

Kapitel 3

Methode der finiten Elemente

Die Finite-Elemente-Methode (*FEM*) hat sich in den Ingenieurwissenschaften wegen ihrer universellen Anwendbarkeit auf beliebig geformte Strukturen insbesondere auf dem Gebiet der Elastomechanik gegenüber anderen numerischen Berechnungsverfahren, z.B. der Finite-Differenzen-Methode (*FDM*) durchgesetzt. Aufgrund der allgemeinen mathematischen Formulierung der FE-Methode auf der Grundlage von Variationsprinzipien läßt sie sich auch zur Lösung von verschiedenen physikalischen Feldproblemen einsetzen. Neben Problemstellungen der technischen Mechanik werden heute zunehmend auch Wärme-feldprobleme, gekoppelte Feldprobleme (elektromagnetische, piezoelektrische Wechselwirkung) und Probleme der Strömungsmechanik erfolgreich behandelt. Exakte analytische Lösungen partieller Differentialgleichungen, welche die zugrundeliegenden physikalischen Probleme beschreiben, existieren in der Regel nur für einige einfache Sonderfälle. Als universelles numerisches Werkzeug gestattet die FE-Methode, diese Probleme auch bei sehr komplexen Strukturgeometrien in Verbindung mit vielfältigen Randbedingungen zu berechnen. Das Konzept der FE-Methode ist mathematisch abgesichert und es existieren effiziente numerische Lösungsalgorithmen sowie verifizierte finite Elemente für verschiedene Problemklassen (Schalen-, Platten- und Volumenelemente). Die kommerziell verfügbaren, leistungsfähigen Programmsysteme mit graphisch orientierten Pre- und Postprozessoren¹ verhelfen der FE-Methode zu einem breiten Einsatz in praktischen Anwendungen. In diesem Kapitel werden die mathematischen Grundlagen der FE-Methode und die in dieser Arbeit verwendeten numerischen Berechnungsverfahren zur Lösung sowohl linearer, als auch nichtlinearer Randwertprobleme der Mikromechanik behandelt.

¹Werkzeuge für die Modellaufbereitung und Nachbearbeitung der numerischen Ergebnisse.

3.1 Mathematische Grundlagen

Die mathematischen Grundlagen der FE-Methode werden im folgenden an partiellen Differentialgleichungen (pDGL) vom elliptischen Typ erläutert, insbesondere sollen hierbei ohne Beschränkung der Allgemeinheit skalare Gleichungen zweiter Ordnung betrachtet werden. Die numerische Behandlung von physikalischen Problemstellungen vom elliptischen Typ kann sowohl durch die FD-Methode [Marsal 89], als auch durch die FE-Methode erfolgen. Ein wesentlicher Nachteil der Differenzenmethode, bei der die Differentialoperatoren durch Differenzenquotienten ersetzt werden, besteht darin, daß sie bequem und unmittelbar nur auf rechtwinkligen, regelmäßigen Gitterdiskretisierungen anwendbar ist, so daß nur einfache Strukturgeometrien betrachtet werden können. Im Gegensatz dazu kann die FE-Methode auf beliebig komplexe Geometrien angewendet werden.

3.1.1 Klassisches Randwertproblem

Zur Veranschaulichung der mathematischen Vorgehensweise, die der FE-Methode zugrundeliegt, soll das kontinuierliche, n -dimensionale ($n = 2$ bzw. 3), quasi-lineare Randwertproblem betrachtet werden, welches durch die folgende pDGL gegeben ist:

$$\boxed{\nabla\{a(x, \phi)\nabla\phi(x)\} - f(x) = 0} \quad (3.1)$$

wobei:

- $\phi(x)$: gesuchte Lösungsfunktion im Gebietsinnern $\Omega \subset \mathbb{R}^n$
- $a(x, \phi)$: verallgemeinerter Transportkoeffizient
- $f(x)$: erzeugendes Funktionensystem

Diese Gleichung stellt die klassische Form der Erhaltungsgesetze der Physik (Kontinuitätsgleichung) auf dem einfach zusammenhängenden Grundgebiet Ω dar und wird erst durch physikalisch sinnvolle Randbedingungen spezifiziert. Diese können sowohl vom *Dirichlet*-Typ, als auch vom *Neumann*-Typ sein, falls einerseits die gesuchte Funktion $\phi(x)$ selbst oder die Normalenableitung der Funktion ($\partial_\nu := \partial/\partial\nu$) auf dem Gebietsrand $\Gamma := \partial\Omega$ vorgegeben ist. Es können u.U. auch gemischte Randbedingungen gelten, so daß sich der Gebietsrand aus $\Gamma_D := \Gamma \setminus \Gamma_N$ mit $\phi(x) = g_1(x)$ und Γ_N mit $\partial_\nu\phi(x) = g_2(x)$ zusammensetzt. Eine Lösung der Differentialgleichung (3.1) ist im *klassischen* Sinne gegeben, wenn eine Funktion $\phi(x)$ existiert, die die vorgegebenen Randwerte annimmt und zweimal stetig differenzierbar ist, d.h. $\phi(x) \in C^2(\Omega)$ für alle $x \in \Omega$. Eine wichtige Voraussetzung für die Existenz von klassischen² Lösungen, ist die hinreichende Glattheit des Gebietsrandes.

²Die Lösung des klassischen Randwertproblems wird mathematisch auch als *starke* Lösung bezeichnet.

3.1.2 Konzept der schwachen Lösung

Im allgemeinen existiert bei derartigen Problemen keine analytisch geschlossen darstellbare Lösung, so daß das Grundgebiet diskretisiert und die *klassische* Lösung numerisch approximiert werden muß. Diese Approximation macht Gebrauch vom *Konzept der schwachen Lösung*. Anstatt der pDGL (3.1) wird hierzu ein äquivalentes Variationsproblem betrachtet, da die Lösungen $\phi(x)$ gewisse Minimalitätseigenschaften aufweisen [Bathe 82, Zienkiewicz 84]. Nach dem *Lax-Milgram*-Theorem besitzt das zu dem elliptischen Randwertproblem zugeordnete Variationsproblem eine eindeutige, in diesem Sinne *schwache Lösung* [Braess 91]. Sofern die Lösung $\phi(x) \in V$ ($V = H_0^1$: Sobolev-Raum³ mit Nullrandbedingung) zusätzlich gewisse Regularitätsbedingungen aufweist, d.h. stetig, genügend glatt und zweimal stetig differenzierbar ist, läßt sich obige pDGL in das folgende äquivalente Problem umschreiben:

$$\forall \psi \in V : \int_{\Omega} \nabla \psi(x) \cdot a(x, \phi) \nabla \phi(x) d\Omega = \int_{\Omega} \psi(x) f(x) d\Omega \quad (3.2)$$

Diese Integralgleichung wird auch die „schwache Formulierung“ von Gleichung (3.1) genannt und $\phi(x)$ ist entsprechend die „schwache Lösung“ der pDGL. Diese Formulierung mittelt die Differentialgleichung (3.1) mit einer Gewichtungsfunktion⁴ $\psi(x)$, wobei die zweite Ortsableitung der gesuchten Lösungsfunktion $\phi(x)$ durch die Anwendung des Greenschen Integralsatzes mit Hilfe der partiellen Integration um eine Stufe erniedrigt wird. Der Vorteil dieser Vorgehensweise besteht darin, daß die *schwache* Lösung im Gegensatz zur *starken* Lösung, die durch Gleichung (3.1) gegeben ist, nur *einmal* stetig differenzierbar sein muß, d.h. $\phi(x) \in C^1(\Omega)$ für alle $x \in \Omega$.

3.1.3 Finite Elemente Diskretisierung

Die Diskretisierung des kontinuierlichen, *schwachen* Problems (3.2) kann auf verschiedene Weisen vorgenommen werden, z.B. mit der Finite-Volumen-Methode (FVM) oder der FE-Methode⁵, auf die im folgenden näher eingegangen werden soll. Bei der FE-Methode wird für die Lösung des globalen Variationsproblems das Grundgebiet Ω in endliche (*finite*) Elemente Ω_e zerlegt und die Lösung des globalen Variationsproblems durch die Lösung des Variationsproblems für die einzelnen Elemente ersetzt. Die schwache Lösung $\phi(x) \in V$ wird durch den diskreten Ansatz $\phi_h(x) \in S_h$ numerisch stückweise approximiert, der über eine endliche Summe von Formfunktionen (engl.: *Shapefunctions*) $S_k(x)$ dargestellt werden kann:

$$\phi_h(x) = \sum_{k=1}^{N_h} \alpha_k S_k(x) \quad (3.3)$$

³Der Sobolev-Raum $H^m(\Omega)$ ist ein Hilbert-Raum der Lebesgue-meßbaren Funktionen $L_2(\Omega)$ mit quadrat-integrablen *schwachen* Ableitungen bis zur Ordnung m , wobei $\dim H^m(\Omega) = \infty$.

⁴Die Testfunktionen $\psi(x)$ sind in der Regel aus dem gleichen Raum wie die Lösungsfunktion $\phi(x)$.

⁵Im Gegensatz zu diesen beiden Methoden approximiert die FD-Methode die *starke* Lösung des klassischen Randwertproblems (3.1).

Diese Formfunktionen spannen einen endlich dimensionalen Unterraum $S_h(\Omega) \subset H_0^1(\Omega)$, den sogenannten *Finite-Elemente-Raum*, auf, mit $\dim S_h(\Omega) = N_h$. Der eingeschränkte Funktionenraum S_h wird durch den Diskretisierungsparameter h charakterisiert, der den größten Durchmesser der finiten Elemente darstellt. Man kann zeigen, daß die $\phi_h(x)$ eine konvergierende *Cauchy-Folge* in dem abgeschlossenen und vollständigen Unterraum S_h bilden und daß $\phi_h(x)$ gegen die *schwache* Lösung $\phi(x)$ strebt, falls die Elementweite genügend klein wird, d.h.: $h \rightarrow 0$ [Ciarlet 78].

Den einfachsten Ansatz für Formfunktionen stellen Polynome ersten Grades dar, die einen stetigen, linearen Funktionsverlauf abbilden können. In diesem Fall sind die Formfunktionen durch $S_j(x_k) = \delta_{jk}$ gegeben, so daß die Näherungslösung ϕ_h eine auf Ω stetige Funktion wird, die in den Elementknoten x_k die Werte der Koeffizienten α_k annimmt, d.h. $\phi_h(x_k) = \alpha_k$. In **Abbildung 3.1** ist die Approximation einer beliebigen Funktion $\phi(x)$ unter Verwendung linearer Formfunktionen $S_i(x)$ dargestellt. Ersetzt man nun $\psi(x)$ in

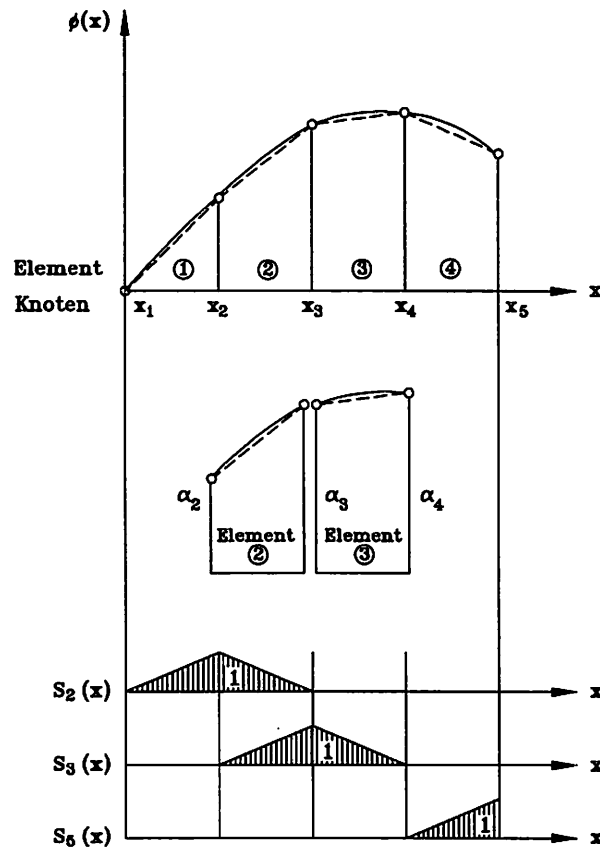


Abbildung 3.1: Approximation einer Funktion unter Verwendung linearer Formfunktionen

Gleichung (3.2) ebenfalls durch eine endliche Summe von Funktionen $S_i(x)$ gemäß Gleichung (3.3):

$$\psi_h(x) = \sum_{i=1}^{N_h} \alpha_i S_i(x)$$

so erhält man ein System von N_h , im allgemeinen nichtlinearen Gleichungen:

$$\sum_{k=1}^{N_h} \int_{\Omega} \nabla S_i(x) a(x, \phi_h) \nabla S_k(x) d\Omega \alpha_k = \int_{\Omega} S_i(x) f(x) d\Omega \quad \text{für } i = 1..N_h \quad (3.4)$$

die in Matrixnotation vereinfacht zu:

$$\boxed{\sum_{k=1}^{N_h} A_{ik}(\phi_h) \alpha_k = f_i \quad \text{für } i = 1..N_h} \quad (3.5)$$

zusammengefaßt werden können. Aufgrund der Elliptizität der pDGL ist die Systemmatrix A_{ik} positiv definit und infolge des Zusammenhangs $a(x, \phi_h)$ ferner von der gesuchten Lösung ϕ_h und damit von den erst zu bestimmenden Koeffizienten α_k abhängig. Damit liegt ein nichtlineares Problem vor. In Kapitel 3.3 wird auf die physikalischen Hintergründe dieser Nichtlinearitäten eingegangen und die für die Lösung der daraus resultierenden nichtlinearen Gleichungssysteme erforderlichen numerischen Verfahren kurz beschrieben. Die Güte der numerischen Approximation der schwachen Lösung wird in Kapitel 3.6 diskutiert.

3.2 Formulierung der Elementsteifigkeitsmatrix

Im vorigen Kapitel wurde das der FE-Methode zugrundeliegende mathematische Konzept der schwachen Lösung und die Diskretisierung des kontinuierlichen Randwertproblems dargestellt. Die physikalische Interpretation soll im weiteren am Beispiel der Strukturmechanik erfolgen. Als Ausgangspunkt für die FE-Formulierung dient daher die Grundgleichung der Kontinuumsmechanik, das sogenannte „Spannungs-Divergenz-Theorem“. Unter Anwendung des Konzeptes der schwachen Lösung erfolgt die Integration der mit geeigneten Testfunktionen η_i gewichteten lokalen Gleichgewichtsaussage (Gleichung 2.1) über das betrachtete Gebiet Ω ($i, j : 1, 2, 3$):

$$\sum_i \int_{\Omega} \eta_i \left(\sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + F_i^{\Omega} \right) d\Omega = \sum_i \int_{\Omega} \eta_i \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} d\Omega \quad (3.6)$$

Hierbei stellt F^{Ω} die Summe der von außen auf den Festkörper einwirkenden Volumenkräfte dar. Durch partielle Integration der Divergenz des Spannungstensors wird der Gradient auf die Testfunktionen η_i abgewälzt, die mit den Verschiebungen u_i identifiziert werden können. Unter Ausnutzung des Zusammenhangs⁶ zwischen den Dehnungen ε_{ij} und den Verschiebungen u_i und der Auswertung des Integrals über die Randkurve $\Gamma = \Gamma_D + \Gamma_N$, bei der der Anteil über den eingespannten Rand Γ_D verschwindet ($u_i = 0$) und nur die mit Oberflächenkräften ($F_i^{\Gamma} = \sum_j \sigma_{ij} n_j$, n_j : Normalenvektor) belasteten Ränder Γ_N berücksichtigt werden müssen, folgt schließlich [Matzenmiller 93]:

$$\sum_{i,j} \int_{\Omega} \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} d\Omega = \sum_i \left\{ \int_{\Gamma} u_i F_i^{\Gamma} d\Gamma + \int_{\Omega} u_i \left(F_i^{\Omega} - \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \right) d\Omega \right\} \quad (3.7)$$

⁶Im weiteren soll nur die lineare Näherung von Gleichung (2.4) betrachtet werden.

Die linke Seite der Gleichung (3.7) stellt die innere Energie des elastischen Festkörpers dar, während auf der rechten Seite die Anteile der durch die Oberflächenkräfte F^Γ und die Volumenkräfte F^Ω verrichteten Arbeit stehen. Bei der Beschränkung auf rein statische Probleme entfällt die Trägheitskraft auf der rechten Seite der Gleichung.

Das zu der schwachen Formulierung (Gleichung 3.7) korrespondierende Variationsprinzip ist das *Prinzip der virtuellen Arbeit* bzw. *Verschiebungen* [Zienkiewicz 84]. Aus der Forderung nach der Stationarität der potentiellen Energie E_{pot} des elastischen Kontinuums kann die Elementsteifigkeitsmatrix direkt abgeleitet werden:

$$E_{pot} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \varepsilon^t \sigma d\Omega - \int_{\Omega} u^t F^\Omega d\Omega - \int_{\Gamma} u_\Gamma^t F^\Gamma d\Gamma - \sum_i u_i F_i \rightarrow Min \quad (3.8)$$

Im Gleichgewichtszustand entspricht die gesamte innere Energie des elastischen Körpers der von außen verrichteten Arbeit. Hierbei sind ε die Dehnungen und σ die Spannungen, die äußeren Kräfte sind durch die Volumenkräfte F^Ω , die Oberflächenkräfte F^Γ und die diskreten Knotenkräfte F_i gegeben. Entsprechend sind u die Vektoren des Verschiebungsfeldes im Innern, u_Γ die Oberflächenverschiebungen und u_i die Knotenverschiebung des i -ten Knotens. Für die dreidimensionale Verschiebung $u(\vec{x})^t = (u_x(\vec{x}), u_y(\vec{x}), u_z(\vec{x}))$ im Innern eines Elementes wird ein Ansatz der Form:

$$u(\vec{x}) = \sum_k N^k(\vec{x}) \cdot u_e^k \quad (3.9)$$

gewählt, wobei $u_e^t = (u_x^e, u_y^e, u_z^e)$ der Vektor der diskreten Knotenverschiebungen des Elementes ist, die Matrix $N = [N_x(\vec{x}), N_y(\vec{x}), N_z(\vec{x})]$ die Form- bzw. Ansatzfunktionen (siehe Gleichung 3.3) enthält und die Summe sich über alle Knoten erstreckt. Die Dehnungen ε ergeben sich in linearer Näherung aus der Ableitung der Verschiebungen:

$$\varepsilon(\vec{x}) = D \cdot u(\vec{x}) - \varepsilon_0 \quad (3.10)$$

Hierbei entspricht ε_0 einer Vordehnung⁷ und D stellt eine Matrix von Differentialoperatoren dar:

$$D = \begin{bmatrix} \partial_x & 0 & 0 \\ 0 & \partial_y & 0 \\ 0 & 0 & \partial_z \\ \partial_y & \partial_x & 0 \\ 0 & \partial_z & \partial_y \\ \partial_z & 0 & \partial_x \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

wobei $\partial_{x_i} := \frac{\partial}{\partial x_i}$ für die partiellen Ableitungen steht. Mit den Gleichungen (3.9) und (3.10) ergibt sich:

$$\varepsilon(x) = B(x) \cdot u_e - \varepsilon_0 \quad (3.12)$$

⁷Unter Vordehnungen sind spannungsunabhängige Verformungen zu verstehen, die als Ursache z.B. Kristallwachstum oder Temperaturänderungen (siehe Kapitel 3.5.1) haben.

mit $B(x) := D \cdot N(x)$. Über das Materialgesetz (Gleichung 2.2) wird der Zusammenhang zwischen Dehnungen und Spannungen hergestellt. Unter der Annahme linearen Werkstoffverhaltens, d.h. C ist unabhängig von ε , folgt:

$$\sigma(\vec{x}) = C\varepsilon(\vec{x}) = C(B(x) \cdot u_e - \varepsilon_0) \quad (3.13)$$

Werden diese Beziehungen in die Gleichung (3.8) eingesetzt, so folgt für die potentielle Energie E_{pot}^e eines finiten Elementes:

$$\begin{aligned} E_{pot}^e &= \frac{u_e^t}{2} \int_{\Omega} B^t C B d\Omega u_e - u_e^t \int_{\Omega} B^t C \varepsilon_0 d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \varepsilon_0 C \varepsilon_0 d\Omega \\ &\quad - u_e^t \left(\int_{\Omega} N^t F^{\Omega} d\Omega + \int_{\Gamma} N_{\Gamma}^t F^{\Gamma} d\Gamma + F_i \right) \end{aligned} \quad (3.14)$$

Die Bedingung für das Minimum der potentiellen Energie des Gesamtsystems verlangt, daß die Ableitung der Energie nach den Knotenverschiebungen verschwindet. Für das einzelne finite Element bedeutet dies $\partial E_{pot}^e / \partial u_e = 0$. Damit folgt aus Gleichung (3.14) die Grundgleichung der linearen Statik auf der Elementebene:

$$\int_{\Omega} B^t C B d\Omega \cdot u_e = \int_{\Omega} B^t C \varepsilon_0 d\Omega + \int_{\Omega} N^t F^{\Omega} d\Omega + \int_{\Gamma} N_{\Gamma}^t F^{\Gamma} d\Gamma + F_i \quad (3.15)$$

oder in Matrixkurzschreibweise⁸:

$$\boxed{[K_e] \cdot \{u_e\} = \{F_e\}} \quad (3.16)$$

Hierbei ist die Elementsteifigkeitsmatrix durch:

$$[K_e] = \int_{\Omega} [B]^t [C] [B] d\Omega \quad (3.17)$$

gegeben und der Gesamtkraftvektor setzt sich aus den Einzelanteilen gemäß:

$$\{F_e\} = \{F_0 + F^{\Omega} + F^{\Gamma} + F_i\} \quad (3.18)$$

zusammen. Die Kraft F_e entspricht den äquivalenten Knotenersatzkräften, die durch die verteilten Lasten F^{Ω} und F^{Γ} , sowie die diskret einwirkenden Einzelkräfte F_i hervorgerufen wird. Die Gesamtsteifigkeitsmatrix des Systems berechnet sich über die Summation aller einzelnen Elementsteifigkeitsmatrizen und entspricht der Systemmatrix $A_{i,k}$ der Gleichung (3.5).

3.3 Nichtlinearitäten

Die Aufstellung der Elementsteifigkeitsmatrix, die zur Lösung des linearen Strukturproblems (3.16) benötigt wird, erfolgte unter der Annahme eines linearen Zusammenhangs

⁸In Anlehnung an die bestehende FEM-Literatur [Kohnke 92] sollen im folgenden Matrizen durch $[\cdot]$ und Vektoren durch $\{\cdot\}$ gekennzeichnet werden.

zwischen den Knotenverschiebungen $\{u\}$ und den angreifenden Knotenkräften $\{F\}$. Infolge der Belastung können jedoch nichtlineare Effekte auftreten, die durch eine Geometrieänderung hervorgerufen werden, so daß die Steifigkeitsmatrix $[K(u)]$ ihrerseits vom Auslenkungs- und damit vom Belastungszustand des Systems abhängig wird (siehe Gleichung 3.5):

$$[K(u)] \cdot \{u\} = \{F\} \quad (3.19)$$

Prinzipiell wird bei der Behandlung mechanischer Probleme zwischen drei verschiedenen Typen von Nichtlinearitäten unterschieden: der geometrischen Nichtlinearität, der Material- und der Struktur-Nichtlinearität. Die *Material-Nichtlinearität*, die den nichtlinearen Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnung (z.B. Plastizität, Hyperelastizität) beschreibt, kann bei einkristallinen Materialien im Niedertemperaturbereich vernachlässigt werden, da Silizium bis etwa 600 °C ein absolut lineares *Hookesches* Verhalten zeigt [Over 77]. Ebenso verhält es sich bei den meisten anderen mikromechanischen Werkstoffen. Unter Struktur-Nichtlinearität werden beispielsweise Kontaktprobleme zusammengefaßt, die eine Verformungsbehinderung infolge eines mechanischen Anschlags aufweisen. Bei der Auslegung und Berechnung von mikromechanischen Bauelementen spielen *geometrische Nichtlinearitäten* die größte Rolle. Neben den spannungsversteifenden Effekten handelt es sich hier um das Knicken und Beulen von Balken- und Membranstrukturen, die unter äußeren Lasteinwirkungen stehen oder technologisch bedingte, innere Spannungen aufweisen. Die Problemklasse der geometrischen Nichtlinearitäten werden FE-technisch wie folgt unterteilt [Kohnke 92]:

- **Große Dehnungen** (*Large Strains*), bei denen der nichtlineare Anteil des *Green-Lagrangeschen* Dehnungstensors in Gleichung (2.4) berücksichtigt wird und z.B. Formänderungen oder große Rotationen unter der Belastung auftreten können.
- **Große Auslenkungen** (*Large Deflections*), bei denen große Rotationen auftreten, aber die mechanischen Dehnungen klein bleiben. Die Beschreibung erfolgt durch die sogenannte *Corotational*-Formulierung [Rankin 86], bei der ein lokales Elementkoordinatensystem eingeführt wird, das sich unter Belastung mitdreht und die Elementorientierung annimmt, um die Kraftvektoren bei Druckbelastungen entsprechend der verformten Oberfläche nachzuführen. Es treten keine Formänderungen auf.
- **Spannungsversteifung** (*Stress Stiffening*), bei der die Rotationen und Dehnungen klein bleiben, aber eine Kopplung von Längs- und Biegebelastung auftritt, so daß sich die Biegesteifigkeit der Struktur lastabhängig ändert.

Das nichtlineare Problem wird lokal linearisiert und das zugrundeliegende Gleichungssystem mit einem linearen Gleichungslöser iterativ gelöst. Zur Lösung der linearen Gleichungssysteme wird im FE-Programm ANSYS⁹ in der Regel das *Wavefront*-Lösungsverfahren eingesetzt [Kohnke 92]. Da die Steifigkeitsmatrix von den Verschiebungen abhängig ist,

⁹Im weiteren sollen anhand des kommerziellen FE-Programmsystems ANSYS [SASI] die numerischen Berechnungsmöglichkeiten beschrieben werden, da ANSYS z.Zt. eines der universellsten Programmsysteme

wird sie entsprechend dem Belastungszustand aufgestellt und ein elementinterner Korrekturlastvektor gemäß:

$$[K(u)]_{i-1} \cdot \{\Delta u\}_i = \{F^{ext}\} - \{F^{kor}\}_{i-1} \quad (3.20)$$

berechnet. $[K(u)]_{i-1}$ ist hierbei die verschiebungsabhängige Steifigkeitsmatrix der $(i-1)$ -ten Iteration, $\{\Delta u\}_i = \{u\}_i - \{u\}_{i-1}$ der inkrementelle Verschiebungsvektor, $\{F^{ext}\}$ der extern angreifende Lastvektor und $\{F^{kor}\}_{i-1}$ der verschiebungsabhängige Korrekturlastvektor, der iterativ berechnet wird. Der Ausdruck auf der rechten Seite stellt die Differenz der angreifenden äußeren Last und der Rückstellkraft, generiert durch die Elementspannungen, dar und wird als Ungleichgewichtskraft (Residuum) bezeichnet. Zur Lösung des nichtlinearen Problems können prinzipiell verschiedene Verfahren eingesetzt werden. Je nach Problemstellung sind die Verfahren unterschiedlich effektiv, so daß in FE-Programmen meist mehrere realisiert sind. Das FE-Programm ANSYS erlaubt entweder die Anfangssteifigkeitsmethode oder das *Newton-Raphson*-Verfahren einzusetzen, die sich durch verschiedene Iterationsverfahren unterscheiden. Bei beiden Methoden wird das Verschiebungsinkrement $\{\Delta u\}_i$ infolge jedes Iterationsschrittes kleiner, so daß bei Konvergenz der nichtlinearen Rechnung das Residuum beliebig klein wird.

Bei der Anfangssteifigkeitsmethode wird bei jeder Iteration eine konstante Steifigkeitsma-

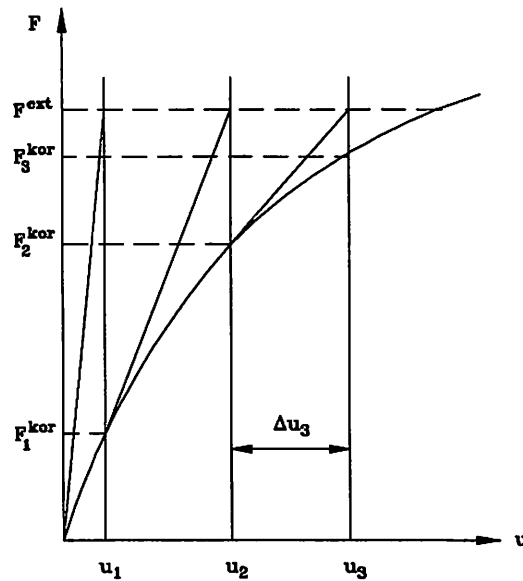


Abbildung 3.2: Iterationsprozeß beim *Newton-Raphson*-Verfahren

trix benutzt und nur der Korrekturlastvektor wird entsprechend dem Belastungszustand geändert. Das *Newton-Raphson*-Verfahren, das in **Abbildung 3.2** für ein Problem mit einem Freiheitsgrad dargestellt ist, verwendet im Vergleich dazu eine bei jeder Iteration neu berechnete Tangentensteifigkeitsmatrix $[K_T]$, für die:

$$[K_T(x, u)] := [K_0(x)] + [K_u(x, u)] + [K_\sigma(x, u)] \quad (3.21)$$

me ist, welches die meisten bei mikromechanischen Strukturen auftretenden physikalischen Effekte (siehe Abbildung 2.2) in ihrer Gesamtheit zu beschreiben erlaubt.

gilt, wobei mit Hilfe der orthogonalen Transformationsmatrix $[T]$ und durch Summation über die einzelnen Elemente (e) die Einzelmatrizen:

$$[K_0] + [K_u] \approx \sum_e [T(x+u)]^t \cdot [K_0^e(x)] \cdot [T(x+u)]$$

$$[K_\sigma] \approx \sum_e [T(x+u)]^t \cdot [S_\sigma^e(x)] \cdot [T(x+u)]$$

gebildet werden [Matzenmiller 93]. Hierbei entspricht $[K_0]$ der geometrischen Struktursteifigkeitsmatrix (3.17) und $[K_u]$ ist der verschiebungsabhängige Anteil. Die Matrix $[S_\sigma]$ beschreibt die zusätzliche Spannungsversteifung, die infolge der Überlagerung von Längs- und Biegespannungsanteilen bei dünnen Balken- und Membranstrukturen auftritt. Während die Struktursteifigkeitsmatrix von der Geometrie und den Elastizitätseigenschaften der Struktur abhängt, wird die Spannungsversteifungsmatrix von der lastinduzierten, inneren Längsspannung σ in der Struktur hervorgerufen. Bei axial belasteten Balkenstrukturen, wie beispielsweise resonanten Kraftsensoren, genügt es nur den Anteil $[S_\sigma]$:

$$([K_0] + [S(\sigma)]) \cdot \{u\} = \{F\} \quad (3.22)$$

in der nichtlinearen statischen Berechnung zu berücksichtigen (ANSYS-Option: *Stress Stiffening*).

3.4 Dynamische Berechnungsverfahren

Das dynamische Verhalten mikromechanischer Systeme ist gekennzeichnet durch ihr stationäres Schwingungsverhalten, das Frequenzgangverhalten und das instationäre Verhalten unter Einwirkung von transienten Störungen. Die rechnerische Modalanalyse löst das dynamische Eigenwertproblem und liefert die Eigenfrequenzen und -schwingungsformen. Im Zusammenhang mit resonanten Sensoren interessieren insbesondere die Eigenfrequenzänderungen unter der Einwirkung von äußeren statischen Belastungen. Frequenzganganalysen ermöglichen die Modellierung unter dem Einfluß von Dämpfungseffekten und zeitlich periodisch variierenden Lasten. Mit Hilfe der direkten Zeitintegration kann zusätzlich das Systemverhalten im Zeitbereich unter impulsartigen Lasteinwirkungen ermittelt werden.

3.4.1 Das Eigenwertproblem

Zur Beschreibung der freien, stationären Schwingungen eines Systems ist die dynamische Eigenwertgleichung:

$$\boxed{[M] \cdot \{\ddot{u}\} + [K(u)] \cdot \{u\} = 0} \quad (3.23)$$

zu lösen. Hierbei ist $[K(u)]$ die verschiebungsabhängige Steifigkeitsmatrix des Gesamtsystems, die in einer nichtlinearen statischen Analyse mit den ANSYS-Optionen *Large*

Deflection und/oder *Stress Stiffening* ermittelt wird. Die Massenmatrix:

$$[M] = \int_{\Omega} [N]^t \rho [N] d\Omega \quad (3.24)$$

berechnet sich aus der Massendichte ρ bei der *konsistenten* Formulierung mit Hilfe der Matrix der Ansatzfunktionen $[N(\vec{x})]$ im finiten Element. Die Masse der Gesamtstruktur kann auch *konzentriert* in den Elementknoten durch eine Diagonalmatrix ($\sum_{i,j} M_{ij} \delta_{ij}$) angenähert werden. Beide Formulierungen sind in ANSYS realisiert und zeichnen sich durch unterschiedliche numerische Genauigkeiten aus [Ramm 90]. Die Vektoren $\{\ddot{u}\}$ und $\{u\}$ stellen die Knotenbeschleunigungen und -verschiebungen dar.

Unter der Annahme freier, ungedämpfter harmonischer Schwingungen verhält sich das System linear und der Lösungsansatz:

$$\{u(\vec{x}, t)\} = \{\Phi(\vec{x})\}_k \cdot \exp(i\omega_k t) \quad (3.25)$$

führt auf das bekannte Eigenwertproblem:

$$([K] - \omega_k^2 [M]) \cdot \{\Phi\}_k = 0 \quad (3.26)$$

Diese Gleichung ist für alle nicht verschwindenden Eigenvektoren $\{\Phi\}_k$ erfüllt, wenn die Determinante:

$$\det([K] - \omega_k^2 [M]) = 0 \quad (3.27)$$

verschwindet. Die Lösungen sind die Eigenwerte¹⁰ und die Eigenschwingungsformen $\{\Phi\}_k$, wobei der Subskript k für die Nummer der Schwingungsmode steht. Die Eigenschwingungsformen bilden einen Satz linear unabhängiger Basisvektoren und sind bezüglich der Gesamtmassenmatrix (3.24) orthonormiert:

$$\{\Phi\}_i^t [M] \{\Phi\}_j = \delta_{ij} \quad (3.28)$$

Für die Modalanalyse können im FE-Programm ANSYS verschiedene Lösungsalgorithmen verwendet werden [Kohnke 92]. Die *Householder*-Methode benutzt ein reduziertes System von Freiheitsgraden, bei dem die Verschiebungen auf die sogenannten Hauptfreiheitsgrade (*MDOF : Master Degrees of Freedom*) mit Hilfe einer *Guyan*-Reduktion kondensiert werden. Im Gegensatz dazu löst das *Subspace*-Iterationsverfahren die voll besetzten Matrizen des Systems bei erhöhter Rechengenauigkeit, benötigt aber entsprechend mehr Speicherkapazität und Rechenzeit.

3.4.2 Modellierung von Dämpfungseffekten

Bei dynamischen Vorgängen führen verschiedene physikalische Dämpfungsmechanismen zur Energiedissipation im Mikrosystem. Diese können durch Kristallimperfectionen im

¹⁰Quadrate der Eigenfrequenzen ω_k .

Kristallinnern oder durch zusätzlich aufgebrachte Dünnschichten mit andersartiger Kristallstruktur (amorph oder polykristallin) hervorgerufen werden. Diese Energieverluste sind abhängig von den Materialeigenschaften, der Absoluttemperatur und den Strukturdimensionen und werden unter dem Begriff „thermo-elastische Reibung“ zusammengefaßt [Roszhart 90]. Ein weiterer Dämpfungsmechanismus wird bei Resonatoren durch die Schwingungen hervorgerufen, bei denen Energieverluste in die Resonatoreinspannung verursacht werden. Diese Art der Dämpfung ist abhängig von der jeweiligen Schwingungsmoden (modale Dämpfung). Zusätzlich wird durch akustische Abstrahlung und viskose Dämpfung externe Fluidämpfung verursacht. Um diese Dämpfungseffekte in FE-Berechnungen zu berücksichtigen, wird von einem viskosen, d.h. geschwindigkeitsproportionalen Dämpfungsterm entsprechend Gleichung (2.17) ausgegangen [Kohnke 92]:

$$[M] \cdot \{\ddot{u}\} + [C_D] \cdot \{\dot{u}\} + [K] \cdot \{u\} = \{f(x, t)\} \quad (3.29)$$

Hierbei sind $[M]$, $[C_D]$ und $[K]$ die Massen-, Dämpfungs-¹¹ und Steifigkeitsmatrix der Struktur und $\{\dot{u}\}$ der Vektor der Knotengeschwindigkeiten. Bei harmonischen Analysen entspricht die rechte Seite einer harmonischen Anregungskraft $\{f(x, t)\} = \{f_0(x)\} \cdot \exp(i\omega t)$. Bei transienten Analysen ist die Anregungskraft im allgemeinen nicht periodisch und zusätzlich können Nichtlinearitäten berücksichtigt werden. Zur Lösung nichtlinearer, transienter Probleme wird die *Newmark*-Integrationsmethode in Verbindung mit dem *Newton-Raphson*-Verfahren eingesetzt. Die Dämpfungsmatrix wird im allgemeinsten Fall durch den Ansatz:

$$[C_D] = \alpha \cdot [M] + (\beta + \beta_c) \cdot [K] + \sum_j \beta_j \cdot [K_j] + \sum_j [C_j] \quad (3.30)$$

berücksichtigt, wobei α und β die sogenannten *Rayleigh*-schen Dämpfungskonstanten sind, die die Dämpfungsmatrix auf die Massen- und Steifigkeitsmatrix beziehen. Der Dämpfungskoeffizient $\beta_c = 2\xi/\omega_c$ ist variabel und nur für die harmonische Frequenzganganalyse verfügbar. Hierbei ist der Parameter $\xi = c/c_{krit}$ das *Lehrsche* Dämpfungsmaß und $c_{krit} = 2m\omega_0$ entspricht der kritischen Dämpfung des Systems. Zusätzlich können Materialdämpfungsbeiträge durch $[K_j]$ und spezielle Dämpferelemente durch $[C_j]$ berücksichtigt werden. Die Angabe der Dämpfungsbeiträge ist nur empirisch zu ermitteln, wobei die beiden *Rayleigh*-Konstanten frequenzabhängig sind. Hierbei ist α ($\sim \omega^{-1}$) für niedrige und β ($\sim \omega$) für hohe Frequenzen maßgebend. Beispielsweise betragen für Piezokeramiken, die im Bereich um 1 MHz betrieben werden, $\alpha = 7,5$ und $\beta = 2 \cdot 10^{-5}$ [Lerch 90].

3.5 Gekoppelte Feldberechnungen

Durch die Miniaturisierung von mikromechanischen Systemen erhält man einerseits eine hohe Integrationsdichte der Bauelemente, andererseits aber eine stark ausgeprägte Wech-

¹¹Der Index *D* bei der Dämpfungsmatrix soll eine Verwechslung mit der Matrix der Elastizitätsmoduln $[C]$ ausschließen (siehe Kapitel 3.2).

selwirkung der physikalischen Größen untereinander, die bei makroskopischen Problemstellungen im allgemeinen vernachlässigt werden können. Zusätzlich besitzen die mikromechanischen Bauelemente sowohl elektrische als auch nichtelektrische Funktionen, so daß infolge der verschiedenen mikromechanischen Wandlungsprinzipien die Berechnung von gekoppelten Feldproblemen beim Entwurfsprozeß unabdingbar werden. Das FE-Programm ANSYS bietet als eines der wenigen kommerziell verfügbaren Programmsysteme mit den sogenannten *Multi-Field-Elementen* die Möglichkeit, Feldkopplungen bereits auf Elementebene numerisch durchzuführen. Diese Elementklasse besitzt mehrere Freiheitsgrade pro Knoten, die es erlauben, strukturmechanische, thermische und piezoelektrische Probleme berechnen zu können. Zu den strukturmechanischen Knotenverschiebungsfreiheitsgraden $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$ kommen die Knotentemperatur T und das elektrische Potential ϕ hinzu. Dadurch wird direkt auf Elementebene eine Kopplung ermöglicht, die die Wechselwirkung bereits in *einem* Berechnungsschritt zu erfassen erlaubt [Ostergaard 89]. Eine alternative Möglichkeit besteht über die Methode der Lastvektorkopplung, bei der die zusätzlichen Kraftbeiträge infolge der Wechselwirkung iterativ berücksichtigt werden. Diese Vorgehensweise wird auch erforderlich, falls verschiedene Programmwerkzeuge miteinander gekoppelt werden müssen, wie beispielsweise bei der Berechnung der thermischen Fluid-Struktur-Wechselwirkungen [Fabula 93b].

3.5.1 Thermoelastische Kopplung

Die Zustandsgleichung für rein thermodynamische Problemstellungen lautet [Boley 85]:

$$\boxed{C_{th} \frac{\partial T}{\partial t} + K_{th} T = Q_{th}} \quad (3.31)$$

wobei C_{th} und K_{th} für die Wärmekapazität und die -leitfähigkeit stehen und Q_{th} die Wärmeflüsse bezeichnet. Bei reinen Temperaturfeldberechnungen kann eine *inhomogene* Temperaturverteilung in mikromechanischen Bauelementen unter Vorgabe von Wärmequellen und -senken ermittelt werden. Zusätzlich treten durch die thermoelastische Kopplung an Bauelementeinspannungen thermisch induzierte mechanische Spannungen infolge veränderter Wärmeausdehnung auf. Diese können im einfachsten Fall unter Vorgabe einer *homogenen* Temperaturüberhöhung ΔT gegenüber der Umgebungstemperatur mit Hilfe des Wärmeausdehnungskoeffizienten α über die thermischen Dehnungen:

$$\varepsilon_{ij}^{th} = \sum_{i,j} \Delta T \alpha_{ij} \delta_{ij} \quad (3.32)$$

berechnet und damit die thermisch induzierten Spannungen:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ijkl} (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^{th}) \quad (3.33)$$

ermittelt werden¹². Für das stationäre, thermisch-mechanisch gekoppelte Problem ergibt sich unter Verwendung der ungekoppelten Zustandsgleichungen (3.29) und (3.31) in der

¹²Das Minuszeichen bei der thermischen Dehnung ist Konvention, da bei einer Temperaturzunahme ($\Delta T \geq 0$) und positiver Wärmeausdehnungsdifferenz ($\Delta \alpha \geq 0$) Druckspannungen auftreten.

FE-Formulierung auf Elementebene [Kohnke 92]:

$$\begin{bmatrix} K & 0 \\ 0 & K_{th} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \vec{u} \\ T \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \vec{F} + \vec{F}^{th} \\ Q_{th} \end{Bmatrix} \quad (3.34)$$

Die Freiheitsgrade an den Knotenpunkten der finiten Elemente sind durch den Vektor der Knotenverschiebungen \vec{u} und die Temperatur T gegeben. Die thermisch induzierte Kraftwirkung wird durch den zusätzlichen Lastvektor¹³ \vec{F}^{th} beschrieben:

$$\{F^{th}\} = \int_{\Omega} [B]^t [C] \{\varepsilon^{th}\} d\Omega \quad (3.35)$$

Bei mikromechanischen Multilayerstrukturen treten ferner durch die unterschiedlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten thermisch induzierte Spannungen auf. Der umgekehrte Effekt, daß sich durch innere Reibung und mechanische Deformationen Wärme bildet, ist in kommerziellen FE-Programmen nicht implementiert. Jegliche sonstige Energiedissipationen können generell nur durch die mechanische Dämpfung (3.30) berücksichtigt werden. Insbesondere gilt dieses auch für dielektrische Verluste bei piezoelektrischen Medien [Eccardt 92]. Daher können mit der FE-Methode nur verlustfreie elektromechanische Wandler simuliert werden.

3.5.2 Elektromechanische Kopplung

Die piezoelektrischen Feldgleichungen (Gleichungen: 2.7–2.9), welche die elektromechanische Kopplung beschreiben, sind in der Regel nur für einfache Geometrien geschlossen lösbar. Im Laufe der Zeit wurden unter vereinfachenden Annahmen verschiedene eindimensionale Ersatzmodelle zur Beschreibung piezoelektrischer Medien entwickelt ([Lerch 90], und Referenzen darin). Um jedoch komplexe Geometrien berechnen zu können, ist es notwendig die FE-Formulierung auf die Beschreibung der elektromechanischen Wechselwirkung zu erweitern. Dieses kann durch die Anwendung eines verallgemeinerten Variationsprinzips erfolgen, z.B. durch das Prinzip der virtuellen Verschiebungen angewendet auf ein elektroelastisches Kontinuum unter dem Einfluß von mechanischen *und* elektrischen Kräften. Faßt man die elektrischen Potentiale als generalisierte Verschiebungen und die elektrischen Ladungen als generalisierte Kräfte auf, so können finite Elemente mit „Verschiebung-Potential“-Freiheitsgraden konstruiert werden [Allik 70].

Die im FE-Programm ANSYS implementierten elektromechanischen Zustandsgleichungen basieren auf einer gemischten Formulierung unter Verwendung der extensiven Zustandsgröße $\{\varepsilon\}$ für die mechanische Dehnung und der intensiven Zustandsgröße $\{E\}$ für das elektrische Feld. Bei linearem Materialverhalten und Beschränkung auf Effekte erster Ord-

¹³Im Gegensatz zur direkten Kopplung auf Elementebene (siehe Kapitel 3.5.2) erfordert die Methode der Lastvektorkopplung eine iterative Lösung mit mindestens zwei Berechnungsschritten, um *beide* feldbeschreibenden Gleichungen zu lösen. Im *ersten* Schritt wird dabei das Temperaturfeldproblem und im *zweiten* das mechanische Problem berechnet.

nung gilt [Kohnke 92]:

$$\begin{cases} \{\sigma\} &= [C^E] \cdot \{\varepsilon\} - [e] \cdot \{E\} \\ \{D\} &= [e]^t \cdot \{\varepsilon\} + [\epsilon^\epsilon] \cdot \{E\} \end{cases} \quad (3.36)$$

hierbei sind $\{\sigma\}, \{\varepsilon\}$ der Spannungs- und Dehnungsvektor, $\{E\}, \{D\}$ das elektrische Feld und die Flußdichte, $[C^E]$ die Steifigkeitsmatrix (bei konstantem elektrischen Feld), $[e]$ die piezoelektrische Kopplungsmatrix und $[\epsilon^\epsilon]$ die Permittivitätsmatrix (bei konstanter mechanischer Dehnung). Analog zur Finite-Elemente-Diskretisierung beim rein mechanischen Problem können unter Verwendung von Methoden der Variationsrechnung die gekoppelten elektromechanischen Zustandsgleichungen auf Elementebene abgeleitet werden [Allik 70]:

$$\begin{bmatrix} M & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \ddot{\vec{u}} \\ \ddot{\phi} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} C & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{\vec{u}} \\ \dot{\phi} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} K_{uu} & K_{u\phi} \\ K_{u\phi}^t & K_{\phi\phi} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \vec{u} \\ \phi \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \vec{F} \\ Q \end{Bmatrix} \quad (3.37)$$

Die Freiheitsgrade an den Knotenpunkten der finiten Elemente sind durch den Vektor der Knotenverschiebungen \vec{u} und das elektrische Potential ϕ gegeben. Die Untermatrizen $[M]$ und $[K_{uu}]$ stellen die bereits bekannte Massen- (3.24) und Steifigkeitsmatrix (3.17) dar, und beziehen sich lediglich auf das mechanische Problem, das die Ansatzfunktionen $N_u(\vec{x})$ für die Verschiebungen im Element (Gleichung 3.9) verwendet. Die Strukturdämpfungsmatrix $[C_D]$ enthält nur mechanische Dämpfungsbeiträge und wird gemäß Gleichung (3.30) aufgebaut. Die piezoelektrische Kopplung wird durch die Außerdiagonalelemente, dieses sind die symmetrischen Untermatrizen $[K_{u\phi}] = [K_{\phi u}]^t$, der verallgemeinerten elektromechanischen Gesamtsteifigkeitsmatrix bewerkstelligt:

$$[K_{u\phi}] = \int_{\Omega} [B_u]^t [e] [B_\phi] d\Omega \quad (3.38)$$

Für die dielektrische Leitfähigkeitsmatrix, die als „elektrische Steifigkeitsmatrix“ gedeutet werden kann, gilt:

$$[K_{\phi\phi}] = - \int_{\Omega} [B_\phi]^t [\epsilon^\epsilon] [B_\phi] d\Omega \quad (3.39)$$

Auf der rechten Seite der Gleichung (3.37) steht \vec{F} für die Summe der mechanischen konzentrierten Knoten-, sowie verteilten Oberflächen- und Volumenkräfte (Gleichung 3.18). Die Summe der elektrischen konzentrierten Punktladungen, Oberflächen- und Volumenladungsdichten wird durch $\{Q\}$ dargestellt. Das elektrische Feld ergibt sich aus dem Gradienten des elektrischen Potentials im Element:

$$\{E\} = -[B_\phi] \cdot \{\phi\} \quad (3.40)$$

wobei:

$$[B_\phi] = \begin{Bmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{Bmatrix} \cdot \{N_\phi\}^t \quad (3.41)$$

Der Vektor $\{N_\phi\} = \{N_1, N_2, \dots, N_n\}$ wird als Ansatzfunktion für das elektrische Potential verwendet, wobei $\{\phi\} = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n\}$ ist und n die Anzahl der Knoten im verwendeten

Element darstellt. Ein Vorteil bei der FE-Formulierung der piezoelektrischen Zustandsgleichungen mit Hilfe der gemischten Zustandsgrößen $\{\varepsilon\}$ und $\{E\}$ ergibt sich aus der Tatsache, daß sich die Dehnung und das elektrische Feld unter Verwendung der Gleichungen (3.12) und (3.40) direkt aus den Knotenfreiheitsgraden (\vec{u}, ϕ) bestimmen lassen. Hieraus können gemäß den piezoelektrischen Zustandsgleichungen (3.36) die Spannung und die Flußdichte im finiten Element berechnet werden.

Bei der Berechnung von piezoelektrisch betriebenen Mikrostrukturen sind neben den lokalen Knotenergebnissen die integralen Größen, wie elektrische Impedanz und elektromechanischer Kopplungsfaktor von besonderem Interesse. Mit Hilfe der mechanischen, dielektrischen und elektromechanischen Energie im finiten Element [Naillon 83]:

$$\begin{aligned} E_{uu} &= \frac{1}{2} \{u\}^t [K_{uu}] \{u\} \\ E_{\phi\phi} &= \frac{1}{2} \{\phi\}^t [K_{\phi\phi}] \{\phi\} \\ E_{u\phi} &= \frac{1}{4} (\{u\}^t [K_{u\phi}] \{\phi\} + \{\phi\}^t [K_{u\phi}]^t \{u\}) \end{aligned} \quad (3.42)$$

kann der elektromechanische Kopplungsfaktor:

$$k^2 := \frac{E_{u\phi}^2}{E_{uu} \cdot E_{\phi\phi}} \quad (3.43)$$

ermittelt werden. Bei dieser Gleichung handelt es sich um die *exakte* Definition des elektromechanischen Kopplungsfaktors, während Gleichung (2.14) eine Näherung darstellt und nur für entkoppelte Schwingungsmoden Gültigkeit besitzt [Lerch 90]. In Kapitel 5 wird das elektromechanische Wandlungsprinzips modelliert und verschiedene Einflüsse auf das Schwingungsverhalten und den elektromechanischen Kopplungsfaktor untersucht, sowie das frequenzabhängige Impedanzverhalten von piezoelektrisch angetriebenen Mikrostrukturen berechnet.

3.6 Fehlerabschätzungen

Als Näherungsverfahren unterliegt die FE-Methode verschiedenen Fehlereinflüssen, so daß der Gültigkeitsbereich des FE-Modells bei jeder Problemstellung einzeln untersucht und verifiziert werden muß. Die Wahl der Diskretisierung muß dem Problem angepaßt sein. Für unterschiedliche mathematische Analysen muß die Orts- und Zeitdiskretisierung eine Auflösung der Variablenänderung ermöglichen. In der Regel erfordern statische, dynamische und thermische Berechnungen daher verschiedene Elementvernetzungen, da die Gradienten der einzelnen Feldgrößen sich unterschiedlich über das Gebiet verteilen. Die Fehler, die bei der numerischen Behandlung auftreten können, lassen sich grob unterteilen in den:

- **Modellfehler**, der durch die Vereinfachung der Realität bei der mathematischen Idealisierung des physikalischen Problems auftritt. Neben der ungenügenden Geo-

metrieerfassung können weiterhin die nur ungenau bekannten Materialeigenschaften zu erheblichen Fehlereinflüssen beitragen. Die Idealisierung der Randbedingungen kann zusätzlich an Bauelementerändern zu singulärem Lösungsverhalten führen.

- **Approximationsfehler** bzw. Diskretisierungsfehler, der die Abweichung der FE-Näherungslösung von der exakten Lösung des physikalischen Problems darstellt und der eine Aussage über die Vernetzungsgüte des untersuchten Gebietes erlaubt. Die verwendeten Formfunktionen der finiten Elemente haben hierbei einen unmittelbaren Einfluß auf den Diskretisierungsfehler. Mit Hilfe verschiedener *a priori* Fehlerabschätzungen kann das Konvergenzverhalten *vor* der FE-Berechnung abgeschätzt werden [Göhner 93].
- **Numerischer Fehler**, der durch die Rechengenauigkeit der verwendeten numerischen Algorithmen verursacht wird, da die numerischen Verfahren, die zur Integration und zur Lösung nichtlinearer Gleichungen eingesetzt werden, nicht exakt sind. Zusätzlich kommen Rundungsfehler hinzu, die von der Güte der rechnerinternen Zahldarstellung (Rechner- ε) abhängen.

Die Größenordnung der einzelnen Fehler sollte aufeinander abgestimmt sein. In der Mikromechanik sind beispielsweise die Materialdaten in der Regel nicht genau bekannt, so daß es nicht sinnvoll ist, den numerischen Fehler aufwendig zu minimieren.

Im weiteren soll der Approximationsfehler e_h genauer betrachtet werden, der die Differenz zwischen der schwachen Lösung ϕ der Gleichung (3.2) und der besten numerischen Approximation ϕ_h im FE-Unterraum S_h , gemessen in einer geeignet zu wählenden Norm¹⁴ darstellt. Dieser kann durch:

$$e_h = \|\phi - \phi_h\| \leq c \cdot h^p \quad (3.44)$$

abgeschätzt werden [Braess 91]. Hierbei stellt c eine netzunabhängige Konstante dar. Mit abnehmender Elementweite h und zunehmender FE-Ordnung p der Elementansatzfunktion ($p = \text{Polynomgrad} + 1$) nimmt der Approximationsfehler e_h stetig ab. Jedoch hat die Glattheit (Regularität) der Lösungsfunktion ϕ einen Einfluß auf das Konvergenzverhalten der verwendeten Elemente. Das Approximationsverhalten wird bei Randwertproblemen im allgemeinen zum Rand hin schlechter, so daß es wenig Sinn macht den Polynomgrad beliebig zu erhöhen, vielmehr sollte in diesen Bereichen die Diskretisierung hinreichend fein gewählt werden.

In der Praxis der FE-Berechnungen wird zur Verbesserung der Konvergenzeigenschaften sowohl die Elementweite h verkleinert (*h-Methode*), als auch der Polynomgrad der Elementansatzfunktionen erhöht (*p-Methode*), um den Lösungsfortschritt beim Übergang auf eine jeweils feinere Elementvernetzung zu bestimmen. Durch Einsatz von *a posteriori* Fehlerschätzern (siehe [Zienkiewicz 87]) können adaptive Vernetzungstechniken eingesetzt

¹⁴Zur lokalen Fehlerabschätzung bei statischen FE-Berechnungen wird in der Regel die „Energienorm“ benutzt, die eine anschauliche Deutung über die Feldenergie im finiten Element erlaubt [Braess 91, Hackbusch 86].

werden und die Elementweite und/oder Polynomordnung *lokal* verändert werden, um die Auflösung von großen Feldgradienten zu ermöglichen. Ein großer Vorteil der *h-Methode* besteht darin, daß einfache Ansatzfunktionen, meist linearer oder quadratischer Ordnung, verwendet werden und somit die Anzahl der Freiheitsgrade und der Berechnungsaufwand niedrig gehalten wird. Der Hauptnachteil gegenüber der *p-Methode* ist die erneut erforderliche Vernetzung¹⁵ der Struktur. Neuere FE-Programmentwicklungen gehen dazu über, beide Methoden zu kombinieren (sogenannte *hp-Methode*), um eine optimale Konvergenzbeschleunigung zu erhalten und die Vorteile beider Verfahren ausnutzen zu können.

¹⁵In diesem Zusammenhang spricht man auch von der sogenannten *hr-Methode*, wobei *r* für *remesh* steht.