es wäre also denkbar, diese ESIFen analog zu den SIFen des ebenen Zustandes als Bruchparameter an *Ecken* zu benutzen. Eine solche Vorgehensweise würde jedoch viel zusätzlichen Aufwand mit sich bringen, da Experimente zur Ermittlung der Bruchzähigkeit an *Ecken* durchgeführt werden müssten, und zwar an sehr vielen unterschiedlichen Ecken-Geometrien, da offensichtlich die ESIFen nicht mit  $k_{Ic}$  verglichen werden können (diese hätten sogar eine andere Dimension, da eine andere Spannungsverteilung  $r^{\lambda-1}$  vorliegt).

Die einzig sinnvolle Strategie erscheint somit die bekannten SIFen auch bei Problemen mit Ecken zu benutzen und diese in der Umgebung einer Ecke im asymptotischen Sinne zu verstehen. Mit anderen Worten: es wird erwartet, dass die SIF-Asymptotik an einer Ecke das Bruchverhalten dieser Ecke bestimmt. Diese Annahme ist keineswegs trivial und sollte durch entsprechende Experimente verifiziert werden.

Anhand des Oberflächenriss-Beispiels wird nun in den folgenden Abschnitten gezeigt, wie die Singulärexponenten zur Beschreibung des Bruchverhaltens an einer Ecke benutzt werden können. Darauf aufbauend wird ausserdem belegt, dass die von der asymptotischen Theorie erwarteten Effekte in sehr guter Übereinstimmung mit den numerischen und experimentellen Befunden sind.

## 5.1 Die Asymptotik von Bruchparametern an einer Ecke

Anhand des Konzeptes von *schwachen und starken Singularitäten* soll in den nachfolgenden Kapiteln die Frage der Asymptotik des SIFs und der EFR in der

Umgebung einer Ecke im  $\mathbb{R}^3$  geklärt werden. Wir beginnen zunächst mit einem kurzen Überblick über wichtige Ergebnisse der asymptotischen Entwicklung um Ecken und Kanten und insbesondere über deren Wechselwirkung bei polyedrischen Gebieten.

### 5.1.1 Asymptotik des Spannungsintensitätsfaktors

Wir betrachten einen Riss mit glatter Rissfront in einem homogenen Körper, Bild 5.1. Der Riss endet im Punkt  $O$  an einer freien Oberfläche des Körpers. Wir interessieren uns für die Verschiebungsverteilung in der Umgebung der Rissfront und insbesondere in der Nähe des Punktes  $O$ .

Es ist bekannt [27, 24], dass die Verschiebung in einem beliebigen Punkt  $P$  aus der Umgebung der Rissfront in einer asymptotischen Reihe

$$\mathbf{u}(\rho, \varphi, z) = k(z) \rho^{1/2} \hat{\mathbf{u}}(\varphi) + \mathbf{u}_{\text{rem}}, \quad (5.5)$$

bezüglich eines zylindrischen Koordinatensystems  $\rho, \varphi, z$  entwickelt werden kann. Das Restglied  $\mathbf{u}_{\text{rem}}$  ist von der Ordnung  $\mathcal{O}(\rho^\xi)$ ,  $\xi > 1/2$  und bezeichnet die Summe aller Terme, die schwächer-singulär sind als  $\rho^{1/2}$  bezüglich  $\rho$  für ein festes  $z$ . Wir weisen darauf hin, dass (5.5) in diesem Fall eine einfachere Struktur aufweist, als man anhand der generellen Theorie erwarten würde, so dass keine oszillierenden oder logarithmischen Singularitäten auftreten [24]. Diese Asymptotik entspricht für ein festes  $z$  in der Tat der ebenen Theorie und  $\rho^{1/2}$  ist die bekannte radiale Verteilung der Verschiebungen in einer Ebene normal zur Rissfront im Punkt  $O^*$ . Die Winkelabhängigkeit der Verschiebungen wird durch die *Winkelfunktionen*  $\hat{\mathbf{u}}(\varphi)$  beschrieben. Der SIF  $k(z)$  ist eine Funktion von  $z$  und hängt von der Position  $O^*$  auf der Rissfront ab. Im allgemeinen ist nichts über das Verhalten von  $k(z)$  und  $\mathbf{u}_{\text{rem}}(z)$  bezüglich  $z$  bekannt, diese Größen könnten somit für  $z \rightarrow 0$ , d.h. in der Umgebung des Punktes  $O$  unendlich gross werden.

Die Verschiebungen im Punkt  $P$  können analog zu (5.5) auch bezüglich eines sphärischen Koordinatensystems  $r, \theta, \varphi$  mit Ursprung in  $O$  in eine asymptotische Reihe entwickelt werden [50, 26]<sup>1</sup>:

$$\mathbf{u}(r, \theta, \varphi) = K r^\lambda \mathbf{U}(\theta, \varphi) + \mathbf{U}_{\text{rem}}. \quad (5.6)$$

Der Punkt  $O$  wird hier traditionell als *Ecke* und die Rissfront als *Kante* bezeichnet. Das Gebiet in der Umgebung von  $O$  wird als Kegel betrachtet (alle

---

<sup>1</sup>Wir nehmen hier an, dass keine logarithmischen Terme auftreten.



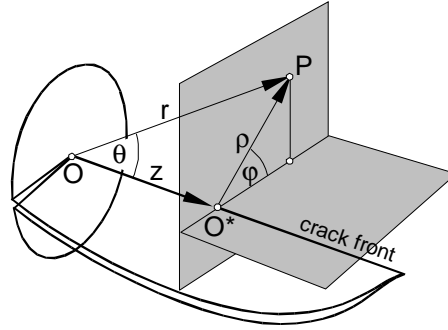


ABBILDUNG 5.1: Geometrische Beziehungen in der Umgebung jener Stelle an der Rissfront, an der der Riss eine freie Oberfläche des Körpers durchstösst.

Eigenschaften hängen nicht von  $r$ , sondern nur von  $\theta, \varphi$  ab) der eine zusätzliche Kante (die Rissfront) und einen speziellen Querschnitt besitzt. Wie üblich, bezeichnen wir mit  $K$  den ESIF und mit  $\lambda$  den Ecken-Singulärexponenten, welcher eine im allgemeinen unbekannte komplexe Zahl ist. Sowohl  $\lambda$  als auch die *Ecken-Winkelfunktionen*  $\mathbf{U}$  hängen nur von der lokalen Geometrie (dem Winkel, unter welchem die Rissfront zum Beispiel an der Oberfläche endet) und nicht von der Belastung ab. Mit  $\mathbf{U}_{\text{rem}}$  bezeichnen wir erneut ein Restglied der Ordnung  $\mathcal{O}(r^\mu)$ ,  $\mu > \lambda$ , welches schwächer-singulär ist als  $r^\lambda$  bezüglich  $r$ . Allerdings ist wieder nichts über das Verhalten von  $\mathbf{U}$  und  $\mathbf{U}_{\text{rem}}$  bezüglich  $\theta$  bekannt, so dass beide Grössen für  $\theta \rightarrow 0$ , d.h. in der Umgebung der Rissfront unendlich ansteigen können.

Da (5.5) und (5.6) zwei asymptotische Entwicklungen derselben physikalischen Grösse darstellen, kann aus deren Gleichstellung eine Asymptotik für  $k(z)$  gewonnen werden. Die offensichtliche geometrische Beziehung

$$r = \frac{z}{\cos(\theta)}, \quad \rho = z \tan(\theta) \quad (5.7)$$

liefert

$$k(z) z^{1/2} \tan^{1/2}(\theta) \hat{\mathbf{u}}(\varphi) + \mathbf{u}_{\text{rem}} = K z^\lambda \cos^{-\lambda}(\theta) \mathbf{U}(\theta, \varphi) + \mathbf{U}_{\text{rem}}, \quad (5.8)$$

so dass das dominante Glied in einer asymptotischen Entwicklung von  $k(z)$  wie folgt angegeben werden kann:

$$k(z) \sim K z^{\lambda-1/2}. \quad (5.9)$$

Wie aus Gleichung (5.9) ersichtlich, markiert  $1/2$  einen Wendepunkt für die Asymptotik von  $k(z)$  für  $z \rightarrow 0$ , d.h. in der Umgebung von  $O$ : Falls der reelle Teil der

Ecken-Singularität  $\Re(\lambda)$  kleiner als  $1/2$  ist, wird  $k(z)$  für  $z \rightarrow 0$  unendlich gross werden. Dieser Fall wird als *stark-singulär* bezeichnet [58]. Falls  $\Re(\lambda) > 1/2$ , dann wird  $k(z)$  für  $z \rightarrow 0$  unendlich klein werden; dieser Fall wird als *schwach-singulär* [58] bezeichnet. Bemerkenswerterweise hängt dieses Verhalten *nur* von der Ecken- und Kantensingularität und somit von der Geometrie und den Materialeigenschaften, jedoch *nicht* von der Belastung ab<sup>2</sup>.

Eine strenge Ableitung der  $k(z)$ -Asymptotik (5.9) kann in [26, 27] gefunden werden. In diesen Arbeiten wird der allgemeinere Fall einer beliebigen Kanten-Singularität behandelt, da  $\rho^{1/2}$  nur ein Spezialfall für das Rissproblem im homogenen Körper darstellt. Wir weisen ausserdem darauf hin, dass die in (5.5) und (5.6) benutzte Asymptotik im gewissen Sinne unbefriedigend ist, da wie bereits angedeutet, weder das Kanten-Restglied  $\mathbf{u}_{\text{rem}}$  noch das Ecken-Restglied  $\mathbf{U}_{\text{rem}}$  wirklich glatt sind. Damit können beide für  $z \rightarrow 0$  bzw.  $\theta \rightarrow 0$  stark ansteigen, so dass die asymptotische Ordnung in (5.5) und (5.6) damit zerstört worden wäre. Diese Überlegung bildet den Ausgangspunkt für weitere, “verbesserte” (aber zugleich auch weitaus komplexere) Entwicklungen mit glatten Restgliedern [82, 27]. Da die hier benutzten simplen Zusammenhänge jedoch die Wechselwirkung von Ecke und Kante ausreichend genau illustrieren, verzichten wir an dieser Stelle auf eine vollständige Behandlung dieses Problems und verweisen auf [26, 82, 27].

### 5.1.2 Asymptotik der Energiefreisetzungsrate

Ähnlich wie für den SIF im vorigen Kapitel, lässt sich auch eine Asymptotik für die GRIFFITH'sche EFR ableiten, indem ein sich ausbreitender Riss als kleine Störung eines bereits rissbehafteten Körpers betrachtet wird und verschiedene Hilfsmittel aus der Störungstheorie benutzt werden [57, 58, 54, 59].

Wir betrachten erneut den spannungsfreien Riss mit glatter Rissfront, der im Punkt  $O$  an der freien Oberfläche eines Körpers endet, Bild 5.1. Wir bezeichnen diese Konfiguration im folgenden als *ungestört*. Nachdem der Riss sich in der Umgebung von  $O$  in einer Entfernung  $\epsilon$  ausgebreitet hat, erhalten wir die *gestörte* Konfiguration.

Nach LEGUILLON [59] können zwei verschiedene asymptotische Entwicklungen für die gestörte Konfiguration benutzt werden, damit eine Asymptotik für die

---

<sup>2</sup>Eine implizite Abhängigkeit ist dennoch aufgrund spezieller Symmetrien in der Belastung gegeben, die selektiv Moden mit unterschiedlichen Singularitäten anregen kann. Dieser Punkt wird später ausführlicher diskutiert.

EFR  $G$  erhalten werden kann: Die erste (*äussere*) Entwicklung

$$\mathbf{u}^\varepsilon(x) = \mathbf{U}^0(x) + f_1(\varepsilon)\mathbf{U}^1(x) + \dots; \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f_1(\varepsilon) = 0 \quad (5.10)$$

beschreibt den Zustand im Körper ausserhalb einer gewissen Umgebung von  $O$ .

Die zweite (*innere*) Entwicklung

$$\mathbf{u}^\varepsilon(y) = F_0(\varepsilon)\mathbf{V}^0(y) + F_1(\varepsilon)\mathbf{V}^1(y) + \dots; \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{F_1(\varepsilon)}{F_0(\varepsilon)} = 0 \quad (5.11)$$

ist auf einem Gebiet definiert, welches der Umgebung von  $O$  nach einem Übergang zu neuen Koordinaten  $y = x/\varepsilon$  mit  $\varepsilon \rightarrow 0$  entspricht. Dieses Gebiet ist offensichtlich unendlich gross und beinhaltet eine Rissstörung der Länge 1.0, mit anderen Worten wurde die nähere Umgebung des Punktes  $O$  wie mit einem “Mikroskop” mit  $1/\varepsilon$  skaliert, damit das Verhalten einer dort auftretenden Grenzschicht untersucht werden kann. Diese innere Entwicklung ist somit nur in der Umgebung von  $O$  gültig.

Ausser dem Term

$$\mathbf{U}^0(x) = K r^\lambda \mathbf{U}(\theta, \varphi) + \dots, \quad (5.12)$$

welcher die klassische Lösung eines ungestörten Rissproblems darstellt, müssen alle anderen Terme aus den Gleichungen (5.10) und (5.11) anhand von *Anpassungsbedingungen* (matching conditions) identifiziert werden. Diese können aus der Überlegung gewonnen werden, dass beide Entwicklungen in einer Zwischenregion übereinstimmen müssen. Nachdem alle Terme in der inneren und äusseren Entwicklung aufgestellt wurden, kann die GRIFFITH'sche EFR für quasi-statische Rissausbreitung aus der Differenz der potentiellen Energien der ungestörten und der gestörten Konfiguration pro neu geschaffener Rissoberfläche berechnet werden [59]:

$$G = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\delta W}{\varepsilon^2} \sim \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} K^2 \tilde{K} \varepsilon^{2\lambda-1}, \quad (5.13)$$

wobei  $K$  den ESIF bezeichnet,  $\tilde{K}$  weitere Koeffizienten darstellen, die nur von der Störung (der Form der Rissverlängerung) abhängen,  $\lambda$  den Ecken-Singulärexponenten und  $\varepsilon$  die dimensionslose Rissverlängerung um  $O$  bezeichnen.

Wie leicht festgestellt werden kann, markiert  $1/2$  erneut einen Wendepunkt in dem Verhalten von  $G$  in der Umgebung von  $O$ :  $\Re(\lambda) > 1/2$  führt zu einer *schwachen Singularität*, bei der  $G \rightarrow 0$ , dagegen führt  $\Re(\lambda) < 1/2$  zu einer *starken Singularität* mit  $G \rightarrow \infty$  [58].

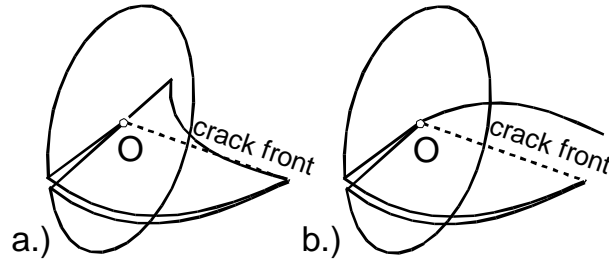


ABBILDUNG 5.2: Rissausbreitung in der Nähe einer freien Oberfläche für starke (a) und schwache (b) Ecken-Singularität.

### 5.1.3 Starke und schwache Singularitäten

Es ist offensichtlich, dass die Asymptotik, die wir in den vorangegangenen Abschnitten für den SIF und die EFR in der Umgebung einer Ecke abgeleitet haben, eine zentrale Rolle für das Bruchverhalten eines rissbehafteten Körpers spielen wird und zwar unabhängig davon, ob der IRWIN'sche oder der GRIFFITH'sche Ansatz benutzt wird. In beiden Fällen markiert  $1/2$  einen Wendepunkt für eine schwache ( $\Re(\lambda) > 1/2$ ,  $G \rightarrow 0$ ,  $k \rightarrow 0$ ) bzw. eine starke ( $\Re(\lambda) < 1/2$ ,  $G \rightarrow \infty$ ,  $k \rightarrow \infty$ ) Singularität [58].

Wir diskutieren nun, welches Verhalten ein Oberflächenriss mit einer starken bzw. schwachen Eckensingularität aufweisen muss.

Nehmen wir an, dass die Risskonfiguration in der Umgebung von  $O$  durch  $\Re(\lambda) < 1/2$  charakterisiert werden kann, dann wird die EFR (bzw. der SIF) für  $z \rightarrow 0$  stark ansteigen<sup>3</sup>. Nahe an  $O$  werden beide Bruchparameter einen viel grösseren Wert als im Körperinneren annehmen. Eine kleine Last wird daher ausreichend sein, um *lokal* einen Rissfortschritt nahe  $O$  zu bewirken, Bild 5.2a. Konsequenterweise wird sich ein Punkt an der Rissfront in der Nähe der Oberfläche früher ausbreiten als ein Punkt, der sich weiter im Körperinneren befindet, was zur Änderung der lokalen Rissgeometrie am Punkt  $O$  führen wird. Wie im Kapitel 4 gezeigt wurde (vgl. Bild 4.3), ist ein Anstieg des Singulärexponenten  $\Re(\lambda)$  die Folge. Dieser Prozess wird sich solange fortsetzen, bis eine Konfiguration erreicht

<sup>3</sup>Falls ein Bruchparameter gegen Unendlich geht, müsste Rissausbreitung für jede Belastung stattfinden, was nicht beobachtet wird. Eine mögliche Lösung dieses Problems kann in der Finiten Bruchmechanik gefunden werden, indem angenommen wird, dass das Inkrement bei Rissausbreitung nicht unendlich klein, sondern endlich ist [58]. In diesem Fall verläuft die Rissausbreitung nicht glatt, sondern geht in kleinen Sprüngen vonstatten. Bruchparameter können entsprechend sehr klein bzw. gross werden, müssen jedoch endlich bleiben [58].

ist, bei der  $\Re(\lambda) = 1/2$  gilt. Von diesem Moment an besitzt jeder Punkt an der Rissfront dasselbe Singulärverhalten, so dass ein weiterer Rissfortschritt unter Teilnahme aller Punkte auf der Rissfront selbst-ähnlich stattfinden kann.

Falls die Risskonfiguration in der Umgebung von  $O$  eine solche ist, bei der  $\Re(\lambda) > 1/2$  gilt, wird die EFR (oder der SIF) für  $z \rightarrow 0$  gegen Null streben. In der Umgebung von  $O$  werden beide Bruchparameter einen viel kleineren Wert aufweisen als weiter im Inneren des Körpers. Bei einer ansteigenden Belastung wird solange keine Rissausbreitung stattfinden, bis ein kritischer Zustand im Inneren des Körpers erreicht wird, bei dem  $G > G_c$  (oder  $k > k_{Ic}$ ) und dort lokales Risswachstum einsetzt. Dies wird erneut die lokale Rissgeometrie nahe  $O$  ändern, jedoch wird sich jetzt ein Punkt der Rissfront im Inneren vor einem solchen an der Oberfläche ausbreiten, Bild 5.2b. Die so bewirkte Änderung des Austrittswinkels der Rissfront zur Oberfläche führt solange zu sinkenden  $\Re(\lambda)$ -Werten (vgl. Bild 4.3), bis eine Konfiguration erreicht wird, bei der  $\Re(\lambda) = 1/2$ . Von diesem Moment an nimmt jeder Punkt auf der Rissfront an der Rissausbreitung teil.

Wir wollen noch kurz diskutieren, welches Verhalten von einem Oberflächenriss zu erwarten ist, der für eine gegebene Risskonfiguration mehrere Ecken-Moden besitzt, und zwar sowohl stark- als auch schwach-singuläre. Wie im Kapitel 4 gezeigt wurde, tritt dieser Fall bei einer allgemeinen Belastung ein, Bild 4.3. Nun werden für  $z \rightarrow 0$  die zu den schwach-singulären Moden gehörenden Terme in der asymptotischen Entwicklung von SIF und EFR gegen Null streben, während die zu den stark-singulären Moden gehörenden Terme stark ansteigen werden: Die Rissausbreitung wird für kleine Lasten zuerst an der Oberfläche einsetzen, bis eine kritische Konfiguration erreicht wird, wie bereits für den Fall einer einzigen starken Singularität beschrieben. Falls bei dieser kritischen Konfiguration nur *eine* starke Singularität vorliegt (wie für den Oberflächenriss immer der Fall, siehe Bild 4.4), wird die weitere Rissausbreitung nahe an  $O$  *nur* von ihr bestimmt. Dies muss jedoch nicht zwingend für alle Probleme gelten, da sich die Risskonfiguration und somit auch die Singulärexponenten geändert haben: Falls nun mehrere stark-singuläre Moden vorliegen, wird zwar der dominante im asymptotischen Sinne das Verhalten bestimmen, jedoch könnten die anderen bei einem endlichen, realen Körper ebenfalls einen Einfluss auf die Stabilität der Rissausbreitung haben (Terme höherer Ordnung).

Eine Konsequenz aus dem beschriebenen Sachverhalt ist, dass eine gleichzeitige Rissausbreitung aller Punkte auf der Rissfront nicht für beliebige, sondern nur für spezifische, lokale Rissgeometrien möglich ist, nämlich solche, bei denen die Ecken-Singularität exakt  $1/2$  ist. Diese Annahme wurde zum ersten Mal in einer fundamentalen Arbeit von BAZANT & ESTENSSORO [11] geäußert, wenn

auch nicht anhand einer streng abgeleiteten Asymptotik für die Bruchparameter, sondern aufgrund allgemeiner, energetischer Überlegungen. In der erwähnten Arbeit wurde ebenfalls gezeigt, dass der experimentell beobachtete Winkel zwischen Rissfront und Oberfläche eines sich ausbreitenden Risses unter Mode-I-Belastung gut mit den theoretischen Erwartungen übereinstimmt. Im nächsten Abschnitt wollen wir ähnliche Ergebnisse auch für Oberflächenrisse unter mixed-Mode-Belastung zeigen, deren Rissfront bzw. Rissebene nicht senkrecht zur Oberfläche steht.

## 5.2 Fallstudien für den Oberflächenriss

In diesem Kapitel stellen wir detaillierte numerische und experimentelle Untersuchungen an SEN (single edge notched) Proben mit normaler bzw. geneigter Kerbe vor, welche von Dr. F.-G. Buchholz, Fachgruppe Angewandte Mechanik (FAM) der Universität Paderborn zur Verfügung gestellt wurden. Die Ergebnisse werden unter Berücksichtigung von auftretenden 3D- bzw. Mode-Kopplungseffekten in der Nähe der freien Oberfläche mit den theoretischen Erwartungen seitens der asymptotischen Theorie verglichen. Die folgenden Ausführungen beruhen auf den Arbeiten DIMITROV et al. [31] und DIMITROV et al. [32], in denen auch weitere Einzelheiten zu diesem Thema gefunden werden können.

Die untersuchten SEN-Proben haben die geometrischen Abmessungen Länge  $l = 260\text{mm}$ ,  $2l_e = 240\text{mm}$ , Stärke  $t = 10\text{mm}$ , Höhe  $w = 60\text{mm}$  und normalisierte Risslänge<sup>4</sup>  $a/w = 1/3$  und wurden unter drei-Punkte-Biegung (3PB) oder vier-Punkte-Schub (4PS) mit einer Streckenlast von  $F = 2\text{ kN/mm}$  belastet, siehe Bild 5.3. Es wurden sowohl normale ( $\beta = 90^\circ$ ) als auch geneigte ( $\beta = 45^\circ, 30^\circ$ ) Kerbebenen betrachtet.

Die Verteilung der EFR entlang der Rissfront wurde zunächst anhand einer dreidimensionalen numerischen Analyse nach der MVCCI (modified virtual crack closure integral) Methode berechnet [72, 20], wobei die tiefe Kerbe in der SEN-Probe als Riss modelliert wurde. Für die FE-Diskretisierung mit ca. 30.000 Freiheitsgraden wurden nicht-singuläre Volumen-Elemente mit 6 oder 8 Knoten und linearem Approximationsansatz benutzt. Das Netz wurde *a-priori* an der Rissfront und zur Oberfläche hin verfeinert. Die zugehörigen Experimente wurden an SEN-Proben aus durchsichtigem PMMA-Material (Querkontraktionszahl  $\nu \approx 0.3$ ) durchgeführt, so dass die Rissfront bei verschiedenen Etappen der Rissausbrei-

---

<sup>4</sup>Die Risslänge stimmt in diesem Fall mit der Länge der tiefen Kerbe in der SEN-Probe überein, da keine Schwingungsrisse erzeugt wurden.

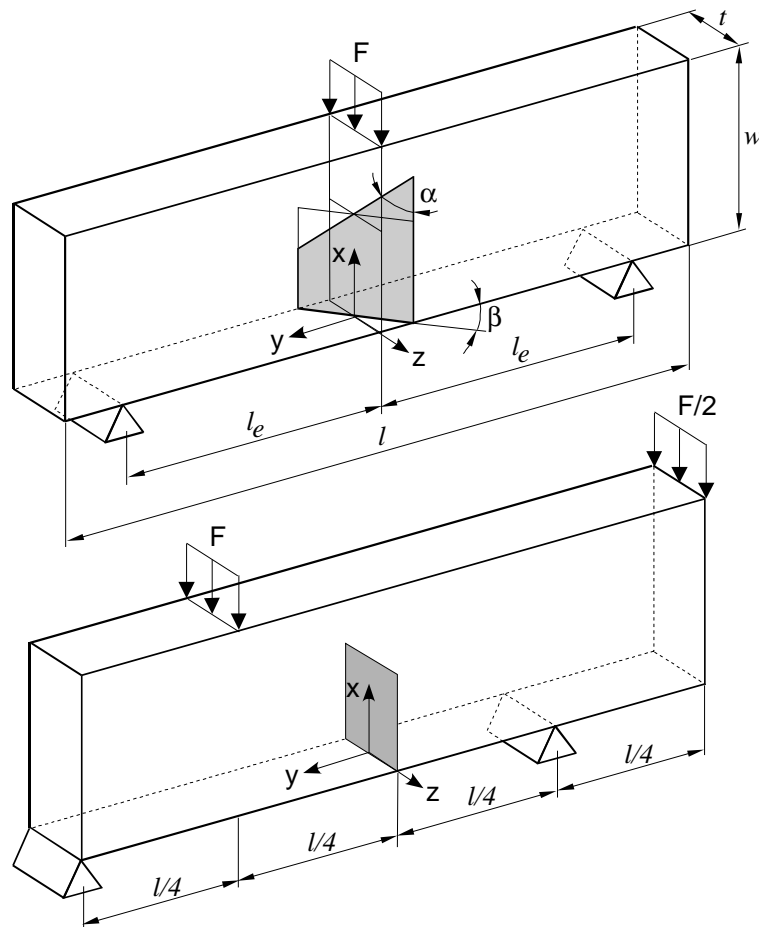


ABBILDUNG 5.3: SEN-Probe mit geneigter Rissebene unter drei-Punkte Biegung (oben), bzw. vier-Punkte Schub (unten).

tung visuell beobachtet werden kann.

### 5.2.1 Drei-Punkte-Biegung, normale Rissebene

Wir betrachten zunächst eine SEN-Probe mit  $\alpha = \beta = 90^\circ$  unter drei-Punkte-Biegebelastung, Bild 5.3 oben.

Falls an den zur  $x$ - $y$  Ebene parallelen Seitenflächen der Probe Symmetrie-Randbedingungen definiert werden, herrscht im Probeninneren der ebene Verzerrungszustand (EVZ) und wir erwarten einen konstanten EFR-Wert über die Rissfront, welcher mit der zwei-dimensionalen EVZ-Analyse [64] übereinstimmen sollte. Die

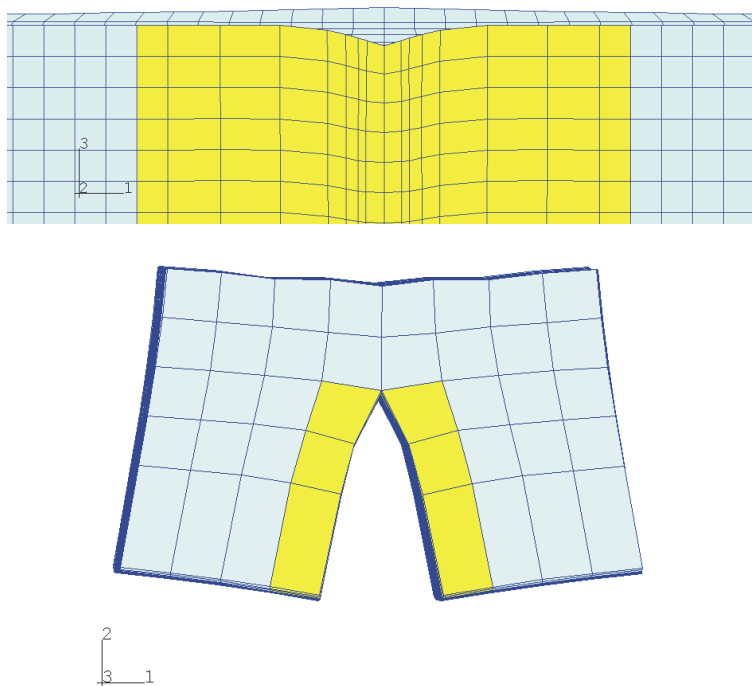


ABBILDUNG 5.4: Deformiertes FE-Modell einer SEN-Probe mit  $\beta = 90^\circ$  unter drei-Punkte-Biegebelastung aus verschiedenen Blickwinkeln.

Ergebnisse im Bild 5.5 bestätigen dies im Rahmen einer numerischen Genauigkeit von 2%, was ausreichend für die weiteren Untersuchungen ist.

Als nächstes betrachten wir spannungsfreie Randbedingungen an den Seitenflächen der Probe, die entsprechende EFR-Verteilung ist ebenfalls im Bild 5.5 dargestellt. Im Probeninneren ist  $G_I$  näherungsweise konstant, weist jedoch einen Wert auf, der wesentlich höher liegt als der EVZ-Wert. Dies hat zur Konsequenz, dass die ebene EVZ-Analyse nicht mehr konservativ ist. Ausserdem kann in der Nähe der Oberfläche ein ausgeprägter 3D-Effekt beobachtet werden, mit stark abfallenden  $G_I$ -Werten für  $z/t \rightarrow 0.5$ .

Dieser Effekt hängt sicherlich mit der Querkontraktion und der fehlenden Verzerrungsbehinderung in  $z$ -Richtung an der freien Oberfläche der Probe zusammen [21, 19]. Diese Auffassung wurde anhand einer ganzen Reihe von Untersuchungen bestätigt. So führt zum Beispiel die fehlende Verzerrungsbehinderung zu einer Verwölbung der Oberfläche nahe zur Rissfront, die im Detail des deformierten



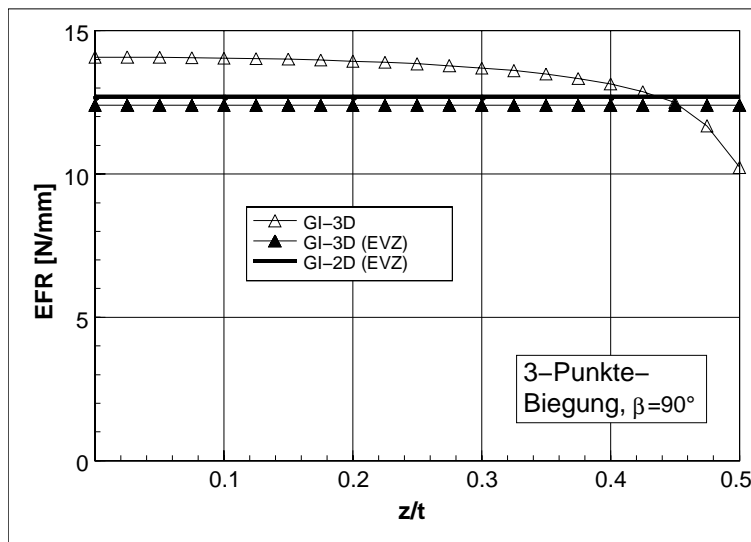


ABBILDUNG 5.5: EFR-Verteilung über die Rissfront einer SEN-Probe mit  $\beta = 90^\circ$  unter drei-Punkte-Biegebelastung.

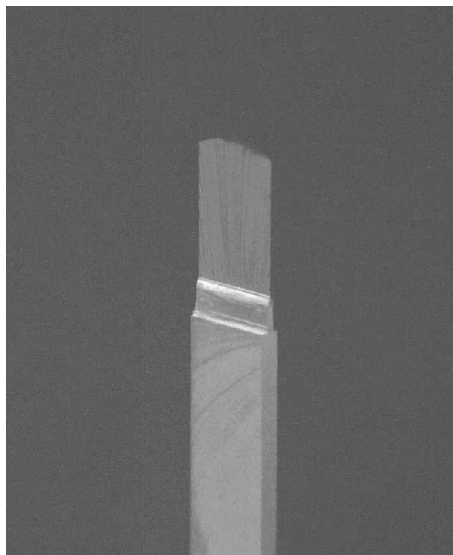


ABBILDUNG 5.6: Gerissene SEN-Probe mit  $\beta = 90^\circ$  unter drei-Punkte-Biegebelastung.

FE-Netzes im Bild 5.4 oben deutlich sichtbar ist. Ausserdem zeigen Berechnungen für  $\nu = 0.0$  einen konstanten  $G_I$ -Wert über die gesamte Rissfront ohne jegliche Verwölbung der Oberfläche.

Wir wollen nun diskutieren, wie die beschriebenen Phänomene aus Sicht der asymptotischen Theorie erklärt werden können. Im Falle von Rissebene und Rissfront normal zur Oberfläche ( $\alpha = \beta = 90^\circ$ ) können drei verschiedene Ecken-Moden auftreten, mit entsprechenden Singulärexponenten  $\lambda_{I^*} = 0.393$ ,  $\lambda_{II^*} = 0.548$  und  $\lambda_{III^*} = 0.978$ , siehe Bild 4.3. Mode  $III^*$  ist sehr schwach-singulär und wird im folgenden nicht weiter berücksichtigt. Aufgrund der symmetrischen Belastung wird somit nur Mode  $II^*$  (in diesem Fall symmetrisch) angeregt, damit ist das dominante Glied in der asymptotischen Entwicklung der Verschiebungen von der Ordnung  $\lambda_{II^*} = 0.548$ . Mode  $II^*$  weist einen Verschiebungssprung nur bezüglich der  $U_y$ -Komponente auf, Bild 4.5, daraus folgt, dass nur die  $G_I$ -Komponente der EFR bei den MVCCI-Berechnungen von Null verschieden sein kann [31] (die Risschliessungsarbeit ist nur dann ungleich Null, falls eine relative Verschiebung der Rissflanken in einer bestimmten Richtung auftritt). Obwohl die Bezeichnung  $G_{x,y,z}$  uns für die EFR-Verteilung um eine Ecke angebrachter erscheint, behalten wir die traditionelle Notation  $G_{I,II,III}$  aus Gründen der Kompatibilität bei. Entsprechend dem Konzept der starken und schwachen Singularität ist also für  $z/t \rightarrow 0.5$  eine verschwindende  $G_I$ -Komponente der EFR zu erwarten (schwache Singularität für  $\lambda_{II^*} = 0.548$ ). Der tatsächliche Wert an der Oberfläche kann im Rahmen einer numerischen Analyse natürlich nicht erreicht werden: Weitere Untersuchungen mit zusätzlicher Netzverfeinerung in  $z$ -Richtung haben jedoch gezeigt, dass der  $G_I$ -Wert für  $z/t = 0.5$  weiter abfällt, so dass im Grenzfall, exakt wie erwartet, ein verschwindender Wert vermutet werden kann.

Die Spur der Winkelfunktion von Mode  $II^*$  an der Oberfläche (siehe Bild 4.5) zeigt ausserdem, dass der oben erwähnte Verwölbungseffekt ebenfalls erklärt werden kann — beim räumlichen Mode  $II^*$  verschwinden die Verschiebungen in  $z$ -Richtung nämlich nicht, im Unterschied zum ebenen Mode I. Nur für  $\nu = 0.0$  stellt sich ein solcher Zustand ein, der einer Mode-I-Rissöffnung entspricht, siehe Bild 4.6 oben. Darum wurden bei den numerischen Untersuchungen für  $\nu = 0.0$  auch konstante  $G_I$ -Werte über die Rissfront und keine Verwölbung festgestellt.

In einem entsprechenden Experiment konnte die Entwicklung einer charakteristisch gekrümmten Rissfront beobachtet werden, bei der die Punkte der Rissfront nahe zur Oberfläche hinter denen im Inneren blieben, Bild 5.6. Dieses Verhalten entspricht somit exakt der berechneten  $G_T$  Verteilung und der Deutung seitens der asymptotischen Analyse. Der beobachtete stumpfe Winkel zwischen Rissfront und Oberfläche stimmt dabei mit dem erwarteten kritischen Wert von  $\alpha \approx 101^\circ$

für  $\beta = 90^\circ$  (Bild 4.4) gut überein. Ähnliche Ergebnisse wurden auch in [11] dokumentiert.

### 5.2.2 Drei-Punkte-Biegung, geneigte Rissebene

Als nächstes soll die SEN-Probe mit geneigter Rissebene ( $\beta = 45^\circ$ ) unter drei-Punkte-Biegung untersucht werden, Bild 5.3 oben. In diesem Fall sind nicht nur Mode I, sondern auch Mode III Deformationen aufgrund der Neigung der Rissebene zu erwarten. Als eine erste Abschätzung kann das Problem eines geneigten halb-unendlichen Risses im elastischen Raum unter einachsiger Zug-Belastung  $\sigma_0$  verwendet werden, die entsprechenden SIF-Werte können mit  $k_I = \sigma_0 \sqrt{\pi a} \sin^2 \beta$  und  $k_{III} = \sigma_0 \sqrt{\pi a} \sin \beta \cos \beta$  angegeben werden [69].

Die Ergebnisse für die EFR-Verteilung befinden sich im Bild 5.7. Im Inneren der Probe sind  $G_I, G_{III}$  annähernd konstant, jedoch ist das Verhältnis  $G_{III}/G_I \approx 0.5$ . Für  $z/t > 0.25$  sinkt  $G_I$  kontinuierlich, während  $G_{III}$  ansteigt. Die MVCCI-Analyse zeigt ausserdem auch einen lokalen Mode-II-Zustand, der sich in entsprechenden  $G_{II}$ -Werten niederschlägt. Diese  $G_{II}$ -Werte steigen bemerkenswerterweise für  $z/t \rightarrow 0.5$  stark an.

Man könnte nun geneigt sein, den Effekt sinkender  $G_I$ -Werte damit zu erklären, dass das Biegemoment, welches hauptsächlich zur Belastung beiträgt, in der Mitte der Probe ( $y = 0$ ) maximal ist und nach Aussen hin ( $|y| > 0$ ) abfällt, so dass sinkende  $G_I$ -Werte zur Oberfläche hin zu erwarten wären. Man könnte auch meinen, die an der Oberfläche auftretenden  $G_{II}$ -Werte könnten etwas mit dem vorhandenen Querschub zu tun haben. Weitere Untersuchungen an SEN-Proben unter vier-Punkte-Biegung (gleiche Anordnung, jedoch nicht eine, sondern zwei, symmetrisch zur  $x$ - $z$ -Ebene angeordnete Belastungskräfte), bei denen das Biegemoment konstant und der Querschub Null ist, haben jedoch gezeigt, dass dort dieselben Phänomene zu beobachten sind und somit globale Belastungseffekte keine Erklärung für die geschilderte EFR-Verteilung sein können.

Aus asymptotischer Sicht kommen für diesen Fall zwei Moden mit Singulärexponenten  $\lambda_{I^*} = 0.388$  bzw.  $\lambda_{II^*} = 0.676$  in Frage, Bild 4.3. Da keine spezielle Symmetrie vorhanden ist, werden beide Moden angeregt, so dass die dominante Ordnung der Verschiebungen an der freien Oberfläche  $\lambda_{I^*} = 0.388$  ist und damit eine *starke* Singularität vorliegt. Mode  $I^*$  weist Sprünge sowohl in  $U_x$  als auch in  $U_z$  auf, was  $G_{II}, G_{III} \neq 0$  zur Folge hat und den Eindruck einer "Kombination" der Moden II und III an der Oberfläche vermittelt. Die starke Singularität von Mode  $I^*$  führt ausserdem zu stark ansteigenden Werten von  $G_{II}, G_{III}$  für

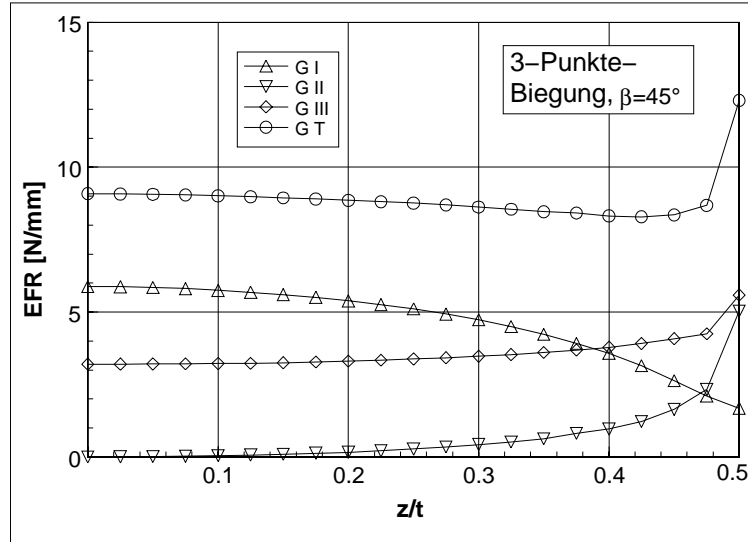


ABBILDUNG 5.7: EFR-Verteilung über die Rissfront einer SEN-Probe mit  $\beta = 45^\circ$  unter drei-Punkte-Biegebelastung.

$z/t \rightarrow 0.5$  bei gleichzeitig sinkenden  $G_I$ -Werten aufgrund der schwachen Singularität von Mode  $II^*$ .

Im Bild 5.8 kann die Auswirkung der diskutierten EFR-Verteilung auf die Entwicklung der Rissfront im entsprechenden Experiment verfolgt werden. Auf Makroebene findet eine Änderung der ursprünglichen Ausbreitungsrichtung (Abscherung) aufgrund der  $G_{II}$ -Verteilung statt. Auf Mesoebene läuft dieser Vorgang jedoch nicht glatt vonstatten: Besonders in den frühen Stadien der Rissausbreitung bilden sich unregelmässige Facetten, welche einen Winkel  $\phi$  mit der ursprünglichen Ausbreitungsebene bilden. Diese Facetten treten scheinbar aufgrund der lokalen  $G_{III}$ -Verteilung auf und wurden ebenfalls von POOK [70] beobachtet und diskutiert. Der Facetten-Winkel  $\phi$  kann nach [70] näherungsweise mit

$$\tan 2\phi = \frac{2k_{III}}{k_I(1 - 2\nu)}, \quad (5.14)$$

angegeben werden.

Die Facetten sind in den frühen Stadien der Rissausbreitung mit unregelmässigen Bruchklippen verbunden und wachsen später zu einem einheitlichen Riss zusammen, Bild 5.8. Dies ist jedoch nicht zwingend, wie aufgrund der Ergebnisse eines analogen Experiments mit  $\beta = 30^\circ$  ersichtlich ist, Bild 5.9. Die getrennten Risse an beiden Oberflächen der Probe scheinen hier nicht zusammenzuwachsen. Die

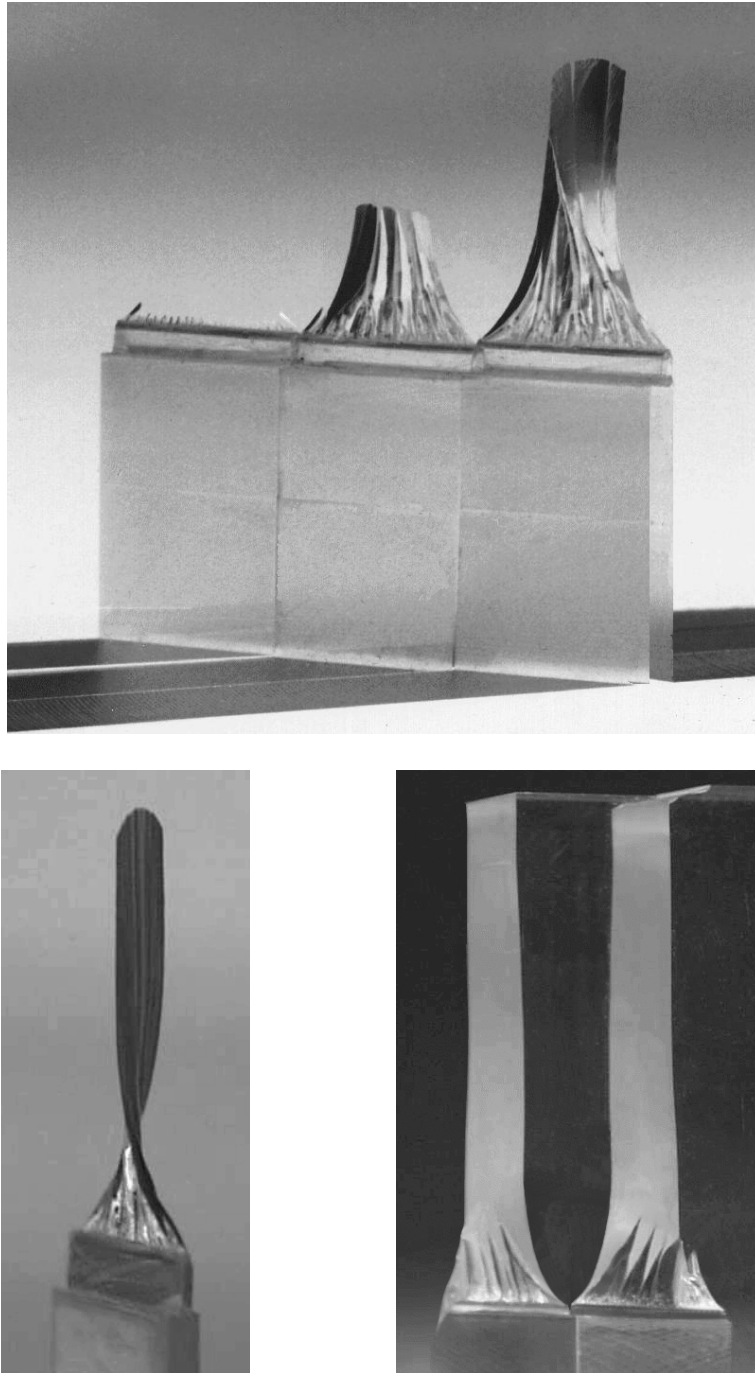


ABBILDUNG 5.8: Gerissene SEN-Probe mit  $\beta = 45^\circ$  unter drei-Punkte-Biegebelastung bei unterschiedlichen Stadien der Rissausbreitung.

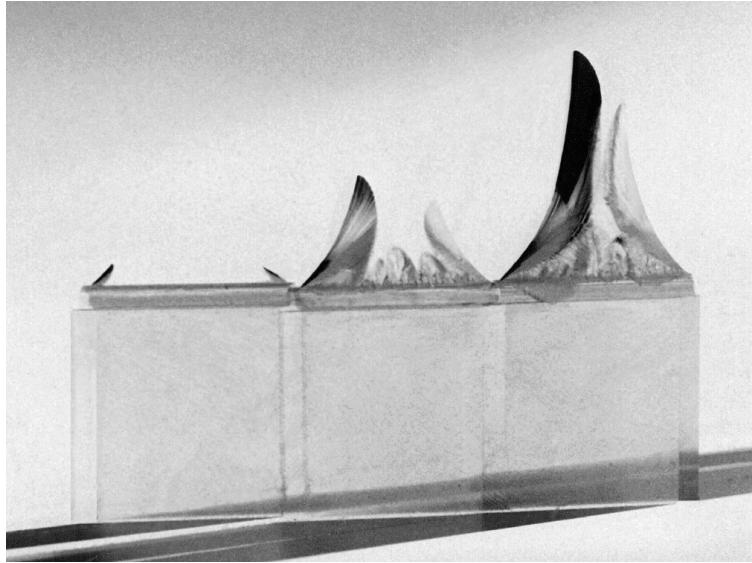


ABBILDUNG 5.9: Gerissene SEN-Probe mit  $\beta = 30^\circ$  unter drei-Punkte-Biegebelastung bei unterschiedlichen Stadien der Rissausbreitung.

Rissausbreitung beginnt jedoch in beiden Fällen wie erwartet an der Oberfläche<sup>5</sup>, Bild 5.8 und 5.9.

Der an der Oberfläche zu erwartende Facetten-Winkel  $\phi$  kann aus (5.14) mit der Annahme  $k_{III}/k_I = \infty$  berechnet werden. Dies führt zu  $\phi = 45^\circ$ , so dass die neue Rissebene dort senkrecht zur Oberfläche liegen müsste (ursprünglicher Winkel  $\beta = 45^\circ$ ). Gleichzeitig ist, wie erwähnt, auch eine Änderung der Ausbreitungsrichtung aufgrund der lokalen Mode-II-Belastung zu erwarten. Eine Abschätzung des Abscherwinkels an der Oberfläche kann aufgrund des Kriteriums der Maximalen EFR [44, 41] mit der Annahme  $k_I/k_{II} = 0$  berechnet werden und ergibt einen Winkel  $\approx 75^\circ$ . Dies führt wiederum zu einem Winkel  $\mu = \delta = 90^\circ - 75^\circ = 15^\circ$ , welcher das Abknicken der sichtbaren Rissspur an der Oberfläche beschreibt. Die diskutierten geometrischen Beziehungen sind im Bild 5.10 illustrativ aufgeführt, eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden im Bild 5.8 ist zu verzeichnen.

<sup>5</sup>Auch wenn dies zunächst ein Problem der Rissinitiierung und nicht des Risswachstums erscheint, kann anhand neuerer Arbeiten [56] gezeigt werden, dass das Phänomen der Rissbildung an einer scharfen Kerbe auf eine sehr ähnliche Art und Weise behandelt werden kann, wie die Rissausbreitung, einfach indem die entsprechenden SIFen durch sogenannte Kerbkonzentrationsfaktoren ersetzt werden. Das Konzept der starken und schwachen Singularität bleibt davon unberührt.

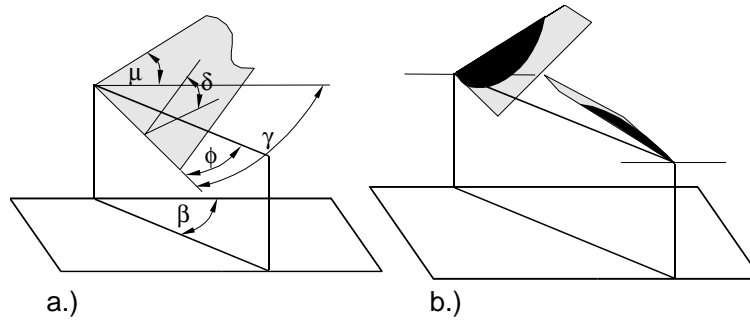


ABBILDUNG 5.10: Geometrische Beziehungen nahe der Oberfläche einer gerissenen SEN-Probe mit geneigter Rissebene (a), sowie erwartete Form des neu initiierten Risses (b).

### 5.2.3 Vier-Punkte-Schub

Zuletzt soll die SEN-Probe mit normaler Rissebene unter vier-Punkte-Schub betrachtet werden, Bild 5.3 unten. In diesem Fall sind die auftretenden  $G_{II}$  Werte im Inneren der Probe näherungsweise konstant, steigen jedoch nahe der Oberfläche stark an (vgl. Bild 5.11), was die Ergebnisse der entsprechenden 2D-Analyse als nicht konservativ entwertet. Ausserdem zeigt die 3D-Analyse mit der MVCCI-Methode, dass an der Oberfläche zusätzlich eine  $G_{III}$ -Komponente auftritt, die für  $z/t \rightarrow 0.5$  stark ansteigt, obwohl die globale Belastung keine Mode-III-Komponente erwarten lässt. Das Auftreten von  $G_{III}$  wird üblicherweise als *schwacher Kopplungseffekt* zwischen Mode II und III interpretiert [21, 19, 28], obwohl keine strenge Begründung für ein solches Verhalten zu existieren scheint.

Aus asymptotischer Sicht kann die anti-symmetrische Scherbelastung in der  $x-y$  Ebene Mode  $II^*$  nicht anregen (Mode  $II^*$  ist symmetrisch), deswegen ist nur Mode  $I^*$ , mit dem entsprechenden Singulärexponenten  $\lambda_{I^*} = 0.393$  an der Oberfläche präsent. Wie bereits erwähnt, weist Mode  $I^*$  sowohl Verschiebungssprünge in  $x$  als auch in  $z$ -Richtung auf, was nach aussen hin wie eine "Kopplung" der Moden II und III erscheint. Das resultierende, stark-singuläre Verhalten führt zu einem starken Anwachsen von  $G_{II}, G_{III}$  zur Oberfläche hin, die numerischen Berechnungen liefern allerdings einen endlichen Wert.

Das Verständnis dieses 3D-Effektes scheint auch durch weitere Untersuchungen mit  $\nu = 0.0$  bestätigt zu werden [18]. Exakt wie zu erwarten, ist in diesem Fall  $G_{II}$  über die gesamte Rissfront konstant, die  $G_{III}$  Komponente verschwand hingegen komplett. Mode  $I^*$  ist somit für  $\nu = 0.0$  äquivalent zum EVZ-Mode II, wie auch seitens der asymptotischen Betrachtung vorhergesagt, vgl. Bild 4.6 unten.

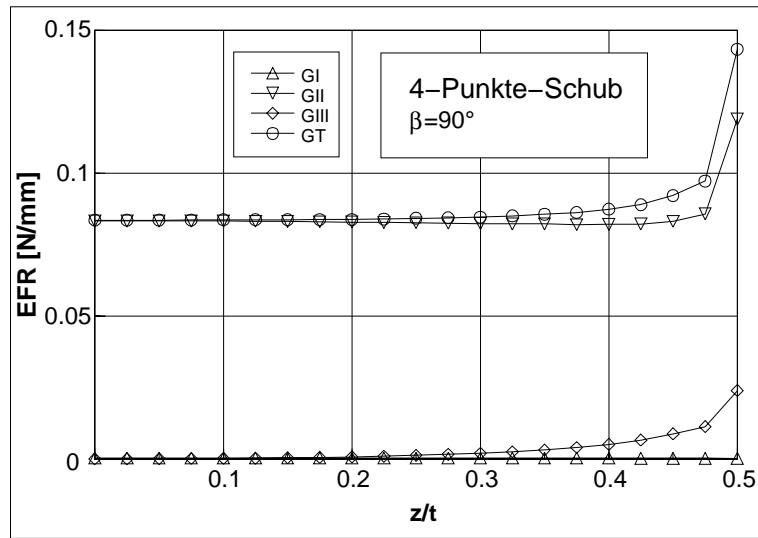


ABBILDUNG 5.11: EFR-Verteilung über die Rissfront einer SEN-Probe mit  $\beta = 90^\circ$  unter vier-Punkte-Schub.

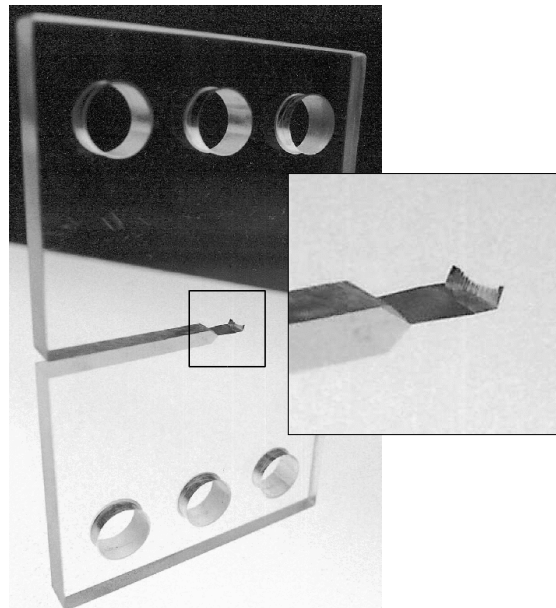


ABBILDUNG 5.12: Gerissene CTS-Probe mit  $\beta = 90^\circ$  und einem Mode-I-Anriss unter vier-Punkte-Schub.



In einem entsprechenden Experiment wurde eine CTS (compact tension shear) Probe mit einem Mode-I-Anriss unter reiner in-plane Scherbelastung untersucht, die Ergebnisse sind im Bild 5.12 aufgeführt. Aufgrund der Mode-II-Belastung verlässt der Riss seine ursprüngliche Ausbreitungsrichtung. Der Abscherwinkel kann an der Oberfläche anhand des Kriteriums der Maximalen EFR [44, 41] unter der Annahme  $k_I/k_{II} = 0$  berechnet werden und ergibt ca.  $75^\circ$ . Der Einfluss von  $G_{III}$  an der Oberfläche scheint dagegen schwach zu sein, da hier keine Facetten beobachtet werden konnten. Die weitere Rissausbreitung bleibt von Mode III weitgehend unberührt.

Da der Auslaufwinkel der Rissfront an der Oberfläche für den Mode-I-Anriss  $101^\circ$  beträgt (vgl. Bild 4.4), kann der neue Neigungswinkel  $\beta = 87^\circ$  zwischen Rissebene und freier Oberfläche nach der einfachen geometrischen Beziehung

$$\cos \beta = \cos \gamma \sin \delta, \quad (5.15)$$

mit  $\gamma = 180^\circ - 101^\circ = 79^\circ$ ,  $\delta = 90^\circ - 75^\circ = 15^\circ$  berechnet werden, vgl. Bild 5.10. Das stark-singuläre Verhalten von Mode  $I^*$  äussert sich wie erwartet in einer bevorzugten Rissausbreitung an der Oberfläche. Der beobachtete spitze Auslaufwinkel im Bild 5.12 entspricht gut dem theoretisch erwarteten kritischen Winkel von  $\alpha \approx 68^\circ$  für  $\beta = 87^\circ$ , Bild 4.4.

# Kapitel 6

## Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde eine Methode zur Bestimmung von Singularitäten in der Lösung drei-dimensionaler Randwertprobleme der Elastizitätstheorie vorgestellt. Solche Singularitäten treten am Rand nicht ausreichend glatter Gebiete oder am Interface von Gebieten mit unterschiedlichen Materialeigenschaften auf. Sie spielen bei vielen Anwendungen, insbesondere in der Bruchmechanik und bei der numerischen Simulation eine wichtige Rolle.

Die Ordnung der Singularität wird im allgemeinen durch den dominanten Singulärexponenten bestimmt, dem auch ein Mode in Form einer sogenannten Winkelfunktion zugeordnet werden kann. Für die Bestimmung von Singulärexponenten und Winkelfunktionen wurde in dieser Arbeit die Technik der Variablentrennung mit anschließender GALERKIN-PETROV FE-Approximation benutzt. Für die Lösung des sich daraus ergebenden quadratischen Eigenwertproblems vom Typ  $(\mathbf{P} + \lambda\mathbf{Q} + \lambda^2\mathbf{R}) \mathbf{d} = \mathbf{0}$  wurde die iterative ARNOLDI-Methode vorgeschlagen. Diese Methode erlaubt nach einer LU-Faktorisierung der Bandmatrix  $\mathbf{P}$  die *simultane* Berechnung von *allen* Eigenwerten und den entsprechenden Eigenvektoren, die für die Charakterisierung der Singularität von Interesse sind: Die Eigenpaare stellen diskrete Näherungen für Singulärexponenten und Winkelfunktionen dar.

Ein wichtiger Gesichtspunkt bei der numerischen Bestimmung von Singularitäten spielt die Tatsache, dass die Winkelfunktionen bei Ecken-Problemen mit zusätzlichen Kanten nicht glatt sind. Damit eine ausreichende Genauigkeit bei den Berechnungen auch in diesem Fall gewährleistet werden kann, wurde die Anwendung eines adaptiven Algorithmus für Netzverfeinerung auf der Basis eines *a-posteriori* Fehlerschätzers vorgeschlagen und als *h*-Methode implementiert. Die Effizienz dieser Vorgehensweise wurde anhand von Benchmark-Tests eingehend

belegt.

Darüber hinaus wurden viele praktisch-relevante Beispielen behandelt, die die Anwendbarkeit der vorgestellten Methode bei Problemen mit Ecken, Kanten und Rissen illustrieren. Besonders berücksichtigt wurden dabei inhomogene Probleme mit isotropen bzw. orthotropen Materialeigenschaften.

Als eine interessante Anwendung von 3D-Singularitäten in der Bruchmechanik wurde das Problem eines Oberflächenrisses behandelt. Hier treten bekannterweise 3D- bzw. Mode-Kopplungseffekte auf, deren Ursprung insbesondere bei mixed-Mode Belastung weitgehend ungeklärt ist. Anhand des Konzeptes der starken und schwachen Singularitäten wurde nun eine Erklärung dieser Phänomene aus Sicht der asymptotischen Theorie vorgeschlagen. Anhand detaillierter numerischer bzw. experimenteller Untersuchungen der SEN-Probe mit gerader bzw. geneigter Risesebene wurde im Rahmen einiger Fallstudien eine gute Übereinstimmung zwischen theoretisch erwartetem und numerisch bzw. experimentell beobachtetem Bruchverhalten eines Oberflächenrisses festgestellt.

Die Ergebnisse dieser Arbeit wurden in einer Reihe von Artikeln veröffentlicht [29, 30, 33, 31, 34, 32].

# Anhang A

## Begriffe und Bezeichnungen

### A.1 Funktionenräume

Die im Text systematisch verwendeten Funktionenräume werden an dieser Stelle kurz definiert. Für weitere Einzelheiten verweisen wir z.B. auf [87, 40]

Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ ,  $m = 2, 3$  ein offenes, zusammenhängendes Gebiet,  $\alpha$  ein sog. Multi-Index,  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$ ,  $\alpha_i \in \mathbb{N}_0$  und  $n \in \mathbb{N}_0$  eine ganze, nicht-negative Zahl. Wir führen folgende Abkürzung für die partiellen Ableitungen einer Funktion  $u(x)$  ein:

$$D^\alpha u = \frac{\partial^{\alpha_1 + \dots + \alpha_m} u}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_m^{\alpha_m}}, \quad |\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_m, \quad \alpha_i \in \mathbb{N}_0. \quad (\text{A.1})$$

Wir bezeichnen mit  $C^n(\Omega)$  die Menge aller Funktionen  $u(x)$ ,  $x \in \Omega$ , die stetige und beschränkte Ableitungen  $D^\alpha u(x)$ ,  $|\alpha| \leq n$  (d.h. bis zur Ordnung  $n$ ) besitzen. Die entsprechende Norm  $\|u(x)\|_{C^n}$  definieren wir mit

$$\|u(x)\|_{C^n} = \sup_{\substack{|\alpha| \leq n \\ x \in \Omega}} |D^\alpha u(x)|. \quad (\text{A.2})$$

Mit  $L^p(\Omega)$  bezeichnen wir die Menge aller Funktionen  $u(x)$ ,  $x \in \Omega$ , deren  $p$ -te Potenz LEBESGUE-integrierbar ist, d.h. für die gilt

$$\int_{\Omega} |u(x)|^p dx < \infty, \quad (\text{A.3})$$

für die entsprechende Norm gilt

$$\|u(x)\|_{L^p} = \left[ \int_{\Omega} |u(x)|^p dx \right]^{1/p}. \quad (\text{A.4})$$

Wir führen ausserdem mit

$$H^n(\Omega) := \{u \in L^2(\Omega) : D^\alpha u \in L^2(\Omega), 0 \leq |\alpha| \leq n\} \quad (\text{A.5})$$

den üblichen SOBOLEV-Raum aller Funktionen, die zusammen mit ihren im Sinne von Distributionen zu verstehenden Ableitungen bis einschliesslich der Ordnung  $n$  quadratisch-integrierbar sind. Im Falle nicht-ganzzahliger Exponenten  $S$  bezeichnen wir mit  $n$  den ganzzahligen Wert und mit  $\sigma$  den Bruchrest, so dass  $S = n + \sigma, 0 \leq \sigma < 1$ . Den SOBOLEV-Raum  $H^S(\Omega)$  definieren wir mit

$$H^S(\Omega) := \{u \in H^n(\Omega) : \iint_{\Omega \times \Omega} \frac{|D^\alpha u(x) - D^\alpha u(y)|^2}{|x - y|^{m+2\sigma}} dx dy < \infty, |\alpha| \leq n\}. \quad (\text{A.6})$$

Die entsprechenden Normen sind im Fall ganzzahliger Exponenten mit

$$\|u(x)\|_{H^n} = \left[ \sum_{|\alpha| \leq n} \int_{\Omega} |D^\alpha u(x)|^2 dx \right]^{1/2} \quad (\text{A.7})$$

und im Fall nicht-ganzzahliger Exponenten mit

$$\|u(x)\|_{H^S} = \left[ \|u(x)\|_{H^n}^2 + \sum_{|\alpha| \leq n} \iint_{\Omega \times \Omega} \frac{|D^\alpha u(x) - D^\alpha u(y)|^2}{|x - y|^{m+2\sigma}} dx dy \right]^{1/2} \quad (\text{A.8})$$

definiert. Obige Definitionen gelten auch für vektorwertige Funktionen. In diesem Fall ist das Quadrat der Norm einer Vektor-Funktion die Summe der Quadrate der Normen aller Komponenten.

Der Zusammenhang zwischen den Räumen  $H^S(\Omega)$  und  $C^k(\Omega)$  wird durch den folgenden Satz beschrieben:

**Theorem 5:** (Satz von SOBOLEV, s.a. Satz 1.2.14 in [40]) *Es gilt die folgende Einbettung*

$$H^S(\mathbb{R}^m) \subset C^k(\mathbb{R}^m), \quad \forall k < S - m/2, \quad k \text{ ganzzahlig.} \quad (\text{A.9})$$

## A.2 Operatorbündel

Wir geben hier einige Definitionen und Erläuterungen hinsichtlich der Eigenschaften von Operatorbündeln. Für weitere Einzelheiten, insbesondere was den Zusammenhang mit Singularitäten betrifft, verweisen wir auf [52].

Seien  $X$  und  $Y$  zwei HILBERT-Räume mit entsprechendem Skalarprodukt und Norm sowie  $L(X, Y)$  die Menge aller linearen Operatoren von  $X$  nach  $Y$ . Das Operatorenpolynom

$$\mathfrak{A}(\lambda) = \sum_{k=0}^n \lambda^k \mathfrak{A}_k, \quad \lambda \in \mathbb{C}, \mathfrak{A}_k \in L(X, Y) \quad (\text{A.10})$$

wird im folgenden *Operatorbündel* genannt. In dieser Arbeit werden nur quadratische Polynome solcher Art betrachtet.

Die Zahl  $\lambda_0$  wird als *Eigenwert* des Bündels bezeichnet, falls die Gleichung

$$\mathfrak{A}(\lambda_0)u_0 = 0 \quad (\text{A.11})$$

eine nicht-triviale Lösung  $u_0 \in X \setminus \{0\}$  besitzt,  $u_0$  wird *Eigenvektor* genannt. Die Menge aller Eigenwerte

$$\sigma(\mathfrak{A}) \subset \mathbb{C} \quad (\text{A.12})$$

bezeichnen wir als *Spektrum* des Operators. Der Raum

$$U(\mathfrak{A}, \lambda_0) := \{u : \mathfrak{A}(\lambda_0)u = 0\} \cup \{0\} \quad (\text{A.13})$$

aller zu einem bestimmten Eigenwert  $\lambda_0$  gehörenden Eigenvektoren wird *Eigenraum* bezüglich  $\lambda_0$  genannt. Die Dimension dieses Eigenraums

$$I(\mathfrak{A}, \lambda_0) := \dim U(\mathfrak{A}, \lambda_0) \quad (\text{A.14})$$

bezeichnen wir als *geometrische Multiplizität* des Eigenwertes  $\lambda_0$ .

Sei nun  $\lambda_0$  ein Eigenwert und  $u_0$  ein entsprechender Eigenvektor. Falls die Funktionen  $u_1, \dots, u_{s-1} \in X$  die Gleichung

$$\sum_{k=0}^j \frac{1}{k!} \mathfrak{A}^{(k)}(\lambda_0) u_{j-k} = 0, \quad j = 1, \dots, s-1 \quad (\text{A.15})$$

erfüllen, wobei unter  $\mathfrak{A}^{(k)} = d^k \mathfrak{A} / d\lambda^k$  die  $k$ -te Ableitung nach  $\lambda$  zu verstehen ist, dann nennen wir  $u_0, \dots, u_{s-1}$  eine *JORDAN-Kette* von  $\mathfrak{A}$  bezüglich  $\lambda_0$ . Die

Funktionen  $u_1, \dots, u_{s-1}$  werden zu  $u_0$  gehörende *verallgemeinerte Eigenvektoren* genannt. Sei nun  $m(u_0)$  die maximale Länge der JORDAN-Ketten von  $u_0$  und  $I$  die geometrische Multiplizität von  $\lambda_0$ . Die Menge der JORDAN-Ketten

$$\{u_{j,0}, u_{j,1}, \dots, u_{j,k_{j-1}}\}, \quad j = 1, \dots, I \quad (\text{A.16})$$

stellt ein *kanonisches System* von (generalisierten) Eigenvektoren dar, falls die Menge

$$u_{1,0}, \dots, u_{I,0} \quad (\text{A.17})$$

eine Basis in  $\ker \mathfrak{A}(\lambda_0)$  bildet und

$$m(u_{j,0}) = \max_{u \in \ker \mathfrak{A}(\lambda_0) \setminus M_j} m(u), \quad j = 1, \dots, I, \quad (\text{A.18})$$

wobei  $M_j = \text{span}\{u_{1,0}, \dots, u_{j-1,0}\}$ . Die Zahlen  $k_j = m(u_{j,0})$  werden *partielle Multiplizität* des Eigenwertes  $\lambda_0$  genannt. Die Summe  $k = k_1 + \dots + k_I$  bezeichnen wir als *algebraische Multiplizität* des Eigenwertes  $\lambda_0$ .

Falls die algebraische und geometrische Multiplizität eines Eigenwertes nicht übereinstimmen, wird dieser *defektiert*, andernfalls *nicht-defektiert* oder *regulär* genannt.

## A.3 Matrizen

Wir geben hier einige Matrixdefinitionen, die bei der Formulierung im Text aus Platzgründen ausgelassen wurden.

Der symmetrische Gradientenoperator in Matrix-Form  $\mathfrak{D}$  definiert den (kinematischen) Zusammenhang zwischen dem Verschiebungsvektor  $\mathbf{u}^T = [u, v, w]$  und dem Verzerrungsvektor  $\boldsymbol{\varepsilon}^T = [\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z, 2\varepsilon_{xy}, 2\varepsilon_{xz}, 2\varepsilon_{yz}]$ , mit  $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathfrak{D}\mathbf{u}$  und kann wie folgt angegeben werden:

$$\mathfrak{D} := \begin{bmatrix} \partial_x & 0 & 0 \\ 0 & \partial_y & 0 \\ 0 & 0 & \partial_z \\ \partial_y & \partial_x & 0 \\ \partial_z & 0 & \partial_x \\ 0 & \partial_z & \partial_y \end{bmatrix}. \quad (\text{A.19})$$

Die BOOLE'sche Matrix des Verschiebungsvektors  $\mathbf{T}_d$  soll die Einträge im Knotenverschiebungsvektor auf geeignete Art und Weise umordnen:

$$[u_1^i, v_1^i, w_1^i, \dots, u_K^i, v_K^i, w_K^i]^T = \mathbf{T}_d [u_1^i, \dots, u_K^i, v_1^i, \dots, v_K^i, w_1^i, \dots, w_K^i]^T. \quad (\text{A.20})$$

Im Falle linearer Approximation mit  $K = 3$  ist diese gegeben durch:

$$\mathbf{T}_d := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.21})$$

Der Zusammenhang für höhere Approximationsordnungen ist analog.

Der Verzerrungsvektor  $\boldsymbol{\varepsilon}_i^h = \mathbf{T}_\varepsilon \mathbf{g}_i^h$  kann aus dem Vektor

$$\mathbf{g}_i^h = [\partial_x u, \partial_y u, \partial_z u, \dots, \partial_x w, \partial_y w, \partial_z w]^T$$

des Verschiebungsgradienten mittels der BOOLE'schen Matrix  $\mathbf{T}_\varepsilon$  berechnet werden, diese ist gegeben durch

$$\mathbf{T}_\varepsilon := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.22})$$



# Anhang B

## Konstitutive Gleichungen

Die konstitutiven Gleichungen geben den (linearen) Zusammenhang zwischen Spannungen und Verzerrungen vor und können über das verallgemeinerte HOOKE'sche Gesetz im Hauptmaterialkoordinatensystem wie folgt angegeben werden:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{u}_i^h) = \hat{\mathbf{C}} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{u}_i^h). \quad (\text{B.1})$$

Die symmetrische  $6 \times 6$  Matrix  $\hat{\mathbf{C}}$  hängt allgemein von 21 Materialkonstanten ab. Im Falle von orthotropen Materialien gilt

$$\hat{\mathbf{C}} := \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & & & \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & & & \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & & & \\ & & & C_{44} & & \\ & & & & C_{55} & \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

so dass 9 unabhängige Materialkonstanten vorliegen [71]. Die Koeffizienten  $C_{ij}$  können durch die im Ingenieur-Bereich geläufigen Konstanten  $E_i, \nu_{ij}$  and  $G_{ij}$  ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} C_{11} &= E_1 \frac{1 - \nu_{23}\nu_{32}}{\Delta}, & C_{12} &= E_1 \frac{\nu_{21} + \nu_{31}\nu_{23}}{\Delta}, & C_{13} &= E_1 \frac{\nu_{31} + \nu_{21}\nu_{32}}{\Delta}, \\ C_{22} &= E_2 \frac{1 - \nu_{13}\nu_{31}}{\Delta}, & C_{23} &= E_2 \frac{\nu_{32} + \nu_{12}\nu_{31}}{\Delta}, & C_{33} &= E_3 \frac{1 - \nu_{12}\nu_{21}}{\Delta}, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

$$C_{44} = G_{12}, \quad C_{55} = G_{13}, \quad C_{66} = G_{23},$$

$$\Delta = 1 - \nu_{12}\nu_{21} - \nu_{23}\nu_{32} - \nu_{31}\nu_{13} - 2\nu_{21}\nu_{32}\nu_{13},$$

wobei

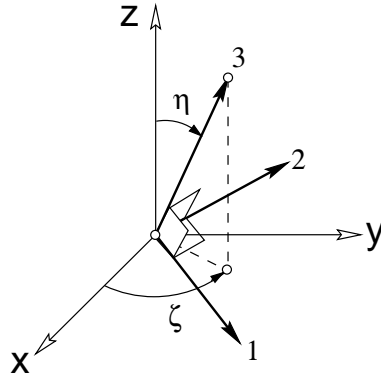


ABBILDUNG B.1: Zusammenhang zwischen dem Materialkoordinatensystem  $(1, 2, 3)$  und dem globalen Koordinatensystem  $(x, y, z)$ .

- $E_1, E_2, E_3$  sind die elastischen Moduli in den Richtungen 1,2,3,
- $\nu_{ij}$  sind die Querkontraktionszahl-Koeffizienten,
- $G_{ij}$  sind die Schub-Moduli in den Ebenen  $i - j$ .

Im Falle isotroper Materialien gilt

$$\hat{C} := C \begin{bmatrix} 1 - \nu & \nu & \nu & & & \\ \nu & 1 - \nu & \nu & & & \\ \nu & \nu & 1 - \nu & & & \\ & & & 0.5 - \nu & & \\ & & & & 0.5 - \nu & \\ & & & & & 0.5 - \nu \end{bmatrix} \quad (\text{B.4})$$

$$C := \frac{E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}$$

und es sind nur zwei Konstanten — z.B. der Elastizitätsmodul  $E$  und die Querkontraktionszahl  $\nu$  für die Beschreibung eines solchen Materialverhaltens notwendig.

Falls das globale Koordinatensystem nicht mit dem Materialkoordinatensystem übereinstimmt, wie im allgemeinen bei inhomogenen Problemen der Fall, dann müssen Transformationen durchgeführt werden.

Es sei  $(x, y, z)$  das globale Koordinatensystem mit der Basis  $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$  und  $(1, 2, 3)$  das Materialkoordinatensystem mit der Basis  $(\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3)$ , in dem die linearen konstitutiven Gleichungen definiert wurden. Wir betrachten eine allgemeine

Transformation zwischen beiden Koordinatensystemen, bei der die Einheitsvektoren durch

$$\hat{\mathbf{e}}_i = a_{ik} \mathbf{e}_k. \quad (\text{B.5})$$

abgebildet werden. Ein Tensor 2. Stufe hat in beiden Koordinatensystemen folgende Darstellung:

$$\Phi_{x,y,z} = \hat{\phi}_{mn} \hat{\mathbf{e}}_m \hat{\mathbf{e}}_n \quad (\text{B.6})$$

$$\hat{\Phi}_{1,2,3} = \phi_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j. \quad (\text{B.7})$$

Einsetzen von (B.5) in (B.7) liefert

$$\Phi_{x,y,z} = \phi_{ij} a_{mi} a_{nj} \hat{\mathbf{e}}_m \hat{\mathbf{e}}_n. \quad (\text{B.8})$$

Der Vergleich von (B.8) und (B.6) führt zur folgenden Beziehung:

$$\hat{\phi}_{mn} = a_{mi} a_{nj} \phi_{ij}, \quad (\text{B.9})$$

oder in Matrix-Notation

$$[\hat{\phi}] = \mathbf{A} [\phi] \mathbf{A}^T, \quad \mathbf{A} = [a_{ij}], \quad [\phi] = [\phi_{ij}], \quad [\hat{\phi}] = [\hat{\phi}_{ij}]. \quad (\text{B.10})$$

Wir weisen darauf hin, dass  $[\phi]$  hier eine *Matrix* ist und kein Vektor. Für eine FE-Formulierung ist es jedoch erforderlich, die Tensoren 2. Stufe (Spannungen und Verzerrungen) als Vektoren und die Tensoren 4. Stufe (Elastizitätstensor) als Matrizen darzustellen. Wir bringen daher Gleichung (B.10) in die Form

$$\hat{\phi} = \mathbf{T}_\phi \phi, \quad (\text{B.11})$$

wobei die Matrix  $\mathbf{T}_\phi$  durch Umgruppieren der Einträge von  $\mathbf{A} [\phi] \mathbf{A}^T$  berechnet werden kann und  $\phi, \hat{\phi}$  zwei Vektoren sind, die alle unabhängige Einträge der Tensoren  $\hat{\phi}_{mn}, \phi_{ij}$  enthalten (im Falle symmetrischer Tensoren in  $\mathbb{R}^3$  sind dies 6 Einträge).

Wir betrachten nun konkret folgende Transformation zwischen beiden Koordinatensystemen: Zuerst eine Rotation um  $z$  um den Winkel  $\zeta$  und anschließend eine Rotation um  $y$  um den Winkel  $\eta$ , siehe Bild B.1. Die Transformationsmatrix  $\mathbf{A}$  hat damit folgende Darstellung

$$\mathbf{A} := \begin{bmatrix} c_\eta c_\zeta & c_\eta s_\zeta & -s_\eta \\ -s_\zeta & c_\zeta & 0 \\ s_\eta c_\zeta & s_\eta s_\zeta & c_\eta \end{bmatrix} \quad (\text{B.12})$$

$$s_\zeta = \sin(\zeta) \quad c_\zeta = \cos(\zeta) \quad s_\eta = \sin(\eta) \quad c_\eta = \cos(\eta)$$

. Der Spannungsvektor

$$\boldsymbol{\sigma}_{x,y,z}^T := [\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \tau_{xy}, \tau_{xz}, \tau_{yz}], \quad (\text{B.13})$$

kann somit aus

$$\boldsymbol{\sigma}_{1,2,3}^T := [\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \tau_{12}, \tau_{13}, \tau_{23}], \quad (\text{B.14})$$

durch die Transformation (siehe (B.11))

$$\boldsymbol{\sigma}_{x,y,z} = \mathbf{T}_\sigma^T(\eta, \zeta) \boldsymbol{\sigma}_{1,2,3} \quad (\text{B.15})$$

mit

$$\mathbf{T}_\sigma^T(\eta, \zeta) = \begin{bmatrix} c_\zeta^2 c_\eta^2 & s_\zeta^2 & c_\zeta^2 s_\eta^2 & -2 s_\zeta c_\zeta c_\eta & 2 c_\zeta^2 s_\eta c_\eta & -2 s_\eta s_\zeta c_\zeta \\ c_\eta^2 s_\zeta^2 & c_\zeta^2 & s_\eta^2 s_\zeta^2 & 2 s_\zeta c_\zeta c_\eta & 2 s_\zeta^2 s_\eta c_\eta & 2 s_\eta s_\zeta c_\zeta \\ s_\eta^2 & 0 & c_\eta^2 & 0 & -2 s_\eta c_\eta & 0 \\ c_\eta^2 s_\zeta c_\zeta & -s_\zeta c_\zeta & s_\eta^2 s_\zeta c_\zeta & c_\eta(2c_\zeta^2 - 1) & 2 s_\eta c_\eta s_\zeta c_\zeta & s_\eta(2c_\zeta^2 - 1) \\ -c_\zeta s_\eta c_\eta & 0 & c_\zeta s_\eta c_\eta & s_\eta s_\zeta & c_\zeta(2c_\eta^2 - 1) & -c_\eta s_\zeta \\ -s_\zeta s_\eta c_\eta & 0 & s_\zeta s_\eta c_\eta & -s_\eta c_\zeta & s_\zeta(2c_\eta^2 - 1) & c_\eta c_\zeta \end{bmatrix}. \quad (\text{B.16})$$

berechnet werden. Der Verzerrungsvektor

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{x,y,z}^T = [\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z, 2\varepsilon_{xy}, 2\varepsilon_{xz}, 2\varepsilon_{yz}], \quad (\text{B.17})$$

kann analog aus

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{1,2,3}^T = [\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, 2\varepsilon_{12}, 2\varepsilon_{13}, 2\varepsilon_{23}], \quad (\text{B.18})$$

durch

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{x,y,z} = \mathbf{T}_\varepsilon^T(\eta, \zeta) \boldsymbol{\varepsilon}_{1,2,3} \quad (\text{B.19})$$

berechnet werden, wobei

$$\mathbf{T}_\varepsilon^T = [\mathbf{I}, 2\mathbf{I}] \mathbf{T}_\sigma^T [\mathbf{I}, 1/2\mathbf{I}], \quad (\text{B.20})$$

mit der Bezeichnung

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.21})$$

wegen des Koeffizienten 2 vor  $\varepsilon_{xy}, \varepsilon_{xz}, \varepsilon_{yz}$  bzw.  $\varepsilon_{12}, \varepsilon_{13}, \varepsilon_{23}$  in den Verzerrungsvektoren  $\boldsymbol{\varepsilon}_{x,y,z}, \boldsymbol{\varepsilon}_{1,2,3}$ .

Wir suchen nun eine Matrix  $\mathbf{C}$ , die im globalen  $(x, y, z)$  Koordinatensystem die konstitutive Gleichung

$$\boldsymbol{\sigma}_{x,y,z} = \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}_{x,y,z} \quad (\text{B.22})$$

definieren soll. Einsetzen von (B.15) und (B.19) in (B.22) liefert unter Berücksichtigung von (B.1)

$$\mathbf{T}_\sigma^T \hat{\mathbf{C}} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{C} \mathbf{T}_\varepsilon^T \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (\text{B.23})$$

Die Matrix der elastischen Konstanten  $\mathbf{C}$  in globalen Koordinaten kann somit wie folgt angegeben werden:

$$\mathbf{C} = \mathbf{T}_\sigma^T(\eta, \zeta) \hat{\mathbf{C}} \mathbf{T}_\varepsilon(\eta, \zeta). \quad (\text{B.24})$$

Die konstitutiven Gleichungen im globalen Koordinatensystem  $(x, y, z)$  lauten daher

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_i^h) = \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_i^h). \quad (\text{B.25})$$

# Literaturverzeichnis

- [1] M. Ainsworth, J.Z. Zhu, A.W. Craig, and O.C. Zienkiewicz. Analysis of the Zienkiewicz-Zhu a posteriori error estimator in the finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 28:2161–2174, 1989.
- [2] T.L. Anderson. *Fracture mechanics: fundamentals and applications*. CRC Press, Boca Raton, 1991.
- [3] T. Apel, V. Mehrmann, and D. Watkins. Structured eigenvalue methods for the computation of corner singularities in 3d anisotropic elastic structures. Preprint SFB393/01-25, Technical University Chemnitz, Germany, 2001.
- [4] T. Apel, A.-M. Sändig, and S.I. Solov’ev. Computation of 3D vertex singularities for linear elasticity: Error estimates for a finite element method on graded meshes. Preprint SFB393/01-33, Technical University Chemnitz, Germany, 2001.
- [5] T. Apel, A.M. Sändig, and J.R. Whiteman. Graded mesh refinement and error estimates for finite element solutions of elliptic boundary value problems in non-smooth domains. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 19:63–85, 1996.
- [6] I. Babuska. Can the h, p and h-p versions solve problems with corners singularities effectively? TICAM Forum Notes No. 3, Internet publication: <http://www.ticam.utexas.edu/ticam-forum/report3.ps>, 1997.
- [7] I. Babuska. A model study of the quality of a posteriori error estimators for finite element solutions of linear elliptic problems, with particular reference to the behavior near the boundary. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40:2521–2577, 1997.
- [8] I. Babuska and A.K. Aziz. Survey lectures on the mathematical foundations of the finite element method. In A.K. Aziz, editor, *The Mathematical*

- Foundations of the Finite Element Method with Applications to Partial Differential Equations.* Academic Press, New York, 1972.
- [9] S. Balay, W.D. Gropp, L.C. McInnes, and B.F. Smith. PETSc 2.0 User's manual. Technical Report ANL-95/11 - Revision 2.0.29, Argonne National Laboratory, 2000.
- [10] R.S. Barsoum. Theoretical basis of the finite element iterative method for the eigenvalue problem in stationary cracks. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 26:531–539, 1988.
- [11] Z.P. Bazant and L.F. Estensoro. Surface singularity and crack propagation. *International Journal of Solids and Structures*, 15:405–426, 1979.
- [12] Z.P. Bazant and L. Keer. Singularities of elastic stresses and of harmonic functions at conical notches or inclusions. *International Journal of Solids and Structures*, 10:957–964, 1974.
- [13] A.E. Beagles and A.-M. Sändig. Singularities of rotationally symmetric solutions of boundary value problems for the Lamé equations. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik - ZAMM*, 71:423–431, 1991.
- [14] I. Becker. *Numerische Berechnung von Ecken- und Kantensingularitäten elastischer Felder für dreidimensionale Rissprobleme.* PhD thesis, Institut für Technische Mechanik, Universität Karlsruhe (TH), 1990.
- [15] J.P. Benthem. State of stress at the vertex of a quarter-infinite crack in a half-space. *International Journal of Solids and Structures*, 13:479–492, 1977.
- [16] H. Blum and M. Dobrowolski. On finite element methods for elliptic equations on domains with corners. *Computing*, 28:53–63, 1982.
- [17] D. Broeck. *Elementary engineering fracture mechanics.* Martinus Nijhoff, Boston, 3. edition, 1982.
- [18] F.-G. Buchholz, A. Chergui, and H.A. Richard. Computational fracture analysis by the MVCCI-method regarding 3D and mode coupling effects for different specimens and loading conditions. In M.M. de Freitas, editor, *Proc. of the 6th Int. Conf. on Biaxial/Multiaxial Fatigue & Fracture, Vol. II*, pages 991–998, Lisboa, Portugal, June 2001.
- [19] F.-G. Buchholz, A. Chergui, and H.A. Richard. Fracture analyses and experimental results on crack growth under general mixed mode loading conditions. In M. Guagliano and M.H. Aliabadi, editors, *Advances in fracture*

- and damage mechanics II. Proc. of the 2nd Int. Conf. on fracture and damage mechanics*, pages 451–456, Milan, Italy, 18-20 September 2001. Hoggar, Geneva, 2001.
- [20] F.-G. Buchholz, H. Grebner, K.-H. Dreyer, and H. Krome. 2D- and 3D-applications of the improved and generalized modified crack closure integral method. In S.N. Atluri and G. Yagawa, editors, *Computational Mechanics. Proc. of the Int. Conf. on Comp. Eng. Sci. (ICES 88) Vol. I*, pages 14.i.1–14.i.4, Atlanta, Georgia, USA, April 1988. Springer, New York, 1988.
- [21] F.-G. Buchholz, H. Wang, J. Lin, and H.A. Richard. 3D finite-element-analysis of different test specimens for investigations on mixed mode I, II and III fracture. In *Computational Mechanics. CD-ROM Proc. of the 4th World Congr. on Comp. Mech. (WCCM IV)*, pages 1–21, Part III, Section 4, Paper 1, Buenos Aires, Argentina, 29 June - 2 July 1998.
- [22] A.W. Bush. *Perturbation Methods for Engineers and Scientists*. CRC Press, Boca Raton, 1992.
- [23] P.G. Ciarlet. *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. Number 4 in Studies in Mathematics and its Applications. North-Holland Publishing, Amsterdam, 1978.
- [24] M. Costabel, M. Dauge, and R. Duduchava. Asymptotics without logarithmic terms for crack problems. Prépublication 01-50, Institut de Recherche Mathématique de Rennes, France, 2001.
- [25] M. Costabel, M. Dauge, and Y. Lafranche. A fast semi-analytic method for the computation of elastic edge singularities. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190:2111–2134, 2001.
- [26] M. Dauge. *Elliptic Boundary Value Problems on Corner Domains. Smoothness and Asymptotics of Solutions*. Number 1341 in Lecture notes in mathematics. Springer, Berlin, 1988.
- [27] M. Dauge. “Simple” corner-edge asymptotics. Internet publication, <http://www.maths.univ-rennes1.fr/~dauge/publis/corneredge.pdf>, 2000.
- [28] G. Dhondt, A. Chergui, and F.-G. Buchholz. Computational fracture analysis of different specimens regarding 3D and mode coupling effects. *Engineering Fracture Mechanics*, 68:383–401, 2001.
- [29] A. Dimitrov, H. Andrä, and E. Schnack. Efficient computation of order and mode of corner singularities in 3D - elasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 52:805–827, 2001.



- [30] A. Dimitrov, H. Andrä, and E. Schnack. Singularities near three-dimensional corners in composite laminates. *International Journal of Fracture*, 115:361–375, 2002.
- [31] A. Dimitrov, F.-G. Buchholz, and E. Schnack. Free-surface effects in crack propagation: a theoretical-numerical-experimental correlation. Preprint 01-2002, Institut für Technische Mechanik, Universität Karlsruhe (TH).
- [32] A. Dimitrov, F.-G. Buchholz, and E. Schnack. 3D-corner effects in crack propagation. In H.A. Mang, F.G. Rammerstorfer, and J. Eberhardsteiner, editors, *On-line Proc. of the 5th World Congress in Comp. Mech. (WCCM V)*, Vienna, Austria, July 7–12 2002. <http://wccm.tuwien.ac.at/index.html>.
- [33] A. Dimitrov and E. Schnack. Asymptotical expansion in non-Lipschitzian domains — a numerical approach. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 9:467–492, 2002.
- [34] A. Dimitrov and E. Schnack. Stress singularities in multi-material structures. In M.A. Efendiev and W.L. Wendland, editors, *Proc. of the Int. Conf. on Multifield Problems*, Stuttgart, Germany, April 8-10 2002. Springer, New York, 2002.
- [35] G. Fix, S. Gulati, and G.I. Wakoff. On the use of singular functions with finite element approximations. *Journal of Computational Physics*, 13:209–238, 1973.
- [36] F. Ghahremani. A numerical variational method for extracting 3D singularities. *International Journal of Solids and Structures*, 27:1371–1386, 1991.
- [37] E. Glushkov, N. Glushkova, and O. Lapina. 3-D elastic stress singularity at polyhedral corner points. *International Journal of Solids and Structures*, 36:1105–1128, 1999.
- [38] O.H. Griffin. Three dimensional thermal stresses in angle-ply composite laminates. *Journal of Composite Materials*, 22:53–69, 1988.
- [39] O.H. Griffin and J.C. Roberts. Numerical/experimental correlation of three dimensional thermal stress distributions in graphite/epoxy laminates. *Journal of Composite Materials*, 17:539–548, 1983.
- [40] P. Grisvard. *Singularities in Boundary Value Problems*. Number 22 in Recherches en Mathématiques Appliquées. Masson, Springer, Paris, 1992.
- [41] D. Gross. *Bruchmechanik*. Springer, Berlin, 2. edition, 1996.

- [42] L. Gu and T. Belytschko. A numerical study of stress singularities in a two-material wedge. *International Journal of Solids and Structures*, 31:865–889, 1994.
- [43] R.J. Hartranft and G.C. Sih. Stress singularity for a crack with an arbitrarily curved front. *Engineering Fracture Mechanics*, 9:705–718, 1977.
- [44] M. Hussain, S. Pu, and J. Underwood. Strain energy release rate for a crack under combined mode I and mode II. *ASTM, STP*, 560:2–28, 1974.
- [45] M. Imanaka, K. Ishii, and H. Nakayama. Evaluation of fatigue strength of adhesively bonded single and single step double lap joints based on stress singularity parameters. *Engineering Fracture Mechanics*, 62:409–424, 1999.
- [46] M.F. Kanninen and C.H. Popelar. *Advanced fracture mechanics*. Oxford University Press, New York, 1985.
- [47] M.K. Kassir and G.C. Sih. *Mechanics of Fracture 2 — Three Dimensional Crack Problems*. Noordhoff, Leyden, 1975.
- [48] N.W. Klingbeil and J.L. Beuth. On the design of debond-resistant bimerials. Part I: Free-edge singularity approach. *Engineering Fracture Mechanics*, 66:93–110, 2000.
- [49] N.W. Klingbeil and J.L. Beuth. On the design of debond-resistant bimerials. Part II: A comparison of free-edge and interface crack approaches. *Engineering Fracture Mechanics*, 66:111–128, 2000.
- [50] V.A. Kondratiev. Boundary problems for elliptic equations in domains with conical or angular points. *Transact. Moscow Math. Soc.*, 16:227–313, 1967.
- [51] V.A. Kozlov, V.G. Maz'ya, and J. Rossmann. *Elliptic Boundary Value Problems in Domains with Point Singularities*. Number 52 in Mathematical Surveys and Monographs. AMS, 1997.
- [52] V.A. Kozlov, V.G. Maz'ya, and J. Rossmann. *Spectral Problems Associated with Corner Singularities of Solutions to Elliptic Equations*. Number 85 in Mathematical Surveys and Monographs. AMS, 2000.
- [53] V.A. Kozlov, V.G. Maz'ya, and C. Schwab. On singularities of solutions of the displacement problem of linear elasticity near the vertex of a cone. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 119:197–227, 1992.
- [54] D. Leguillon. Asymptotic and numerical analysis of a crack branching in non-isotropic materials. *European Journal of Mechanics, A/Solids*, 12:33–51, 1993.

- [55] D. Leguillon. Computation of 3D singularities in elasticity. In M. Costabel, M. Dauge, and S. Nicaise, editors, *Boundary Value Problems and Integral Equations in Nonsmooth Domains*, number 167 in Lecture Notes in Pure and Applied Mathematics, pages 161–170. Dekker, New York, 1995. Proc. of the Conf. at the CIRM, Lumini, May 3-7 1993.
- [56] D. Leguillon. A criterion for crack nucleation at a notch in homogeneous materials. *C.R.Acad.Sci.Paris, Série IIb* 329:97–102, 2001.
- [57] D. Leguillon and E. Sanchez-Palencia. *Computation of Singular Solutions in Elliptic Problems and Elasticity*. Masson, Wiley, Paris, 1987.
- [58] D. Leguillon and E. Sanchez-Palencia. Fracture in heterogeneous materials. Weak and strong singularities. In P. Ladaveze and O.C. Zienkiewicz, editors, *New advances in Computational Structural Mechanics*, pages 423–434. Elsevier, 1992.
- [59] D. Leguillon and E. Sanchez-Palencia. On 3D cracks intersecting a free surface in laminated composites. *International Journal of Fracture*, 99:25–40, 1999.
- [60] R.B. Lehoucq, D.C. Sorensen, and C. Yang. ARPACK User's guide: Solution of large scale eigenvalue problems with implicitly restarted Arnoldi methods. Internet publication, <ftp://ftp.caam.rice.edu/pub/software/ARPACK>, 1998.
- [61] J.L. Lions and E. Magenes. *Non-homogeneous boundary value problems and applications*, volume I-III of *Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften in Einzeldarstellungen*. Springer, Berlin, 1972,1973.
- [62] V.G. Mazja, S.A. Nasarow, and B.A. Plamenewski. *Asymptotische Theorie elliptischer Randwertaufgaben in singulär gestörten Gebieten*. Mathematische Lehrbücher und Monographien: 2. Abteilung. Akademie-Verlag, 1991.
- [63] N.V. Movchan and S.A. Nazarov. Asymptotics of the order of singularity for the wedge-shaped cracks. *Bulletin of Leningrad State University Series 1*, 3:34–38, 1990. In Russian.
- [64] Y. Murakami. *Stress intensity factors handbook*. Pergamon, Oxford, 1987.
- [65] S.A. Nazarov and A.S. Slutskii. The asymptotic form of the stressed state near a three-dimensional boundary singularity of the claw type. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 63:943–951, 1999.
- [66] S. Nicaise and A.-M. Sändig. General interface problems, Part 1&2. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 17:395–450, 1994.

- [67] S.S. Pageau and S.B. Biggers. A finite element approach to three-dimensional singular stress states in anisotropic multi-material wedges and junctions. *International Journal of Solids and Structures*, 33:33–47, 1996.
- [68] V.V. Panasyuk, A.E. Andrejkiv, and M.M. Stadnik. Three-dimensional static crack problem solutions (a review). *Engineering Fracture Mechanics*, 14:245–260, 1981.
- [69] L.P. Pook. A finite element analysis of the angle crack specimen. In H.P. Rossmanith and K.J. Miller, editors, *Mixed-Mode Fatigue and Fracture*, pages 285–302. Mechanical Engineering Publ., 1993.
- [70] L.P. Pook. On fatigue crack paths. *International Journal of Fatigue*, 17:5–14, 1995.
- [71] J.N. Reddy. *Mechanics of laminated composite plates: theory and analysis*. CRC Press, Boca Raton, 1996.
- [72] E.F. Rybicki and M.F. Kanninen. A finite element calculation of stress intensity factors by a modified crack closure integral. *Engineering Fracture Mechanics*, 9:931–938, 1977.
- [73] Y. Saad. Variations on Arnoldi’s method for computing eigenelements of large unsymmetric matrices. *Linear Algebra and Its Applications*, 34:269–295, 1980.
- [74] H. Schmitz, K. Volk, and W. Wendland. Three-dimensional singularities of elastic fields near vertices. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 9:323–337, 1993.
- [75] E. Schnack and I. Becker. Numerical computation of three-dimensional crack problems. In *IX Symposium on "Verformung und Bruch"*, volume I: Plenary Lectures, pages 155–158, Magdeburg, Germany, 28-30 August 1991. Technical University "Otto von Guericke" Magdeburg.
- [76] J. R. Shewchuk. TRIANGLE: Engineering a 2d quality mesh generator and delaunay triangulator. Internet publication, <http://www.cs.cnu.edu/~quake/triangle.html>, 1996.
- [77] G.C. Sih. A review of the three-dimensional stress problem for a cracked plate. *International Journal of Fracture Mechanics*, 7:39–61, 1971.
- [78] N. Somaratna and T.C.T. Ting. Three-dimensional stress singularities in anisotropic materials and composites. *International Journal of Engineering Sciences*, 24:1115–1134, 1986.

- [79] V. Staroverov, G. Kobelkov, E. Schnack, and A. Dimitrov. On numerical methods for flat crack propagation. Preprint 2-1999, Institut für Technische Mechanik, Universität Karlsruhe (TH), 1999.
- [80] B.A. Szabo and Z. Yosibash. Numerical analysis of singularities in two dimensions, Part 2: Computation of generalized flux/stress intensity factors. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 39:409–434, 1996.
- [81] F. Tisseur and K. Meerbergen. The quadratic eigenvalue problem. *SIAM Review*, 43:235–286, 2001.
- [82] T. v. Petersdorff. *Randwertproblem der Elastizitätstheorie für Polyeder-Singularitäten und Approximation mit Randelementmethoden*. PhD thesis, Technische Hochschule Darmstadt, 1989.
- [83] S.S. Wang and I. Choi. Boundary-layer effects in composite laminates: Part 1 and 2. *Journal of Applied Mechanics*, 49:541–560, 1982.
- [84] H.M. Westergaard. Bearing pressures and cracks. *Journal of Applied Mechanics*, 61:A49–53, 1939.
- [85] M.L. Williams. Stress singularities resulting from various boundary conditions in angular corners of plates in extension. *Journal of Applied Mechanics*, 19:526–528, 1952.
- [86] M.L. Williams. The stresses around a fault or crack in dissimilar media. *Bulletin of the Seismological Society of America*, 49:199–204, 1959.
- [87] J. Wloka. *Partielle Differentialgleichungen. Sobolevräume und Randwertaufgaben*. Teubner, Stuttgart, 1982.
- [88] Z. Yosibash. Computing edge singularities in elastic anisotropic three-dimensional domains. *International Journal of Fracture*, 86:221–245, 1997.
- [89] Z. Yosibash. Computing singular solutions of elliptic boundary value problems in polyhedral domains using the  $p$ -FEM. *Applied Numerical Mathematics*, 33:71–93, 2000.
- [90] Z. Yosibash and B.A. Szabo. Numerical analysis of singularities in two dimensions, Part 1: Computation of eigenpairs. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 38:2055–2082, 1995.
- [91] O.C. Zienkiewicz and R.L. Taylor. *The Finite Element Method*, volume 1. McGraw-Hill, London, 4th edition, 1989.

- [92] O.C. Zienkiewicz and J.Z. Zhu. A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24:337–357, 1987.
- [93] O.C. Zienkiewicz and J.Z. Zhu. The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates, Part 1 and 2. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33:1331–1382, 1992.