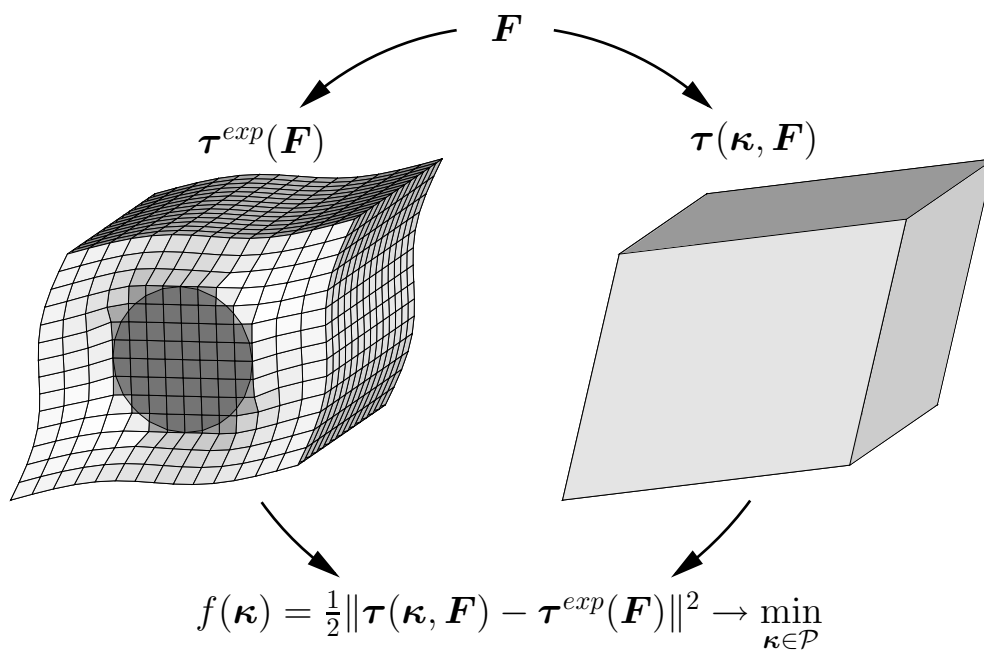


Zur Parameteridentifikation komplexer Materialmodelle auf der Basis realer und virtueller Testdaten

Andreas Rieger



Bericht Nr.: I-14 (2005)
Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I
Professor Dr.-Ing. C. Mieke
Stuttgart 2005

Zur Parameteridentifikation komplexer Materialmodelle auf der Basis realer und virtueller Testdaten

Von der Fakultät Bau- und Umweltingenieurwissenschaften
der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde
eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Andreas Rieger

aus Ruit auf den Fildern

Hauptbericht: Prof. Dr.-Ing. Christian Miede
Mitbericht: Prof. Dr. rer. nat. Siegfried Schmauder
Tag der mündlichen Prüfung: 23. Februar 2005

Herausgeber:

Prof. Dr.-Ing. habil. C. Miehe

Organisation und Verwaltung:

Institut für Mechanik (Bauwesen)

Lehrstuhl I

Universität Stuttgart

Pfaffenwaldring 7

70550 Stuttgart

Tel.: ++49-(0)711/685-6378

Fax : ++49-(0)711/685-6347

© Andreas Rieger

Institut für Mechanik (Bauwesen)

Lehrstuhl I

Universität Stuttgart

Pfaffenwaldring 7

70550 Stuttgart

Tel.: ++49-(0)711/685-6381

Fax : ++49-(0)711/685-6347

Alle Rechte, insbesondere das der Übersetzung in fremde Sprachen, vorbehalten. Ohne Genehmigung des Autors ist es nicht gestattet, dieses Heft ganz oder teilweise auf fotomechanischem Wege (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.

ISBN 3-937859-02-0 (D 93 Stuttgart)

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden verschiedene Methoden der Parameteridentifikation anhand von realen Meßergebnissen und virtuellen Versuchsdaten aufgezeigt. Die Parameteridentifikation führt auf eine inverse Problemstellung, die nicht exakt, aber im Sinne einer optimalen Anpassung von Simulation und Experiment, gelöst wird. Hierzu dienen die Methoden der nichtlinearen Optimierung, die eine problemabhängige Fehlerfunktion unter Beachtung von Nebenbedingungen minimiert. Zur Minimierung der Fehlerfunktion wird insbesondere die Sequentielle Quadratische Programmierung und ein Simplex Verfahren betrachtet. Für eine gradientenbasierte Optimierung werden die Sensitivitäten der in die Zielfunktion eingehenden Größen benötigt. Dies führt bei einer analytischen Bestimmung der Gradienten auf zwei entkoppelte Teile. Der eine Teil wird durch die Simulation des Experiments bestimmt. Der andere Teil beinhaltet die Spannungssensitivität, die als eine Erweiterung des algorithmischen Materialmodells betrachtet werden können.

Die Parameteridentifikation wird auf drei unterschiedliche Klassen von Versuchen angewendet. Dies sind zum einen axiale Zug-Druckversuche, bei denen die Fehlerfunktion über den Vergleich von experimentellen und simulierten axialen Spannungen gebildet wird. Hierbei wird insbesondere auf den Vergleich von analytisch und numerisch berechneten Gradienten abgezielt. Die zweite Art von Versuchen, die in die Identifikation einbezogen werden sind optische Verschiebungsmessungen an der Probenoberfläche. Die Fehlerfunktion wird hierbei über diskrete Knotenverschiebungen gebildet. Die Grundlage der dritten Klasse von Identifikationen bilden virtuelle Experimente. Diese Daten werden aus der Homogenisierungsanalyse heterogener Mikrostrukturen gewonnen. Die Fehlerfunktion wird über mehrdimensionale Spannungs-Verzerrungspfade aufgebaut. Alle drei Arten von Identifikationen werden anhand ausgewählter Modellprobleme dargestellt.

Abstract

In this thesis several methods of parameter identification are considered making use of real and virtual experimental data. The identification leads to an inverse problem which can not be solved exactly but in the sense of an optimal alignment of simulated and experimental data. Methods of nonlinear optimization serve as a tool to minimize a problem dependent objective function which can be subject to constraints. In particular, the sequential quadratic programming method and a simplex method are investigated. For a gradient based optimization the sensitivities of the objective function is required. This leads to two decoupled parts in case of an analytical computation of the gradients. One part is determined by the simulation of the experiment. The other part contains the stress sensitivities on the material level.

The identification process is applied to three different classes of experiments. In particular uniaxial tension compression tests, where the objective function is set up by the comparison of simulated and experimental uniaxial stresses. Emphasis is put on the comparison of analytically computed and numerically approximated gradients. The second kind of experiments to incorporate into the identification process are optically measured displacement fields. The objective function is set up via discrete nodal positions. The basis of the third class of identification processes are virtual experiments. Virtual test data is generated through a homogenization analysis while testing a given heterogeneous microstructure. In this case the objective function is build up by the comparison of simulated and experimental multidimensional stress strain paths. All three kinds of identifications are supported by selected model problems.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit am Institut für Mechanik (Bauwesen) der Universität Stuttgart als Kursdirektor des internationalen Master Studiengangs “Computational Mechanics of Materials and Structures” (COMMAS).

Meinen besonderen Dank möchte ich Herrn Professor Christian Miehe für die Anregung zu dieser Arbeit und die Unterstützung und Betreuung während meiner Tätigkeit am Institut aussprechen. Ich danke Herrn Professor Miehe außerdem für die Übernahme des Hauptberichts.

Herrn Professor Siegfried Schmauder danke ich sehr für sein Interesse an dieser Arbeit und die Übernahme des Mitberichts.

Allen Mitarbeitern des Instituts für Mechanik danke ich für die sehr angenehme Arbeitsatmosphäre. Dabei möchte ich mich besonders bei meiner Frau Dr.-Ing. Sonja Rieger für die fachliche Zusammenarbeit, das sehr gute private Umfeld und das Korrekturlesen der Arbeit bedanken. Ferner bedanke ich mich bei Dr.-Ing. Gerald Scheday, Dr.-Ing. Andreas Koch, und Dipl.-Ing. Jan Schotte für die hilfreichen Diskussionen.

Stuttgart, Februar 2005

Andreas Rieger

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung und Motivation	1
1.1. Überblick und Ziele der Arbeit	2
1.2. Gliederung	4
2. Grundlagen der Kontinuumsmechanik und Materialtheorie	7
2.1. Kinematik deformierbarer Körper	7
2.1.1. Materieller Körper, Konfigurationen und Deformationsabbildung . .	7
2.1.2. Deformationen von Linien-, Flächen- und Volumenelementen	8
2.1.3. Metrik- und Verzerrungstensoren	12
2.2. Spannungstensoren	14
2.2.1. Kontaktspannungen	14
2.2.2. Cauchy- und Kirchhoff-Spannungstensoren	14
2.2.3. Piola-Kirchhoff Spannungenstensoren	15
2.3. Physikalische Bilanzsätze der Kontinuumsmechanik	16
2.3.1. Massebilanz	16
2.3.2. Impulsbilanz	17
2.3.3. Drehimpulsbilanz	17
2.3.4. Energiebilanz	18
2.3.5. Entropieungleichung	18
2.4. Konstitutive Materialgleichungen	19
2.4.1. Prinzip der materiellen Objektivität	20
2.4.2. Materielle Symmetrie	20
2.4.3. Konzept interner Variablen	20
2.4.4. Struktur algorithmischer Materialmodelle	21
3. Verfahren der nichtlinearen Optimierung	23
3.1. Übersicht und Klassifizierung	23
3.2. Eindimensionale Optimierungsverfahren	24
3.2.1. Verfahren zur exakten Minimierung	24
3.2.2. Verfahren zur inexakten Minimierung	25
3.3. Mehrdimensionale Optimierungsverfahren	26
3.3.1. Optimierungsverfahren vom Newton Typ	26
3.3.2. Die Sequentielle Quadratische Programmierung	29
3.3.3. Projektionsalgorithmus nach Bertsekas	33

3.3.4.	Das Simplex Verfahren zur nichtlinearen Optimierung	33
3.3.5.	Skalieren	36
3.4.	Instabilitäten und deren Analyse	37
3.5.	Testfunktion für Optimierungsalgorithmen	37
4.	Einführung in die Parameteridentifikation	39
4.1.	Allgemeines	39
4.2.	Physikalisch zugängliche Daten	40
4.3.	Versuchsdaten und Unsicherheiten	41
4.4.	Charakteristische Testabläufe	42
4.5.	Das direkte Problem	43
4.6.	Das inverse Problem der Parameteridentifikation	44
4.7.	Minimierung der Fehlerquadrate	45
4.8.	Verifikation und Validation	46
4.9.	Prüfeinrichtungen und Messverfahren	47
4.9.1.	Servohydraulische Prüfmaschine	47
4.9.2.	Messaufbau für homogene Proben	47
4.9.3.	Messaufbau für inhomogene Proben	48
5.	Parameteridentifikation axialer Deformations- und Spannungszustände 49	
5.1.	Aufbau der Zielfunktion für eindimensionale Versuche	49
5.1.1.	Zielfunktion für verzerrungsgesteuerte Versuche	49
5.1.2.	Zielfunktion für spannungsgesteuerte Versuche	50
5.2.	Treiber für eindimensionale Zug- und Druck-Versuche	50
5.2.1.	Treiber für deformationsgesteuerte Prozesse	50
5.2.2.	Treiber für spannungsgesteuerte Prozesse	51
5.2.3.	Steuerung des Treibers	52
5.2.4.	Analytische Sensitivitätsanalyse deformationsgetriebener Prozesse	54
5.2.5.	Analytische Sensitivitätsanalyse spannungsgetriebener Prozesse	56
5.2.6.	Numerische Sensitivitätsanalyse	58
5.3.	Re-Identifikation von Materialparametern	60
5.3.1.	Kompressibles Neo-Hooke Material	60
5.3.2.	Prä- und Postprozessor für logarithmische Verzerrungen	63
5.3.3.	Nichtlineare Viskoelastizität mit Exponentialansatz	65
5.3.4.	Elastoplastizität mit linearer kinematisch/isotroper Verfestigung	70
5.4.	Identifikation der Materialparameter von kurzglasfaserverstärktem Polyamid	78

5.4.1.	Ein visko-elastoplastisches Materialmodell mit Schädigung	79
5.4.2.	Experimentelle Daten und Identifikation der Materialparameter . . .	81
5.4.3.	Validation mit Kriechversuchen	84
5.5.	Zug-Treiber bei anisotropem Materialverhalten	84
6.	Parameteridentifikation mit der Finite Elemente Methode	89
6.1.	Variationsformulierung der Finite Elemente Methode	89
6.2.	Finite Elemente Diskretisierung mit der Standard Verschiebungsmethode .	90
6.3.	Aufbau der Zielfunktion	93
6.4.	Sensitivitätsanalyse im Rahmen der FEM	94
6.4.1.	Analytische Gradientenbildung im FE Kontext	94
6.4.2.	Numerische Gradientenbildung im FE Kontext	96
6.5.	Strukturproblem der transversal isotropen Elastizität	97
6.5.1.	Generierung der experimentellen Daten	98
6.5.2.	Zielfunktion und Parameteranpassung	98
6.5.3.	Identifikation der ausgezeichneten Richtung	99
6.5.4.	Topologie der Zielfunktion	100
6.5.5.	Gradienten der Knotenpositionen	100
6.6.	Inhomogener Zugstab aus Aluminium	103
6.6.1.	Experimentelle Daten	103
6.6.2.	Ein nichtlineares isotropes Plastizitätsmodell für Aluminium	104
6.6.3.	Zielfunktion und Parameteranpassung	104
7.	Parameteridentifikation auf der Basis virtueller Testdaten	107
7.1.	Homogenisierung im Rahmen finiter Deformationen	108
7.1.1.	Randwertproblem der Makrostruktur	109
7.1.2.	Finite Elemente Lösung des makroskopischen Randwertproblems . .	110
7.1.3.	Randwertproblem der Mikrostruktur	111
7.1.4.	Finite Elemente Lösung des mikroskopischen Randwertproblems . .	113
7.2.	Identifikation transversal isotroper finiter Elastizität	114
7.2.1.	Mikrostrukturen für transversal isotropes Material	114
7.2.2.	Materialmodell auf der Mikroebene	115
7.2.3.	Makroskopisches Materialmodell	116
7.2.4.	Generierung der virtuellen Testdaten	118
7.2.5.	Identifikation der Materialparameter für das Boron-Laminat	118
7.2.6.	Ein Beispiel zu unvollständigen Messdaten	120

7.2.7. Validation der Materialparameter mit Treiber–Rechnung	122
7.2.8. Parameteridentifikation der laminaren Mikrostruktur	122
7.3. Identifikation finiter orthotroper Plastizität	124
7.3.1. Homogenisierungskonzept in der Kristallplastizität	124
7.3.2. Ein Modell zur Einkristallplastizität	124
7.3.3. Vorprozess zur Induktion der Anisotropie	127
7.3.4. Generierung der virtuellen Testdaten	128
7.3.5. Konstitutives Modell im logarithmischen Verzerrungsraum	128
7.3.6. Parameteridentifikation des orthotropen Plastizitätsmodells	134
7.3.7. Validation der identifizierten Materialparameter	136
8. Zusammenfassung und Ausblick	141
Literatur	143
Abbildungsverzeichnis	155
Tabellenverzeichnis	156

1. Einleitung und Motivation

Eine wesentliche Aufgabe des Ingenieurwesens ist die Simulation und Vorhersage von Versagensmechanismen, Langzeitverhalten, Gebrauchsfähigkeit und Lebensdauer von Konstruktionen bzw. von speziellen Bauteilen einer Konstruktion. Diese Gebiete sind unter anderem in der Automobilindustrie, der Luft- und Raumfahrttechnik bei der Umformtechnik und der Materialprüfung relevant. Zur Bearbeitung und Simulation dieser Aufgaben werden häufig rechnergestützte Modelle verwendet. Deren Entwicklung beinhaltet die Durchführung von Versuchen und die Bestimmung von Messdaten, die Bereitstellung eines Modellkonzeptes, die mathematische Modellbildung, die numerische Implementation, die Parameteridentifikation und das Testen und Bewerten des Modells.

Ein materieller Körper reagiert unterschiedlich je nach Art der Einwirkungen wie Kräfte, Temperatur, etc. Das Ziel der *Versuchsdurchführung* ist, in systematischer Art und Weise die Beziehungen zwischen Ein- und Ausgangsgrößen, auch Ursache und Wirkung genannt, physikalisch zugänglicher Größen zu untersuchen. Zugängliche Größen bei mikroskopischen Messungen sind beispielsweise die Versetzungsdichte bei Kristallen, die Hohlraumbildung und die Kristallausrichtung oder Textur. Zugängliche Größen bei makroskopischen Messungen sind unter anderem Verschiebungen, Kräfte, Zeit und Temperatur. Aus den gemessenen Verschiebungen und Kräften werden Verzerrungen und Spannungen bestimmt, die oft als homogen über den Messbereich der Probe vorausgesetzt werden. Diese Annahme ist nicht immer zulässig, wie der Druckversuch an einem Betonwürfel zeigt. Hier sind starke Inhomogenitäten infolge der Reibbehinderung am Probenende zu erwarten. Bei Stahlzugproben treten Einschnürungen bei großen inelastischen Deformationen auf. Aufgrund dieser Unzulänglichkeiten sind verbesserte Verfahren entwickelt worden, welche inhomogene Spannungs- und Deformationszustände erfassen. Hierzu gehören die optischen Messverfahren wie beispielsweise das Objektrasterverfahren.

Das *Modellkonzept* stützt sich auf ausführliche Beobachtungen von Modellversuchen und erfordert tiefe Kenntnisse der physikalischen Vorgänge im betrachteten Material. Basierend auf dem Modellkonzept ist die *mathematische Struktur* des Modells festzulegen, welches zunächst ein breites Spektrum von physikalischen Phänomenen der Versuche qualitativ beschreiben soll. Hier ist das Gebiet der Kontinuumsmechanik und Materialtheorie angesiedelt. Die Beschreibung des individuellen Materialverhaltens wird durch die mathematische Struktur festgelegt, die eine bestimmte Materialklasse konstituiert. Hierbei werden in den Materialgleichungen konstitutive Variablen in Abhängigkeit von sogenannten Primärvariablen angegeben. Konstitutive Variablen sind die freie Energie oder die Spannungen. Die Verzerrungen oder die Temperatur und interne Variablen werden als Primärvariablen angesehen. Diese Materialgleichungen sind im allgemeinen nicht analytisch lösbar. Aus diesem Grund werden sie mit *numerischen Integrationsverfahren* an diskreten Zeitpunkten gelöst.

Anschließend ist eine *Parameteridentifikation* durchzuführen, um die in der Modellbildung eingeführten Konstanten auf der Basis experimenteller Daten so zu bestimmen, dass eine quantitativ verbesserte Übereinstimmung von Simulations- und Versuchsdaten erhalten wird. Die Bestimmung dieser Materialparameter des mathematischen Modells führt auf eine sogenannte *inverse Problemstellung*. Im Gegensatz zum direkten Problem, bei dem für ein gegebenes mathematisches Modell mit gegebenen Materialparametern eine Lösung gesucht wird, sind beim inversen Problem zu gegebenen Versuchsdaten die Materialparameter des Modells zu bestimmen. In einfachen Fällen ist eine direkte Auswertung von

Versuchsdaten zur Bestimmung der Materialparameter möglich. So ist in der linearen Elastizitätstheorie der E -Modul aus dem Verhältnis einer Spannungsänderung assoziiert zur Dehnungsänderung berechenbar.

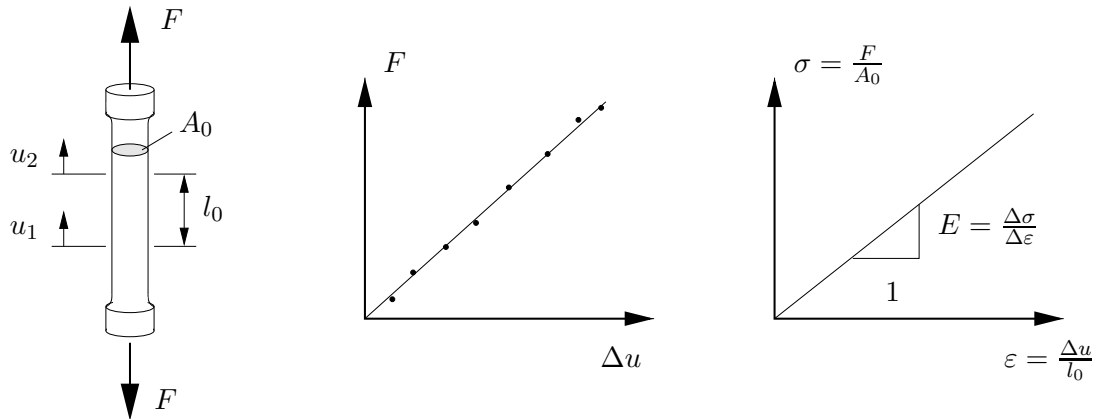


Abbildung 1: Bestimmung des E -Moduls aus einer experimentellen Spannungs–Dehnungs–Beziehung.

Bei komplexeren Materialmodellen ist in der Regel eine einfache Bestimmung und Interpretation der Materialparameter nicht mehr möglich. Hier wird ein Kriterium betrachtet, das eine Aussage über die Qualität der Übereinstimmung von Simulation und Experiment zulässt. Durch die *Minimierung einer Fehlerquadratfunktion* soll eine optimale Übereinstimmung der Versuchsdaten mit den Simulationsdaten in einem gewichteten Mittel erzielt werden. Dieser Ansatz führt auf ein mathematisches Optimierungsproblem, bei dem die variablen Materialparameter aus physikalischen Gründen eingeschränkt sein können. Liefert die Parameteridentifikation zufriedenstellende Ergebnisse, so ist das Modell verifiziert.

1.1. Überblick und Ziele der Arbeit

Das Ziel dieser Arbeit ist die Aufbereitung und Anwendung der Parameteridentifikation als Optimierungsproblem zur Identifikation von Materialparametern komplexer makroskopischer Materialmodelle der finiten Elastizität und Inelastizität. Die Parameteridentifikation erfolgt durch einen Vergleich von experimentellen und simulierten Daten. Es wird versucht eine optimale Übereinstimmung dieser Daten zu erzielen. Hierzu werden die dafür notwendigen Grundlagen zur nichtlinearen Optimierung vorgestellt. Durch die Art der zur Verfügung stehenden Daten lassen sich die in dieser Arbeit betrachteten Parameteridentifikationen in drei unterschiedliche Kategorien einteilen.

- (i) Bei der klassischen Parameteridentifikation werden homogene Probekörper eindimensionalen Zug–Druck Versuchen unterzogen. Hierbei wird die grundlegende Annahme einer homogenen Verteilung von Verzerrungen und Spannungen über den Probenquerschnitt getroffen. Hieraus resultiert eine axiale Spannungsantwort des Materials anhand der die Fehlerquadratfunktion aufgebaut wird. Dies wird beispielsweise ausführlich in den Arbeiten von BUI [18] und SCHEDAY [110] beschrieben.
- (ii) Die Annahme einer homogenen Verteilung von Spannungen und Verzerrungen über den Probenquerschnitt ist nicht immer gegeben. Eine inhomogene Verteilung liegt beispielsweise bei dem oben beschriebenen Betondruckwürfel mit einer Reibbehinderung an den Druckplatten oder bei einem metallischen Zugstab, der sich unter

großer Zugbelastung einschnürt, vor. Aus diesem Grund wurde in den letzten Jahren begonnen anhand von inhomogenen Probegeometrien Parameter zu identifizieren. Dies erfolgte parallel zur Entwicklung optischer Feldmessmethoden, die es erlauben, Oberflächenverschiebungsfelder in zwei oder drei Dimensionen zu bestimmen. Sind diese bekannt, dann kann die Fehlerquadratfunktion über die Oberflächenverschiebungen aufgestellt werden. Die Bestimmung von Verschiebungsfeldern über optische Messeinrichtungen ist ausführlich in WINTER [134] beschrieben. Arbeiten, die sich mit der Identifikation von Materialparametern mit Verschiebungsfeldern befassen sind unter anderem von ANDRESEN ET AL. [1], MAHNKEN [60, 61, 62], MAHNKEN & STEIN [65, 66] und SCHEDAY [110] veröffentlicht worden.

- (iii) Eine neue Entwicklung in der Parameteridentifikation ist das virtuelle Testen von Materialien, die künstlich, durch eine Computersimulation, erzeugt werden. Hierbei wird davon ausgegangen, dass es bei komplexen Materialien mit Mikrostruktur oft möglich ist, die Geometrie der Mikrostruktur und die Stoffgesetze der einzelnen Konstituierenden dieser Mikrostruktur zu bestimmen. Dies bedeutet, die Mechanismen auf Mikroebene können durch einfache Gesetze auf der Mikroebene beschrieben werden, und die darin enthaltenen Parameter sind experimentell bestimmbar. Dies motiviert die Modellierung der Materialien auf der Mikroebene. Durch einen Mikro–Makro Übergang wird die Spannungsantwort bei einer beliebig vorgegebenen Deformation ermittelt. Das hierzu nötige Konzept der Homogenisierung wird in Arbeiten von MIEHE [74, 78] beschrieben. In diesem Fall des virtuellen Testens wird die Fehlerquadratfunktion über mehrdimensionale Spannungs–Verzerrungs Pfade aufgestellt.

Für alle drei beschriebenen Möglichkeiten muss eine Technik bereitgestellt werden, die es ermöglicht das durchgeführte Experiment zu simulieren. Dies ist bei den eindimensionalen Experimenten ein sogenannter Treiber–Algorithmus, der zu einer vorgegebenen axialen Deformation die zugehörige Spannungsantwort eines makroskopischen dreidimensionalen Materialmodells liefert. Im Falle der inhomogenen Proben muss die Simulation mit der Methode der Finiten Elemente durchgeführt werden. Diese ist beispielsweise in ZIENKEWICZ & TAYLOR [136] beschrieben. Diese erlaubt es, bei vorgegebenen Randbedingungen die Verschiebungsantwort eines Randwertproblems zu berechnen. Im letzten Fall des virtuellen Testens ist es ausreichend, das makroskopische Materialmodell mit einer vorgegebenen Deformation auszuwerten.

Die Minimierung der Fehlerquadratfunktion wird mit Verfahren der nichtlinearen Optimierung gelöst. Gängige Methoden sind gradientenfreie Verfahren wie die Evolutionsstrategie, die in SCHWEFEL [121, 122] beschrieben wird, die Monte–Carlo Simulation, das Simplex Verfahren von POWELL [96, 99] oder die Response Surface Methode aus MYERS & MONTGOMERY [89], die alleine mit Auswertungen der Zielfunktion mit vorgegebenen Materialparametern auskommen. Es kommen aber auch gradientenbasierte Verfahren zum Einsatz, die die Bestimmung des Gradienten der Zielfunktion bezüglich der Materialparameter erfordert. Dies sind beispielsweise die Methode des steilsten Abstiegs, die unter anderem in NOCEDAL & WRIGHT [91] beschrieben wird, die konjugierten Gradienten nach HEESTENS & STIEFEL [48], FLETCHER & REEVES [29], die Newton- oder Quasi–Newton Verfahren, SCHITTKOWSKI [115], LUENBERGER [58], SPELLUCCI [126], BERTSEKAS [9, 10, 11], BAZARAA ET. AL. [8]. Zur Anwendung dieser gradientenbasierten Optimierungsverfahren ist eine Sensitivitätsanalyse der Zielfunktion erforderlich. Je

nach Art der Parameteridentifikation benötigt diese (i) den Gradienten der axialen Spannung nach den Materialparametern, oder (ii) den Gradienten der Knotenverschiebungen nach den Materialparametern, oder (iii) den Gradienten des Spannungstensors nach den Materialparametern. Diese Sensitivitätsanalyse wird in den Fällen (i) und (ii) durch die Simulationstechnik bestimmt, beinhaltet aber immer die Bestimmung der Sensitivitäten der Spannungen bezüglich der Materialparameter. Die Sensitivitätsanalyse auf Materialebene ist in allen drei Fällen identisch und kann als eine Erweiterung des dreidimensionalen algorithmischen Materialmodells angesehen werden.

1.2. Gliederung

Im **Kapitel 2** dieser Arbeit sind die kontinuumsmechanischen Grundlagen zur Beschreibung finiter Deformationen zusammengefasst. Es wird sowohl die Kinematik deformierbarer Körper betrachtet als auch die wichtigsten Verzerrungsmaße und Spannungstensen definiert. Desweiteren werden die physikalischen Bilanzgleichungen behandelt, die stoffunabhängig für jeden materiellen Körper gelten. Das Kapitel schließt mit grundlegenden Konzepten zur Materialmodellierung und deren algorithmischen Umsetzung.

Das **Kapitel 3** geht auf die numerischen Verfahren zur nichtlinearen Optimierung ein, die zur Minimierung der Fehlerquadratfunktion bei der Parameteridentifikation nötig sind. Diese sind unter anderem auch in DENNIS & SCHNABEL [25] oder NOCEDAL & WRIGHT [91] dargestellt. Es wird eine Klassifizierung in gradientenbasierte und gradientenfreie, bzw. in deterministische und stochastische Verfahren angegeben. Sowohl eindimensionale Verfahren als auch mehrdimensionale Verfahren werden besprochen, wobei die eindimensionalen Verfahren bei vielen mehrdimensionalen Verfahren eine wichtige Rolle spielen. Bei den mehrdimensionalen Optimierungsverfahren wird ein besonderes Augenmerk auf die Sequentielle Quadratische Programmierung von SCHITTKOWSKI [117] und auf ein Simplex-Verfahren nach POWELL [99] zur Lösung nichtlinearer Optimierungsaufgaben gelegt. Beide Verfahren sind in der Lage Ungleichheitsnebenbedingungen zu berücksichtigen, die physikalischer Natur sein können, oder zur Stabilisierung der Optimierung notwendig sind. Die Leistungsfähigkeit der Verfahren wird anhand der in der Optimierungsliteratur bekannten Rosenbrock-Funktion dargestellt, siehe beispielsweise SPELLUCCI [126].

Das **Kapitel 4** gibt eine Einführung in die klassische Parameteridentifikation homogener Deformationszustände wie sie auch in BARD [5] vorgestellt wird. Das Kapitel geht auf die bei der Durchführung von Experimenten zugänglichen Daten ein, und klärt einige wichtige Begriffe wie das "direkte" und das "inverse Problem" der Parameteridentifikation. Siehe hierzu auch BANKS & KUNISCH [4] und BUI [18].

In **Kapitel 5** wird die Parameteridentifikation homogener Deformations- und Spannungszustände dargestellt. Hierzu gehört die algorithmische Durchdringung des Treibers für vorgegebene Deformationen und vorgegebene Spannungen mit der dazugehörigen Sensitivitätsanalyse. Für die verwendeten Materialgesetze zur finiten nichtlinearen Viskoelastizität und Plastizität wird die Sensitivitätsanalyse auf Materialebene vorgestellt, siehe MAHNKEN [60], MAHNKEN & STEIN [65] und MAHNKEN, JOHANSSON & RUNESSON [67]. Zusätzlich zu den analytischen Gradienten werden numerische Gradienten bestimmt. Diese werden hinsichtlich ihrer Leistungsfähigkeit bei der gradientenbasierten Optimierung überprüft. Das Kapitel schließt mit der Identifikation eines in RIEGER, S. [109] vorgestellten visko-elastoplastischen Materialmodells für ein glasfaserverstärktes Polyamid anhand realer uniaxialer Daten.

Kapitel 6 befasst sich mit der Identifikation bei inhomogenen Deformationszuständen. Die Simulation wird hierbei mit der Finiten Elemente Methode durchgeführt um die Verschiebungsfelder der Simulation den experimentell ermittelten Verschiebungsfeldern gegenüberstellen zu können. Dieses Vorgehen wurde bereits in MAHNKEN [62], MAHNKEN & STEIN [65] und MAHNKEN & KUHL [63] gezeigt. Es wird kurz die Variationsformulierung der Finiten Elemente Methode und die dazugehörige Sensitivitätsanalyse der Knotenverschiebungen bezüglich der Materialparameter vorgestellt. Die Sensitivitätsanalyse führt auf die Bestimmung der Gradienten der Spannungen bezüglich der Materialparameter, wie sie bereits in Kapitel 5 benötigt wird. Die vorgestellte Methode wird auf die Identifikation von Materialparametern zweier Strukturprobleme angewendet.

Das **Kapitel 7** geht auf die Identifikation anhand von virtuellen Testdaten ein. Diese Daten werden durch virtuelles Testen einer Mikrostruktur generiert. Hierbei werden die Materialgesetze und Materialparameter auf Mikroebene und die Struktur oder Geometrie der Mikrostruktur als bekannt vorausgesetzt. Durch einen Mikro–Makro Übergang wird die makroskopische Spannungsantwort einer Mikrostruktur zu einer gegebenen Deformation bestimmt. Diese mehrdimensionale Spannungsantwort wird als experimenteller Datensatz aufgefasst. Die Parameteridentifikation der makroskopischen Modelle erfolgt über den Vergleich dieser virtuellen experimentellen und simulierten Spannungsantwort. Die Simulation erfolgt durch die Auswertung des makroskopischen Materialmodells mit der zur Generierung der Daten verwendeten Deformation. Somit ist auf Strukturebene keine Sensitivitätsanalyse erforderlich. Dieses Vorgehen wird auf eine transversal isotrope elastische Mikrostruktur angewendet. Ferner wird ein Beispiel zur Kristallplastizität diskutiert, wobei die Anisotropie durch einen Vorprozess in ein Polykristall induziert wird. Für die beiden untersuchten Mikrostrukturen wird auf makroskopischer Ebene jeweils ein adäquates phänomenologisches Materialmodell entwickelt und die Materialparameter angepasst. Zur Validation des Modellproblems der Plastizität wird ein Randwertproblem berechnet und die Lösungen der Berechnung mit makroskopischem Modell und der Lösung mit Mikrostruktur gegenübergestellt.

2. Grundlagen der Kontinuumsmechanik und Materialtheorie

In diesem Kapitel werden die allgemeinen Grundlagen der Kontinuumsmechanik dargestellt, die zur Beschreibung geometrisch und physikalisch nichtlinearer Deformationsprozesse notwendig sind. Die verwendete Notation lehnt sich an Arbeiten und Vorlesungen von MIEHE [75, 76] an.

2.1. Kinematik deformierbarer Körper

2.1.1. Materieller Körper, Konfigurationen und Deformationsabbildung

Ein materieller Körper B ist eine Menge von materiellen Punkten $P \in B$, die zu jedem Zeitpunkt t eindeutig und umkehrbar auf Bereiche des dreidimensionalen euklidischen Raums \mathbb{R}^3 abgebildet werden können. Die Abbildung $\chi_t(P)$ eines Punktes P des materiellen Körpers B in die Konfiguration \mathcal{B}_t ist gegeben durch

$$\chi_t : \begin{cases} B & \rightarrow \mathcal{B}_t \in \mathbb{R}^3 \\ P & \mapsto \mathbf{x}_t = \chi_t(P) \end{cases} . \quad (2.1)$$

Hierbei ist \mathbf{x}_t die in Abbildung 2 dargestellte Bahnlinie eines Punktes P . Diese, vom

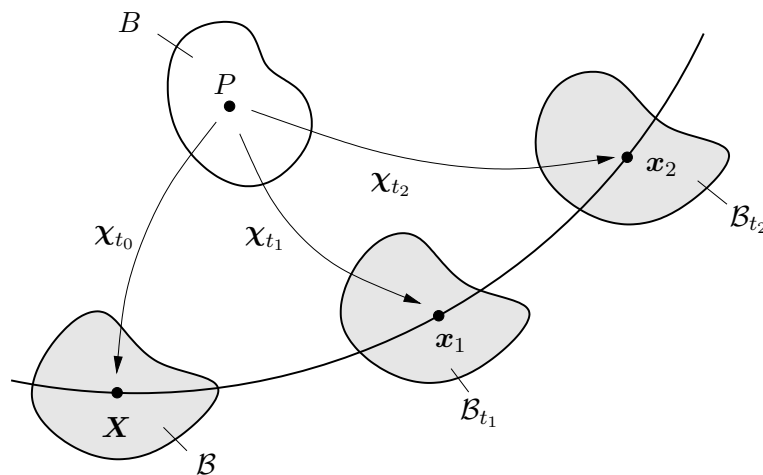


Abbildung 2: Referenzkonfiguration \mathcal{B} und aktuelle Konfigurationen \mathcal{B}_{t_1} und \mathcal{B}_{t_2} sind kontinuierliche Folge von Abbildungen χ_t des materiellen Körpers B in die Konfiguration \mathcal{B}_t . Die Bahnlinie eines Punktes $P \in B$ wird durch die Folge von Positionen $\mathbf{X}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ im dreidimensionalen euklidischen Raum beschrieben.

materiellen Körper zum Zeitpunkt t eingenommene Konfiguration, wird als Momentankonfiguration bezeichnet. Die zeitunabhängige Konfiguration zur Kennzeichnung materieller Punkte wird Referenzkonfiguration genannt. Über diese lassen sich Aussagen über die relative Bewegungen des Körpers machen. Hierbei wird mit Hilfe der bijektiven stetigen Abbildung $\chi_0(P)$ jedem Teilchen P des materiellen Körpers B ein Ortsvektor \mathbf{X} zugeordnet.

$$\chi_0 : \begin{cases} B & \rightarrow \mathcal{B} \in \mathbb{R}^3 \\ P & \mapsto \mathbf{X} = \chi_0(P) \end{cases} \quad (2.2)$$

Die Referenzkonfiguration entspricht der Konfiguration, die der unbelastete Körper bei vorgegebener Referenztemperatur einnimmt.

Im Folgenden wird die Momentankonfiguration, auch Euler'sche Konfiguration genannt, mit \mathcal{S} und der zugehörige Ortsvektor mit \mathbf{x} bezeichnet. Entsprechend wird die Referenzkonfiguration, auch als Lagrange'sche Konfiguration bekannt, mit \mathcal{B} und der Ortsvektor mit \mathbf{X} bezeichnet. Wie in Abbildung 3 dargestellt ist, kann eine direkte Abbildung zwi-

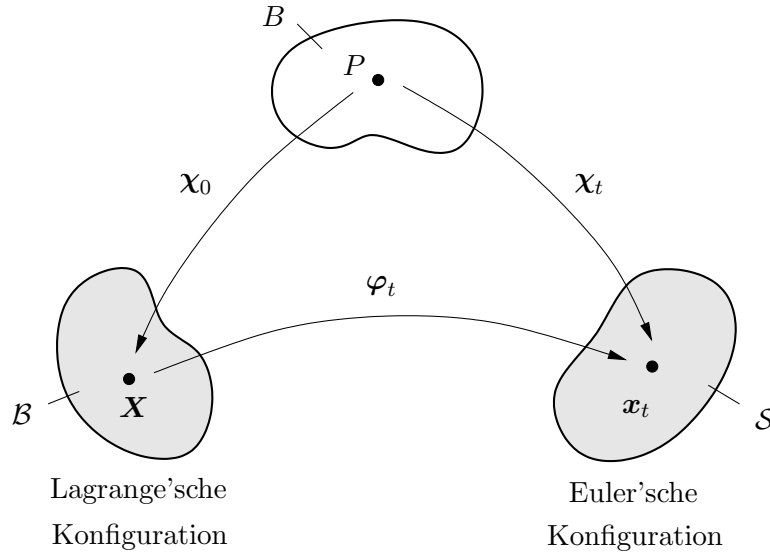


Abbildung 3: Nichtlineare Punktabbildung eines Punktes P des materiellen Körpers B in die Referenzkonfiguration $\mathbf{X} \in \mathcal{B}$ und in die Momentankonfiguration $\mathbf{x}_t \in \mathcal{S}$. Die Abbildung φ_t kann als Hintereinanderausführung der inversen Abbildung χ_0^{-1} und χ_t interpretiert werden.

schen der Referenzkonfiguration \mathcal{B} und der Momentankonfigurationen \mathcal{S} als Hintereinanderausführung der inversen Gleichung (2.2) und Gleichung (2.1) definiert werden. Diese nichtlineare Punktabbildung

$$\varphi_t : \begin{cases} \mathcal{B} & \rightarrow \mathcal{S} \\ \mathbf{X} & \mapsto \mathbf{x} = \varphi_t(\mathbf{X}) = (\chi_0^{-1} \circ \chi_t)(\mathbf{X}) = \chi_t(\chi_0^{-1}(\mathbf{X})) \end{cases} \quad (2.3)$$

beschreibt die Bewegung eines materiellen Körpers mit Bezug auf die festgelegte Referenzkonfiguration und wird Deformationsabbildung genannt. Der lineare Deformationsgradient \mathbf{F} wird als Fréchetableitung der Deformationsabbildung zur Zeit t definiert

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) := \nabla_{\mathbf{X}} \varphi_t(\mathbf{X}) = \frac{\partial \varphi_t(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} \quad (2.4)$$

und nimmt eine zentrale Rolle in der Kinematik finiter Deformationen ein. Die Determinante J des Deformationsgradienten ist beschränkt durch $\det[\mathbf{F}] > 0$, d.h. es werden keine Materialdurchdringungen zugelassen.

2.1.2. Deformationen von Linien-, Flächen- und Volumenelementen

Tangentenabbildung

Die in Abbildung 4 dargestellte materielle Kurve wird mit $\theta \in \mathbb{R}$ parametrisiert. Dann ergibt sich für die materielle Kurve \mathbf{C} in der Referenzkonfiguration \mathcal{B} bzw. für die räumliche Kurve \mathbf{c} in der Momentankonfiguration \mathcal{S}

$$\mathbf{C} : \theta \mapsto \mathbf{X} = \mathbf{C}(\theta) \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{c} : \theta \mapsto \mathbf{x} = \mathbf{c}(\theta) \quad (2.5)$$

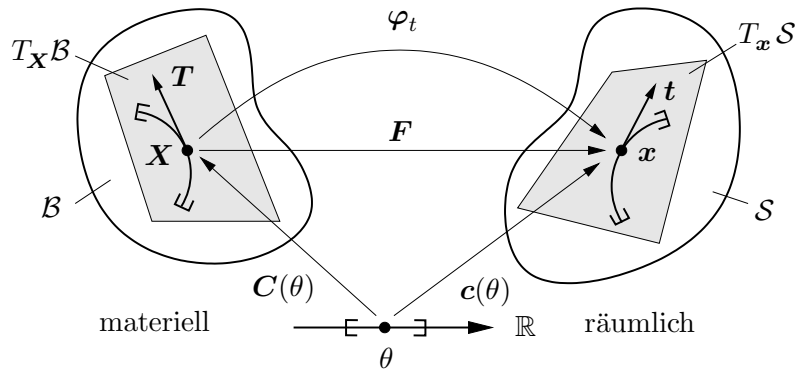


Abbildung 4: Tangentenabbildung materieller Kurven. Der Deformationsgradient \mathbf{F} bildet Tangenten $\mathbf{T} \in T_{\mathbf{X}}\mathcal{B}$ der materiellen Kurve $\mathbf{C} \in \mathcal{B}$ auf Tangenten $\mathbf{t} \in T_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$ der räumlichen Kurve $\mathbf{c} \in \mathcal{S}$ ab.

und somit $\mathbf{c}(\theta) = \varphi_t(\mathbf{C}(\theta)) = \varphi_t(\mathbf{X})$. Für den Tangentenvektor $\mathbf{t}(\theta)$ an die deformierte Kurve ergibt sich

$$\mathbf{t}(\theta) = \frac{d}{d\theta}\mathbf{c}(\theta) = \nabla_{\mathbf{X}}\varphi_t \cdot \frac{d}{d\theta}\mathbf{C}(\theta) = \mathbf{F}(\mathbf{X}) \cdot \mathbf{T}(\theta). \quad (2.6)$$

Der Deformationsgradient bildet somit einen kontravarianten Vektor aus dem Tangentialraum der Referenzkonfiguration $T_{\mathbf{X}}\mathcal{B}$ an der Stelle \mathbf{X} in einen kontravarianten Vektor aus dem Tangentialraum der Momentankonfiguration $T_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$ an der Stelle \mathbf{x} ab.

$$\mathbf{t} = \mathbf{F}\mathbf{T} \quad (2.7)$$

Hierbei wird der zweistufige Tensor \mathbf{F} als Tangentenabbildung der nichtlinearen Punktabbildung φ_t bezeichnet.

$$\mathbf{F} : \begin{cases} T_{\mathbf{X}}\mathcal{B} & \rightarrow T_{\mathbf{x}}\mathcal{S} \\ \mathbf{T} & \mapsto \mathbf{t} = \mathbf{F}\mathbf{T} \end{cases} \quad (2.8)$$

Flächen- oder Normalenabbildung

Das in Abbildung 5 dargestellte Flächenelement \mathbf{A} ergibt sich als Kreuzprodukt der Tangentenvektoren \mathbf{T} und $\tilde{\mathbf{T}}$ zweier materieller Kurven. Das zugehörige deformierte Flächenelement \mathbf{a} ergibt sich analog als Kreuzprodukt der Tangentenvektoren \mathbf{t} und $\tilde{\mathbf{t}}$ der deformierten räumlichen Kurven. Für die kovarianten Vektoren $\mathbf{T} \in T_{\mathbf{X}}\mathcal{B}$ und $\tilde{\mathbf{T}} \in T_{\mathbf{X}}\mathcal{B}$ gilt nach (2.7) die Transformationsvorschrift für Tangentenvektoren

$$\mathbf{t} = \mathbf{F}\mathbf{T} \quad \text{und} \quad \tilde{\mathbf{t}} = \mathbf{F}\tilde{\mathbf{T}} \quad (2.9)$$

mit $\mathbf{t}, \tilde{\mathbf{t}} \in T_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$. Die Abbildung, die ein Flächenelement aus der Lagrange'schen Konfiguration in ein deformiertes Flächenelement der Euler'schen Konfiguration überführt ist

$$\mathbf{a} = \mathbf{t} \times \tilde{\mathbf{t}} = \tilde{\mathbf{N}}(\mathbf{T} \times \tilde{\mathbf{T}}) = \tilde{\mathbf{N}}\mathbf{A}. \quad (2.10)$$

Dies entspricht einer Normalenabbildung $\tilde{\mathbf{N}}$ vom Kotangentialraum der Lagrange'schen Konfiguration $T_{\mathbf{X}}^*\mathcal{B}$ in den Kotangentialraum der Euler'schen Konfiguration $T_{\mathbf{x}}^*\mathcal{S}$. Durch

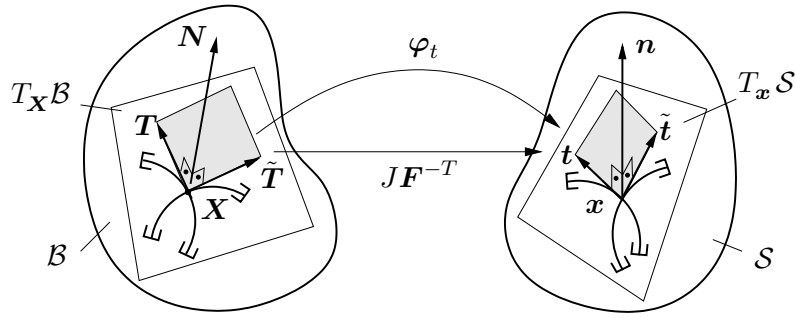


Abbildung 5: Normalen- oder Flächenabbildung. Der Kofaktor des Deformationsgradienten \mathbf{F} bildet Normalen $\mathbf{N} \in T_{\mathbf{X}}^* \mathcal{B}$ des materiellen Kotangententialraums auf Normalen $\mathbf{n} \in T_{\mathbf{x}}^* \mathcal{S}$ des räumlichen Kotangententialraums ab.

Einsetzen von Gleichung (2.9) in (2.10) ergibt sich mit einer elementaren Umformung der Determinante

$$\mathbf{a} = \mathbf{F}\mathbf{T} \times \mathbf{F}\tilde{\mathbf{T}} = \underbrace{\det[\mathbf{F}]\mathbf{F}^{-T}}_{\tilde{\mathbf{N}}}(\mathbf{T} \times \tilde{\mathbf{T}}) = \tilde{\mathbf{N}}(\mathbf{T} \times \tilde{\mathbf{T}}). \quad (2.11)$$

Dabei wird der zweistufige Tensor $\tilde{\mathbf{N}}$ mit

$$\tilde{\mathbf{N}} = \det[\mathbf{F}]\mathbf{F}^{-T} = J\mathbf{F}^{-T} = \text{cof}[\mathbf{F}] \quad (2.12)$$

auch als Kofaktor des Deformationsgradienten \mathbf{F} bezeichnet. Für die Flächenabbildung gilt die folgende Definition

$$\text{cof}[\mathbf{F}] : \begin{cases} T_{\mathbf{X}}^* \mathcal{B} & \rightarrow T_{\mathbf{x}}^* \mathcal{S} \\ \mathbf{A} & \mapsto \mathbf{a} = \text{cof}[\mathbf{F}]\mathbf{A} = J\mathbf{F}^{-T}\mathbf{A} \end{cases}, \quad (2.13)$$

wobei der transformierte inverse Deformationsgradient \mathbf{F}^{-T} Normalen des Kotangententialraums der Referenzkonfiguration in Normalen des Kotangententialraums der Momentankonfiguration abbildet. Der Wert J stellt einen skalaren Normierungsfaktor dar.

Volumen- oder Jacobiabbildung

Materielle und räumliche Volumenelemente werden durch Spatprodukte von Tangentenvektoren aufgespannt. Es gilt

$$V = \mathbf{T}(\tilde{\mathbf{T}} \times \bar{\mathbf{T}}) \quad \text{und} \quad v = \mathbf{t}(\tilde{\mathbf{t}} \times \bar{\mathbf{t}}), \quad (2.14)$$

wobei die räumlichen Tangentenvektoren $\mathbf{t}, \tilde{\mathbf{t}}$ und $\bar{\mathbf{t}}$ durch die Anwendung der Tangentenabbildung (2.7) auf die materiellen Tangentenvektoren $\mathbf{T}, \tilde{\mathbf{T}}$ und $\bar{\mathbf{T}}$ entstehen. Die Volumenabbildung $\text{vol} : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ bildet das materielle Volumen auf das deformierte Volumen ab und ist durch

$$\mathbf{t}(\tilde{\mathbf{t}} \times \bar{\mathbf{t}}) = \text{vol}[\mathbf{T}(\tilde{\mathbf{T}} \times \bar{\mathbf{T}})] \quad (2.15)$$

gegeben. Mit der Beziehung (2.7) und der Definition des Spatproduktes für transformierte Vektoren ergibt sich für diese Volumenabbildung $v = JV$ mit $J = \det[\mathbf{F}]$ und

$$J : \begin{cases} \mathbb{R}^+ & \rightarrow \mathbb{R}^+ \\ V & \mapsto v = JV \end{cases}. \quad (2.16)$$

Diese Abbildung wird auch Jacobiabbildung genannt, da die Änderung des Volumenelements durch die Jacobideterminante beschrieben wird.

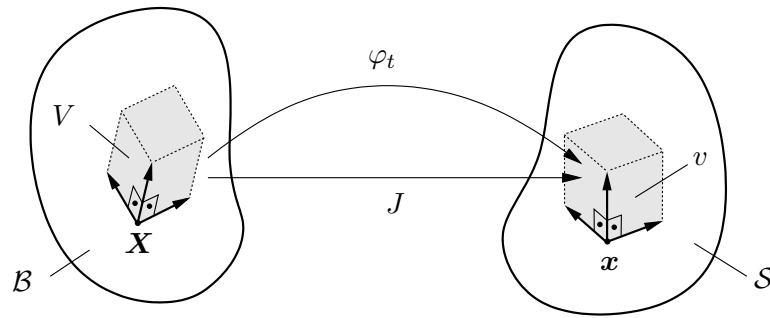


Abbildung 6: Jacobi- oder Volumenabbildung. Die Determinante J des Deformationsgradienten F bildet das materielle Volumen V auf das räumliche Volumen v ab.

Parametrisierung der Referenz- und Momentankonfiguration

Zur Parametrisierung der Referenz- und Momentankonfiguration werden diese als dreidimensionale Mannigfaltigkeiten aufgefasst, die in jedem Punkt \mathbf{X} und \mathbf{x} die Tangentialräume $T_{\mathbf{X}}\mathcal{B}$ und $T_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$ und die Kotangentialräume $T_{\mathbf{X}}^*\mathcal{B}$ und $T_{\mathbf{x}}^*\mathcal{S}$ beinhalten. Die Elemente des Tangentialraums werden als kovariante Vektoren bezeichnet. Elemente des Kotangentialraums werden kontravariante Vektoren genannt. Die Interpretation der Referenz- und Momentankonfiguration als Mannigfaltigkeit impliziert die Existenz einer lokalen Parametrisierung im Parameterraum \mathcal{P} durch allgemeine, krummlinige Koordinaten $\boldsymbol{\theta} \in \mathcal{P}$. Es wird angenommen, dass der Parameterraum \mathcal{P} für beide Mannigfaltigkeiten

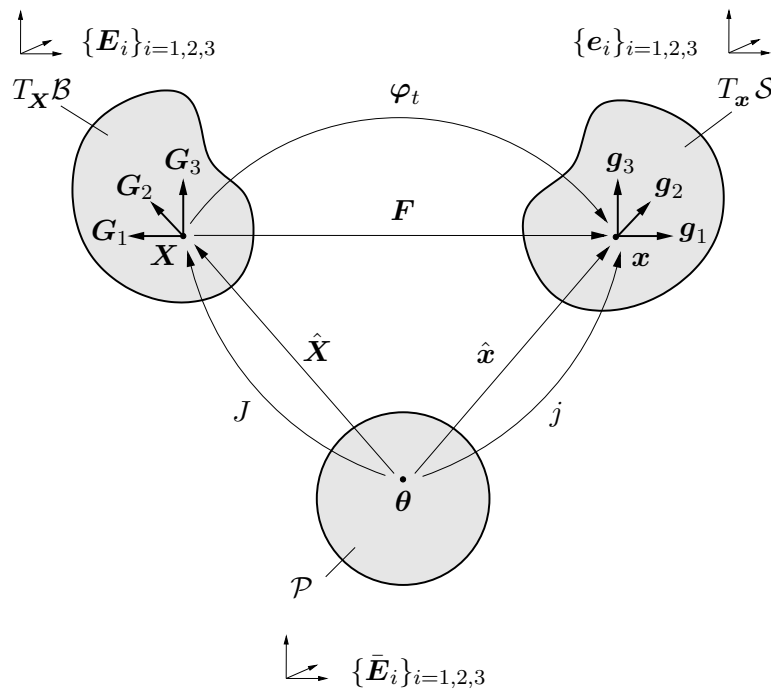


Abbildung 7: Parametrisierung der Momentan- und Referenzkonfiguration durch die Abbildungen $\hat{\mathbf{X}}$ und $\hat{\mathbf{x}}$. Die allgemeine, krummlinige Koordinate $\boldsymbol{\theta}$ aus dem Parameterraum \mathcal{P} wird auf $\mathbf{X} \in T_{\mathbf{X}}\mathcal{B}$ und $\mathbf{x} \in T_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$ abgebildet.

identisch ist und eine kartesische Struktur mit ko- und kontravarianten Basen $\{\bar{\mathbf{E}}_i\}_{i=1,2,3}$ und $\{\bar{\mathbf{E}}^i\}_{i=1,2,3}$ besitzt. Für diese Basen gilt

$$\bar{\mathbf{E}}^i \cdot \bar{\mathbf{E}}_j = \delta^i_j, \quad \bar{\mathbf{E}}^i \cdot \bar{\mathbf{E}}^j = \delta^{ij} \quad \text{und} \quad \bar{\mathbf{E}}_i \cdot \bar{\mathbf{E}}_j = \delta_{ij}. \quad (2.17)$$

Die lokale Parametrisierung der Referenzkonfiguration \mathcal{B} und der Momentankonfiguration \mathcal{S} wird, wie in Abbildung 7 dargestellt, durch die differenzierbaren stetigen Abbildungen

$$\hat{\mathbf{X}} : \begin{cases} \mathcal{P} & \rightarrow \mathcal{B} \\ \boldsymbol{\theta} & \mapsto \mathbf{X} = \hat{\mathbf{X}}(\boldsymbol{\theta}) \end{cases} \quad \text{bzw.} \quad \hat{\mathbf{x}} : \begin{cases} \mathcal{P} & \rightarrow \mathcal{S} \\ \boldsymbol{\theta} & \mapsto \mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\theta}) \end{cases} \quad (2.18)$$

definiert. Die Referenz- bzw. Momentanmannigfaltigkeiten sind ebenfalls jeweils mit einer ko- und kontravarianten Basis $\{\mathbf{E}_i\}_{i=1,2,3}$ und $\{\mathbf{E}^i\}_{i=1,2,3}$ bzw. $\{\mathbf{e}_i\}_{i=1,2,3}$ und $\{\mathbf{e}^i\}_{i=1,2,3}$ ausgestattet. Für diese gelten die analogen Berechnungsvorschriften zu (2.17).

Die vom Parameterraum \mathcal{P} zu $\hat{\mathbf{X}}$ bzw. $\hat{\mathbf{x}}$ assoziierten Tangentenabbildungen sind durch $\mathbf{J} : T_{\boldsymbol{\theta}}\mathcal{P} \rightarrow T_{\mathbf{X}}\mathcal{B}$ bzw. $\mathbf{j} : T_{\boldsymbol{\theta}}\mathcal{P} \rightarrow T_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$ definiert mit den Koeffizienten $J^A_i = \partial \hat{X}^A / \partial \theta^i$ bzw. $j^a_i = \partial \hat{x}^a / \partial \theta^i$. Die dazu dualen Kotangentenabbildungen sind $\mathbf{J}^{-T} : T_{\boldsymbol{\theta}}^*\mathcal{P} \rightarrow T_{\mathbf{X}}^*\mathcal{B}$ bzw. $\mathbf{j}^{-T} : T_{\boldsymbol{\theta}}^*\mathcal{P} \rightarrow T_{\mathbf{x}}^*\mathcal{S}$ mit den Koeffizienten $J^{-1}_A{}^i = \partial \hat{\theta}^i / \partial X^A$ bzw. $j^{-1}_a{}^i = \partial \hat{\theta}^i / \partial x^a$. Die Spalten der Abbildungen \mathbf{J} und \mathbf{J}^{-T} definieren die dualen ko- und kontravarianten Basen $\{\mathbf{G}_A\}_{A=1,2,3}$ und $\{\mathbf{G}^A\}_{A=1,2,3}$, die den Tangential- bzw. Kotangentialraum der Referenzkonfiguration lokal am Punkt $\mathbf{X} = \hat{\mathbf{X}}(\boldsymbol{\theta}) \in \mathcal{B}$ aufspannen. Es gilt

$$\mathbf{J} = [\mathbf{G}_1; \mathbf{G}_2; \mathbf{G}_3] \quad \text{und} \quad \mathbf{J}^{-T} = [\mathbf{G}^1; \mathbf{G}^2; \mathbf{G}^3] \quad \text{mit} \quad \mathbf{G}^A \cdot \mathbf{G}_B = \delta^A_B. \quad (2.19)$$

Analog dazu liefern die Spalten der Abbildungen \mathbf{j} und \mathbf{j}^{-T} die dualen ko- und kontravarianten Basen $\{\mathbf{g}_a\}_{a=1,2,3}$ und $\{\mathbf{g}^a\}_{a=1,2,3}$, die den Tangential- bzw. Kotangentialraum der Momentankonfiguration lokal am Punkt $\mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\theta}) \in \mathcal{S}$ aufspannen.

$$\mathbf{j} = [\mathbf{g}_1; \mathbf{g}_2; \mathbf{g}_3] \quad \text{und} \quad \mathbf{j}^{-T} = [\mathbf{g}^1; \mathbf{g}^2; \mathbf{g}^3] \quad \text{mit} \quad \mathbf{g}^a \cdot \mathbf{g}_b = \delta^a_b \quad (2.20)$$

2.1.3. Metrik- und Verzerrungstensoren

Metrikstensoren

Um innere Produkte auf der Referenz- und Momentankonfiguration definieren zu können, werden Metrikstensoren benötigt. Eine solche positiv definite symmetrische Metrik zwischen Tangential- und Kotangentialraum wird auf der Referenz- bzw. Momentankonfiguration durch

$$\mathbf{G} : \begin{cases} T_{\mathbf{X}}\mathcal{B} & \rightarrow T_{\mathbf{X}}^*\mathcal{B} \\ \mathbf{T} & \mapsto \mathbf{N} = \mathbf{G} \cdot \mathbf{T} \end{cases} \quad (2.21)$$

mit $\mathbf{G} = G_{AB} \mathbf{G}^A \otimes \mathbf{G}^B$ und Koeffizienten $G_{AB} = \mathbf{G}_A \cdot \mathbf{G}_B$ bzw.

$$\mathbf{g} : \begin{cases} T_{\mathbf{x}}\mathcal{S} & \rightarrow T_{\mathbf{x}}^*\mathcal{S} \\ \mathbf{t} & \mapsto \mathbf{n} = \mathbf{g} \cdot \mathbf{t} \end{cases} \quad (2.22)$$

mit $\mathbf{g} = g_{ab} \mathbf{g}^a \otimes \mathbf{g}^b$ und Koeffizienten $g_{ab} = \mathbf{g}_a \cdot \mathbf{g}_b$ definiert. Die dazu inversen Metrikstensoren \mathbf{G}^{-1} und \mathbf{g}^{-1} werden durch

$$\mathbf{G}^{-1} = G^{-1AB} \mathbf{G}_A \otimes \mathbf{G}_B : T_{\mathbf{X}}^*\mathcal{B} \rightarrow T_{\mathbf{X}}\mathcal{B} \quad (2.23)$$

mit $G^{-1AB} = \mathbf{G}^A \cdot \mathbf{G}^B$ und

$$\mathbf{g}^{-1} = g^{-1ab} \mathbf{g}_a \otimes \mathbf{g}_b : T_{\mathbf{x}}^*\mathcal{S} \rightarrow T_{\mathbf{x}}\mathcal{S} \quad (2.24)$$

mit $g^{-1ab} = \mathbf{g}^a \cdot \mathbf{g}^b$ definiert. Diese Metrikstensoren geben, wie in Abbildung 8 dargestellt, den Zusammenhang zwischen Tangential- und Normalenvektoren an. In der klassischen Tensoralgebra wird von "senken" der Indizes durch die Metrikstensoren \mathbf{G} und \mathbf{g} und vom "heben" der Indizes durch \mathbf{G}^{-1} und \mathbf{g}^{-1} gesprochen. Es ist zu beachten, dass \mathbf{T} und \mathbf{N} unterschiedliche geometrische Objekte sind, d.h. sie werden als kovariantes und kontravariantes Objekt aufgefasst, repräsentieren aber den gleichen Vektor.

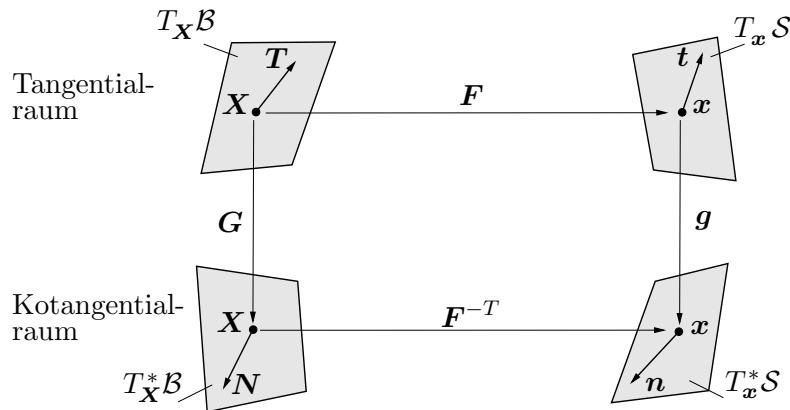


Abbildung 8: Die Metriktensoren \mathbf{G} und \mathbf{g} geben den Zusammenhang zwischen Tangential- und Kotangentialraum in der Momentan- und Referenzkonfiguration an.

Deformationsabhängige Metriktensoren

Das in Abbildung 8 gezeigte Bild ist nicht kommutativ, es gilt also

$$\mathbf{G} \neq \mathbf{F}^T \mathbf{g} \mathbf{F} \quad \text{und} \quad \mathbf{g} \neq \mathbf{F}^{-T} \mathbf{G} \mathbf{F}^{-1}. \quad (2.25)$$

Zur Konstruktion einer kommutativen Abbildung werden der rechte und der inverse linke Cauchy–Green Tensor als positiv definite symmetrische Verzerrungstensoren

$$\boxed{\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{g} \mathbf{F} \quad \text{und} \quad \mathbf{c} = \mathbf{F}^{-T} \mathbf{G} \mathbf{F}^{-1}} \quad (2.26)$$

eingeführt. Für einen symmetrischen positiv definiten Tensor \mathbf{C} muss folgendes gelten.

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{g} \mathbf{F} = (\mathbf{F}^T \mathbf{g} \mathbf{F})^T = \mathbf{C}^T \quad \text{und} \quad \mathbf{T} \cdot \mathbf{C} \mathbf{T} > 0 \quad \forall \quad \mathbf{T} \neq \mathbf{0} \quad (2.27)$$

Der rechte Cauchy–Green Tensor \mathbf{C} wird als ‘pull-back’ von \mathbf{g} und \mathbf{c} als ‘push-forward’ von \mathbf{G} bezeichnet. Diese deformationsabhängigen Metriktensoren implizieren eine alternative Darstellung der Länge von materiellen und räumlichen Tangentenvektoren. Es gilt

$$|\mathbf{T}|_{\mathbf{G}} = |\mathbf{t}|_{\mathbf{c}} \quad \text{und} \quad |\mathbf{t}|_{\mathbf{g}} = |\mathbf{T}|_{\mathbf{C}}, \quad (2.28)$$

d.h. die materielle Länge eines Vektors kann mit Hilfe seiner räumlichen Länge errechnet werden und umgekehrt. \mathbf{C} und \mathbf{c} haben eine fundamentale Bedeutung bei der Berechnung von Verzerrungen.

Verzerrungstensoren

Um die quadratische Änderung der Länge eines Tangentenvektors angeben zu können, wird das Verzerrungsmaß $\delta := \frac{1}{2} (|\mathbf{t}|_{\mathbf{g}}^2 - |\mathbf{T}|_{\mathbf{G}}^2)$ eingeführt. Mit der äquivalenten Darstellung der räumlichen Länge des Tangentenvektors aus (2.28)₂ ergibt sich das Lagrange’sche Verzerrungsmaß

$$\delta = \frac{1}{2} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{C} \mathbf{T} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{G} \mathbf{T}) = \mathbf{T} \cdot \mathbf{E} \mathbf{T}, \quad (2.29)$$

wobei mit $\mathbf{E} := \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{G})$ der positiv definite symmetrische Green’sche Verzerrungstensor bezeichnet wird. Durch Einsetzen von (2.28)₁ in (2.29) ergibt sich die Euler’sche Darstellung des Verzerrungsmaß

$$\delta = \frac{1}{2} (\mathbf{t} \cdot \mathbf{g} \mathbf{t} - \mathbf{t} \cdot \mathbf{c} \mathbf{t}) = \mathbf{t} \cdot \mathbf{e} \mathbf{t}, \quad (2.30)$$

mit dem positiv definiten, symmetrischen Almansi'schen Verzerrungstensor $\mathbf{e} := \frac{1}{2}(\mathbf{g} - \mathbf{c})$. Beide Verzerrungstensoren können ineinander überführt werden und verhalten sich proportional zur Differenz der räumlichen Metrik minus der materiellen Metrik jeweils in Lagrange'scher oder Euler'scher Darstellung. Der Verzerrungstensor \mathbf{E} in (2.29) ergibt sich für $m = 2$ aus der von Seth und Hill definierten Familie von generalisierten Verzerrungstensoren

$$\mathbf{E}^m(\mathbf{C}) = \begin{cases} \frac{1}{m}(\mathbf{C}^{m/2} - \mathbf{G}) & \text{falls } m \neq 0 \\ \frac{1}{2} \ln[\mathbf{C}] & \text{falls } m = 0 \end{cases} . \quad (2.31)$$

Der Hencky Verzerrungstensor stellt mit $m = 0$ einen Spezialfall dar. Aus dieser Definition ergeben sich die bekannten materiellen Verzerrungstensoren. Dies sind

$$\left. \begin{array}{l} m = 2 : \text{ Green'scher Verzerrungstensor} \quad \mathbf{E}^{(2)} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{G}) \\ m = 1 : \text{ Biot Verzerrungstensor} \quad \mathbf{E}^{(1)} = \mathbf{C}^{1/2} - \mathbf{G} \\ m = 0 : \text{ Hencky Verzerrungstensor} \quad \mathbf{E}^{(0)} = \frac{1}{2} \ln[\mathbf{C}]. \end{array} \right\} \quad (2.32)$$

2.2. Spannungstensoren

2.2.1. Kontaktspannungen

Bei der Anwendung des Euler'schen Schnittprinzips wird ein herausgeschnittener Teil eines Kontinuums betrachtet. Die mechanische Wirkung des Restkörpers wird durch eine Kontaktspannung und einen Wärmeflußvektor auf der Schnittfläche ersetzt. Der herausgeschnittene Teil wird im folgenden in der materiellen bzw. räumlichen Darstellung mit \mathcal{B}_P bzw. mit \mathcal{S}_P bezeichnet, die Schnittflächen entsprechend mit $\partial\mathcal{B}_P$ und $\partial\mathcal{S}_P$. Auf der räumlichen Schnittfläche $\partial\mathcal{S}_P$ wird der Spannungsvektor $\mathbf{t}(\mathbf{x}, t, \mathbf{n})$ definiert um die mechanische Wirkung des abgeschnittenen Teils zu ersetzen. Aus dem Spannungsvektor \mathbf{t} multipliziert mit seiner assoziierten infinitesimalen Schnittfläche da resultiert der infinitesimale Kraftvektor $d\mathbf{f} = \mathbf{t} da$.

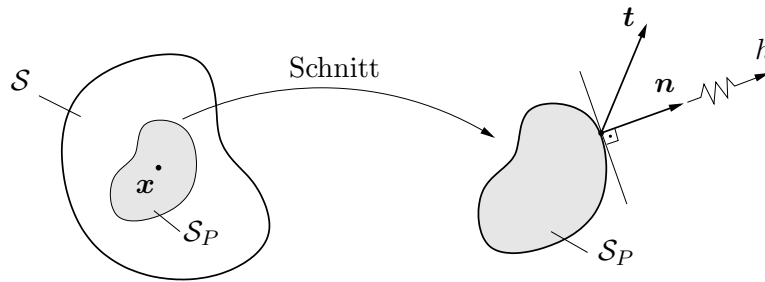


Abbildung 9: Euler'sches Schnittprinzip. Zerlegung der Momentankonfiguration \mathcal{S} in ein beliebiges Teilgebiet \mathcal{S}_P mit dem Spannungsvektor \mathbf{t} und dem Wärmeflussvektor h für die mechanische Restwirkung und der Schnittnormalen \mathbf{n} auf der Oberfläche $\partial\mathcal{S}_P$.

2.2.2. Cauchy- und Kirchhoff-Spannungstensoren

Nach dem Cauchy-Theorem soll der Spannungsvektor \mathbf{t} eine lineare Funktion der Schnittnormalen \mathbf{n} sein.

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, t, \mathbf{n}) := \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) \mathbf{n} \quad (2.33)$$

Der Cauchy'sche Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ bildet den räumlich kovarianten Normalenvektor $\mathbf{n} \in T_{\mathbf{x}}^* \mathcal{S}$ auf den räumlich kontravarianten Spannungstensor $\mathbf{t} \in T_{\mathbf{x}} \mathcal{S}$ ab.

$$\boldsymbol{\sigma} : \begin{cases} T_{\mathbf{x}}^* \mathcal{S} & \rightarrow T_{\mathbf{x}} \mathcal{S} \\ \mathbf{n} & \mapsto \mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \end{cases} \quad (2.34)$$

Diese Cauchy-Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ entsprechen dem Verhältnis der auf der aktuellen Schnittfläche lokal wirkenden Kraft zur aktuellen Fläche $d\mathbf{a}$. Diese Spannungen werden auch als wahre Spannungen bezeichnet. Die Kirchhoff-Spannungen $\boldsymbol{\tau}$ ergeben sich aus den Cauchy-Spannungen durch Multiplikation mit der Jacobideterminante J .

$$\boldsymbol{\tau} = J\boldsymbol{\sigma} = \det[\mathbf{F}]\boldsymbol{\sigma} \quad (2.35)$$

Sowohl die Cauchy-Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ als auch die Kirchhoff-Spannungen $\boldsymbol{\tau}$ sind Euler'sche Objekte und werden kontravariante Abbildungen genannt.

2.2.3. Piola-Kirchhoff Spannungstensoren

Äquivalent zur Definition der Cauchy-Spannungen wird ein Spannungsvektor $\mathbf{T} \in T_{\mathbf{x}} \mathcal{S}$ auf der Euler'schen Konfiguration definiert, der multipliziert mit der undeformierten infinitesimalen Schnittfläche $d\mathbf{A}$ die resultierende Kraft $d\mathbf{f}$ ergibt. Dieser wird als nominaler Spannungsvektor bezeichnet und soll eine lineare Funktion der Schnittrichtung \mathbf{N} sein.

$$\mathbf{T}(\mathbf{X}, t, \mathbf{N}) := \tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{X}, t) \mathbf{N} \quad (2.36)$$

Der erste Piola-Kirchhoff Spannungstensor $\tilde{\mathbf{P}}$ bildet den materiellen kovarianten Normalenvektor $\mathbf{N} \in T_{\mathbf{X}}^* \mathcal{B}$ in einen räumlichen kontravarianten Spannungsvektor $\mathbf{T} \in T_{\mathbf{x}} \mathcal{S}$ ab. Die gemischt variante Abbildung $\tilde{\mathbf{P}}$ wird wie folgt definiert

$$\tilde{\mathbf{P}} : \begin{cases} T_{\mathbf{X}}^* \mathcal{B} & \rightarrow T_{\mathbf{x}} \mathcal{S} \\ \mathbf{N} & \mapsto \mathbf{T} = \tilde{\mathbf{P}} \mathbf{N} \end{cases} \quad (2.37)$$

Die ersten Piola-Kirchhoff Spannungen geben den Zusammenhang zwischen lokal wirkender Kraft auf der aktuellen Schnittfläche und undeformierter Ausgangsfläche $d\mathbf{A}$ wieder. Der Zusammenhang zwischen den Cauchy-Spannungen (2.34) bzw. Kirchhoff-Spannungen (2.35) und den ersten Piola-Kirchhoff Spannungen (2.37) ist durch

$$\tilde{\mathbf{P}} = J\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} = \boldsymbol{\tau}\mathbf{F}^{-T} \quad (2.38)$$

gegeben. Der zweite Piola-Kirchhoff Spannungstensor \mathbf{S} wird als rein Lagrange'scher Spannungstensor definiert. Die Transformation des Spannungsvektors $\mathbf{T} \in T_{\mathbf{x}} \mathcal{S}$ in die Lagrange'sche Konfiguration, $\hat{\mathbf{T}} = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{T} \in T_{\mathbf{X}} \mathcal{B}$, ergibt

$$\hat{\mathbf{T}}(\mathbf{X}, t, \mathbf{N}) := \mathbf{S}(\mathbf{X}, t) \mathbf{N} \quad (2.39)$$

mit der kontravarianten Abbildung

$$\mathbf{S} : \begin{cases} T_{\mathbf{X}}^* \mathcal{B} & \rightarrow T_{\mathbf{X}} \mathcal{B} \\ \mathbf{N} & \mapsto \hat{\mathbf{T}} = \mathbf{S} \mathbf{N} \end{cases} \quad (2.40)$$

Der Zusammenhang zwischen den Cauchy- oder Kirchhoff-Spannungen und den zweiten Piola-Kirchhoff Spannungen ergibt sich durch Einsetzen und Vergleichen der Gleichungen (2.36), (2.38) und (2.40) zu

$$\mathbf{S} = J\mathbf{F}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} \quad (2.41)$$

und kann der kommutativen Darstellung in Abbildung 10 entnommen werden.

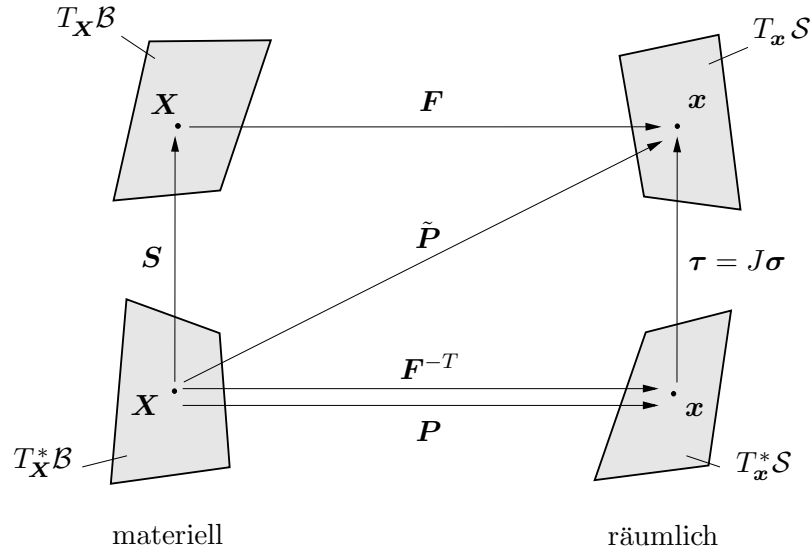


Abbildung 10: Kommutative Abbildungen der Spannungsbeziehungen. Zusammenhang zwischen den gemischtvarianten 1. Piola–Kirchhoff Spannungen $\tilde{\mathbf{P}}$, den Langrange’schen 2. Piola–Kirchhoff Spannungen \mathbf{S} und den Euler’schen Kirchhoff–Spannungen $\boldsymbol{\tau}$.

2.3. Physikalische Bilanzsätze der Kontinuumsmechanik

Die Bilanzgleichungen für Masse, Impuls, Drehimpuls, Energie und Entropie bilden die physikalische Grundlage der Kontinuumsmechanik. Diese haben axiomatischen Charakter und sind auf jeden beliebigen Körper anwendbar. Von der global geltenden integralen Formulierung dieser Bilanzen, die für einen Teil des Körpers \mathcal{S}_P formuliert sind wird auf die lokale Form geschlossen. Hierbei wird die Wirkung des Rests $\mathcal{S} \setminus \mathcal{S}_P$ durch Oberflächenspannungen und Wärmefluss ersetzt.

2.3.1. Massebilanz

Für einen Teil des Kontinuums muss die Masse M zeitlich konstant bleiben, d.h. es soll

$$\frac{d}{dt}M = 0 \quad \text{mit} \quad M = \int_{\mathcal{B}_P} \rho_0(\mathbf{X}) dV = \int_{\mathcal{S}_P} \rho(\mathbf{x}, t) dv \quad (2.42)$$

gelten. Mit $\rho_0(\mathbf{X})$ und $\rho(\mathbf{x}, t)$ wird die materielle und räumliche Dichte definiert. Die lokale materielle Form der Massebilanz folgt mit Hilfe der Jacobitransformation.

$$\rho_0 = J \rho \quad (2.43)$$

Durch einsetzen in (2.42) ergibt sich unter Berücksichtigung der zeitlichen Unabhängigkeit der Integrationsgrenze \mathcal{B}_P

$$\frac{d}{dt}\rho_0 = \frac{d}{dt}(J\rho) = J\dot{\rho} + \dot{J}\rho = 0. \quad (2.44)$$

Mit der Definition der zeitlichen Ableitung der Determinante des Deformationsgradienten $\dot{\mathbf{J}} = \mathbf{J}\mathbf{F}^{-T} : \dot{\mathbf{F}} = \mathbf{J} \operatorname{div}[\mathbf{v}]$ folgt die lokale räumliche Form der Massenbilanz

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div}[\mathbf{v}] = 0 \quad (2.45)$$

wobei mit $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ die Geschwindigkeit des materiellen Punktes \mathbf{x} zur Zeit t bezeichnet wird.

2.3.2. Impulsbilanz

Die Impulsbilanz besagt, dass die zeitliche Änderung des Impulses gleich der Summe der äußeren Kräfte ist, die auf den Teil \mathcal{S}_P wirkt, d.h. es muss

$$\frac{d}{dt}\mathbf{I} = \mathbf{F} \quad \text{mit} \quad \mathbf{I} = \int_{\mathcal{S}_P} \rho \mathbf{v} \, dv \quad (2.46)$$

gelten. Dabei ist $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ die räumliche Geschwindigkeit. Die auf $\mathcal{S}_P \subset \mathcal{S}$ wirkenden äußeren Kräfte \mathbf{F} werden in Volumen- und Oberflächenkräfte aufgeteilt. Es gilt

$$\mathbf{F} := \int_{\mathcal{S}_P} \rho \boldsymbol{\gamma} \, dv + \int_{\partial \mathcal{S}_P} \mathbf{t} \, da, \quad (2.47)$$

mit der massenspezifischen Körperkraft oder Körperbeschleunigung $\boldsymbol{\gamma}$ und dem Spannungsvektor \mathbf{t} aus Definition (2.34). Durch Einsetzen der Gleichungen (2.46)₂ und (2.47) in die Impulsbilanz (2.46)₁ und durch Anwendung des Cauchy–Theorems (2.33) und des Gauß’schen Integralsatzes, erhält man die lokale Form der Impulsbilanz im Referenzsystem zu

$$\operatorname{div}[\boldsymbol{\sigma}] + \rho \boldsymbol{\gamma} = \rho \dot{\mathbf{v}}. \quad (2.48)$$

Die materielle Formulierung der Impulsbilanz zum Zeitpunkt t ergibt sich nach einer Transformation der Dichte mit $\rho_0 = J\rho$ und durch Anwendung der Piola–Identität $\operatorname{DIV}[\mathbf{P}] = J \operatorname{div}[\boldsymbol{\sigma}]$

$$\operatorname{DIV}[\mathbf{P}] + \rho_0 \boldsymbol{\gamma} = \rho_0 \dot{\mathbf{v}}. \quad (2.49)$$

2.3.3. Drehimpulsbilanz

Die zeitliche Änderung des Drehimpulses \mathbf{D}_o bezogen auf den Koordinatenursprung “o” ist gleich der Summe aller von außen angreifenden Momente auf einen Teilkörper \mathcal{S}_P .

$$\frac{d}{dt}\mathbf{D}_o = \mathbf{M}_o \quad \text{mit} \quad \mathbf{D}_o := \int_{\mathcal{S}_P} \mathbf{x} \times \mathbf{v} \rho \, dv \quad (2.50)$$

Die Summe der äußeren Momente auf \mathcal{S}_P errechnet sich als Vektorprodukt des Ortsvektors \mathbf{x} mit den auf den Teilkörper \mathcal{S}_P wirkenden Volumen- und Oberflächenkräften.

$$\mathbf{M}_o := \int_{\mathcal{S}_P} \mathbf{x} \times \boldsymbol{\gamma} \rho \, dv + \int_{\partial \mathcal{S}_P} \mathbf{x} \times \mathbf{t} \, da \quad (2.51)$$

Umformungen der globalen Aussage mit den Integralsätzen, dem Cauchy–Theorem und mit weiteren algebraischen Umformungen analog zur Impulserhaltung, folgt die räumliche Form der Drehimpulsbilanz

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T. \quad (2.52)$$

Aus dieser Symmetriebedingung für die Cauchy–Spannungen und mit den Äquivalenzen (2.38) und (2.41) folgt direkt die Symmetrie der Kirchhoff–Spannungen und der zweiten Piola–Kirchhoff Spannungen

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}^T \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{S} = \mathbf{S}^T. \quad (2.53)$$

Die ersten Piola–Kirchhoff Spannungen sind wegen $\mathbf{F}^{-1}\mathbf{P} = \mathbf{P}^T\mathbf{F}^{-T}$ nicht symmetrisch.

2.3.4. Energiebilanz

Der erste Hauptsatz der Thermodynamik besagt, dass die zeitliche Änderung der totalen Energie gleich der Summe der mechanischen und thermischen Arbeit ist. Die totale Energie setzt sich aus der kinetischen Energie K und der internen Energie E zusammen. Die Energiebilanz wird durch folgende Gleichung beschrieben

$$\frac{d}{dt}(K + E) = P_{ext} + Q, \quad (2.54)$$

mit den Definitionen der kinetischen und inneren Energie

$$K := \int_{S_P} \frac{1}{2} \rho |\mathbf{v}|^2 dv \quad \text{und} \quad E := \int_{S_P} \rho e dv. \quad (2.55)$$

Das räumliche Skalarfeld $e(\mathbf{x}, t)$ beschreibt die spezifische Energie im Punkt \mathbf{x} zur Zeit t . Die totale mechanische Leistung, die aus den auf den Restkörper wirkenden Volumen- und Oberflächenkräften resultiert, ist definiert als

$$P_{ext} := \int_{S_P} \rho \mathbf{v} \boldsymbol{\gamma} dv + \int_{\partial S_P} \mathbf{v} \mathbf{t} da. \quad (2.56)$$

Die totale thermische Leistung ist durch die spezifische Wärmezufuhr $r(\mathbf{x}, t)$ und den Kontaktwärmefluss $h(\mathbf{x}, t, \mathbf{n})$ definiert durch

$$Q := \int_{S_P} \rho r dv - \int_{\partial S_P} h da. \quad (2.57)$$

Der Kontaktwärmefluss gibt die Menge an Wärme an, die den Körper verlässt und genügt dem Stoke'schen Wärmeflusstheorem $h = \mathbf{q} \mathbf{n}$ mit dem Wärmeflussvektor $\mathbf{q}(\mathbf{x}, t)$. Durch Ableiten und Einsetzen dieser integralen Größen in (2.55) und Anwenden des Cauchy- bzw. Stoke'schen Theorems erhält man die lokale räumliche Form der Energieerhaltung

$$\rho \dot{e} = \rho r - \operatorname{div}[\mathbf{q}] + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}, \quad (2.58)$$

wobei mit $\mathbf{d}(\mathbf{x}, t)$ der symmetrischen Anteil des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten $\mathbf{l} = \partial \mathbf{v} / \partial \mathbf{x} = \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}$ bezeichnet ist. Für die lokale materielle Energiebilanz ergibt sich durch Umformungen

$$\rho_0 \dot{e} = \rho_0 r - \operatorname{DIV}[\mathbf{Q}] + \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}, \quad (2.59)$$

mit der spezifischen Energie e , der spezifischen Wärmezufuhr r und dem materiellen Wärmeflussvektor $\mathbf{Q} = J \mathbf{F}^{-1} \mathbf{q}$.

2.3.5. Entropieungleichung

Im Gegensatz zum ersten Hauptsatz der Thermodynamik, bei dem es um den Energietransport eines thermodynamischen Prozesses geht, werden im zweiten Hauptsatz der Thermodynamik Gesetzmäßigkeiten formuliert, die für die Richtung des Energietransportes verantwortlich sind. Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik fordert, dass die zeitliche Änderung der Entropie $\eta(\mathbf{x}, t)$ größer oder gleich der thermischen Leistung bezogen auf die absolute Temperatur $\theta(\mathbf{x}, t) \geq 0$ ist.

$$\Gamma := \frac{d}{dt} H - \frac{Q}{\theta} \geq 0 \quad \text{mit} \quad H = \int_{S_P} \rho \eta dv \quad (2.60)$$

Der Begriff der Entropie wird als Maß für die Unordnung bezeichnet. Durch Einsetzen von Gleichung (2.57) in (2.60) ergibt sich die globale räumliche Entropieproduktion Γ als Differenz der zeitlichen Änderung der Entropie und der Entropiezufuhr.

$$\Gamma = \frac{d}{dt} \int_{S_P} \rho \eta \, dv - \frac{1}{\theta} \int_{S_P} \rho r \, dv + \frac{1}{\theta} \int_{\partial S_P} h \, da \geq 0 \quad (2.61)$$

Ist die Entropieproduktion gleich Null, so handelt es sich um einen reversiblen Prozess. Irreversible Zustandsänderungen haben eine positive Entropieproduktion, d.h. es findet Energiedissipation statt. Durch Umformung und Anwenden des Stoke'schen Theorems folgt das lokale räumliche Prinzip der Entropieungleichung

$$\rho \dot{\eta} + \frac{1}{\theta} \left[\operatorname{div}[\mathbf{q}] - \rho r - \frac{1}{\theta} \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \theta \right] \geq 0. \quad (2.62)$$

Diese Ungleichung wird durch Einsetzen der lokalen räumlichen Energiebilanz (2.58) und der Legendre Transformation $e = \psi + \eta\theta$ zur Clausius–Duhem Ungleichung umformuliert.

$$\mathcal{D} := \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} - \rho \eta \dot{\theta} - \rho \dot{\psi} - \frac{1}{\theta} \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \theta \geq 0 \quad (2.63)$$

Der letzte Term in (2.63) wird als Entropieproduktion bezeichnet. Die Ungleichung (2.62) wird getrennt in eine lokale Dissipation \mathcal{D}_{loc} und eine konduktive Dissipation \mathcal{D}_{con} . Für die lokale Dissipation erhält man die sogenannte Clausius–Planck Ungleichung

$$\mathcal{D}_{loc} := \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} - \rho \eta \dot{\theta} - \rho \dot{\psi} \geq 0 \quad . \quad (2.64)$$

Als materielle Form dieser Ungleichung ergibt sich

$$\mathcal{D}_{loc} := \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \rho_0 \eta \dot{\theta} - \rho_0 \dot{\psi} \geq 0 \quad . \quad (2.65)$$

Der konduktive Teil wird auch als Fourier–Ungleichung bezeichnet und hat die Form

$$\mathcal{D}_{con} = -\frac{1}{\theta} \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \theta \geq 0 \quad \text{bzw.} \quad \mathcal{D}_{con} = -\frac{1}{\theta} \mathbf{Q} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \theta \geq 0. \quad (2.66)$$

Werden rein mechanische Prozesse betrachtet, so vereinfachen sich die Gleichungen (2.63) und (2.65) dahingehend, dass jeweils der zweite Term mit der zeitlichen Ableitung der Temperatur entfällt.

2.4. Konstitutive Materialgleichungen

Im Rahmen dieser Arbeit werden sogenannte standard dissipative Materialien betrachtet. Das Verhalten solcher Materialien wird von zwei skalaren tensorwertigen Funktionen bestimmt. Die lokal gespeicherte Energie wird durch die freie Energiefunktion bestimmt, wohingegen die inelastischen Prozesse von einer Dissipationsfunktion bestimmt wird. Diese Funktionen unterliegen einigen fundamentalen Prinzipien, die z.B. in TRUESDELL & NOLL [130] oder HAUPT [41] ausführlich diskutiert werden. Dies sind unter anderem die materielle Objektivität und die materielle Symmetrie.

2.4.1. Prinzip der materiellen Objektivität

Für ein elastisches Material wird angenommen, dass die lokal gespeicherte Energie ψ vom Deformationsgradienten \mathbf{F} abhängt. Das Prinzip der materiellen Objektivität fordert, dass sich die gespeicherte Energie bei der Überlagerung einer Starrkörperrotation \mathbf{Q} nicht ändern darf.

$$\psi(\mathbf{F}) = \psi(\mathbf{Q}\mathbf{F}) \quad \forall \mathbf{Q} \in \mathcal{SO}(3) \quad (2.67)$$

Eine übliche Vorgehensweise, die dieses Prinzip a priori erfüllt, ist die Einführung der Abhängigkeit der freien Energie vom rechten Cauchy–Green Tensor $\mathbf{C} := \mathbf{F}^T \mathbf{F}$. Der Rechte Cauchy–Green Tensor ist objektiv, da $(\mathbf{Q}\mathbf{F})^T (\mathbf{Q}\mathbf{F}) = \mathbf{F}^T (\mathbf{Q}^T \mathbf{Q}) \mathbf{F} = \mathbf{C}$ ist. Funktionen, die in den Verzerrungsmaßen der Seth–Hill Familie (2.31) formuliert sind, erfüllen ebenfalls das Prinzip der materiellen Objektivität.

2.4.2. Materielle Symmetrie

Es gibt eine Reihe an Materialien, die eine intrinsische Symmetrie beherbergen. Dies sind beispielsweise Materialien, die ein atomares Gitter aufweisen oder Kompositwerkstoffe, die aus einem Matrixmaterial mit eingebetteten Fasern bestehen. Das Prinzip der materiellen Symmetrie fordert, dass die freie Energie invariant bezüglich Rotationen der Ausgangskonfiguration ist, sofern diese Rotationen die Mikrostruktur auf sich selbst abbilden. Daraus ergibt sich die Restriktion

$$\psi(\mathbf{F}) = \psi(\mathbf{F}\mathbf{Q}^T) \quad \forall \mathbf{Q} \in \mathcal{G} \quad (2.68)$$

wobei \mathcal{G} die materielle Symmetriegruppe darstellt, für die die gespeicherte Energie unverändert bleibt.

2.4.3. Konzept interner Variablen

Dissipative Effekte in der Viskoelastizität oder Plastizität werden durch zusätzlich in die freie Energie eingeführte interne Variablen beschrieben. Die Konstitutivgleichungen werden als eine materielle Box mit internen und externen Freiheitsgraden betrachtet.

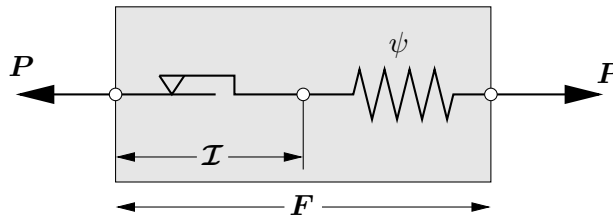


Abbildung 11: Konzept der internen Variablen. Die Spannungen werden durch die totale Deformation \mathbf{F} und die internen Variablen \mathcal{I} bestimmt.

$$\psi := \psi(\mathbf{F}, \mathcal{I}, \mathbf{X}) \quad (2.69)$$

Die internen Variablen entwickeln sich mit der Zeit, wobei die Evolutionsgleichung erster Ordnung durch folgende Funktion gegeben ist.

$$\dot{\mathcal{I}} := \mathcal{E}(\mathbf{F}, \mathcal{I}, \mathbf{X}) \quad \text{mit} \quad \mathcal{I}(\mathbf{X}, t = t_0) = \mathcal{I}_0 \quad (2.70)$$

Diese Evolutionsgleichungen müssen ebenfalls objektiv sein, siehe Abschnitt 2.4.1. Durch Einsetzen der freien Energie (2.69) in die Clausius–Planck Ungleichung (2.65) erhalten wir für isotherme Prozesse

$$\left(\mathbf{P} - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}\right) : \dot{\mathbf{F}} - \frac{\partial \psi}{\partial \mathcal{I}} \cdot \dot{\mathcal{I}} \geq 0 \quad (2.71)$$

und postulieren die Spannungen als Ableitung der freien Energie nach dem Deformationsgradienten.

$$\mathbf{P} := \frac{\partial \psi(\mathbf{F}, \mathcal{I}, \mathbf{X})}{\partial \mathbf{F}} \quad (2.72)$$

Eine Formulierung mit dem objektiven rechten Cauchy–Green Tensor \mathbf{C} erfüllt das Prinzip der materiellen Objektivität a priori und es ergibt sich die reduzierte Form

$$\left. \begin{aligned} \psi &= \psi(\mathbf{C}, \mathcal{I}) \\ \mathbf{P} &= 2\mathbf{F}\partial_{\mathbf{C}}\psi(\mathbf{C}, \mathcal{I}) \\ \dot{\mathcal{I}} &= \mathcal{E}(\mathbf{C}, \mathcal{I}) \quad \text{mit} \quad \mathcal{I}(t = t_0) = \mathcal{I}_0 \end{aligned} \right\}. \quad (2.73)$$

2.4.4. Struktur algorithmischer Materialmodelle

Die mit den Gleichungen (2.72) und (2.70) beschriebene Materialklasse stellt ein gekoppeltes System gewöhnlicher Differentialgleichungen dar und ist zur numerischen Umsetzung in einem typischen Zeitintervall $[t_n, t_{n+1}]$ zu integrieren. Im Kontext klassischer deformationsgetriebener Spannungsalgorithmen, SIMO & HUGHES [125], wird die Spannung \mathbf{P}_{n+1} bei vorgegebener Deformation \mathbf{F}_{n+1} bestimmt, wobei alle Größen zum Zeitpunkt t_n als bekannt vorausgesetzt werden. Zur Integration der Evolutionsgleichung (2.70) wird hier der allgemeine Aufdatierungsalgorithmus

$$\mathcal{I}_{n+1} = \mathcal{I}_n + \Delta t \left[(1 - \alpha)\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n) + \alpha\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{F}_{n+1}, \mathcal{I}_{n+1}) \right] \quad (2.74)$$

verwendet, der mit der Wahl $\alpha = 1$ den impliziten Euler und mit $\alpha = 0$ den expliziten Euler Aufdatierungsalgorithmus erster Ordnung enthält. Mit $\alpha = 0.5$ ist die Trapezregel mit einer Ordnung zweiter Stufe enthalten. Wird die Gleichung (2.74) zusammengefasst, erhalten wir die Struktur

$$\mathcal{I}_{n+1} = \hat{\mathcal{E}}(\mathbf{F}_{n+1}; \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}) \quad (2.75)$$

für die algorithmischen internen Variablen \mathcal{I}_{n+1} zum Zeitpunkt t_{n+1} . Die Gleichung (2.75) wird für einen linearen Evolutionsoperator \mathcal{E} direkt gelöst, andernfalls muss die Lösung auf der Basis einer lokalen Newton–Iteration gefunden werden. Wird die algorithmische Abhängigkeit der Spannungen von der aktuellen Deformation und den aktuellen internen Variablen betrachtet, $\mathbf{P}_{n+1} = \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{F}_{n+1}, \mathcal{I}_{n+1})$, und setzt den Ausdruck (2.75) ein, $\mathbf{P}_{n+1} = \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{F}_{n+1}, \hat{\mathcal{E}}(\mathbf{F}_{n+1}; \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}))$ so lässt sich der algorithmische Spannungsausdruck zu

$$\boxed{\mathbf{P}_{n+1} = \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{F}_{n+1}; \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\})} \quad (2.76)$$

umformen. Somit hängt die algorithmische Spannung \mathbf{P}_{n+1} allein von der vorgegebenen Deformation \mathbf{F}_{n+1} und den vom Zeitschritt t_n bekannten Geschichtsvariablen $\{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}$

ab. Wie in MIEHE [72] dargestellt, werden in einem typischen Zeitintervall die Geschichtsvariablen als eingefroren betrachtet. Diese Beobachtung wird weiterhin in den Abschnitten zur Sensitivitätsanalyse genutzt, siehe 5.2.4 und 5.2.5.

Zur Anwendung der Methode der Finiten Elemente bzw. für den Treiberalgorithmus aus Abschnitt 5.2 wird die Sensitivität der Spannung bezüglich einer Änderung der totalen Deformation benötigt. Dieser Zusammenhang ist über den algorithmischen konsistenten Tangentenmodul gegeben.

$$\Delta \mathbf{P}_{n+1} = \mathbb{A}_{n+1} : \Delta \mathbf{F}_{n+1} \quad (2.77)$$

Dieser Tangentenmodul berechnet sich aus der Differentiation der algorithmischen Spannungen nach den totalen Deformationen zum aktuellen Zeitpunkt.

$$\boxed{\mathbb{A}_{n+1} := \partial_{\mathbf{F}_{n+1}} \hat{\mathbf{P}}_{n+1}(\mathbf{F}_{n+1}; \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\})} \quad (2.78)$$

Dieser Tensor vierter Stufe wird in der Regel analytisch in der Materialroutine berechnet, kann aber auch über eine numerische Differentiation bestimmt werden.

3. Verfahren der nichtlinearen Optimierung

3.1. Übersicht und Klassifizierung

Die nichtlineare Optimierung ist eine der Grundaufgaben aller natur- und ingenieurwissenschaftlichen Bereiche. Ein guter Überblick über numerische Optimierungsverfahren ist unter anderem in der Literatur von DENNIS & SCHNABEL [25], FLETCHER [29], LUNENBERGER [58], NOCEDAL & WRIGHT [91], POWELL [100], THIELECKE [128] zu finden.

Ein Optimierungsproblem ist charakterisiert durch eine zu minimierende Zielfunktion $f(\boldsymbol{\kappa})$, mit dem Parametervektor $\boldsymbol{\kappa}$, der im allgemeinen durch nichtlineare Gleichheits- und Ungleichheitsnebenbedingungen \mathbf{g} und \mathbf{h} eingeschränkt ist.

$$\left. \begin{aligned} f(\boldsymbol{\kappa}) \rightarrow \min_{\boldsymbol{\kappa} \in \mathcal{P}} \\ \mathcal{P} = \{h_i(\boldsymbol{\kappa}) = 0, i = 1, \dots, n_h \quad ; \quad g_j(\boldsymbol{\kappa}) \leq 0, j = 1, \dots, n_g\} \end{aligned} \right\} \quad (3.1)$$

Die Menge aller Gleichheits- und Ungleichheitsnebenbedingungen wird in dem zulässigen Parameterbereich \mathcal{P} zusammengefasst. Als Sonderfall reduziert sich dieser Parameterraum auf obere und untere Schranken für jeden Parameter.

$$\mathcal{P} = \{a_i \leq \kappa_i \leq b_i, i = 1, \dots, n\} \quad (3.2)$$

Die Parameterschranken stammen häufig aus dem physikalischen Kontext oder aus bereits gewonnenen Erkenntnissen. Treten Gleichheitsnebenbedingungen zwischen den Materialparametern auf, wie beispielsweise beim inkompressiblen Ogden-Material [92], dann können diese Bedingungen auch von vorne herein im Materialmodell integriert werden. Die Zahl der freien Parameter reduziert sich und die Gleichheitsnebenbedingung in der Optimierung verschwinden. Somit kommt der unrestringierten Optimierung ein besonderes Interesse zu. Das Optimalitätskriterium erster Ordnung besagt, dass der Gradient der Zielfunktion verschwinden muss.

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}) = \mathbf{0} \quad (3.3)$$

Da diese Aussage lediglich ein lokales Extremum charakterisiert, wird für ein globales Minimum $\boldsymbol{\kappa}^*$ zusätzlich die Bedingung

$$f(\boldsymbol{\kappa}^*) \leq f(\boldsymbol{\kappa}) \quad \forall \boldsymbol{\kappa} \in \mathcal{P} \quad (3.4)$$

gefordert. Die Optimierungsverfahren können nach unterschiedlichen Gesichtspunkten kategorisiert werden, siehe MAHNKEN [62]. Eine mögliche Einteilung unterscheidet nach Verfahren, die Gradienteninformationen ausnutzen bzw. diese nicht ausnutzen. Verfahren, die Gradienteninformationen ausnutzen werden als Newton-ähnliche Verfahren bezeichnet. Im Gegensatz hierzu stehen die Verfahren die ohne die Gradienten der Zielfunktion auskommen. Eine weitere Einteilung unterscheidet nach Verfahren, die reproduzierbare Ergebnisse liefern, auch deterministische Verfahren genannt, und stochastische Verfahren, die unter Verwendung von Zufallszahlen die Suche vorantreiben.

Ein Nachteil der gradientenbasierten Verfahren ist, dass sie nur zur Auffindung lokaler Minima geeignet sind. Die in RECHENBERG [102] und SCHWEFEL [121, 122] beschriebene Evolutionsstrategie gehört zu den stochastischen Verfahren und ist daher besser geeignet das globale Minimum zu finden. In Tabelle 1 sind einige der bekanntesten Verfahren nach diesen zwei Gesichtspunkten kategorisiert.

Gradientenbasiert	Gradientenfrei	Deterministisch	Stochastisch
Gauss-Newton	Simplex-Methode	Simplex-Methode	Evolutionsstrategie
Levenberg-Marquardt	Evolutionsstrategie	Gauss-Newton	Monte-Carlo
Quasi-Newton		Levenberg-Marquardt	
SQP-Methode		SQP-Methode	
		Quasi-Newton	

Tabelle 1: Einteilung einiger numerischer Optimierungsverfahren in gradientenbasierte bzw. gradientenfreie Verfahren und deterministische bzw. stochastische Verfahren.

3.2. Eindimensionale Optimierungsverfahren

Als Grundlage zur numerischen Optimierung werden einige eindimensionale Optimierungsverfahren vorgestellt, die Bestandteil jedes mehrdimensionalen Optimierungsalgorithmus sind. Ist eine Suchrichtung \mathbf{s} gefunden, so ist zu prüfen, ob bezüglich der wahren Funktion eine Verbesserung des Funktionswertes eingetreten ist. Ist dies der Fall, wird in der aktuellen Suchrichtung das Minimum der wahren Funktion genau oder näherungsweise ermittelt. Eine exakte Suche entlang dieser Richtung \mathbf{s} ist sehr rechenintensiv. In vielen Fällen muss die Suche entlang der Richtung nicht exakt ausgeführt werden. Es genügt eine ausreichende Verbesserung des Funktionswertes im Vergleich zum vorherigen Funktionswert zu erzielen.

Eine exakte Suche kann zum Beispiel mit der Nullstellensuche des Newton-Verfahrens durchgeführt werden. Ebenso können einfache Bisektionsverfahren oder die Methode des goldenen Schnitts verwendet werden. Die Verfahren zur inexakten Minimierung entlang einer Suchrichtung basieren auf einer Schrittweitenverkürzung, die so lange wiederholt wird, bis ein bestimmtes Kriterium erfüllt ist. In dieses Kriterium können Informationen über den Funktionswert oder über die Gradienten der Funktion entlang der Suchrichtung einfließen.

3.2.1. Verfahren zur exakten Minimierung

Methode des Goldenen Schnitts

Dieses Verfahren ist ein eindimensionales Suchverfahren zur Suche des Minimums einer Funktion in einem Intervall $[a, b]$ und kommt mit Funktionsauswertungen aus. Das Intervall $[a, b]$ wird schrittweise so verkleinert, dass das jeweilige neue Teilintervall den Minimalpunkt x^* enthält. Zu Beginn wird das Startintervall mit $[a_1, b_1] = [a, b]$ initialisiert. Anschließend werden die Punkte

$$\lambda_1 = a_1 + (1 - \alpha)(b_1 - a_1) \quad , \quad \mu_1 = a_1 + \alpha(b_1 - a_1) \quad (3.5)$$

berechnet, wobei $\alpha = \frac{1}{2}(\sqrt{5} - 1) \approx 0.618$ ist. Dies entspricht einer Teilung des Intervalls nach dem goldenen Schnitt. Im Folgenden sind zwei Fälle zu beachten. Falls

$$\left. \begin{array}{l} \text{a) } f(\lambda_1) < f(\mu_1), \text{ dann } a_2 = a_1, b_2 = \mu_1, \mu_2 = \lambda_1 \text{ ,} \\ \text{b) } f(\lambda_1) \geq f(\mu_1), \text{ dann } a_2 = \lambda_1, b_2 = b_1, \lambda_2 = \mu_1 \text{ .} \end{array} \right\} \quad (3.6)$$

Ist $b_2 - a_2 \geq \varepsilon$, dann wird das Verfahren mit dem Intervall $[a_2, b_2]$ wiederholt, wobei einer der Werte $f(\lambda_2)$ für Fall a) bzw. $f(\mu_2)$ für Fall b) aus dem ersten Schritt verwendet werden kann. Zur Berechnung eines Intervalls $[a_n, b_n]$, in dem der Minimalpunkt x^* liegt, sind somit insgesamt n Funktionsauswertungen erforderlich.

Bisektionsverfahren

Wird das Bisektionsverfahren zur Suche eines Minimums eingesetzt, kann dies als Suche nach der Nullstelle der ersten Ableitung der Funktion f interpretiert werden. Gegeben ist das Intervall $[a, b]$ wobei die Ableitung $f'(a) < 0$ und die Ableitung $f'(b) > 0$ ist. Dies bedeutet aufgrund der Stetigkeit der Funktion, dass die erste Ableitung im angegebenen Intervall mindestens einen Nulldurchgang hat. Das Vorgehen kann wie folgt beschrieben werden. Initialisiere $a_1 = a$ und $b_1 = b$ und berechne $y_1 = f'(\frac{a_1+b_1}{2})$. Falls

$$\left. \begin{array}{l} y_1 > 0 \text{ setze } a_2 = a_1, b_2 = \frac{a_1+b_1}{2}, \\ y_1 < 0 \text{ setze } a_2 = \frac{a_1+b_1}{2}, b_2 = b_1. \end{array} \right\} \quad (3.7)$$

Nun ist $f'(a_2) < 0$, $f'(b_2) > 0$ und die Intervalllänge halbiert. Danach wird der Funktionswert $y_2 = f'(\frac{a_2+b_2}{2})$ berechnet und das Verfahren wiederholt.

Newton Verfahren

Das Newton Verfahren ist ein schnell konvergierendes Verfahren zur Suche einer lokalen Nullstelle der ersten Ableitung. Die Funktion f wird im aktuellen Näherungspunkt x^k durch eine quadratische Funktion approximiert. Es gilt

$$f(x) \approx q(x) = f(x^k) + (x - x^k)f'(x^k) + \frac{1}{2}(x - x^k)^2 f''(x^k) \quad (3.8)$$

mit den ersten und zweiten Ableitungen der Funktion f im Punkt x^k . Ist die zweite Ableitung positiv, dann hat $q(x^k)$ an der Stelle x^{k+1} ein globales Minimum und es ergibt sich die Iterationsvorschrift

$$x^{k+1} = x^k - [f''(x^k)]^{-1} f'(x^k) \text{ für } k = 1, 2, \dots \quad (3.9)$$

3.2.2. Verfahren zur inexakten Minimierung

Das Armijo–Goldstein Kriterium

Bei diesem Kriterium muss die Schrittweite α eine ausreichende Verringerung der Zielfunktion gewährleisten aber trotzdem ausreichend groß sein. Die Bedingungen lauten

$$\left. \begin{array}{l} f(\boldsymbol{\kappa}_i + \alpha \mathbf{s}_i) \leq f(\boldsymbol{\kappa}_i) + \alpha \mu_1 \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T f(\boldsymbol{\kappa}_i) \mathbf{s}_i, \\ f(\boldsymbol{\kappa}_i + \alpha \mathbf{s}_i) \geq f(\boldsymbol{\kappa}_i) + \alpha \mu_2 \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T f(\boldsymbol{\kappa}_i) \mathbf{s}_i. \end{array} \right\} \quad (3.10)$$

Die skalaren Werten μ_1 und μ_2 unterliegen den Schranken $0 < \mu_1 \leq \mu_2 < 1$. Eine anschauliche Interpretation dieser Bedingung ist beispielsweise DENNIS & SCHNABEL [25] zu entnehmen.

Armijo Backtracking

Ein verbreitetes Verfahren, welches in der Implementation des SQP–Algorithmus aus Tabelle 3 verwendet wird, ist das sogenannte “Armijo Backtracking”. Ausgehend von einem aktuellen Parametervektor wird durch Lösen des quadratischen Subproblems ein neuer Parametervektor bestimmt. Zu diesem neuen Parametersatz wird der Funktionswert bestimmt. Anschließend wird anhand des in Tabelle 2 dargestellten Algorithmus entschieden, ob dieser neue Satz akzeptiert wird, oder ob die Schrittweite reduziert werden muss.

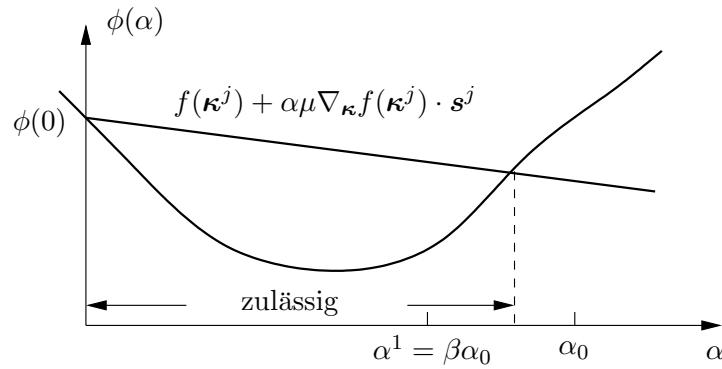


Abbildung 12: Grafische Darstellung des Armijo Backtracking. Die Schrittweite wird nicht weiter reduziert, sobald sie in dem angegebenen zulässigen Bereich liegt.

Tabelle 2: Algorithmus des Armijo Backtracking.

Setze $0 < \mu < 1$, $0 < \beta < 1$ und $\alpha_0 > 0$ (z.B. $\mu = 0$, $\beta = 0.7$, $\alpha_0 = 1$)

1. Initialisiere $i = 0$, $\alpha^i = \alpha_0$
2. Wenn $f(\kappa^j + \alpha^i \mathbf{s}^j) \leq f(\kappa^j) + \alpha^i \mu \nabla_{\kappa} f(\kappa^j) \cdot \mathbf{s}^j$ dann $\alpha^j = \alpha^i$ und gehe nach 4.
3. Setze $i = i + 1$, $\alpha^i = \beta \alpha^i$ und gehe nach 2.
4. Ende

3.3. Mehrdimensionale Optimierungsverfahren

Mehrdimensionale Optimierungsverfahren basieren auf einer lokalen Approximation der nichtlinearen Zielfunktion in einer Umgebung des aktuellen Parametervektors. Dabei lassen sich die Methoden nach ihrer Ordnung, d.h. nach dem Grad der verwendeten Ableitung kategorisieren. Verfahren 0. Ordnung verwenden lediglich Funktionswerte, Verfahren 1. Ordnung verwenden die ersten Ableitungen und die Verfahren 2. Ordnung verwenden zusätzlich die zweiten Ableitungen der Zielfunktion. Im Weiteren werden Verfahren 1. und 2. Ordnung mit einer geeigneten Schrittweitensteuerung vorgestellt. Auf die explizite Berechnung der 1. Ableitungen kann durch Verwendung von numerischer Differentiation verzichtet werden, siehe hierzu die Kapitel 5.2.6 und 6.4.2. In Abschnitt 3.3.4 wird auf ein Verfahren 0. Ordnung eingegangen.

3.3.1. Optimierungsverfahren vom Newton Typ

Die Diskrepanz zwischen der lokalen Approximation und der Zielfunktion führt auf eine iterative Lösung des Gesamtproblems in der Form

$$\boldsymbol{\kappa}^{k+1} = \boldsymbol{\kappa}^k + \Delta \boldsymbol{\kappa}^k = \boldsymbol{\kappa}^k + \alpha \mathbf{s}^k. \quad (3.11)$$

Das Inkrement $\Delta \boldsymbol{\kappa}$ setzt sich aus der Suchrichtung \mathbf{s} und der skalaren Schrittweite α zusammen. Die folgenden Verfahren unterscheiden sich in der Art und Weise, wie die Suchrichtung bzw. die Schrittweite bestimmt wird.

Die Methode des steilsten Abstiegs

Die Methode des steilsten Abstiegs verwendet als Suchrichtung \mathbf{s} den negativen Gradienten $-\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa})$ der zu minimierenden Funktion, der lokal das stärkste Gefälle angibt. Dieses Verfahren approximiert die Zielfunktion durch eine lineare Funktion. Aus diesem Grund ist eine Begrenzung oder Steuerung der Schrittweite zwingend erforderlich. Wird die Schrittweite so gesteuert, dass eine exakte Minimierung der Funktion entlang der gegebenen Suchrichtung stattfindet, so ist die neue Suchrichtung orthogonal zur alten Suchrichtung, siehe Abbildung 13. Ist die Zielfunktion durch ein langgestrecktes Tal charakterisiert, d.h. die Eigenwerte der Hesse-Matrix haben unterschiedliche Größenordnungen, so kommt es zu einem Zick-Zack Verlauf des Lösungspfads. Durch eine geeignete Skalierung der Parameter kann dieses Phänomen umgangen werden.

Das Newton Verfahren

Beim Newton Verfahren wird die Zielfunktion durch eine quadratische Funktion am Iterationspunkt approximiert.

$$f \approx f(\boldsymbol{\kappa}^i) + \nabla^T f(\boldsymbol{\kappa}^i) \Delta \boldsymbol{\kappa}^i + \frac{1}{2} \Delta \boldsymbol{\kappa}^{iT} \nabla^2 f(\boldsymbol{\kappa}^i) \Delta \boldsymbol{\kappa}^i \quad (3.12)$$

Die notwendige Bedingung $\nabla f(\boldsymbol{\kappa}^i) + \nabla^2 f(\boldsymbol{\kappa}^i) \Delta \boldsymbol{\kappa}^i = \mathbf{0}$ liefert ein eindeutiges Minimum der Approximation für den Fall, dass die Hessematrix $\mathbf{H} := \nabla_{\boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{\kappa}}^2 f(\boldsymbol{\kappa})$ positiv definit ist. Somit fließen Krümmungsinformationen in die Wahl der Suchrichtung ein. Die Aufdatierungsvorschrift hat folgende Gestalt.

$$\boldsymbol{\kappa}^{i+1} = \boldsymbol{\kappa}^i + \Delta \boldsymbol{\kappa}^i = \boldsymbol{\kappa}^i - \alpha [\mathbf{H}(\boldsymbol{\kappa}^i)]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{\kappa}^i) \quad (3.13)$$

Die Newton Iteration liefert aus der Methode heraus eine Schrittweitenbegrenzung. Es ist trotzdem ratsam eine sogenannte Dämpfungsstrategie zu verfolgen und zu überprüfen, ob die Approximation in dem Bereich des Parameterschrittes ihre Gültigkeit behält.

In Abbildung 13 ist die Methode des steilsten Abstiegs und das Newton-Verfahren gegenübergestellt. Dabei wird die Funktion $f(x, y) = (x - 2)^4 + (x - 2y)^2$ und ein Startwert von (3.0/5.5) gewählt. Es sind jeweils 100 Iterationen mit exakter Schrittweitensteuerung dargestellt. Bei der Methode des steilsten Abstiegs ist deutlich das Zick-Zack Verhalten nahe der Lösung zu erkennen.

Das Gauss-Newton Verfahren

Im Folgenden wird die spezielle Struktur des Fehlerquadratfunktionals ausgenutzt. Dies führt auf das Gauss-Newton Verfahren, das nur die ersten Ableitungen der Zielfunktion benötigt. Bei hinreichend gutem Startwert weisen diese Verfahren trotzdem eine quadratische Konvergenz auf. Die Güte- oder Zielfunktion hat im Fall der Parameteridentifikation die Form einer Fehlerquadrat-Funktion und wird in der Literatur mit "least squares function" oder abgekürzt LSF bezeichnet. Dabei werden die Differenzen zwischen gemessenen Größen \mathbf{d}^{exp} und errechneten Größen $\mathbf{d}(\boldsymbol{\kappa})$ quadriert und aufsummiert.

$$f(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_d} [d_i(\boldsymbol{\kappa}) - d_i^{exp}]^2 \quad (3.14)$$

Die erste Ableitung der Zielfunktion nach den Parametern ergibt sich als Produkt aus den Residuen $[d_i(\boldsymbol{\kappa}) - d_i^{exp}]$ und der Jacobi-Matrix $\mathbf{J}(\boldsymbol{\kappa}) = \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{d}(\boldsymbol{\kappa})$ der berechneten Größen.

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f = \sum_{i=1}^{n_d} [d_i(\boldsymbol{\kappa}) - d_i^{exp}] \frac{\partial d_i(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \quad (3.15)$$

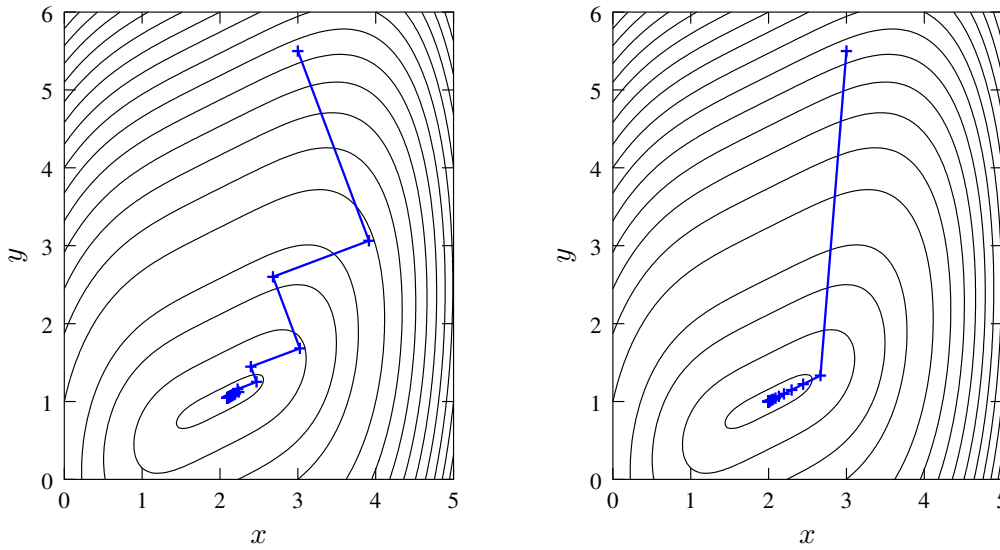


Abbildung 13: Suchpfad der Methode des steilsten Abstieges mit Zick-Zack Verlauf (links) und Suchpfad der Newton-Methode (rechts).

Ein nochmaliges Ableiten nach den Parametern führt auf die Hesse-Matrix \mathbf{H} , die für diesen speziellen Fall aus zwei Anteilen besteht.

$$\mathbf{H} = \nabla_{\boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{\kappa}}^2 f = \sum_{i=1}^{n_d} [d_i(\boldsymbol{\kappa}) - d_i^{exp}] \frac{\partial^2 d_i(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \boldsymbol{\kappa} \partial \boldsymbol{\kappa}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n_d} \left[\frac{\partial d_i(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \otimes \frac{\partial d_i(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \right]}_{\mathbf{H}_{GN}} \quad (3.16)$$

Der erste Teil enthält Informationen über die Krümmungen der Zielfunktion, die durch die zweiten Ableitungen der berechneten Größen bestimmt werden. Der zweite Teil der Hesse-Matrix wird durch die Jacobi-Matrix bestimmt, d.h. durch die ersten Ableitungen. Mit der Annahme, dass nahe des Lösungspunktes die Residuen

$$[d_i(\boldsymbol{\kappa}) - d_i^{exp}] \rightarrow 0 \quad (3.17)$$

sehr kleine Werte annehmen, kann der Teil der zweiten Ableitungen vernachlässigt werden, d.h. der Aufwand zur Berechnung reduziert sich und die Hessematrix wird durch die sogenannte Gauss-Newton Matrix ersetzt.

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{GN} \quad (3.18)$$

Das restliche Iterationsschema bleibt unbeeinflusst.

Das Quasi-Newton Verfahren

Das Quasi-Newton Verfahren ist auch als Sekanten- oder Variable-Metrik-Verfahren bekannt. Hier wird versucht den Berechnungsaufwand für die zweiten Ableitungen einzusparen und trotzdem die guten Konvergenzeigenschaften in der Nähe der Lösung beizubehalten. Zudem sollen mögliche Probleme bei der Invertierung der Hesse-Matrix vermieden werden. Aus diesem Grund wird die aktuelle Hesse-Matrix am Iterationspunkt i aus aktuellen Gradienten-Informationen und der Iterationsmatrix des vorherigen Schritts aufdatiert. Es gibt eine Vielzahl an Möglichkeiten diese Aufdatierungsvorschrift zu konstruieren. Als Beispiel seien hier die Aufdatierungsvorschriften nach BROYDEN [15], DAVIDON,

FLETCHER & POWELL und die Vorschrift nach BROYDEN, FLETCHER [27], GOLDFARB [33] und SHANNO [119] aufgeführt. Diesen Vorschriften liegt die Definition zweier Vektoren

$$\mathbf{p} = \boldsymbol{\kappa}_{k+1} - \boldsymbol{\kappa}_k \quad \text{und} \quad \mathbf{q} = \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}_{k+1}) - \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}_k) \quad (3.19)$$

zugrunde. Die einfachste Aufdatierungsvorschrift ist die Rang-1 Aufdatierung nach BROYDEN.

$$\mathbf{H}_{k+1}^{BROYDEN} = \mathbf{H}_k + \frac{(\mathbf{q} - \mathbf{H}_k \mathbf{p})(\mathbf{q} - \mathbf{H}_k \mathbf{p})^T}{(\mathbf{q} - \mathbf{H}_k \mathbf{p})^T \mathbf{p}} \quad (3.20)$$

Ein leistungsfähigeres Rang-2 Aufdatierungsverfahren ist das DFP-Verfahren nach DAVIDON das von FLETCHER und POWELL modifiziert wurde.

$$\mathbf{H}_{k+1}^{DFP} = \mathbf{H}_k + \frac{\mathbf{q}\mathbf{q}^T}{\mathbf{q}^T \mathbf{p}} - \frac{\mathbf{H}_k \mathbf{p} \mathbf{p}^T \mathbf{H}_k}{\mathbf{p}^T \mathbf{H}_k \mathbf{p}} \quad (3.21)$$

Anstatt die Hesse-Matrix selbst aufzudatieren, gibt es die Möglichkeit die Inverse $\mathbf{B} = [\nabla^2 f]^{-1}$ durch eine Aufdatierungsvorschrift zu approximieren. Dieses Vorgehen macht die Inversion der Matrix überflüssig und den Algorithmus effizienter. Die Vorschrift für das DFP-Verfahren erhält man durch das Vertauschen von \mathbf{p} und \mathbf{q} in (3.21). Aus numerischen Untersuchungen ist bekannt, dass dieses DFP Verfahren empfindlich auf eine ungenaue Optimierung entlang der Suchrichtung reagiert. Aus einer Weiterentwicklung entstand die heute meist genutzte Aufdatierungsvorschrift für die Inverse der Hesse Matrix, der sogenannte BFGS-Update, der nach BROYDEN, FLETCHER, GOLDFARB und SHANNO benannt ist. Diese Aufdatierung hat eine selbstkorrigierende Eigenschaft bei nicht exakter Schrittweitenbestimmung.

$$\mathbf{B}_{k+1}^{BFGS} = \mathbf{B}_k + \frac{\mathbf{p}\mathbf{p}^T}{\mathbf{p}^T \mathbf{q}} \left[1 + \frac{\mathbf{q}^T \mathbf{B} \mathbf{q}}{\mathbf{p}^T \mathbf{q}} \right] - \frac{\mathbf{B} \mathbf{q} \mathbf{p}^T + \mathbf{p} \mathbf{q}^T \mathbf{B}}{\mathbf{p}^T \mathbf{q}} \quad (3.22)$$

Die Quasi-Newton Verfahren unter Verwendung dieser Aufdatierungsformel haben sich bei der Optimierung von nichtlinearen Problemen bewährt.

3.3.2. Die Sequentielle Quadratische Programmierung

Die Sequentielle Quadratische Programmierung gehört zu den leistungsfähigsten Methoden zur Optimierung nichtlinearer Probleme mit allgemeinen nichtlinearen Gleichheits- und Ungleichheitsnebenbedingungen.

Die Active Set Strategie

Zusätzlich zur Behandlung der Ungleichheitsnebenbedingungen wird eine "Active Set" Strategie eingeführt. Dies bedeutet, die Ungleichheitsnebenbedingungen werden in aktive und inaktive Nebenbedingungen eingeteilt. Für einen eingefrorenen "Active Set" \mathcal{W} werden die aktiven Ungleichheitsnebenbedingungen wie Gleichheitsnebenbedingungen behandelt.

$$\mathbf{g}_{\mathcal{W}} = \mathbf{0} \quad \Leftrightarrow \quad g_i = 0 \quad \text{für } i \in \mathcal{W} \quad (3.23)$$

Nicht aktive Nebenbedingungen werden in dem aktuellen Iterationsschritt nicht beachtet.

Die Lagrange Funktion

Das Optimierungsproblem mit Nebenbedingungen wird in eine sogenannte Lagrange Funktion überführt, siehe hierzu BESTLE [12], GROSSMANN [34], SCHITTKOWSKI [117], etc.. Das Minimierungsproblem

$$f(\boldsymbol{\kappa}) \rightarrow \min. \quad \text{mit} \quad \mathbf{h}(\boldsymbol{\kappa}) = \mathbf{0} \quad \text{und} \quad \mathbf{g}_{\mathcal{W}}(\boldsymbol{\kappa}) = \mathbf{0} \quad (3.24)$$

wird in ein Sattelpunktproblem umwandelt. Hierzu werden die Lagrange Multiplikatoren $(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}})$ eingeführt. Die daraus entwickelte Lagrangefunktion lautet

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}}) := f(\boldsymbol{\kappa}) + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{h}(\boldsymbol{\kappa}) + \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}}^T \mathbf{g}_{\mathcal{W}}(\boldsymbol{\kappa}) \rightarrow \text{stat.}, \quad (3.25)$$

wobei nur die aktiven Ungleichheitsnebenbedingungen aufgenommen werden. Die Optimalitätsbedingungen erster Ordnung, auch Karush–Kuhn–Tucker Bedingungen genannt, stellen sich folgendermaßen dar.

$$\mathbf{G}(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}}) := \begin{bmatrix} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathcal{L} \\ \nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathcal{L} \\ \nabla_{\boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}}} \mathcal{L} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathcal{L} \\ \mathbf{h} \\ \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (3.26)$$

Der Gradient der Lagrange Funktion setzt sich aus dem Gradienten der Zielfunktion und dem Gradienten der Nebenbedingungen zusammen.

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathcal{L} = \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}) + \boldsymbol{\mu}^T \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{h}(\boldsymbol{\kappa}) + \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}}^T \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{g}_{\mathcal{W}}(\boldsymbol{\kappa}) \quad (3.27)$$

Für die Lösung der Optimalitätsbedingungen (3.26) kommen Newton- oder Quasi-Newton Verfahren zur Anwendung. Die Anwendung des Newton-Verfahrens liefert im i -ten Iterationsschritt die Linearisierung

$$\mathbf{G}(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}}) + \nabla \mathbf{G}(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}}) \begin{bmatrix} \Delta \boldsymbol{\kappa} \\ \Delta \boldsymbol{\mu} \\ \Delta \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}} \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (3.28)$$

mit der Jacobimatrix $\nabla \mathbf{G}$. Unter Beachtung von (3.26) und der Definition der Inkremente der Parameter und Lagrange Multiplikatoren ergibt sich

$$\begin{bmatrix} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathcal{L} \\ \mathbf{h} \\ \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{H} & \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T \mathbf{h} & \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \\ \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{h} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{g}_{\mathcal{W}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\kappa}^{n+1} - \boldsymbol{\kappa}^n \\ \boldsymbol{\mu}^{n+1} - \boldsymbol{\mu}^n \\ \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}}^{n+1} - \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}}^n \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (3.29)$$

wobei \mathbf{H} die zweite Ableitung der Lagrange Funktion darstellt.

$$\mathbf{H} = \nabla_{\boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{\kappa}}^2 \mathcal{L} = \nabla_{\boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{\kappa}}^2 f + \boldsymbol{\mu}^T \nabla_{\boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{\kappa}}^2 \mathbf{h} + \boldsymbol{\lambda}^T \nabla_{\boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{\kappa}}^2 \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \quad (3.30)$$

Mit einigen algebraischen Umformungen ergibt sich das folgende gekoppelte Gleichungssystem.

$$\left. \begin{aligned} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f + [\nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T \mathbf{h} \quad \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T \mathbf{g}_{\mathcal{W}}] \begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_{i+1} \\ \boldsymbol{\lambda}_{i+1} \end{bmatrix} + \nabla_{\boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{\kappa}}^2 f [\boldsymbol{\kappa}^{n+1} - \boldsymbol{\kappa}^n] = \mathbf{0} \\ \begin{bmatrix} \mathbf{h} \\ \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{h} \\ \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \end{bmatrix} [\boldsymbol{\kappa}^{n+1} - \boldsymbol{\kappa}^n] = \mathbf{0} \end{aligned} \right\} \quad (3.31)$$

Die Auflösung liefert eine Bestimmungsgleichung für die Lagrange Multiplikatoren

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_{i+1} \\ \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}_{n+1}} \end{bmatrix} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} \quad (3.32)$$

und das Parameterinkrement

$$\Delta \boldsymbol{\kappa}_{n+1} = -\mathbf{H}^{-1} \left\{ \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f + [\nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T \mathbf{h} \quad \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T \mathbf{g}_{\mathcal{W}}] \begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_{i+1} \\ \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}_{i+1}} \end{bmatrix} \right\}. \quad (3.33)$$

Hier wird die symmetrische Matrix \mathbf{A}

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{h} \\ \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \end{bmatrix} \mathbf{H}^{-1} [\nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T \mathbf{h} \quad \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T \mathbf{g}_{\mathcal{W}}] \quad (3.34)$$

und der Vektor \mathbf{b}

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} \mathbf{h} \\ \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{h} \\ \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \end{bmatrix} \mathbf{H}^{-1} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T f \quad (3.35)$$

eingeführt. Das Parameterinkrement wird zur Aufdatierung des Parametervektors $\boldsymbol{\kappa}_{n+1} = \boldsymbol{\kappa}_n + \Delta \boldsymbol{\kappa}_{n+1}$ genutzt. Das Lösen des linearen Gleichungssystems wird im Rahmen der Newton-Iteration wiederholt, bis die Norm des Parameterinkrements kleiner einer gegebenen Toleranz ist.

$$\|\Delta \boldsymbol{\kappa}\| < tol \quad (3.36)$$

Im Allgemeinen wird anstatt der Inversen der exakten Hessematrix $\mathbf{B} = [\nabla_{\boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{\kappa}}^2 f]^{-1}$ die BFGS-Matrix (3.22) genutzt. Die Iterationsmatrix wird mit $\mathbf{B}_1 = \mathbf{H}_{GN}^{-1}$ initialisiert und aufdatiert, wobei $\mathbf{p} = \boldsymbol{\kappa}_{k+1} - \boldsymbol{\kappa}_k$ und $\mathbf{q} = \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\kappa}_{k+1}) - \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\kappa}_k)$ gilt. Der Algorithmus ist in Tabelle 3 zusammengefasst.

Gedämpfter BFGS-Update

Um die positive Definitheit der aufdatierten approximierten Hessematrix gewährleisten zu können, wurde von POWELL [98] eine Dämpfungsstrategie entwickelt. Bei dieser Methode wird der Vektor \mathbf{p}_k modifiziert, falls die Krümmungsbedingung

$$\mathbf{p}^T \mathbf{q} \geq 0.2 \mathbf{p}^T \mathbf{B} \mathbf{p} \quad (3.37)$$

verletzt ist. Dann gilt

$$\mathbf{p}_k = \Theta \mathbf{p}_k + (1 - \Theta) \mathbf{B}_k \mathbf{q}_k, \quad (3.38)$$

wobei Θ aus der Gleichung

$$\Theta = \begin{cases} 1 & \text{falls } \mathbf{p}^T \mathbf{q} \geq 0.2 \mathbf{p}^T \mathbf{B} \mathbf{p} \\ (0.8 \mathbf{p}^T \mathbf{B} \mathbf{p}) / (\mathbf{p}^T \mathbf{B} \mathbf{p} - \mathbf{p}^T \mathbf{q}) & \text{falls } \mathbf{p}^T \mathbf{q} < 0.2 \mathbf{p}^T \mathbf{B} \mathbf{p} \end{cases} \quad (3.39)$$

bestimmt wird. Für den Wert $\Theta = 1$ ergibt sich die übliche BFGS-Formel. Für den Fall, dass die Bedingung (3.37) verletzt ist, sichert diese Modifikation, dass die Determinante von \mathbf{B}_{n+1} nicht kleiner als 0.2 mal der Determinante von \mathbf{B}_n wird.

Tabelle 3: SQP-Algorithmus mit Active-Set Strategie.

Initialisiere "Active Set" $\mathcal{W} = \emptyset$, Zähler $i = 1$, Startvektor $\boldsymbol{\kappa}_1 = \boldsymbol{\kappa}_0$ und Inverse der Hessematrix $\mathbf{B}_1^{BFGS} = (\mathbf{H}^{GN})^{-1}$.

1. Simulation mit aktuellem Parametersatz $\boldsymbol{\kappa}_i$:
 \Rightarrow Zielfunktion $f(\boldsymbol{\kappa}_i)$ und Gradienten $\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}_i)$
2. Löse quadratisches Subproblem:
 - Berechne \mathbf{A}_i und \mathbf{b}_i

$$\mathbf{A}_i := \begin{bmatrix} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{h} \\ \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \end{bmatrix} \mathbf{H}^{-1} \begin{bmatrix} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T \mathbf{h} & \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{b}_i := \begin{bmatrix} \mathbf{h} \\ \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{h} \\ \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \end{bmatrix} \mathbf{H}^{-1} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T f.$$

- Datiere Lagrange Parameter auf

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_{i+1} \\ \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}_{i+1}} \end{bmatrix} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}.$$

- Berechne Inkrement des Parametervektors

$$\Delta \boldsymbol{\kappa}^{n+1} = -\mathbf{H}^{-1} \left\{ \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f + \begin{bmatrix} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T \mathbf{h} & \nabla_{\boldsymbol{\kappa}}^T \mathbf{g}_{\mathcal{W}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_{i+1} \\ \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}_{i+1}} \end{bmatrix} \right\}.$$

3. Bestimme Schrittweite α durch Line-Search Algorithmus aus Tabelle 2.
4. Prüfe Active Set:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Wenn } g_j > 0 \text{ und } g_j \notin \mathcal{W} \text{ aktualisiere } \mathcal{W} \\ \text{Wenn } \lambda_{j\mathcal{W}} < 0 \text{ entferne Nebenbedingung } j \text{ aus } \mathcal{W} \end{array} \right\} \text{ Gehe zu 2.}$$

5. Datiere Parametervektor auf:

$$\boldsymbol{\kappa}_{i+1} = \boldsymbol{\kappa}_i + \alpha \Delta \boldsymbol{\kappa}_{i+1}, \quad \boldsymbol{\mu}_{i+1} = \boldsymbol{\mu}_i + \alpha (\boldsymbol{\mu}_{i+1} - \boldsymbol{\mu}_i), \quad \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}_{i+1}} = \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}_i} + \alpha (\boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}_{i+1}} - \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{W}_i})$$

6. Prüfe Toleranz $\|\Delta \boldsymbol{\kappa}\| < tol$. Datiere BFGS-Matrix auf

$$\mathbf{B}_{k+1}^{BFGS} = \mathbf{B}_k + \frac{\mathbf{p}\mathbf{p}^T}{\mathbf{p}^T \mathbf{q}} \left[1 + \frac{\mathbf{q}^T \mathbf{B} \mathbf{q}}{\mathbf{p}^T \mathbf{q}} \right] - \frac{\mathbf{B} \mathbf{q} \mathbf{p}^T + \mathbf{p} \mathbf{q}^T \mathbf{B}}{\mathbf{p}^T \mathbf{q}}$$

mit $\mathbf{p} = \boldsymbol{\kappa}_{k+1} - \boldsymbol{\kappa}_k$ und $\mathbf{q} = \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\kappa}_{k+1}) - \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\kappa}_k)$

7. Erhöhe $i \leftarrow i + 1$ und gehe zu 1.

Neustart der Approximation der inversen Hessematrix

Es wurde in Kapitel 3.3.1 bereits beschrieben, dass bei der Betrachtung nichtlinearer Ausgleichsprobleme die Hessematrix stark von der Jacobimatrix dominiert ist, falls die Residuen klein werden, siehe Gleichung (3.16). Aus diesem Grund bietet sich sowohl die Initialisierung der Hesse-Matrix, als auch ein Neustart der Hesse-Matrix mit der Gauss-Newton Matrix an. Ein regelmäßiger Neustart kann zu einer Beschleunigung der Konvergenz führen. Dabei hat sich ein Neustart nach etwa $2n$ Iterationen bewährt, wobei n die Dimension des Optimierungsproblems angibt.

3.3.3. Projektionsalgorithmus nach Bertsekas

In diesem Abschnitt wird ein Projektionsalgorithmus für Newton und Quasi-Newton Verfahren vorgestellt. Dieses Vorgehen ist in BERTSEKAS [9] ausführlich dargestellt. Mit diesem speziellen Algorithmus ist es möglich obere und untere Grenzen für die Parameter zu definieren und in die Optimierung einzubeziehen. Allgemeine nichtlineare Gleichheits- oder Ungleichheitsnebenbedingungen sind allerdings nicht realisierbar. Im Gegensatz zu der in Kapitel 3.3.2 vorgestellten Lagrange-Methode, werden hier keine Lagrange Multiplikatoren berechnet. Das Minimierungsproblem lautet

$$\left. \begin{aligned} f(\boldsymbol{\kappa}) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{d}(\boldsymbol{\kappa}) - \mathbf{d}^{exp}\|^2 \Rightarrow \min_{\boldsymbol{\kappa} \in \mathcal{P}} \\ \text{mit } \mathcal{P} &:= \{a_i \leq \kappa_i \leq b_i, \quad i = 1, \dots, n\} \end{aligned} \right\}. \quad (3.40)$$

Die Aufdatierungsvorschrift für den neuen Parametervektor ist durch die Projektion des neuen Parametervektors in das zulässige Gebiet gegeben,

$$\boldsymbol{\kappa}_{i+1} = P\{\boldsymbol{\kappa}_i - \alpha_i \mathbf{H}_i \nabla f(\boldsymbol{\kappa}_i)\} \quad (3.41)$$

wobei P den Projektionsoperator darstellt, der versichert, dass die Parameter den durch Grenzen eingeschränkten Bereich nicht verlassen. Der Projektionsoperator ist definiert durch

$$P(\boldsymbol{\kappa}) := \min[\max(\kappa_i, a_i), b_i]. \quad (3.42)$$

Mit \mathbf{H} wird wieder die Iterationsmatrix und mit α ein skalarer ‘‘Line-Search’’ Parameter bezeichnet. In Abbildung 14 ist ein Vergleich angegeben, der die unterschiedliche Behandlung der Nebenbedingung beim Projektionsalgorithmus und bei der SQP-Methode verdeutlicht. Die Iterationsschritte werden anhand der Funktion $f(\mathbf{x}) = (x-2)^4 + (x-2y)^2$ mit dem durch eine untere Schranke von $y = 2.5$ eingeschränkten Parameterbereich dargestellt. Der Startwert wird zu (1.0/5.0) gewählt.

3.3.4. Das Simplex Verfahren zur nichtlinearen Optimierung

Die Anfänge des Simplex-Verfahrens sind in DEMING & PARKER [24] dargestellt. Eine weit verbreitete Variante zur Lösung allgemeiner unbeschränkter Optimierungsprobleme ist das Verfahren nach NEDLER & MAED [90]. Für Probleme mit einer kleinen Anzahl an Unbekannten haben sich Simplex Verfahren als robust und zuverlässig erwiesen. Das hier dargestellte Simplex Verfahren basiert auf der Arbeit von POWELL [99]. Der Algorithmus ist unter dem Namen *cobylya* bekannt und ist frei zugänglich, [101]. Der Grundgedanke des Simplex Verfahrens bei der nichtlinearen Optimierung ist, die Zielfunktion $f(\boldsymbol{\kappa}) \in \mathbb{R}^n$ und die Nebenbedingungen $\mathbf{g}(\boldsymbol{\kappa})$ durch eine lineare Funktion zu approximieren. Um einen

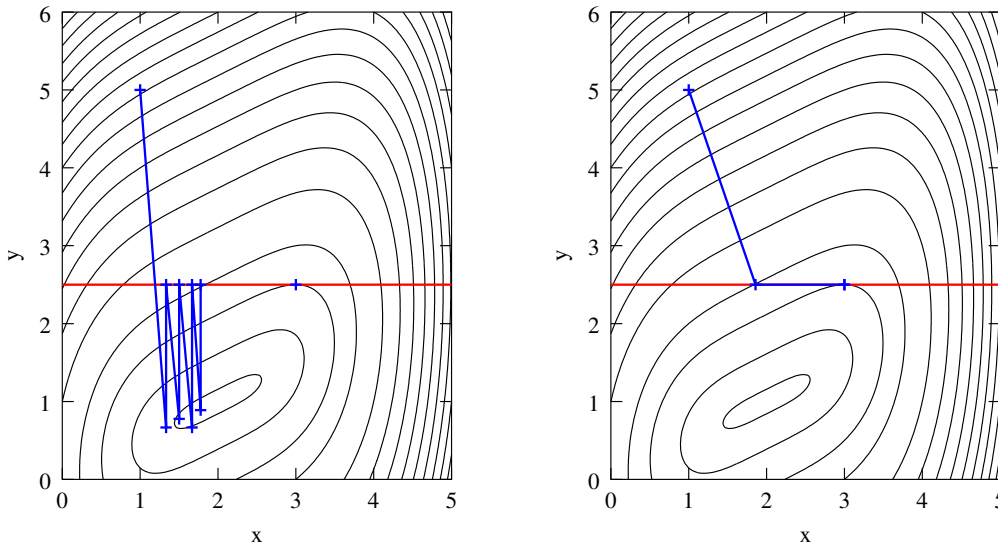


Abbildung 14: Links: Iterationsschritte mit Projektion in das zulässige Gebiet. Rechts: Quadratische Approximation für das SQP-Verfahren mit Lagrange Multiplikator.

Simplex im \mathbb{R}^n zu bestimmen sind Funktionsauswertung an $n + 1$ Stellen notwendig. Die Approximation erfüllt hierbei das Kriterium, dass sie exakt durch die $n + 1$ Stützstellen verläuft. Das Optimierungsproblem lautet

$$f(\boldsymbol{\kappa}) \rightarrow \min. \quad \text{mit} \quad g_i(\boldsymbol{\kappa}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad \boldsymbol{\kappa} \in \mathbb{R}^n. \quad (3.43)$$

Die lineare Approximation der Funktion wird mit $\hat{f}(\boldsymbol{\kappa})$ bezeichnet und hat die Form

$$\hat{f}(\boldsymbol{\kappa}) \rightarrow \min. \quad \text{mit} \quad \hat{g}_i(\boldsymbol{\kappa}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (3.44)$$

Diese Approximation erfüllt die Bedingung, dass sie die Funktionswerte der wahren Funktion an den Stützstellen wiedergibt.

$$\hat{f}(\boldsymbol{\kappa}_i) = f(\boldsymbol{\kappa}_i), \quad i = 1, \dots, n + 1 \quad (3.45)$$

Im Weiteren wird eine sogenannte Straffunktion eingeführt. Sie verhindert, dass der zulässige Parameterraum \mathcal{P} nicht zu weit verlassen wird.

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{\kappa}) = \hat{f}(\boldsymbol{\kappa}) + \mu[\max\{\hat{g}_i(\boldsymbol{\kappa}), i = 1, \dots, m\}]_+ \quad (3.46)$$

Nun wird versucht diese lineare Approximation der Zielfunktion inklusive der Nebenbedingungen zu minimieren. Da dieses Problem im allgemeinen aber keine endliche Lösung besitzt, wird ein Vertrauensbereich mit Radius ρ eingeführt.

$$\|\boldsymbol{\kappa}^{i+1} - \boldsymbol{\kappa}^i\| \leq \rho \quad (3.47)$$

Der Simplex kann sich entsprechend der folgenden Regeln durch den n -dimensionalen Suchraum bewegen und dabei seine Form und Größe an die lokalen Gegebenheiten der Zielfunktion anpassen. Die Generierung eines neuen Parametersatzes $\boldsymbol{\kappa}^{i+1}$ folgt den folgenden zwei Gesetzmäßigkeiten.

1. *Minimierungsschritt:* Lösen des linearisierten Problems mit einer möglichen Reduktion des Vertrauensbereichs ρ .
2. *Simplex Schritt:* Verbesserung der Geometrie des Simplex.

Minimierungsschritt

Ein neuer Punkt des Simplex wird bestimmt, indem das lineare Problem

$$\hat{f}(\boldsymbol{\kappa}) \rightarrow \min. \quad \text{mit} \quad \hat{g}_i(\boldsymbol{\kappa}) \leq 0 \quad (3.48)$$

unter Berücksichtigung des Vertrauensbereiches

$$\|\boldsymbol{\kappa}^{i+1} - \boldsymbol{\kappa}^i\| \leq \rho \quad (3.49)$$

gelöst wird. Anschließend wird überprüft, ob eine ausreichende Reduktion im Funktionswert der Zielfunktion aufgetreten ist.

$$\phi(\boldsymbol{\kappa}^i) - \phi(\boldsymbol{\kappa}^{i+1}) > 0.1[\hat{\phi}(\boldsymbol{\kappa}^i) - \hat{\phi}(\boldsymbol{\kappa}^{i+1})] \quad (3.50)$$

Falls der Simplex akzeptiert wird, jedoch die Bedingung (3.50) nicht erfüllt ist, so wird der Vertrauensbereich verkleinert.

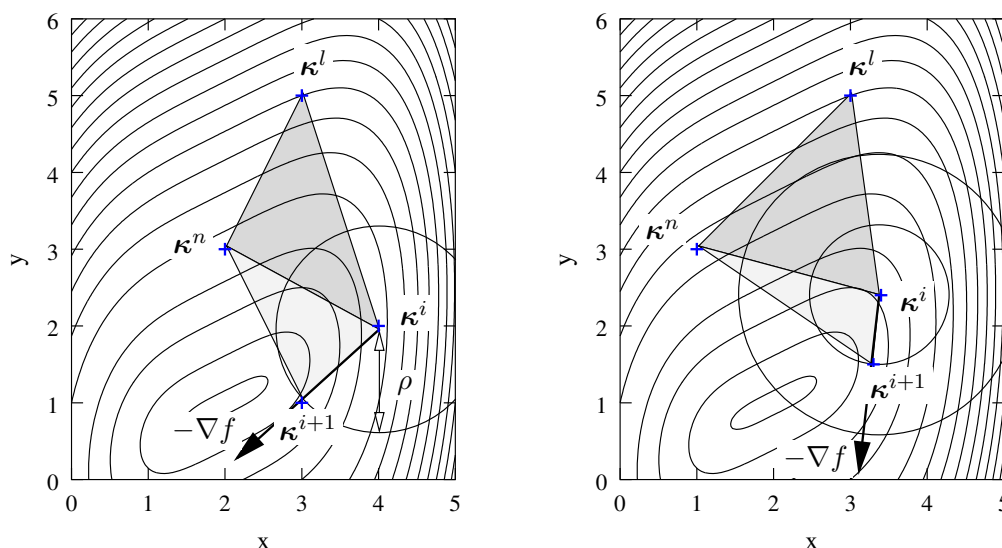


Abbildung 15: Darstellung zweier Minimierungsschritte für den Simplex Algorithmus. Links: Normaler Minimierungsschritt und rechts Minimierungsschritt mit Reduktion des Vertrauensbereichs.

Simplex Schritt

Sollte im Verlauf der Optimierung der Simplex zunehmend entarten, dann wird ein Simplex Schritt bevorzugt, der nicht unbedingt die Minimierung der Zielfunktion anstrebt, sondern versucht, die Form des Simplex zu verbessern. Hierzu wird der euklidische Abstand σ^j einer Ecke zur gegenüberliegenden Seite und die Länge der Kante η^j zwischen der aktuellen und bisher besten Ecke bestimmt. Der Simplex wird unverändert akzeptiert, falls

$$\left. \begin{array}{l} \sigma^j \geq \alpha \rho \\ \eta^j \leq \beta \rho \end{array} \right\} j = 1, \dots, n \quad \text{mit} \quad 0 < \alpha < 1 < \beta. \quad (3.51)$$

Falls dies nicht der Fall ist wird zu $\boldsymbol{\kappa}^{i+1}$ ein alternativer Vektor $\boldsymbol{\kappa}^\Delta$ generiert

$$\boldsymbol{\kappa}^\Delta = \boldsymbol{\kappa}^i \pm \gamma \rho \boldsymbol{v}^l, \quad (3.52)$$

der die Gestalt des Simplex verbessert. Der Vektor \boldsymbol{v}^l ist der Normaleneinheitsvektor auf die gegenüberliegende Fläche von $\boldsymbol{\kappa}^l$. Das Vorzeichen wird so gewählt, dass $\hat{\phi}(\boldsymbol{\kappa}^\Delta)$ minimal wird.

3.3.5. Skalieren

Die vorher besprochenen Newton und Quasi-Newton Methoden besitzen die Eigenschaft, Krümmungsbedingungen mit zu berücksichtigen und sind somit selbstskalierend. Die Methode des steilsten Abstiegs und die Simplex Methode besitzen diese Eigenschaft nicht und reagieren aus diesem Grund empfindlich auf eine schlechte Topologie der Zielfunktion. Dieses Problem tritt beispielsweise auf, wenn eine Zielfunktion ein enges und langgestrecktes Tal aufweist. Die Zielfunktion reagiert dann stark auf kleine Änderungen bezüglich einiger Komponenten des Parametervektors $\boldsymbol{\kappa}$, wohingegen sie völlig unempfindlich auf Änderungen anderer Komponenten ist. Ein weiterer Grund für eine schlechte Leistungsfähigkeit kann auch ein stark unterschiedliches Größenverhältnis der Parameter sein.

Im Fall des steilsten Abstiegs empfiehlt es sich die Parameter mit den Verhältnissen der Sensitivitäten der Funktion zu skalieren. Dies wird in Abbildung 16 anhand der Funktion $f(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + 10y^2)$ dargestellt. Bei der Skalierung der Parameter wird das exakte Verhältnis benutzt. Hierdurch wird mit der Methode des steilsten Abstiegs die Lösung in einem Schritt gefunden. Die Auswertung der Zielfunktion bleibt von dieser Transformation unbeeinflusst. Es gilt $f(\boldsymbol{\kappa}) = f(\mathbf{D}\bar{\boldsymbol{\kappa}})$. Nach erfolgreicher Optimierung bezüglich der transformierten Parameter werden diese mit $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{D}\bar{\boldsymbol{\kappa}}$ zurücktransformiert. Treten während der Optimierung starke Veränderungen in den Parametern auf, so empfiehlt es sich die Parameter mit den verbesserten Werten neu zu skalieren. Das hier beschriebene Vorgehen kann in NOCEDAL [91] nachgelesen werden.

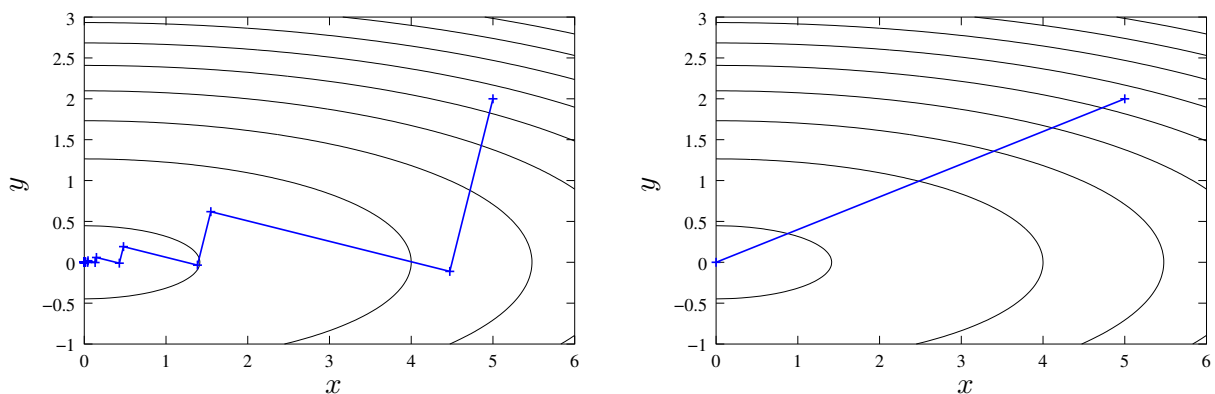


Abbildung 16: Iterationsschritte des steilsten Abstiegs ohne Skalierung (links) und mit Skalierung der Parameter durch das Verhältnis der Sensitivitäten der Zielfunktion bezüglich einer Änderung der Parameter (rechts).

Betrachten wir den Simplex Algorithmus aus Abschnitt 3.3.4, der im n -dimensionalen Parameterraum den ersten Simplex mit der selben Schrittweite in jeder Richtung generiert. Besitzen die Parameter stark unterschiedliche Größenordnungen, so bietet es sich an, diese jeweils mit ihrem Startwert auf 1 zu skalieren. Damit arbeitet das Simplex-Verfahren in einem skalierten Parameterraum und kann wesentlich effizienter sein. Durch Einführen einer Skalierungsmatrix \mathbf{D} , die eine Diagonalform aufweist, werden die Parameter transformiert. Üblicherweise wird ein Parameter mit seinem Startwert skaliert, so dass alle zu optimierenden Parameter Anfangs mit dem Wert 1 belegt sind.

$$\bar{\boldsymbol{\kappa}} = \mathbf{D}^{-1}\boldsymbol{\kappa} \quad (3.53)$$

Die Diagonalelemente der Skalierungsmatrix werden mit dem Startwert des Parameter-

vektors belegt, so dass gilt

$$\mathbf{D} = \text{diag}\{\kappa_i^{-1}\} \quad \text{für } i = 1, \dots, n. \quad (3.54)$$

Das Konvergenzverhalten der beiden oben genannten Methoden kann durch eine Skalierung stark beschleunigt werden. Das Zick-Zack Verhalten wird bei der Methode des steilsten Abstiegs verringert. Beim Simplex Verfahren neigt der Simplex nicht dazu schnell zu entarten. Somit bleibt der Vertrauensbereich lange groß und es ist eine bessere Konvergenzgeschwindigkeit zu beobachten.

3.4. Instabilitäten und deren Analyse

Die Parameteridentifikation als Minimierungsproblem von Fehlerquadratfunktionalen zeigt oft ein instabiles Verhalten. Mathematische Arbeiten, die sich mit Instabilitäten befassen sind unter anderem BANKS & KUNISCH [4], BAUMEISTER [7] und LOUIS [57]. Instabilitäten können als ein sehr flaches Fehlerfunktional in einer bestimmten Richtung interpretiert werden. Ein flaches Funktional kann über die Konditionszahl k der Hesse-Matrix oder Gauss-Newton Matrix identifiziert werden. Die Konditionszahl ist

$$k = \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}} \quad (3.55)$$

wobei $\lambda_i, i = 1, \dots, n_p$ die Eigenwerte sind. Ist das Problem schlecht konditioniert müssen Verfahren zur Regularisierung, wie beispielsweise das Levenberg-Marquardt Verfahren oder die Tikhonov Regularisierung angewendet werden.

Ursachen für Instabilitäten können in der Modellbildung oder in der Versuchsgestaltung liegen.

- Das Modell enthält lineare Abhängigkeiten und damit zu viele Materialparameter
- Die experimentellen Daten sind unzureichend, d.h. nicht alle physikalischen Phänomene werden aktiviert.

3.5. Testfunktion für Optimierungsalgorithmen

Die in den Abschnitten 3.3.2 und 3.3.4 beschriebenen Optimierungsmethoden werden auf die, in der Optimierungsliteratur SPELLUCCI [126] zitierte Rosenbrock-Funktion mit zwei Parametern angewendet. Anhand dieses Beispiels wird das unterschiedliche Verhalten der Optimierungsmethoden verdeutlicht.

Die Rosenbrock-Funktion ist charakterisiert durch ein langgestrecktes, gekrümmtes Tal, längs der Parabel $x_2 = x_1^2$. Die Funktion lautet

$$f(\mathbf{x}) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2. \quad (3.56)$$

Die einzige Minimalstelle befindet sich bei

$$\mathbf{x}^* = \begin{bmatrix} 1.0 \\ 1.0 \end{bmatrix} \quad \text{mit } f(\mathbf{x}^*) = 0.0. \quad (3.57)$$

Die Höhenlinien der Rosenbrock-Funktion sind in Abbildung 17 dargestellt, wobei im ersten Bild der Optimierungsverlauf mit der Simplex-Methode dargestellt ist. Im zweiten

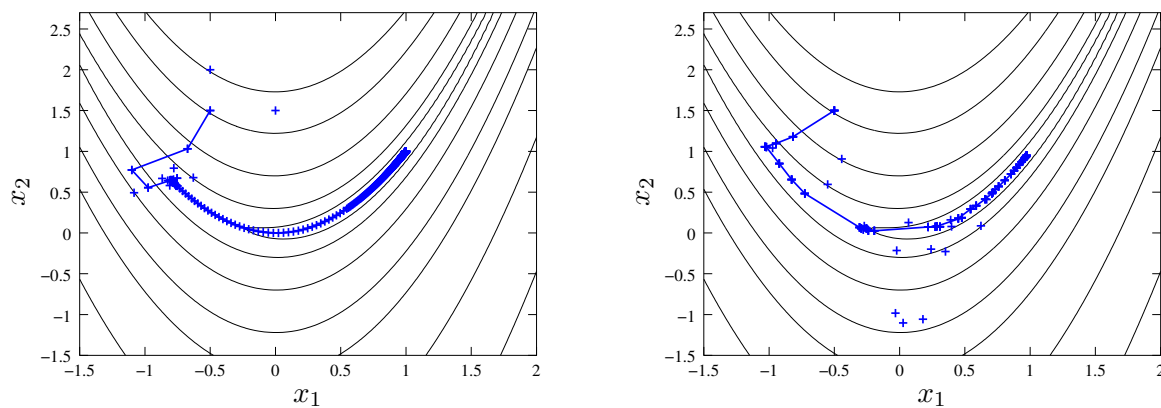


Abbildung 17: Darstellung der Rosenbrock-Funktion (3.56) durch ausgewählte Höhenlinien. Links: Suchweg für das Simplex-Verfahren und rechts der Suchweg für das SQP-Verfahren.

Bild der Abbildung 17 ist der Verlauf mit dem SQP-Verfahren dargestellt. Der Pfad verbindet jeweils die Parametersätze mit absteigender Zielfunktion. Die nicht verbundenen Punkte sind Funktionsauswertungen, die durch die Methode erforderlich sind, jedoch den Funktionswert nicht minimieren.

4. Einführung in die Parameteridentifikation

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit den Grundlagen der Parameteridentifikation und versucht die wichtigsten Begriffe, die im Zusammenhang mit der Parameteridentifikation stehen, zu klären. Insbesondere wird das direkte und das inverse Problem erläutert, und wie das inverse Problem in ein Minimierungsproblem überführt wird.

4.1. Allgemeines

Ingenieurmäßige Anwendungen erfordern die Simulation des Verformungs- und Versagensverhaltens von Materialien und Strukturen. Die Simulation beinhaltet Materialmodelle, die aus differentialalgebraischen Systemen bestehen, denen Konstanten, die sogenannten Materialparameter, zugrunde liegen. Um bei einer Simulation möglichst gute Vorhersagen treffen zu können, muss auf der Grundlage von vollständigen experimentellen Daten ein Materialmodell entwickelt werden, das die beobachteten Phänomene qualitativ beschreiben kann. Hierzu gehört das Aufstellen eines Modellkonzepts, das die Beobachtungsskale und die grundlegenden Phänomene bestimmt. Desweiteren müssen die beobachteten Phänomene mathematisch durch Differentialgleichungen beschrieben werden. Die Parameteridentifikation beschäftigt sich mit der Bestimmung der im Modell enthaltenen Materialparameter anhand eines Vergleichs von experimentellen und simulierten Daten. Ziel ist eine möglichst gute quantitative Übereinstimmung von Experiment und Simulation zu erreichen. Ist diese Übereinstimmung erreicht, ist das Modell verifiziert. Als letzter Schritt muss das Modell und die Anpassung hinsichtlich des Gültigkeitsbereichs untersucht werden. Dies erfolgt durch einen Vergleich von Simulation und Experiment bezüglich einer neuen Datenbasis, die nicht zur Identifikation genutzt wird.

Tabelle 4: Schritte der Parameteridentifikation.

1. *Modellkonzept:*
Beobachtungsskale festlegen (Makro, Meso, Mikro).
Grundlegende Phänomene charakterisieren (Nichtlinearität, Viskosität, Verfestigung, Temperatureffekte, Schädigung, ...).
Zeitlicher Rahmen, Kosten, Versuchsmöglichkeiten eingrenzen.
2. *Mathematische Modellbildung:*
Beschreibung der Phänomene durch Differentialgleichungen. Einführen der Materialparameter κ .
3. *Parameteridentifikation:*
Bestimmen der Materialparameter κ auf der Grundlage der Daten \mathcal{D}_1 .
4. *Verifikation:*
Untersuchung der Qualität des Modells bezüglich des Datensatzes \mathcal{D}_1 .
5. *Validation:*
Untersuchung des Gültigkeitsbereichs des Modells und der Parameter bezüglich weiterer Daten $\mathcal{D}_2 \neq \mathcal{D}_1$.

Als Voraussetzung um eine Parameteridentifikation durchführen zu können, wird ein Programm benötigt, das das direkte Problem lösen kann. Dies kann der in Kapitel 5.2 beschriebene Treiber Algorithmus für homogene Deformationszustände sein, oder ein Finite Elemente Programm zum Lösen eines Anfangsrandwertproblems, siehe Kapitel 6. Ferner wird ein Optimierungsprogramm benötigt, das ausgehend von einem aktuellen Parametervektor einen neuen generiert, der die Zielfunktion minimiert. Diese Optimierungswerkzeuge werden in Kapitel 3 beschrieben. Ein schematischer Ablaufplan zur Parameteridentifikation ist in der folgenden Abbildung 18 dargestellt.

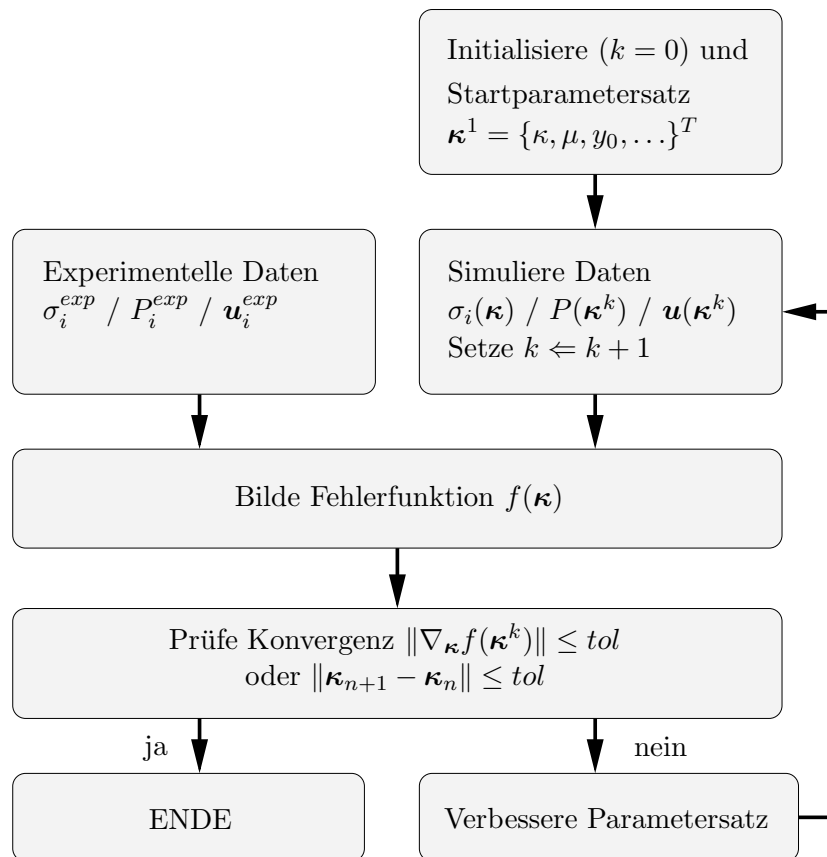


Abbildung 18: Ablaufdiagramm der Parameteridentifikation. Das Generieren eines verbesserten Parametervektors kann mit gradientenbasierten, gradientenfreien, deterministischen oder stochastischen Methoden durchgeführt werden. Einen Überblick über die Optimierungsmethoden gibt Kapitel 3 und Tabelle 1.

4.2. Physikalisch zugängliche Daten

Bei der klassischen Parameteridentifikation eindimensionaler Deformations- und Spannungszustände wird die grundlegende Annahme getroffen, dass eine gleichmäßige Spannungs- und Verzerrungsverteilung über den Querschnitt der Probe vorliegt. Diese Annahme ist sicherlich bei dem meisten Materialien in einem angemessenen Verzerrungsbereich gültig. Die Abbildung 18 verdeutlicht schematisch einen Probekörper unter Zugbeanspruchung, der sich unter der Last längt und gleichzeitig verjüngt. Bei einem solchen Versuch sind eine Reihe von Daten direkt zugänglich, andere Größen lassen sich daraus berechnen.

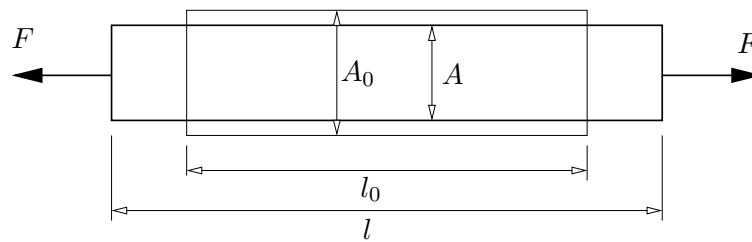


Abbildung 19: Homogenes Verhalten eines Probekörpers unter Zugbelastung mit Ausgangslänge l_0 und Ausgangsquerschnitt A_0 . Nach Anlegen der Kraft F verlängert sich die Probe auf die aktuelle Länge l und verjüngt sich auf den Querschnitt A ein.

- Durch die Ausgangslänge l_0 und die aktuelle Länge l kann die Verzerrung ε oder Streckung λ berechnet werden.

$$\varepsilon = \frac{l - l_0}{l_0} \quad \text{oder} \quad \lambda = 1 + \varepsilon \quad (4.1)$$

- Über die aktuelle Kraft F und die Ausgangsquerschnittsfläche A_0 kann die Spannung σ oder die ersten Piola–Kirchhoff Spannung P berechnet werden

$$\sigma = \frac{F}{A_0} \quad \text{oder} \quad P = \frac{F}{A_0} \quad (4.2)$$

- Die Zeit t kann direkt gemessen werden.
- Die Temperatur Θ kann direkt gemessen werden.

4.3. Versuchsdaten und Unsicherheiten

Die Versuchsplanung beschäftigt sich in systematischer Weise damit, die Zusammenhänge zwischen Eingangsgrößen (Ursache) und Ausgangsgrößen (Wirkung) zu untersuchen, um sinnvolle experimentelle Daten zu erhalten. Die Versuchsdaten sind mit Unsicherheiten versehen. Diese können in drei Arten unterteilt werden.

Rauschen: Das Rauschen der Daten entsteht durch Messfehler. Das Messsystem bestehend aus Messgrößenaufnehmer, Messgrößenverarbeitung und Messwertausgabe ist einer Vielzahl von Störgrößen unterworfen, die die Messdaten beeinflussen.

Streuen: Wird ein und der selbe Versuch mit augenscheinlich gleichen Versuchskörpern wiederholt, so führt dies jedoch zu unterschiedlichen Ergebnissen. Ursachen hierfür sind beispielsweise Inhomogenitäten in dem Probekörper, unterschiedliche Herstellungsbedingungen usw. Laut LEMAITRE UND CHABOCHE [56] liegt das Streuen der Daten in der Größenordnung von 1–5 % bei elastischen Verzerrungen, 10–15 % bei plastischen Verzerrungen und bei bis zu 1000 % bei Ermüdungsbruch durch Dauerbeanspruchung.

Unvollständigkeit: In der Praxis liegen bei allen Versuchsergebnissen unvollständige Daten vor. Der Grad der Unvollständigkeit kann jedoch unterschiedlich stark ausgeprägt sein und sich unterschiedlich stark auswirken. Betrachten wir die lineare Elastizitätstheorie, so ist es nicht möglich aus Schubversuchen den Kompressionsmodul zu identifizieren. Hier ist die Datenbasis unvollständig, da der Effekt der Kompression bei einem Schubtest überhaupt nicht aktiviert wird. Wird andererseits bei einem Zugversuch an einer metallischen Probe die Spannungs–Verzerrungs Kurve nur an wenigen diskreten Stellen gemessen, so

ist es trotzdem möglich die Anfangsfließspannung zu identifizieren, obwohl der Punkt des Fließbeginns nicht unbedingt gemessen wird. Hier ist also der Grad der Unvollständigkeit nicht so gravierend wie bei dem zuerst genannten Beispiel. In Kapitel 7.2.6 dieser Arbeit wird ein Beispiel zu unvollständigen Messdaten im Rahmen des virtuellen Testens gegeben.

4.4. Charakteristische Testabläufe

Von besonderer Bedeutung für eine sinnvolle Erarbeitung eines Modellkonzepts und für die stabile Identifikation der Materialparameter ist die sorgfältige Auswahl der Testabläufe. Nicht alle Testabläufe eignen sich um die materialtypischen Phänomene aufzuzeigen. Nachfolgend sind die gebräuchlichsten Testabläufe dargestellt, wobei diese in verzerungsgesteuerte und spannungsgesteuerte Versuche unterschieden werden.

Monotone Zugbelastung: Bei einer monotonen Zug- oder Druckbelastung kann lediglich zwischen linearem oder nichtlinearem Materialverhalten unterschieden werden.

Belastung mit anschließender Entlastung: Hier kann weiter beobachtet werden, ob die Entlastung auf demselben Pfad wie die Belastung erfolgt. Erfolgt die Entlastung auf einem anderen Pfad, so handelt es sich um ein dissipatives Materialverhalten.

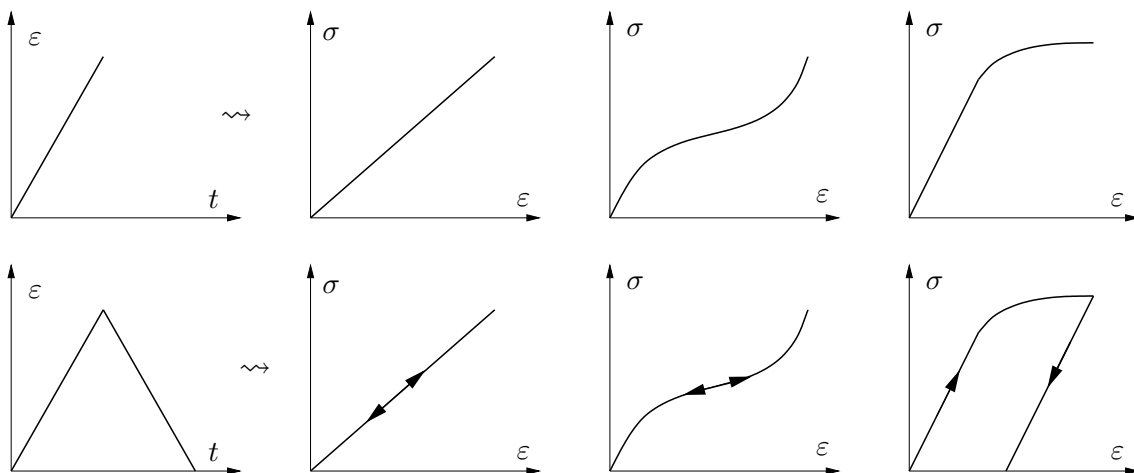


Abbildung 20: Oben: Monotone Zugbelastung. Beobachtet werden kann eine lineare oder nichtlineare Spannungsantwort. Unten: Be- und Entlastung. Bei dissipativen Materialien erfolgt die Entlastung auf einem anderen Pfad wie die Belastung.

Zyklische Belastung: Diese Art der Belastung dient dazu, Verfestigungseffekte zu charakterisieren.

Belastung mit unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten: Hier können viskose Effekte des Materials ausgemacht werden. Ändert sich die Spannungsantwort mit unterschiedlichen Verzerrungsgeschwindigkeiten, so enthält das Material viskose Eigenschaften.

Belastung mit konstanter Verzerrung: Bei dem sogenannten Relaxationsversuch wird das viskose Langzeitverhalten des Materials untersucht. Bei viskosen Materialien wird ein Abfallen der Spannung auf einen stationären Wert beobachtet.

Belastung mit konstanter Spannung: Der sogenannte Kriechversuch ist das Gegenstück zum Relaxationsversuch. Auch hier wird das Langzeitverhalten untersucht. Die Verzer-

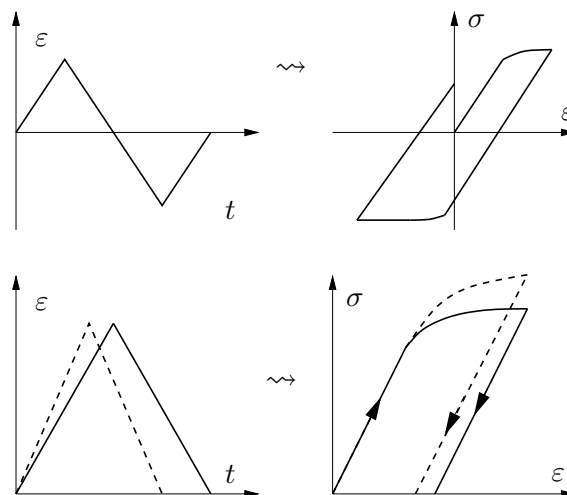


Abbildung 21: Oben: Zyklische Belastung. Beobachtet werden können Verfestigungseffekte wie isotrope oder kinematische Verfestigung. Unten: Belastung mit unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten. Es kann beobachtet werden, ob ratenabhängiges Verhalten vorliegt.

rungszunahme wird in drei Bereiche eingeteilt. *i*) Primäres Kriechen, *ii*) Sekundäres Kriechen und *iii*) Tertiäres Kriechen.

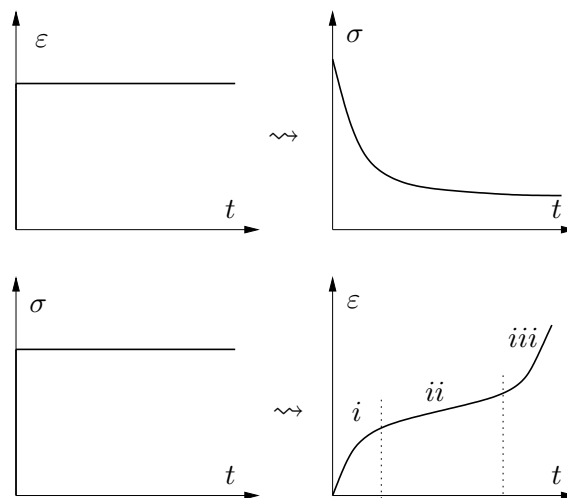


Abbildung 22: Oben: Relaxation. Beobachtet werden kann ein Abfallen der Spannung auf einen stationären Wert. Unten: Kriechversuch mit der Einteilung in *i*) primäres Kriechen, *ii*) sekundäres Kriechen und *iii*) tertiäres Kriechen.

Die gezeigten Abläufe können zum Aufbau eines komplexen Prüfprogramms beliebig zusammengefasst und kombiniert werden.

4.5. Das direkte Problem

Als direktes Problem wird das Lösen eines Anfangswert- oder Anfangsrandwertproblems bezeichnet. Hierbei sind die Materialparameter sowie die Geometrie, Randbedingungen und die Belastung gegeben. Als Ergebnis wird beispielsweise das Verschiebungsfeld oder die Spannungsantwort in einem bestimmten Punkt der Struktur bestimmt. Das direkte Problem kann folgendermaßen zusammengefasst werden.

Gegeben:	Gesucht:
<ul style="list-style-type: none"> ○ Materialmodell ○ Belastung ○ Materialparameter ○ Anfangsbedingungen 	<ul style="list-style-type: none"> ○ Spannungs- oder Verschiebungsantwort

Tabelle 5: Das direkte Problem.

Um dieses Vorgehen mathematisch zu erfassen, wird eine Modellfunktion $g(\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{f}, \mathbf{u})$ eingeführt. Diese Modellfunktion definiert bei gegebenen Eingangsgrößen \mathbf{f} und gegebenen Materialparametern $\boldsymbol{\kappa}$ die Ausgangsgröße \mathbf{u} . Das direkte Problem fordert somit die Berechnung von \mathbf{u}^* , so dass $g(\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{f}, \mathbf{u}) = 0$ für gegebene Werte von \mathbf{f} und $\boldsymbol{\kappa}$ gilt.

$$\boxed{\text{Finde } \mathbf{u}^*, \text{ so dass } g(\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{f}, \mathbf{u}) = 0 \text{ für gegebene } \boldsymbol{\kappa} \text{ und } \mathbf{f}} \quad (4.3)$$

4.6. Das inverse Problem der Parameteridentifikation

Wird formal die Antwort \mathbf{u} mit einem Eintrag der linken Seite in Tabelle 5 getauscht, entsteht ein inverses Problem. Wird beispielsweise die Systemantwort mit der Geometrie getauscht, entsteht das Problem der Topologieoptimierung wie es in Arbeiten von PEDERSEN [94] oder SIGMUND & TORQUATO [124] dargestellt ist. Im Fall der Parameteridentifikation wird die Systemantwort mit den Materialparametern vertauscht. Diese Art der inversen Problemstellung beschreibt die Berechnung der optimalen Materialparameter auf der Grundlage von gegebenen Modellinformationen, Belastung und Systemantwort. Siehe hierzu auch BANKS & KUNISCH [4], BARD [5], BAUMEISTER [7], BUI [18] und MAHNKEN [60].

Gegeben:	Gesucht:
<ul style="list-style-type: none"> ○ Materialmodell ○ Belastung ○ Spannungs- oder Verschiebungsantwort ○ Anfangsbedingungen 	<ul style="list-style-type: none"> ○ Materialparameter

Tabelle 6: Das inverse Problem der Parameteridentifikation.

Auf die oben eingeführte Modellfunktion g bezogen, lautet die inverse Problemstellung

$$\boxed{\text{Finde } \boldsymbol{\kappa}^*, \text{ so dass } g(\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{f}, \mathbf{u}) = 0 \text{ für gegebene } \mathbf{f} \text{ und } \mathbf{u}(\boldsymbol{\kappa}) = \mathbf{u}^{exp}.} \quad (4.4)$$

Die grafische Zusammenfassung in Abbildung 23 verdeutlicht die Unterschiede von direktem und inversem Problem. Dieses inverse Problem ist nach HADAMARD [35] in der Regel schlecht gestellt. Ist ein Problem gut gestellt, so erfüllte es drei Kriterien. Dies sind Existenz, Eindeutigkeit und Stabilität. Die Frage nach Existenz und Eindeutigkeit ist grundlegend für die Analyse der Annahmen des mathematischen Modells. Ist die Lösung nicht Eindeutig, besagt dies, dass die Datensätze der Experimente nicht genug Informationen enthalten, um alle im Modell enthaltenen Parameter zu bestimmen. Mit Hilfe der Stabilitätsanalyse muss untersucht werden, ob die Lösung für den Parametersatz kontinuierlich von den Eingangsdaten abhängen. Das Konzept von Hadamard besagt, dass

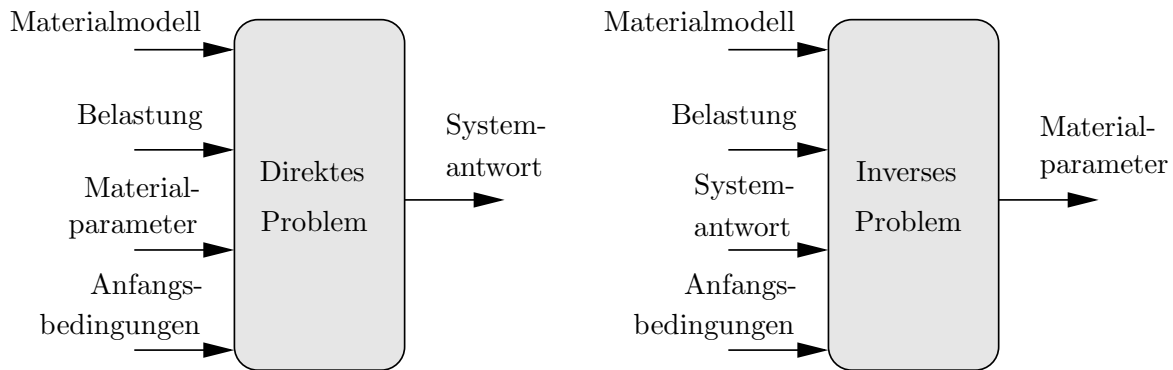


Abbildung 23: Gegenüberstellung von direktem Problem und inversem Problem der Parameteridentifikation.

eine kleine Änderung in den Eingangsdaten nur zu einer kleinen Veränderung der Lösung führen darf. Eine gute Übersicht der Schwierigkeiten bei inversen Fragestellungen ist in BAUMEISTER [7] aufgeführt. Im allgemeinen werden ausreichend experimentelle Daten vorliegen, so dass Gleichung (4.4) überbestimmt ist. Aus diesem Grund ist nicht zu erwarten, dass hier eine eindeutige Lösung bestimmt werden kann. Das schlecht gestellte Problem wird aus diesem Grund in ein Minimierungsproblem überführt, so dass eine optimale Anpassung der Simulationsdaten an die experimentell ermittelten Daten im Sinne einer Minimierung einer Fehlerfunktion vorgenommen wird.

4.7. Minimierung der Fehlerquadrate

In diesem Abschnitt wird die Zielfunktion aufgestellt, die es bei der Parameteridentifikation zu minimieren gilt. Dies wird hier am Beispiel eines verzerrungsgesteuerten Zugversuchs verdeutlicht. n_d beschreibt die Zahl der zur Verfügung stehenden experimentellen Daten. Jeder Streckung λ_i ist eine experimentell gemessene Spannung P_i^{exp} zugeordnet. Mit einem gegebenen Materialparametersatz $\boldsymbol{\kappa}$ kann zu jeder Streckung λ_i die zugehörige simulierte Spannung $P_i(\boldsymbol{\kappa})$ berechnet werden. Der Parametervektor $\boldsymbol{\kappa}$ kann Restriktionen unterworfen sein, die in dem Parameterraum \mathcal{P} zusammengefasst sind. Im weiteren wer-

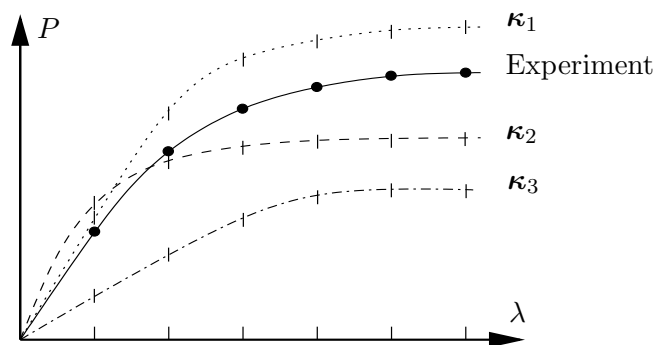


Abbildung 24: Darstellung der schematischen Spannungs-Verzerrungskurve eines Zugversuchs und Simulationen mit unterschiedlichen Materialparametern.

den, wie im vorherigen Kapitel, die zu vergleichenden Daten mit \mathbf{u} bezeichnet, so dass für Abbildung 24 die Gleichheit $P_i^{exp} = u_i^{exp}$ und $P_i(\boldsymbol{\kappa}) = u_i(\boldsymbol{\kappa})$ gilt. Die übliche Vorgehensweise ist die Gegenüberstellung von experimentell ermittelten Daten \mathbf{u}^{exp} und berechneten Daten $\mathbf{u}(\boldsymbol{\kappa})$ in einer geeigneten Norm. Die Norm in der hier der Fehler dargestellt wird

ist die sogenannte L_2 -Norm. Die Differenz zwischen Experiment und Simulation zu einem vergleichbaren Zeitpunkt t_k wird quadriert und anschließend über alle verfügbaren Datenpunkte n_d aufsummiert. Damit stellt sich das Fehlerquadrat-Minimierungsproblem zu

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{Finde } \boldsymbol{\kappa}^*, \text{ so dass } g(\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{f}, \mathbf{u}) = 0 \text{ für gegebene } \mathbf{f} \text{ und} \\ f(\boldsymbol{\kappa}) := \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_d} [u_i(\boldsymbol{\kappa}) - u_i^{exp}]^2 = \frac{1}{2} \|\mathbf{u}(\boldsymbol{\kappa}) - \mathbf{u}^{exp}\|_2^2 \rightarrow \min_{\boldsymbol{\kappa} \in \mathcal{P}}. \end{array}} \quad (4.5)$$

Wie in BARD [5] dargestellt, kann die Zielfunktion $f(\boldsymbol{\kappa})$ durch Einführen einer Wichtung verändert werden. Die Wichtungsmatrix \mathbf{W} hat diagonalgestalt und modifiziert die Zielfunktion in folgender Form.

$$f(\boldsymbol{\kappa}) := \frac{1}{2} \|\mathbf{W}(\mathbf{u}(\boldsymbol{\kappa}) - \mathbf{u}^{exp})\|_2^2 \rightarrow \min_{\boldsymbol{\kappa} \in \mathcal{P}} \quad (4.6)$$

Somit können Daten unterschiedlicher Größenordnungen mit gleichen Anteilen in die Fehlerfunktion eingehen. Daten unterschiedlicher Genauigkeit können nach dem jeweiligen Vertrauen in diese Daten gewichtet werden. Ferner kann eine Wichtung durch die spezielle Auswahl der Identifikationsstellen erfolgen. Identifikationsstellen werden in Bereichen angeordnet, die bei der Identifikation von besonderem Interesse sind. Im Gegensatz hierzu steht eine Gleichverteilung der Identifikationsstellen über den Zeitraum des Experiments.

4.8. Verifikation und Validation

Die Identifikation eines Modells besteht aus den Teilschritten der Strukturidentifikation, d.h. Formulierung der mathematischen Struktur und der Parameteridentifikation, d.h. Bestimmung der Werte der Materialkonstanten. Nachfolgend sollte die Glaubwürdigkeit und das Vertrauen in das Modell hergestellt werden. In diesem Zusammenhang sind die Begriffe Verifikation und Validation aus der Systemtheorie bekannt. Es wird die Darstellung von BUB & LUGNER [17] verwendet.

Verifikation

Bei der Verifikation wird die Frage nach der Korrektheit gestellt. Für die Parameteridentifikation kann die Frage nach der Korrektheit bezüglich des Modellkonzepts, der Modellbildung, der Identifikation und der Simulationsdaten gestellt werden. Bei all diesen Fragestellungen muss ein gewisses Akzeptanzniveau festgelegt werden. Zur Verifikation der Simulationsdaten werden diese den experimentellen Daten gegenübergestellt. Da diese Datenbasis bereits bei der Modellentwicklung herangezogen wurde, sind die Datenbasen von Modell und Experiment voneinander abhängig. Ist eine akzeptable Übereinstimmung der Datenbasen erreicht, gilt das Modell als verifiziert.

Validation

Bei der Validation erfolgt die Überprüfung des Modells mit einer zusätzlichen Datenbasis, die bei der Entwicklung und Identifikation des Modells nicht berücksichtigt wird. Somit sind die zu vergleichenden Datenbasen unabhängig. Bei der Validation wird somit die Frage nach dem Gültigkeits- oder Anwendungsbereich gestellt. Auch hier muss ein Akzeptanzniveau festgelegt werden.

4.9. Prüfeinrichtungen und Messverfahren

In diesem Abschnitt wird die verwendete Prüfmaschine und die Messverfahren, die zur Bestimmung der experimentellen Datensätze verwendet werden, vorgestellt. Dabei handelt es sich um eine servohydraulische Zug-Druck Prüfmaschine, einen Dehnungsaufnehmer, und ein optisches Messverfahren zur Bestimmung von zwei- oder dreidimensionalen Verschiebungsfeldern.

4.9.1. Servohydraulische Prüfmaschine

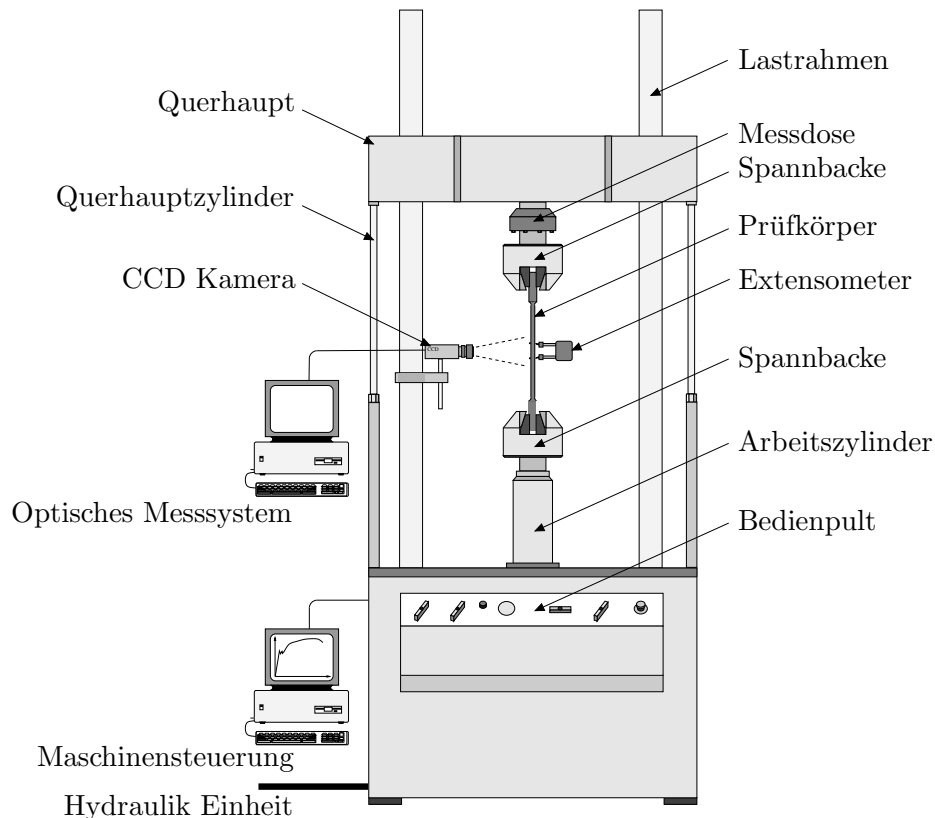


Abbildung 25: Schematisch Darstellung der MTS Prüfmaschine und der optischen Messeinrichtung.

Alle Versuche werden auf einer servohydraulischen Prüfmaschine mit 100 kN Nennlast durchgeführt. Das Gerät stammt von der Firma MTS aus Berlin und ist in Abbildung 25 dargestellt. In dieser Abbildung ist ebenfalls das entkoppelte Messsystem dargestellt, mit dem die Oberflächenverschiebungsfelder aufgenommen werden können. Hierauf wird nicht näher eingegangen. Eine ausführliche Beschreibung dieser Prüfeinrichtung ist in MIEHE & SCHEDAY [83] gegeben. Die Prüfmaschine ist so ausgestattet, dass kraftgesteuerte, traversenweggesteuerte als auch dehnungsgesteuerte Versuche durchgeführt werden können. Die Aufzeichnung von Zeit, Kraft, Dehnung und Traversenweg werden durch ein vorzugebendes Zeitintervall gesteuert.

4.9.2. Messaufbau für homogene Proben

Die grundlegende Annahme bei der Durchführung von eindimensionalen Versuchen ist homogene Verteilung von Spannungen und Verzerrungen über den Querschnitt der Probe. Dies ermöglicht die Bestimmung von Verzerrungen über einen an der Probe angebrachten

Weglängenmesser als Quotient aus Längenänderung und Ausgangslänge. Durch vorheriges Bestimmen des Ausgangsquerschnitts A_0 der Probe kann dann über die gemessene Kraft F die nominelle Spannung $P = \frac{F}{A_0}$ bestimmt werden. Somit stehen die für eine Identifikation notwendigen Daten zur Verfügung. Dies sind im einzelnen, die Zeit, die Verzerrung und die Spannung.

Schnürt sich beispielsweise eine Metallprobe bei fortschreitender Deformation ein, so handelt es sich um einen inhomogenen Deformationszustand. Die Erfassung der experimentellen Daten muss dann mit Methoden aus dem folgenden Abschnitt behandelt werden.

4.9.3. Messaufbau für inhomogene Proben

Optische Feldmessmethoden spielen in der Entwicklung komplizierter Bauteile und neuer Werkstoffe eine wichtige Rolle. Das am Institut für Mechanik (Bauwesen) zur Verfügung stehende Objektrasterverfahren der Firma GOM aus Braunschweig ist eine berührungsfreie Messmethode, die keinerlei Zwänge auf den Probekörper ausübt. Das Grundprinzip des Objektrasterverfahrens ist die Aufnahme eines Objektes vor und während der Belastung und die Weiterverarbeitung dieser Bilder mit Methoden der digitalen Bildverarbeitung. Dies ist schematisch für die Bestimmung zweidimensionaler Verschiebungsfelder in Abbildung 26 dargestellt. Dieses Konzept beinhaltet einen einheitlichen flächenorientier-

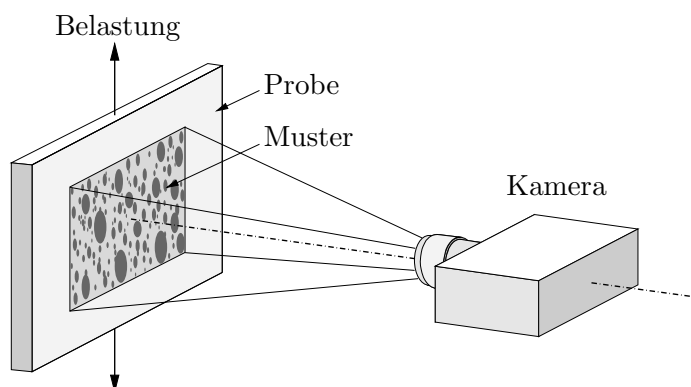


Abbildung 26: Optisches Messverfahren mit der Objektrastermethode.

ten Ansatz, die die Bestimmung von Punktkoordinaten vor und während der Belastung, die Berechnung von Verschiebungsfeldern durch Differenzenbildung und die Berechnung von Verschiebungsfeldern mittels Interpolation zusammenfasst. Dies ist ausführlich in WINTER [134] dargestellt.

5. Parameteridentifikation axialer Deformations- und Spannungszustände

5.1. Aufbau der Zielfunktion für eindimensionale Versuche

5.1.1. Zielfunktion für verzerrungsgesteuerte Versuche

Basierend auf der Methode der Minimierung der Fehlerquadrate muss bei Versuchen eine Vergleichbarkeit von experimentellen Daten P^{exp} und simulierten Daten $P(\boldsymbol{\kappa})$ vorliegen. Ein direkter Vergleich dieser Daten ist im allgemeinen nicht möglich, da die experimentellen Daten keine Untermenge der Simulationsdaten darstellen. Es gilt $P^{exp} \not\subset P(\boldsymbol{\kappa})$. Mit der Einführung eines Projektionsoperators \mathcal{M} , siehe BANKS & KUNISCH [4], ist es möglich den Raum der Simulationsdaten in den Raum der experimentellen Daten zu überführen.

$$\mathcal{M} : P \rightarrow P^{exp} \quad , \quad \mathcal{M}P(\boldsymbol{\kappa}) \in P^{exp} \quad (5.1)$$

Ausgehend von den experimentellen Daten werden n Stützstellen über die Zeitdauer T des Experiments festgelegt. Die Zeitpunkte der Stützstellen werden mit t_k bezeichnet, wobei $t_k \in [0, T]$ mit $k = 1 \dots n$ gilt. Da im allgemeinen das Ergebnis der Simulation nicht zu diesen Zeitpunkten t_k vorliegt wird der in (5.1) eingeführte Projektionsoperator \mathcal{M} als eine Interpolation betrachtet, der die Simulationenwerte der Spannungen $P_n(\boldsymbol{\kappa})$ und $P_{n+1}(\boldsymbol{\kappa})$ auf den diskreten Zeitpunkt t_k des Experiments abbildet. Dies gilt wenn der Zeitpunkt eines experimentellen Datenpunktes im Intervall zweier Simulationspunkte liegt, also wenn gilt $t_k \in [t_n, t_{n+1}]$. Die Umsetzung des Projektionsoperators führt zu der Interpolationsvorschrift

$$P_k(\boldsymbol{\kappa}) := \frac{t_{n+1} - t_k}{t_{n+1} - t_n} P_n(\boldsymbol{\kappa}) + \frac{t_k - t_n}{t_{n+1} - t_n} P_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}) \quad (5.2)$$

Diese lineare Interpolation ist in der nachfolgenden Abbildung 27 verdeutlicht. Sind diese

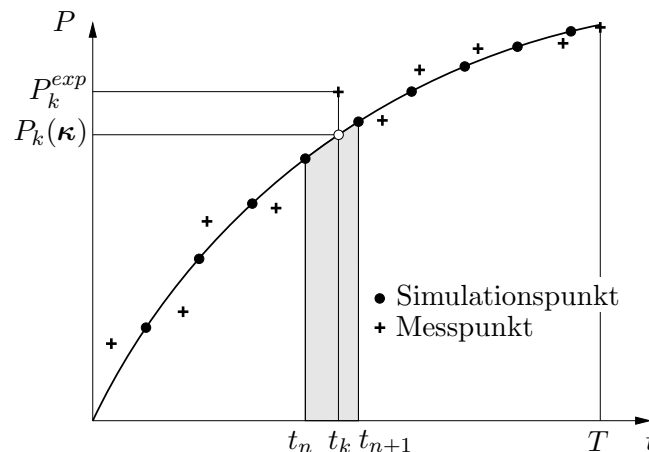


Abbildung 27: Interpolation der Spannungen $P_n(\boldsymbol{\kappa})$ und $P_{n+1}(\boldsymbol{\kappa})$ der Simulation auf den Zeitpunkt t_k des Experiments. Damit sind die Spannungen $P_k(\boldsymbol{\kappa})$ und P_k^{exp} vergleichbar.

vergleichbaren Spannungen bereitgestellt kann die Fehlerquadratfunktion für homogene Deformationen aufgestellt werden.

$$f(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n W_k [P_k(\boldsymbol{\kappa}) - P_k^{exp}]^2 \rightarrow \min. \quad (5.3)$$

Zu jedem Zeitpunkt t_k kann noch zusätzlich ein Wichtungsfaktor W_k angegeben werden. Standardmäßig ist dieser Wert auf 1 gesetzt. Anspruchsvollere Identifikationen erfordern jedoch, dass diese Wichtungsfaktoren auch gezielt gesetzt werden müssen.

5.1.2. Zielfunktion für spannungsgesteuerte Versuche

Im Gegensatz zu den verzerrungsgesteuerten Versuchen, bei denen die Spannungen gemessen werden, hier die Verzerrung als Ergebnis betrachtet. Es findet hier rein formal eine Vertauschung von Ein- und Ausgangsgrößen statt. Damit lautet die Interpolationsvorschrift

$$F_k(\boldsymbol{\kappa}) := \frac{t_{n+1} - t_k}{t_{n+1} - t_n} F_n(\boldsymbol{\kappa}) + \frac{t_k - t_n}{t_{n+1} - t_n} F_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}). \quad (5.4)$$

Sind diese vergleichbaren Deformationen bereitgestellt kann die Fehlerquadratfunktion für homogene spannungsgesteuerte Versuche über die axiale Deformation aufgestellt werden.

$$f(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n W_k [F_k(\boldsymbol{\kappa}) - F_k^{exp}]^2 \rightarrow \min. \quad (5.5)$$

Auch hier wird ein Wichtungsfaktor eingeführt für den die analogen Aussagen wie im vorherigen Abschnitt gelten.

5.2. Treiber für eindimensionale Zug- und Druck-Versuche

Ziel ist es, allgemein dreidimensional formulierte Materialmodelle zur Simulation spezieller Spannungs- oder Deformationszustände nutzen zu können, ohne diese Materialmodelle modifizieren zu müssen. Solche speziellen Spannungs- oder Deformationszustände sind beispielsweise der einaxige Zug, die einfache Scherung oder der Äquibiaxialtest. Hier wird das Augenmerk auf die eindimensionale Zug- Druckbeanspruchung gerichtet, da diese Beanspruchung den Messdaten der in Abschnitt 4.9.1 beschriebenen Universalprüfmaschine entspricht.

5.2.1. Treiber für deformationsgesteuerte Prozesse

Der betrachtete Treiberalgorithmus erlaubt die Verwendung allgemein dreidimensional formulierter, deformationsgetriebener Materialmodelle zur Berechnung eindimensionaler Spannungszustände.

In einem globalen kartesischen Koordinatensystem mit den Basisvektoren $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ wird bei einer vorgegebenen axialen Deformation

$$F_{n+1} := F_{11}(t_{n+1}) \quad (5.6)$$

die axiale Spannung in \mathbf{e}_1 -Richtung berechnet.

$$P_{n+1} := P_{11}(t_{n+1}) \quad (5.7)$$

Der Treiberalgorithmus ist so zu gestalten, dass eine Auswertung des dreidimensional formulierten Materialmodells das gesuchte Ergebnis P_{n+1} liefert. Die Vorgabe der axialen Deformation F_{n+1} und die gesuchte Spannungsantwort P_{n+1} legen eine Partitionierung des Deformations- und Spannungstensors in einen axialen Anteil und Queranteile nahe.

$$\mathbf{F}_{n+1} = F_{n+1} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \bar{\mathbf{F}}_{n+1} \quad \text{und} \quad \mathbf{P}_{n+1} = P_{n+1} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \bar{\mathbf{P}}_{n+1} \quad (5.8)$$

Für den reinen eindimensionalen Spannungszustand ist die Gleichgewichtsnebenbedingung

$$\mathbf{R}_{n+1} := \bar{\mathbf{P}}_{n+1} = \mathbf{0} \quad (5.9)$$

für die Querspannungen $\bar{\mathbf{P}}_{n+1}$ zu erfüllen. Der Treiberalgorithmus hat die Querdeformationen $\bar{\mathbf{F}}_{n+1}$ so zu bestimmen, dass bei vorgegebener axialer Deformation F_{n+1} die Nebenbedingung (5.9) erfüllt ist. Für allgemeine nichtlineare algorithmische Materialfunktionen (2.76) erfolgt die Erfüllung der Gleichgewichtsnebenbedingung (5.9) im Rahmen einer Newton-Iteration, die auf der konsistenten Linearisierung (2.77) des Materialmodells basiert. Da zur Zeit t_{n+1} die axiale Deformation F_{n+1} vorgegeben ist, gilt $\Delta \mathbf{F}_{n+1} \equiv \Delta \bar{\mathbf{F}}_{n+1}$ und wir erhalten die Iterationsgleichung

$$\mathbf{R}_{n+1} + \Delta \mathbf{R}_{n+1} = \bar{\mathbf{P}}_{n+1} + \bar{\mathbb{A}}_{n+1} : \Delta \bar{\mathbf{F}}_{n+1} = \mathbf{0}. \quad (5.10)$$

Dabei ist $\bar{\mathbb{A}}_{n+1} := \partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1} / \partial \bar{\mathbf{P}}_{n+1}$ die Partition der in Gleichung (2.78) definierten konsistenten Tangentenmoduli \mathbb{A} assoziiert zu den Querspannungen $\bar{\mathbf{P}}_{n+1}$. Umstellen der Newton-Typ Iterationsgleichung liefert die Aufdatierungsvorschrift für die Querdeformationen

$$\boxed{\bar{\mathbf{F}}_{n+1} \leftarrow \bar{\mathbf{F}}_{n+1} + \Delta \bar{\mathbf{F}}_{n+1} = \bar{\mathbf{F}}_{n+1} + \bar{\mathbb{A}}_{n+1}^{-1} : \bar{\mathbf{P}}_{n+1}} \quad (5.11)$$

die in jedem Iterationsschritt die dreidimensional formulierte Materialbox (2.76) und (2.78) bei festgehaltener axialer Deformation F_{n+1} auswertet. Die Iteration wird durchgeführt, bis das Konvergenzkriterium

$$\|\mathbf{R}_{n+1}\| \leq tol \quad (5.12)$$

mit $tol \ll 1$ erfüllt ist. Nach der Berechnung der axialen Spannung P_{n+1} mittels Treiberalgorithmus erfolgt die Umspeicherung der Geschichtsvariablen $\mathcal{I}_n \leftarrow \mathcal{I}_{n+1}$ und der Erhöhung der Zeit $t_{n+1} \leftarrow t_{n+1} + \Delta t$ mit neuer Vorgabe der axialen Deformation F_{n+1} . Die Tabelle 7 fasst den Treiberalgorithmus zusammen.

5.2.2. Treiber für spannungsgesteuerte Prozesse

Zur Simulation spannungsgesteuerter axialer Prozesse wie beispielsweise Kriechprozesse, muss der zuvor vorgestellte Treiber modifiziert werden. Hier wird zu einer vorgegebenen axialen Spannung

$$P_{n+1} := P_{11}(t_{n+1}) \quad (5.13)$$

die axiale Deformation

$$F_{n+1} := F_{11}(t_{n+1}) \quad (5.14)$$

bestimmt. Der Treiberalgorithmus muss so gestaltet werden, dass eine iterative Auswertung des dreidimensionalen Materialmodells (2.76) und (2.78) die gesuchte axiale Deformation liefert. Für einen reinen eindimensionalen Spannungszustand ist wiederum eine Gleichgewichtsnebenbedingung zu erfüllen.

$$\mathbf{R}_{n+1} := \mathbf{P}_{n+1} - P_{n+1} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 = \mathbf{0} \quad (5.15)$$

Tabelle 7: Axialer Treiber für deformationsgesteuerte Zug- Drucktests.

1. Gegeben ist $\{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}$ zum Zeitpunkt t_n und $F_{n+1} = F_{11}(t_{n+1})$ zur Zeit t_{n+1} .
Setze Querdeformation zu $\bar{\mathbf{F}}_{n+1} = \bar{\mathbf{F}}_n$.

2. Berechne die totale Deformation

$$\mathbf{F}_{n+1} = F_{n+1} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \bar{\mathbf{F}}_{n+1}$$

3. Berechne die algorithmischen Spannungen und Moduli durch Auswerten des dreidimensionalen Materialgesetzes.

$$\mathbf{P}_{n+1} = \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{F}_{n+1}; \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}) \quad \text{und} \quad \mathbb{A}_{n+1} = \partial_{\mathbf{F}_{n+1}} \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{F}_{n+1}; \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\})$$

4. Partitioniere die Spannungen und Moduli bezüglich der Queranteile

$$\bar{\mathbf{P}}_{n+1} = \mathbf{P}_{n+1} - P_{n+1} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 \quad , \quad \bar{\mathbb{A}}_{n+1} = \partial_{\bar{\mathbf{F}}_{n+1}} \bar{\mathbf{P}}_{n+1}$$

5. Datiere Querdeformation auf

$$\bar{\mathbf{F}}_{n+1} \Leftarrow \bar{\mathbf{F}}_{n+1} - \bar{\mathbb{A}}_{n+1}^{-1} : \bar{\mathbf{P}}_{n+1}$$

6. Prüfe Konvergenz: Für $(\|\bar{\mathbf{P}}_{n+1}\| > tol)$ gehe nach 2.

Der Treiberalgorithmus hat unter der Vorgabe der axialen Spannung P_{n+1} die totale Deformation \mathbf{F}_{n+1} so zu bestimmen, dass die Nebenbedingung (5.15) gilt. Diese Bedingung wird wiederum iterativ gelöst, d.h. im Rahmen einer Newton-Iteration, die auf der konsistenten Linearisierung des Materialmodells (2.77) basiert.

$$\mathbf{R}_{n+1} + \Delta \mathbf{R}_{n+1} = \mathbf{R}_{n+1} + \mathbb{A}_{n+1} : \Delta \mathbf{F}_{n+1} = \mathbf{0} \quad (5.16)$$

Umstellen liefert die Aufdatierungsvorschrift für die gesamte Deformation

$$\boxed{\mathbf{F}_{n+1} \Leftarrow \mathbf{F}_{n+1} + \Delta \mathbf{F}_{n+1} = \mathbf{F}_{n+1} + \mathbb{A}_{n+1}^{-1} : \mathbf{R}_{n+1}} \quad (5.17)$$

Die Iteration wird durchgeführt bis das Konvergenzkriterium

$$\|\mathbf{R}_{n+1}\| \leq tol \quad (5.18)$$

mit $tol \ll 1$ erfüllt ist. Danach erfolgt die Umspeicherung der Geschichtsvariablen $\mathcal{I}_n \Leftarrow \mathcal{I}_{n+1}$ und die Erhöhung des Zeitschrittes $t_{n+1} \Leftarrow t_{n+1} + \Delta t$ mit einer neuen Vorgabe der axialen Spannung P_{n+1} . Tabelle 8 enthält eine Zusammenfassung des Algorithmus.

5.2.3. Steuerung des Treibers

Um komplizierte Prüfprogramme simulieren zu können muss dem Treiberalgorithmus zu jedem Zeitpunkt t_{n+1} die zugehörige Deformation F_{n+1} bei verzerrungsgesteuerten Experimenten, oder die zugehörige Spannung P_{n+1} bei deformationsgesteuerten Experimenten

Tabelle 8: Axialer Treiber für spannungsgesteuerte Zug- Drucktests.

1. Gegeben ist $\{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}$ zum Zeitpunkt t_n und $P_{n+1} = P_{11}(t_{n+1})$ zur Zeit t_{n+1} .
Setze Deformation zu $\mathbf{F}_{n+1} = \mathbf{F}_n$.

2. Berechne die algorithmischen Spannungen und Moduli durch Auswerten des dreidimensionalen Materialgesetzes.

$$\mathbf{P}_{n+1} = \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{F}_{n+1}; \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}) \quad \text{und} \quad \mathbb{A}_{n+1} = \partial_{\mathbf{F}_{n+1}} \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{F}_{n+1}; \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\})$$

3. Berechne das Residuum

$$\mathbf{R}_{n+1} := \mathbf{P}_{n+1} - P_{n+1} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1$$

4. Datiere totale Deformation auf

$$\mathbf{F}_{n+1} \leftarrow \mathbf{F}_{n+1} - \mathbb{A}_{n+1}^{-1} : \mathbf{R}_{n+1}$$

5. Prüfe Konvergenz: Für ($\|\mathbf{R}_{n+1}\| > tol$) gehe nach 2.

vorgegeben werden. Diese komplexen Prüfprogramme werden durch ein Aneinanderfügen von einfachen Funktionen realisiert. Dabei kommen Rampenfunktionen, Haltefunktionen und zyklische Funktionen zum Einsatz. Diese Lastfunktionen sind der Abbildung 28 zu entnehmen. Die aus dem Simulationsablauf ermittelte Deformation oder Spannung

$$F_{11} = \hat{F}_{11}(t) \quad , \quad P_{11} = \hat{P}_{11}(t) \quad (5.19)$$

wird an den Treiberalgorithmus Tabelle 7 für deformationsgesteuerte Prozesse oder an den Algorithmus in Tabelle 8 für spannungsgesteuerte Prozesse übergeben.

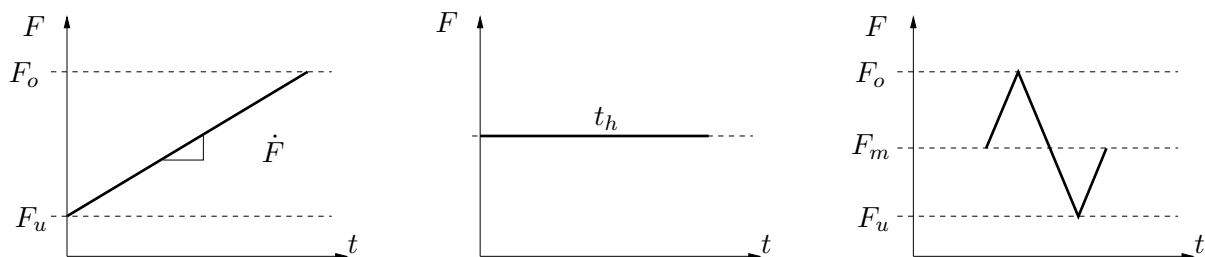


Abbildung 28: Lastfunktionen zur Steuerung der Deformation $F_{11} = \hat{F}_{11}(t)$. Durch die Kombination der Module Rampenfunktion, Haltefunktion und Zyklenfunktion lassen sich beliebige Prozessführungen konstruieren. Die Deformation F kann formal durch die Spannung P für spannungsgesteuerte Prozesse ersetzt werden.

5.2.4. Analytische Sensitivitätsanalyse deformationsgetriebener Prozesse

Bei der Anwendung gradientenbasierter Optimierungsverfahren werden die Sensitivitäten der Zielfunktion $f(\boldsymbol{\kappa})$ bezüglich der Materialparameter benötigt. Diese berechnen sich zu

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}) = \sum_{k=1}^n [P_k(\boldsymbol{\kappa}) - P_k^{exp}] \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} P_k(\boldsymbol{\kappa}). \quad (5.20)$$

Einerseits ist in Gleichung (5.20) die Differenz zwischen simulierten und experimentellen Spannungen und andererseits der Gradient der axialen Spannungen P_{n+1} bezüglich der zu optimierenden Materialparameter $\boldsymbol{\kappa}$ enthalten. Analog zur Interpolation der Spannungen (5.2) erhalten wir den Gradienten der Spannung an der Stützstelle k durch eine lineare Interpolation der Gradienten $\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} P_n(\boldsymbol{\kappa})$ und $\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} P_{n+1}(\boldsymbol{\kappa})$.

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} P_k(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{t_{n+1} - t_k}{t_{n+1} - t_n} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} P_n(\boldsymbol{\kappa}) + \frac{t_k - t_n}{t_{n+1} - t_n} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} P_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}) \quad (5.21)$$

Im Weiteren werden, ausgehend vom axialen Treiber deformationsgesteuerter Prozesse, die in Gleichung (5.20) dargestellten Gradienten der axialen Spannung bezüglich der Materialparameter $\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} P_{n+1}(\boldsymbol{\kappa})$ berechnet. Es wird davon ausgegangen, dass die axiale Spannung P_{n+1} bei gegebener axialer Deformation F_{n+1} vorliegt. Die Querdeformation $\bar{\mathbf{F}}_{n+1}$ ist bei bekannter Deformation \mathbf{F}_n und bekannten Geschichtsvariablen \mathcal{I}_n über eine Iterationschleife berechnet.

$$P_{n+1} = \hat{P}(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}; F_{n+1}, \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}) \quad (5.22)$$

Die Spannung P_{n+1} und die Querdeformation $\bar{\mathbf{F}}_{n+1}$ ist dabei das Ergebnis der Gleichgewichtsiteration, die eine Abhängigkeit von den Materialparametern $\boldsymbol{\kappa}$ aufweist.

$$P_{n+1} = \hat{P}(\boldsymbol{\kappa}, \bar{\mathbf{F}}_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}); F_{n+1}, \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}) \quad (5.23)$$

Die Spannungen in Querrichtung $\bar{\mathbf{P}}_{n+1}$ lassen sich ebenfalls in algorithmischer Schreibweise darstellen. Es wird derselbe funktionale Zusammenhang unterstellt. Die Querspannungen müssen der Gleichgewichtsnebenbedingung $\bar{\mathbf{P}}_{n+1} = \mathbf{0}$ genügen.

$$\bar{\mathbf{P}}_{n+1} = \hat{\mathbf{P}}(\boldsymbol{\kappa}, \bar{\mathbf{F}}_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}); F_{n+1}, \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}) = \mathbf{0} \quad (5.24)$$

Betrachten wir nun die Sensitivität der axialen Spannung im Intervall $[t_n, t_{n+1}]$ bei eingefrorener axialer Deformation F_{n+1} und Geschichtsvariablen $\{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}$, dann lässt sich diese Sensitivität bezüglich der Materialparameter schreiben zu

$$\frac{dP_{n+1}}{d\boldsymbol{\kappa}} = \frac{\partial \hat{P}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} + \frac{\partial \hat{P}}{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}} : \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \quad (5.25)$$

Der Ausdruck $\partial \hat{P} / \partial \bar{\mathbf{F}}$ ist die Partitionierung des bereits berechneten Tangentenmoduls \mathbb{A}_{n+1} aus dem Treiberalgorithmus in der Form

$$\tilde{\mathbb{A}}_{n+1} := \frac{\partial \hat{P}}{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}} \quad (5.26)$$

Der Gradient $\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1} / \partial \boldsymbol{\kappa}$ lässt sich aus der Gleichgewichtsbedingung für die Querspannungen berechnen. Für die die Sensitivität der Querspannungen ergibt sich aus (5.24)

$$\frac{d\bar{\mathbf{P}}_{n+1}}{d\boldsymbol{\kappa}} = \frac{\partial \hat{\mathbf{P}}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{P}}}{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}} : \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} = \mathbf{0} \quad (5.27)$$

mit der weiteren Partitionierung des Tangentenmoduls

$$\bar{\mathbb{A}}_{n+1} := \frac{\partial \hat{\mathbf{P}}}{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}}. \quad (5.28)$$

Unter Berücksichtigung, dass Gleichung (5.27) für beliebige $d\boldsymbol{\kappa}$ gelten muss, ergibt sich der Ausdruck für die partiellen Ableitungen der Querdeformation nach den Materialparametern zu

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} = -\bar{\mathbb{A}}_{n+1}^{-1} : \frac{\partial \hat{\mathbf{P}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \quad (5.29)$$

Durch Einsetzen von (5.29) mit den Partitionierungen (5.26) in (5.25) berechnen sich die gesuchten Gradienten der axialen Spannung P_{n+1} nach den Materialparametern $\boldsymbol{\kappa}$ zu

$$\boxed{\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} P_{n+1} = \frac{\partial \hat{P}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} - \tilde{\mathbb{A}}_{n+1} : \left[\bar{\mathbb{A}}_{n+1}^{-1} : \frac{\partial \hat{\mathbf{P}}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \right]} \quad (5.30)$$

für einen konvergierten Zeitpunkt des Treiberalgorithmus aus Tabelle 7.

Wird eine übliche Konvention zur Abspeicherung von Tensoren in Vektoren zugrunde gelegt, so lassen sich die hier benötigten Partitionierungen des Tangentenmoduls \mathbb{A}_{n+1} folgendermaßen ausdrücken.

$$\tilde{\mathbb{A}} = [\mathbb{A}_{1122}, \mathbb{A}_{1133}, \mathbb{A}_{1112}, \mathbb{A}_{1123}, \dots, \mathbb{A}_{1131}] \quad (5.31)$$

$$\bar{\mathbb{A}}_{n+1} = \begin{bmatrix} \mathbb{A}_{2222} & \mathbb{A}_{2233} & \mathbb{A}_{2212} & \mathbb{A}_{2223} & \cdots & \mathbb{A}_{2231} \\ \mathbb{A}_{3322} & \mathbb{A}_{3333} & \mathbb{A}_{3312} & \mathbb{A}_{3323} & \cdots & \mathbb{A}_{3331} \\ \mathbb{A}_{1222} & \mathbb{A}_{1233} & \mathbb{A}_{1212} & \mathbb{A}_{1223} & \cdots & \mathbb{A}_{1231} \\ \mathbb{A}_{2322} & \mathbb{A}_{2333} & \mathbb{A}_{2312} & \mathbb{A}_{2323} & \cdots & \mathbb{A}_{2331} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbb{A}_{3122} & \mathbb{A}_{3133} & \mathbb{A}_{3112} & \mathbb{A}_{3123} & \cdots & \mathbb{A}_{3131} \end{bmatrix} \quad (5.32)$$

Im Materialmodell müssen die Ableitungen der algorithmischen ersten Piola–Kirchhoff Spannungen \mathbf{P}_{n+1} nach den Materialparametern $\boldsymbol{\kappa}$ bereitgestellt werden wobei die Deformation \mathbf{F}_{n+1} als eingefroren betrachtet wird. Diese sind hier in Vektorschreibweise dargestellt.

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{P}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{P}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \\ \frac{\partial \hat{\mathbf{P}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \end{bmatrix} \quad (5.33)$$

Hier greift die Sensitivitätsanalyse auf die Gradienten der Spannungen zurück, die als ein Teil der Materialroutine aufgefasst werden und aus diesem Grund bei den einzelnen konkreten Materialmodellen vorgestellt werden.

Tabelle 9: Zielfunktion- und Gradientenbestimmung deformationsgesteuerter Prozesse.

1. Initialisiere Simulationszeit $t_n = 0$, Geschichtsvariablen $\mathcal{I}_n = 0$, Zielfunktion $f = 0$ und Stützstellenzähler $k = 0$.
2. Datiere Simulationszeit auf, $t_{n+1} = t_n + \Delta t$, und bestimme axiale Deformation F_{n+1} aus der Lastfunktion (5.19). Falls $t > T$ gehe zu 8.
3. Berechne die algorithmische Spannung P_{n+1} und den Tangentenmodul \mathbb{A}_{n+1} durch Auswerten des Treiberalgorithmus aus Tabelle 7.
4. Bestimme die Sensitivität der axialen Spannung bezüglich einer Änderung der Materialparameter mit analytischen Gradienten aus der Materialroutine

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} P_{n+1} = \frac{\partial \hat{P}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} - \tilde{\mathbb{A}}_{n+1} : \left[\bar{\mathbb{A}}_{n+1}^{-1} : \frac{\partial \hat{P}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \right] \quad (5.34)$$

5. Prüfe das Simulationsintervall
wenn $t_k \notin [t_n, t_{n+1}]$ gehe nach 2.
wenn $t_k \in [t_n, t_{n+1}]$ interpoliere Spannungen und Gradient

$$P_k(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{t_{n+1} - t_k}{t_{n+1} - t_n} P_n(\boldsymbol{\kappa}) + \frac{t_k - t_n}{t_{n+1} - t_n} P_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}) \quad (5.35)$$

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} P_k(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{t_{n+1} - t_k}{t_{n+1} - t_n} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} P_n(\boldsymbol{\kappa}) + \frac{t_k - t_n}{t_{n+1} - t_n} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} P_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}) \quad (5.36)$$

6. Datiere Zielfunktion und Gradienten auf

$$f(\boldsymbol{\kappa}) \Leftarrow f(\boldsymbol{\kappa}) + \frac{1}{2} [P_k(\boldsymbol{\kappa}) - \bar{P}_k]^2 \quad (5.37)$$

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}) \Leftarrow \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}) + [P_k(\boldsymbol{\kappa}) - \bar{P}_k] \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} P_k(\boldsymbol{\kappa}) \quad (5.38)$$

7. Erhöhe $k \Leftarrow k + 1$ und gehe nach 2.

8. Ende.

5.2.5. Analytische Sensitivitätsanalyse spannungsgetriebener Prozesse

Der Gradient der Zielfunktion (5.5) berechnet sich zu

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}) = \sum_{k=1}^n [F_k(\boldsymbol{\kappa}) - F_k^{exp}] \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} F_k(\boldsymbol{\kappa}). \quad (5.39)$$

Analog zur Interpolation der Verzerrungen (5.4) erhalten wir den Gradienten der Verzerrung an der Stützstelle k durch eine lineare Interpolation der Gradienten $\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} F_n(\boldsymbol{\kappa})$ und $\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} F_{n+1}(\boldsymbol{\kappa})$.

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} F_k(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{t_{n+1} - t_k}{t_{n+1} - t_n} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} F_n(\boldsymbol{\kappa}) + \frac{t_k - t_n}{t_{n+1} - t_n} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} F_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}). \quad (5.40)$$

Im Folgenden wird der in Gleichung (5.39) dargestellte Gradient der axialen Deformation bestimmt. Ausgehend von dem Algorithmus aus Tabelle 8 wird davon ausgegangen, dass bei gegebener axialer Spannung P_{n+1} die totale Verzerrung \mathbf{F}_{n+1} und damit auch die axiale Deformation F_{n+1} und die Querdeformation $\bar{\mathbf{F}}_{n+1}$ vorliegt. Die Deformation \mathbf{F}_n und die Geschichtsvariablen \mathcal{I}_n sind bekannt.

$$F_{n+1} = \hat{F}(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}; P_{n+1}, \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}) \quad (5.41)$$

Die totale Deformation \mathbf{F}_{n+1} ist dabei das Ergebnis der Gleichgewichtssiteration, die eine Abhängigkeit von den Materialparametern $\boldsymbol{\kappa}$ aufweist. Diese kann wieder aufgespalten werden in eine \mathbf{e}_1 -Richtung und eine Querrichtung. In folgender Gleichung wird die axiale Richtung der Deformation betrachtet.

$$F_{n+1} = \hat{F}(\boldsymbol{\kappa}, \bar{\mathbf{F}}_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}); P_{n+1}, \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}) \quad (5.42)$$

Das Residuum \mathbf{R}_{n+1} lässt sich ebenfalls in algorithmischer Schreibweise darstellen. Allerdings ist hier zu beachten, dass das Residuum von den totalen Verzerrungen abhängt und nicht nur von den Queranteilen. Es muss der Gleichgewichtsnebenbedingung $\mathbf{R}_{n+1} = \mathbf{0}$ genügen.

$$\mathbf{R}_{n+1} = \hat{\mathbf{R}}(\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{F}_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}); P_{n+1}, \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}) = \mathbf{0} \quad (5.43)$$

Betrachten wir nun die Sensitivität der axialen Deformation im Intervall $[t_n, t_{n+1}]$ bei eingefrorener axialer Spannung P_{n+1} und Geschichtsvariablen $\{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}$, dann lässt sich diese Sensitivität bezüglich der Materialparameter schreiben zu

$$\frac{dF_{n+1}}{d\boldsymbol{\kappa}} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} + \frac{\partial \hat{F}}{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}} : \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \quad (5.44)$$

Wird dieser Ausdruck erweitert, so erhalten wir

$$\frac{dF_{n+1}}{d\boldsymbol{\kappa}} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} + \frac{\partial \hat{F}}{\partial P_{n+1}} \cdot \frac{\partial P_{n+1}}{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}} : \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \quad (5.45)$$

Die Ausdrücke $\partial P_{n+1}/\partial F$, $\partial \hat{P}/\partial \bar{\mathbf{F}}$ sind die Partitionierungen des bereits berechneten und konvergierten Tangentenmoduls aus dem Treiberalgorithmus in der Form

$$\check{\mathbb{A}} := \frac{\partial P_{n+1}}{\partial F_{n+1}} \quad , \quad \check{\mathbb{A}}_{n+1} := \frac{\partial \hat{P}}{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}}. \quad (5.46)$$

Der Gradient $\partial \mathbf{F}_{n+1}/\partial \boldsymbol{\kappa}$ lässt sich aus der Gleichgewichtsbedingung für das Residuum berechnen. Für die die Sensitivität des Residuum ergibt sich aus (5.43)

$$\frac{d\mathbf{R}_{n+1}}{d\boldsymbol{\kappa}} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} : \frac{\partial \mathbf{F}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} = \mathbf{0} \quad (5.47)$$

Unter Berücksichtigung, dass (5.47) für beliebige $d\boldsymbol{\kappa}$ gelten muss, ergibt sich der Ausdruck für die partiellen Ableitungen des Residuums nach den Materialparametern zu

$$\boxed{\frac{\partial \mathbf{F}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} = -\mathbb{A}_{n+1}^{-1} : \frac{\partial \hat{\mathbf{P}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}}}. \quad (5.48)$$

Hierbei werden die Sensitivitäten des Deformationsgradienten \mathbf{F}_{n+1} bezüglich der Materialparameter $\boldsymbol{\kappa}$ analog zu Gleichung (5.33) partitioniert. Es liegt wiederum die Vektorschreibweise zugrunde.

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \\ \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \end{bmatrix} \quad (5.49)$$

Hierbei wird die neue Partitionierung $\partial \hat{P}_{n+1} / \partial F_{n+1}$ des Tangentemoduls \mathbb{A}_{n+1} eingeführt.

$$\check{\mathbb{A}}_{n+1} := \frac{\partial \hat{P}_{n+1}}{\partial F_{n+1}} = [\mathbb{A}_{1111}] \quad (5.50)$$

In einem ersten Schritt werden die Gradienten der Deformationen bezüglich der Materialparameter mit Gleichung (5.48) aus den Gradienten der Spannungen errechnet. Dann ergeben sich durch Einsetzen der Partitionierungen (5.46) und (5.50) in (5.45) die gesuchten Gradienten der axialen Deformation F_{n+1} nach den Materialparametern $\boldsymbol{\kappa}$ zu

$$\boxed{\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} F_{n+1} = \frac{\partial P}{\partial \boldsymbol{\kappa}} - \check{\mathbb{A}}_{n+1}^{-1} \check{\mathbb{A}}_{n+1} : \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \boldsymbol{\kappa}}} \quad (5.51)$$

für einen konvergierten Zeitpunkt des Treiberalgorithmus aus Tabelle 8.

Anmerkung

Als weitere messbare Größe kann die Querdehnung einer axial belasteten Probe dienen. Diese Information kann in gleicher Weise, sowohl bei deformations- als auch bei spannungsgesteuerten Prozessen, in die Zielfunktion aufgenommen werden. Die Zielfunktion, die Gradienten der Zielfunktion und deren Interpolationsvorschriften lassen sich in analoger Weise herleiten.

5.2.6. Numerische Sensitivitätsanalyse

Aus dem vorherigen Abschnitt geht hervor, dass zur Parameteridentifikation mit dem gradientenbasierten SQP-Verfahren die Ableitungen der Zielfunktion $f(\boldsymbol{\kappa})$, und bei Anwendung der analytischen Gradienten die Ableitungen der ersten Piola–Kirchhoff Spannungen $\mathbf{P}(\boldsymbol{\kappa})$ nach den Materialparametern $\boldsymbol{\kappa}$, benötigt werden. Aufgrund der algorithmischen Struktur des Materialmodells ist die analytische Darstellung dieser Ableitungen $\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{P}(\boldsymbol{\kappa})$ oft schwierig. Diese analytisch berechneten Gradienten $\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa})$ sollen im Folgenden durch numerisch approximierte Gradienten ersetzt werden, die diese aufwendige Berechnungen und Eingriffe in die Programmstruktur umgehen. Die numerische Gradientenbildung benötigt diese Gradienten der Spannungen aus der Materialroutine nicht und ist unabhängig von der Art der Prozesssteuerung, d.h. sie ist unabhängig ob Spannungen, axiale Deformationen oder Querdeformationen in die Zielfunktion eingehen.

Für die Gradienten gilt die komponentenweise Darstellung

$$(\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}))_i := \frac{\partial f(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \kappa_i} \quad \text{für } i = 1, \dots, n. \quad (5.57)$$

Bei der numerischen Gradientenbildung wird eine Simulation als Referenzwert benötigt. Diese wird an der Position $\boldsymbol{\kappa}^*$ durchgeführt, an dem der Gradient approximiert werden

Tabelle 10: Zielfunktion- und Gradientenbestimmung spannungsgesteuerter Prozesse.

1. Initialisierung: Simulationszeit $t_n = 0$, Geschichtsvariablen $\mathcal{I}_n = 0$, Zielfunktion $f = 0$ und Stützstellenzähler $k = 0$.
2. Datiere Simulationszeit auf $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ und bestimme axiale Spannung P_{n+1} aus der Lastfunktion (5.19). Falls $t > T$ gehe zu 8.
3. Berechne die algorithmische Deformation \mathbf{F}_{n+1} und den Tangentenmodul \mathbb{A}_{n+1} durch Auswerten des Treiberalgorithmus 8.
4. Bestimme die Sensitivität der axialen Deformation bezüglich einer Änderung der Materialparameter mit analytischen Gradienten aus der Materialroutine

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} F_{n+1} = \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\kappa}} - \check{\mathbb{A}}_{n+1}^{-1} \tilde{\mathbb{A}}_{n+1} : \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \quad \text{mit} \quad \frac{\partial \mathbf{F}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} = -\mathbb{A}_{n+1}^{-1} : \frac{\partial \hat{\mathbf{P}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \quad (5.52)$$

5. Prüfe das Simulationsintervall

wenn $t_k \notin [t_n, t_{n+1}]$ gehe nach 2.

wenn $t_k \in [t_n, t_{n+1}]$ interpoliere Spannungen und Gradient

$$F_k(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{t_{n+1} - t_k}{t_{n+1} - t_n} F_n(\boldsymbol{\kappa}) + \frac{t_k - t_n}{t_{n+1} - t_n} F_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}) \quad (5.53)$$

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} F_k(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{t_{n+1} - t_k}{t_{n+1} - t_n} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} F_n(\boldsymbol{\kappa}) + \frac{t_k - t_n}{t_{n+1} - t_n} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} F_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}) \quad (5.54)$$

6. Datiere Zielfunktion und Gradienten auf

$$f(\boldsymbol{\kappa}) \Leftarrow f(\boldsymbol{\kappa}) + \frac{1}{2} W_k [F_k(\boldsymbol{\kappa}) - \bar{F}_k]^2 \quad (5.55)$$

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}) \Leftarrow \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}) + W_k [F_k(\boldsymbol{\kappa}) - \bar{F}_k] \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} F_k(\boldsymbol{\kappa}) \quad (5.56)$$

7. Erhöhe $k \Leftarrow k + 1$ und gehe nach 2.

8. Ende.

soll. Hieraus ergibt sich nach Gleichung (5.37) oder (5.55) der Wert der Zielfunktion $f^* = f(\boldsymbol{\kappa}^*)$. Anschließend wird der Materialparametervektor im Eintrag i mit einem Wert $\epsilon \ll 1$ gestört. Nach einer weiteren Simulation mit gestörtem Materialparametervektor ergibt sich der Funktionswert $f_i = f(\boldsymbol{\kappa}^* + \epsilon \mathbf{e}_i)$ mit $\mathbf{e}_i \in \mathbb{R}^n$ als i -tem Einheitsvektor. Der Gradient bezüglich des einen gestörten Parameters kann über einen Differenzenquotienten approximiert werden.

$$\left. \frac{\partial f(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \kappa_i} \right|_{\boldsymbol{\kappa}^*} \approx \frac{f_i - f^*}{\epsilon} = \frac{f(\boldsymbol{\kappa}^* + \epsilon \mathbf{e}_i) - f(\boldsymbol{\kappa}^*)}{\epsilon} \quad \text{für } i = 1, \dots, n \quad (5.58)$$

Diese Vorgehensweise erfordert zusätzlich zu der Funktionsauswertungen an der Stelle $\boldsymbol{\kappa}^*$ noch n weitere Funktionsauswertungen mit gestörtem Parametersatz. Der erhöhte Rechenaufwand kann allerdings mit der Tatsache gerechtfertigt werden, dass diese Art der Gradientenbildung immer und zuverlässig funktioniert. Dies ist vor allem auch praktika-

bel, wenn dem Anwender keine Zugriffsmöglichkeiten auf den Quellcode des Programms zur Lösung des Anfangswertproblems gegeben ist, da hier lediglich Funktionsauswertungen zu berechnen sind.

5.3. Re-Identifikation von Materialparametern

In diesem Abschnitt wird eine Re-Identifikation von vorgegebenen Materialparametern anhand eindimensionaler Prozesse durchgeführt. Dies bedeutet, dass mit dem selben Materialmodell, das auch zur Identifikation benutzt wird, Daten generiert werden. Mit einem vorgegebenen Materialparametersatz $\boldsymbol{\kappa}^*$ wird ein vorgegebener Prozess simuliert. Die Spannungs- oder Verzerrungsantwort wird als ein experimenteller Datensatz aufgefasst, an den im Weiteren, ausgehend von einem gewählten Startwert $\boldsymbol{\kappa}^0$, die Anpassung vorgenommen wird. Ziel dieses Abschnittes ist es, die Optimierungsmethoden anhand ausgesuchter Materialmodelle der Elastizität und Inelastizität zu testen. Dies ist im Rahmen einer Re-Identifikation besonders gut möglich, da eine Reihe an Schwierigkeiten und Unsicherheiten ausgeschlossen werden, die bei realen Testdaten vorliegen.

- Jegliche Art von Messfehlern oder Streuungen der experimentellen Daten sind ausgeschlossen.
- Eine Projektion der simulierten Daten in den Raum der experimentell beobachteten Daten entfällt.
- Die optimalen Parameter der Identifikation sind bereits bekannt, wobei der Wert der Least-Squares Funktion verschwinden muss.

5.3.1. Kompressibles Neo-Hooke Material

In einem ersten Beispiel wird ein einfaches elastisches kompressibles Neo-Hooke Materialmodell mit den zwei Materialparametern $\boldsymbol{\kappa} = [\mu, \beta]^T$ untersucht. Da bei der Parameteridentifikation die nominellen Größen eine besondere Bedeutung haben, wird dieses Materialmodell in \mathbf{F} und \mathbf{P} formuliert. Die freie Energiefunktion kann beispielsweise BASAR & WEICHERT [6] entnommen werden.

$$\psi(\mathbf{F}) = \frac{\mu}{2}[\text{tr}(\mathbf{F}^T \mathbf{F}) - 3] + \frac{\mu}{\beta}[(\det \mathbf{F})^{-\beta} - 1] \quad (5.59)$$

Das Modell enthält die Parameter μ als Schubmodul und die Poisson-Zahl ν , die mit dem eingeführten Parameter β in folgender Weise in Beziehung steht.

$$\beta = \frac{2\nu}{1 - 2\nu} \quad (5.60)$$

Bei diesem hyperelastischen Stoffgesetz lassen sich die ersten Piola-Kirchhoff Spannungen \mathbf{P} direkt durch Funktionsauswertung berechnen. Sie sind definiert über die Ableitung der freien Energie ψ nach dem Deformationsgradienten \mathbf{F} .

$$\mathbf{P} = \partial_{\mathbf{F}} \psi = \mu[\mathbf{F} - J^{-\beta} \mathbf{F}^{-T}] \quad (5.61)$$

Die für die Anwendung des Newton Verfahrens notwendigen Moduli stellen sich in Ratenform über $\dot{\mathbf{P}} = \mathbb{C} : \dot{\mathbf{F}}$ dar. Sie ergeben sich als zweite Ableitung der freien Energie nach dem Deformationsgradienten,

$$\mathbb{C} := \partial_{\mathbf{F}\mathbf{F}}^2 \psi(\mathbf{F}) = \mu[\mathbb{I} + \beta J^{-\beta} \mathbf{F}^{-T} \otimes \mathbf{F}^{-T} + J^{-\beta} \mathbb{I}_{\mathbf{F}^{-T}}] \quad (5.62)$$

mit der Definition $\mathbb{I}_{\mathbf{F}^{-T}}^{ijkl} := F_{jk}^{-1} F_{li}^{-1}$ und $\mathbb{I}^{ijkl} := \frac{1}{2} [\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}]$ der verwendeten vierstufigen Tensoren in Indexnotation. Die für die Parameteridentifikation benötigten Sensitivitäten ergeben sich zu

$$\left. \begin{aligned} \partial_{\mu} \mathbf{P} &= \mathbf{F} - J^{-\beta} \mathbf{F}^{-T} \\ \partial_{\beta} \mathbf{P} &= \mu J^{-\beta} \ln[J] \mathbf{F}^{-T}, \end{aligned} \right\} \quad (5.63)$$

wobei hier von den Ableitungen

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{F}^{-T}}{\partial \mathbf{F}} &= \frac{\partial F_{ji}^{-1}}{\partial F_{kl}} = -F_{jk}^{-1} F_{li}^{-1} \\ \frac{\partial \det[\mathbf{F}]}{\partial \mathbf{F}} &= \det[\mathbf{F}] \mathbf{F}^{-T} \end{aligned} \right\} \quad (5.64)$$

Gebrauch gemacht wird.

Re-Identifikation

Zur Generierung der experimentellen Daten wird eine lineare Verzerrungs-Zeit Beziehung zugrunde gelegt, siehe Abbildung 29. Die erhaltene Spannungsantwort wird als experimentelles Ergebnis aufgefasst. Die Daten werden mit

$$\boldsymbol{\kappa}^* = [80.0, 2.0]^T \quad (5.65)$$

erzeugt. Der Startwert für die Optimierungsverfahren wird zu

$$\boldsymbol{\kappa}^0 = [50.0, 1.0]^T \quad (5.66)$$

gesetzt. In Abbildung 30 sind die Gradienten der axialen Spannung P bezüglich der zwei

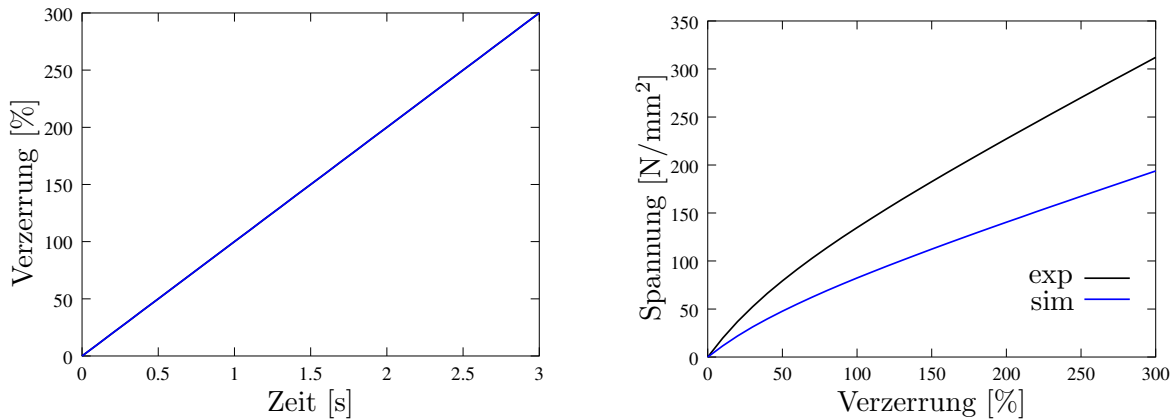


Abbildung 29: Links: Linearer Anstieg der Verzerrung über der Zeit. Rechts: Darstellung der Spannung über der Verzerrung für die experimentellen Daten und die Simulation mit gewählten Startparametersatz.

im Materialmodell enthaltenen Parameter dargestellt. Diese Gradienten werden sowohl analytisch als auch numerisch bestimmt. Erwartungsgemäß sind die auf beide Arten ermittelten Gradienten identisch, da es sich um ein rein elastisches Materialmodell handelt. Im Weiteren wird versucht, die Materialparameter, die zur Erzeugung der Daten genutzt worden sind, wiederzufinden. Hierzu wird die in Kapitel 3 beschriebenen Optimierungsmethoden der Sequentiellen Quadratischen Programmierung (SQP) und das Simplex-Verfahren eingesetzt. Wie in Abbildung 31 zu sehen ist, treiben beide Optimierungsmethoden den LSF Wert auf nahezu Null. Die Leistungsfähigkeit der beiden Verfahren ist

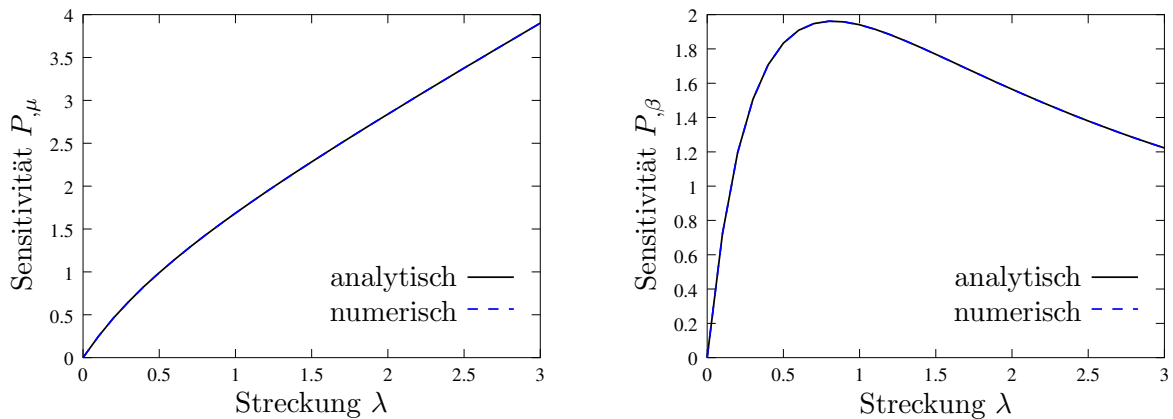


Abbildung 30: Gradienten der axialen Spannung P bezüglich der beiden Materialparameter μ und β . Es ist eine exakte Übereinstimmung der analytisch und numerisch bestimmten Gradienten zu erkennen.

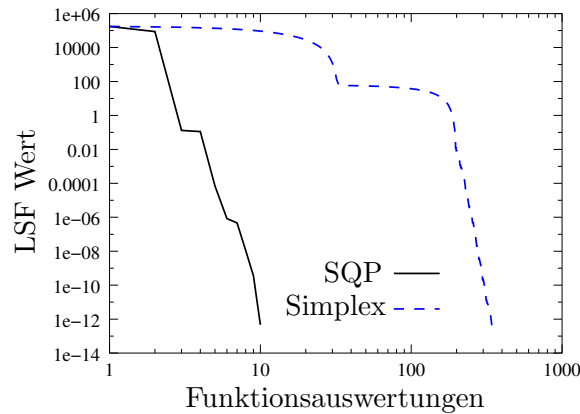


Abbildung 31: Verlauf des LSF-Funktionswertes über der Anzahl der Funktionsauswertungen für die beiden Optimierungsmethoden in doppelt logarithmischer Skale.

jedoch bei diesem Problem sehr unterschiedlich. Dies ist durch die Anzahl der nötigen Funktionsauswertungen dokumentiert, die bei dem Simplex-Verfahren deutlich höher ist als bei dem SQP-Verfahren. Die Betrachtung der Suchpfade über der Topologie der Zielfunktion zeigt, dass der SQP-Algorithmus das Minimum in wenigen Schritten findet, da dieser die Krümmung der Zielfunktion mit berücksichtigt. Der Simplex folgt dem lokal steilsten Abstieg und benötigt relativ viele Funktionsauswertungen bis das Minimum gefunden ist.

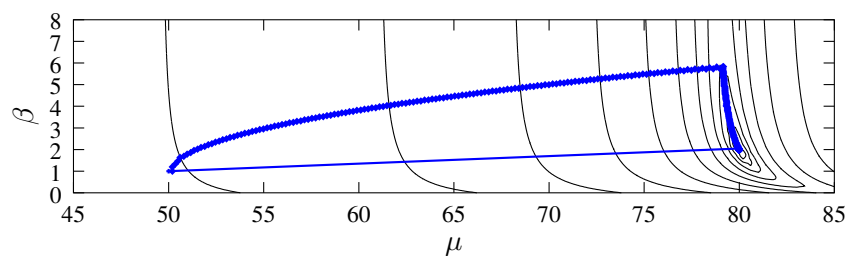


Abbildung 32: Optimierungsverlauf für das SQP-Verfahren (—) und den Simplex-Algorithmus (—•—) über den Höhenlinien der Zielfunktion. Der Simplex folgt dem lokal steilsten Abstieg. Der SQP-Algorithmus berücksichtigt die Krümmung der Zielfunktion und findet das Minimum in wenigen Iterationsschritten.

5.3.2. Prä- und Postprozessor für logarithmische Verzerrungen

Die Materialmodelle zur Inelastizität bei großen Verzerrungen werden in logarithmischen Verzerrungen formuliert, so dass die Struktur wie sie aus der Theorie kleiner Verzerrungen bekannt ist, beibehalten werden kann. Hierzu wird in diesem Abschnitt ein kurzer Überblick über das geometrische Prä- und Postprocessing gegeben, wie es in der Arbeit von MIEHE & LAMBRECHT [82] vorgestellt wird. Das Prä- und Postprocessing wird eingeführt um ausgehend von den Verzerrungsmaßen vom Seth–Hill Typ, die Lagrange'schen Spannungen und Moduli einer freien Energiefunktion berechnen zu können. Unter Präprozessing wird das Einführen der totalen und inelastischen Verzerrungen \mathbf{E} und \mathbf{E}^b ausgehend vom rechten Cauchy–Green Tensor \mathbf{C} und der inelastischen Metrik \mathbf{G}^b verstanden. Die Spannungen und Moduli des Materialmodells werden dann in diesen Verzerrungen berechnet. Anschließend wird das sogenannte Post–Processing, d.h. eine Projektion der Spannungen und Moduli in die Lagrange'sche Konfiguration vorgenommen. Von Seth und Hill wurde die Familie von Verzerrungsmaßen

$$\mathbf{E}^m(\mathbf{C}) = \begin{cases} \frac{1}{m}(\mathbf{C}^{m/2} - \mathbf{G}) & \text{falls } m \neq 0 \\ \frac{1}{2} \ln[\mathbf{C}] & \text{falls } m = 0 \end{cases} \quad (5.67)$$

eingeführt. Für den Fall von $m = 0$ werden die Verzerrungen logarithmische oder Hencky Verzerrungen genannt, die im weiteren Verlauf der Arbeit mit \mathbf{E} bezeichnet werden.

Der Zustand eines Materials wird mit Hilfe von Verzerrungen und internen Variablen definiert, wobei die viskoelastischen bzw. elastoplastischen Überspannungen mit Hilfe von inelastischen Metriktensoren beschrieben werden. Zur Definition dieser Metriktensoren wird der Deformationsgradienten multiplikativ in einen elastischen und einen inelastischen Anteil aufgespalten. Dies kann in Arbeiten von MIEHE & KECK [81] und MIEHE & APEL & LAMBRECHT [80] nachgelesen werden. Es gilt

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^b, \quad (5.68)$$

wobei mit $b = v, p$ entweder eine viskose oder eine plastische Inelastizität bezeichnet wird. Für den inelastischen Anteil ergibt sich der entsprechende Metriktensor zu

$$\mathbf{G}^b = \mathbf{F}^{bT} \mathbf{F}^b. \quad (5.69)$$

Aus dem elastischen Anteil ergibt sich die elastische Metrik

$$\mathbf{G}^e = \mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e. \quad (5.70)$$

Mit der Definition des rechten Cauchy–Green Verzerrungstensors $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ und dem Verzerrungsmaß aus Gleichung (5.67) folgen für $m = 0$ die logarithmischen Verzerrungen

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} \ln[\mathbf{C}] = \frac{1}{2} (\ln[\mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e] + \ln[\mathbf{F}^{bT} \mathbf{F}^b]) = \frac{1}{2} (\ln[\mathbf{G}^e] + \ln[\mathbf{G}^b]). \quad (5.71)$$

Hieraus ergibt sich die additive Aufspaltung der totalen logarithmischen Verzerrungen in elastische Verzerrungen \mathbf{E}^e und in inelastische Verzerrungen \mathbf{E}^b

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^e + \mathbf{E}^b. \quad (5.72)$$

Es wird eine beliebige freie Energiefunktion ψ , die die Speicherung der elastischen Energie mit Hilfe von logarithmischen Hencky–Verzerrungen und internen Variablen beschreibt, betrachtet.

$$\psi = \psi(\mathbf{E}, \mathbf{E}^b) \quad (5.73)$$

Aus dieser Potentialfunktion ergeben sich die zu den logarithmischen Verzerrungen dualen Spannungen und Moduli durch partielle Ableitung nach den logarithmischen Verzerrungen \mathbf{E} ,

$$\mathbf{T} := \partial_{\mathbf{E}}\psi(\mathbf{E}, \mathbf{E}^b) \quad \text{und} \quad \mathbb{E} := \partial_{\mathbf{E}\mathbf{E}}^2\psi(\mathbf{E}, \mathbf{E}^b). \quad (5.74)$$

Um die nominellen Spannungen und Moduli zu erhalten, wird auf deren Definition die Kettenregel angewendet, d.h. es wird zuerst nach den logarithmischen Verzerrungen abgeleitet und anschließend mit einem rein geometrischen Ausdruck nachdifferenziert.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{P} &:= \partial_{\mathbf{F}}\psi(\mathbf{E}, \mathbf{E}^b) = \mathbf{T} : \mathbb{P}_N \\ \mathbb{A} &:= \partial_{\mathbf{F}\mathbf{F}}^2\psi(\mathbf{E}, \mathbf{E}^b) = \mathbb{P}_N^T : \mathbb{E} : \mathbb{P}_N + \mathbf{T} : \mathbb{L}_N \end{aligned} \right\} \quad (5.75)$$

Damit ergeben sich die nominellen Spannungen und Moduli in Abhängigkeit der gegebenen Spannungen \mathbf{T} und der Tangente \mathbb{E} mit der Definition der Projektionstensoren

$$\mathbb{P}_N := \partial_{\mathbf{F}}\mathbf{E} \quad \text{und} \quad \mathbb{L}_N := \partial_{\mathbf{F}\mathbf{F}}^2\mathbf{E}. \quad (5.76)$$

Die in Gleichung (5.75) vorgenommene Projektion der gegebenen Spannungen \mathbf{T} und Moduli \mathbb{E} auf die nominellen Spannungen \mathbf{P} mit zugehörigem Moduli \mathbb{A} wird Postprozessing genannt. Sind die Sensitivitäten der Spannungen im logarithmischen Unterraum bekannt, werden diese analog zur Transformation der Spannungen auf nominelle Größen transformiert. Dies wird als geometrisches Postprozessing der Sensitivitäten bezeichnet.

$$\mathbf{P}_{,\kappa} = \mathbf{T}_{,\kappa} : \mathbb{P}_N \quad (5.77)$$

Die Tabelle 11 fasst das Vorgehen zusammen.

Tabelle 11: Geometrischer Prä- und Postprozessor für Spannungen und Moduli.

1. Präprozessor:	$\mathbf{E} = \frac{1}{2} \ln[\mathbf{C}] \quad \text{und} \quad \mathbf{E}^p = \frac{1}{2} \ln[\mathbf{G}^p]$
2. Material:	$\{\mathbf{E}, \mathbf{E}^p\} \Rightarrow \text{Material} \Rightarrow \{\mathbf{T}, \mathbb{E}\}$
3. Postprozessor:	$\mathbf{P} = \mathbf{T} : \mathbb{P}_N \quad , \quad \mathbf{P}_{,\kappa} = \mathbf{T}_{,\kappa} : \mathbb{P}_N$ und $\mathbb{A} = \mathbb{P}_N^T : \mathbb{E} : \mathbb{P}_N + \mathbf{T} : \mathbb{L}_N$

Diese Formulierung des Materialmodells in logarithmischen Verzerrungen bietet den Vorteil der additiven Zerlegung der Verzerrungen in elastische und inelastische Anteile. Damit ist die Struktur des Materialmodells identisch zu der Formulierung der geometrisch linearen Theorie.

5.3.3. Nichtlineare Viskoelastizität mit Exponentialansatz

Unter Verwendung der in Kapitel 5.3.2 eingeführten Prä- und Postprocessing Prozeduren wird das hier betrachtete Materialmodell ausschließlich im logarithmischen Unterraum besprochen. Es werden die Hencky-Verzerrungen eingeführt, die auf eine additive Aufspaltung der Verzerrungen in einen elastischen und einen inelastischen Teil führt.

$$\mathbf{E}^e = \mathbf{E} - \mathbf{E}^v \quad \text{mit} \quad \mathbf{E} := \frac{1}{2} \ln[\mathbf{C}] \quad \text{und} \quad \mathbf{E}^v := \frac{1}{2} \ln[\mathbf{G}^v] \quad (5.78)$$

Dabei werden die viskosen Verzerrungen \mathbf{E}^v als verzerrungsähnliche interne Variablen eingeführt. Die freie Energie für dieses Modellproblem lässt sich in einen rein elastischen volumetrischen Teil und einen deviatorischen Teil aufspalten. Der deviatorische Teil enthält einen Anteil der Grundelastizität und einen Teil für die viskose Überspannung.

$$\psi(\mathbf{E}, \mathbf{E}^v) = \frac{1}{2} \kappa (\text{tr}[\mathbf{E}])^2 + \mu_0 \|\text{dev}[\mathbf{E}]\|^2 + \mu_v \|\text{dev}[\mathbf{E}] - \mathbf{E}^v\|^2 \quad (5.79)$$

Zur Verdeutlichung wird in der nachfolgenden Abbildung 33 ein eindimensionales rheologisches Modell für die deviatorischen Spannungen dargestellt. Wie aus der Theorie kleiner

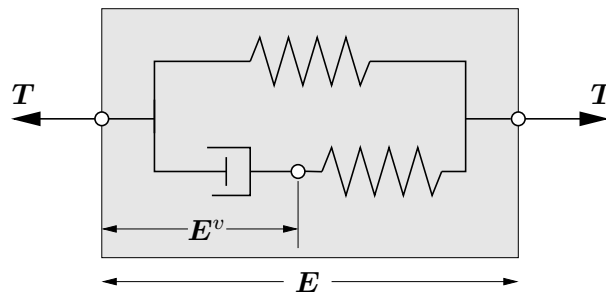


Abbildung 33: Rheologisches Modell zur Visualisierung des viskoelastischen Materialverhaltens. Parallelschaltung von Feder und Maxwell Element.

Verzerrungen bekannt ist, berechnen sich die Spannungen aus der Ableitung der freien Energie nach den Verzerrungen.

$$\mathbf{T} = \frac{\partial \psi(\mathbf{E}, \mathbf{E}^v)}{\partial \mathbf{E}} = \kappa \text{tr}[\mathbf{E}] \mathbf{1} + 2\mu_0 \text{dev}[\mathbf{E}] + 2\mu_v (\text{dev}[\mathbf{E}] - \mathbf{E}^v) \quad (5.80)$$

Die thermodynamische Kraft, konjugiert zu den internen Variablen \mathbf{E}^v , ist definiert zu

$$\mathbf{T}^v := -\frac{\partial \psi(\mathbf{E}, \mathbf{E}^v)}{\partial \mathbf{E}^v} = 2\mu_v (\text{dev}[\mathbf{E}] - \mathbf{E}^v). \quad (5.81)$$

Zur Bestimmung der internen Variablen wird eine Evolutionsgleichung angenommen. Der einfache lineare Fall $\dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{\eta} \mathbf{T}^v$ wird auf eine nichtlineare Evolutionsgleichung vom Exponentialtyp erweitert. Mit der Einführung des viskosen Potentials

$$\phi = \frac{\|\mathbf{T}^v\|}{T_0} \quad (5.82)$$

nimmt die Evolutionsgleichung für die internen Variablen die folgende Gestalt an.

$$\dot{\mathbf{E}}^v = \frac{1}{\eta} \phi^m \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{T}^v} \quad (5.83)$$

Aus der Ableitung des Potentials nach den viskosen Spannungen ergibt sich die Normalenrichtung \mathbf{N} zu

$$\mathbf{N} := \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{T}^v} = \frac{\mathbf{T}^v}{\|\mathbf{T}^v\|}. \quad (5.84)$$

Der Parameter T_0 dient lediglich dazu, die Dimensionslosigkeit des viskosen Potential ϕ sicherzustellen.

Algorithmische Spannungen und Moduli

Im folgenden Schritt wird die Evolutionsgleichung (5.83) mit Hilfe eines numerischen Integrationsverfahrens im diskreten Zeitschritt $[t_n, t_{n+1}]$ integriert. Hieraus ergeben sich die internen Variablen \mathbf{E}_{n+1}^v zur Zeit t_{n+1} . Zur Anwendung kommt ein voll implizites Verfahren, auch Backward Euler Verfahren genannt.

$$\mathbf{E}_{n+1}^v = \mathbf{E}_n^v + \Delta t \frac{1}{\eta} \phi_{n+1}^m \mathbf{N}_{n+1} \quad (5.85)$$

Diese Gleichung kann nicht direkt nach den zu bestimmenden internen Variablen aufgelöst werden. Daher wird sie in eine Residuumsgleichung umgeschrieben.

$$\mathbf{r}_{n+1} := \mathbf{E}_n^v - \mathbf{E}_{n+1}^v + \Delta t \frac{1}{\eta} \phi_{n+1}^m \mathbf{N}_{n+1} = \mathbf{0} \quad (5.86)$$

Dieses nichtlineare Gleichungssystem wird im Rahmen einer Newton-Iteration gelöst. Die Linearisierung dieser Gleichung lautet

$$\text{Lin } \mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_{n+1}^k + \frac{\partial \mathbf{r}_{n+1}}{\partial \mathbf{E}_{n+1}^v} \Big|_k \left[\mathbf{E}_{n+1}^{v,k+1} - \mathbf{E}_{n+1}^{v,k} \right]. \quad (5.87)$$

Diese linearisierte Form wird zu Null gesetzt. Durch Umstellen ergibt sich die Aufdatierungsvorschrift zur iterativen Berechnung der viskosen Verzerrungen

$$\mathbf{E}_{n+1}^v \Leftarrow \mathbf{E}_{n+1}^v - \mathbb{G}^{-1} : \mathbf{r}_{n+1} \quad (5.88)$$

mit der Definition des vierstufigen Tensors

$$\mathbb{G} := -\frac{\partial \mathbf{r}_{n+1}}{\partial \mathbf{E}_{n+1}^v} = \mathbb{I} + \Delta t \frac{2\mu_v}{\eta} (n-1) \phi^{m-1} \mathbf{N}_{n+1} \otimes \mathbf{N}_{n+1}. \quad (5.89)$$

Die Aufdatierung wird wiederholt bis die Norm des Residuums kleiner einer vorgegebenen Toleranz ist, $\|\mathbf{r}_{n+1}\| \leq \text{tol}$. Mit den aktuellen internen Variablen ergeben sich die algorithmischen Spannungen zu

$$\mathbf{T}_{n+1} = \kappa \text{tr}[\mathbf{E}_{n+1}] \mathbf{1} + 2\mu_0 \text{dev}[\mathbf{E}_{n+1}] + 2\mu_v (\text{dev}[\mathbf{E}_{n+1}] - \mathbf{E}_{n+1}^v). \quad (5.90)$$

Für die globale Newton-Iteration im Rahmen einer FE-Anwendung werden die algorithmischen oder konsistenten Tangentenmoduli benötigt.

$$\mathbb{E}_{n+1} := \frac{\partial \mathbf{T}_{n+1}}{\partial \mathbf{E}_{n+1}} = \kappa \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2\mu_0 \mathbb{P} + 2\mu_v \left[\mathbb{P} - \frac{\partial \mathbf{E}_{n+1}^v}{\partial \mathbf{E}_{n+1}} \right] \quad (5.91)$$

Die in diesem Ausdruck enthaltene Ableitung $\partial \mathbf{E}_{n+1}^v / \partial \mathbf{E}_{n+1}$ kann über das implizite Funktionentheorem berechnet werden und ergibt sich zu

$$\frac{\partial \mathbf{E}_{n+1}^v}{\partial \mathbf{E}_{n+1}} = \mathbb{G}^{-1} : \frac{\partial \mathbf{r}_{n+1}}{\partial \mathbf{E}_{n+1}} \quad (5.92)$$

mit

$$\frac{\partial \mathbf{r}_{n+1}}{\partial \mathbf{E}_{n+1}} = \Delta t \frac{2\mu_v}{\eta} \phi_{n+1}^{m-1} (\mathbb{P} + (m-1) \mathbf{N}_{n+1} \otimes \mathbf{N}_{n+1}). \quad (5.93)$$

Konsistente Sensitivitätsanalyse auf Materialebene

Für die Parameteridentifikation werden die Gradienten der algorithmischen Spannungen \mathbf{T}_{n+1} bezüglich der Materialparameter $\boldsymbol{\kappa}$ benötigt. Diese Gradienten müssen konsistent mit dem gewählten Integrationsalgorithmus (5.85) sein. Hierbei muss beachtet werden, dass die Geschichtsvariablen des vorherigen Zeitpunkts ebenfalls von den Materialparametern abhängen. Die Sensitivitäten der Geschichtsvariablen $\mathbf{E}_{n,\boldsymbol{\kappa}}^v$ sind aus dem vorherigen Zeitschritt bereitzustellen und sind somit als zusätzliche Geschichtsvariablen zu verwalten. Dies führt auf eine rekursive Struktur zur Berechnung der Sensitivitäten. Anschaulich wird dies in der nachfolgenden Abbildung Abbildung 34 dargestellt. Hierbei wird

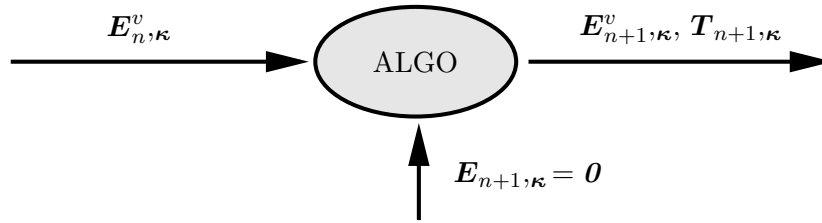


Abbildung 34: Ablauf zur Berechnung der Sensitivitäten der algorithmischen Spannungen.

von einem deformationsgetriebenen Prozess ausgegangen, d.h. die Sensitivität der totalen Deformation ist gleich Null. Für dieses Modellproblem der nichtlinearen Viskoelastizität stellen sich diese Gradienten wie folgt dar.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{T}_{n+1,\boldsymbol{\kappa}} &= \text{tr}[\mathbf{E}_{n+1}] \mathbf{1} \\ \mathbf{T}_{n+1,\mu_0} &= 2 \text{dev}[\mathbf{E}_{n+1}] \\ \mathbf{T}_{n+1,\mu_v} &= 2(\text{dev}[\mathbf{E}_{n+1}] - \mathbf{E}_{n+1}^v) - 2\mu_v \frac{\partial \mathbf{E}_{n+1}^v}{\partial \mu_v} \\ \mathbf{T}_{n+1,\eta} &= -2\mu_v \frac{\partial \mathbf{E}_{n+1}^v}{\partial \eta} \\ \mathbf{T}_{n+1,m} &= -2\mu_v \frac{\partial \mathbf{E}_{n+1}^v}{\partial n} \end{aligned} \right\} \quad (5.94)$$

In den Ausdrücken (5.94) werden die Ableitungen der viskosen Verzerrungen nach den Materialparametern zum Zeitpunkt t_{n+1} benötigt. Diese lassen sich wiederum über das implizite Funktionentheorem berechnen. Es gilt

$$\frac{\partial \mathbf{E}_{n+1}^v}{\partial \boldsymbol{\kappa}} = \mathbb{G}^{-1} : \frac{\partial \mathbf{r}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}}. \quad (5.95)$$

Die inverse der Matrix \mathbb{G} ist bereits aus (5.89) bekannt. Die Ableitungen des Residuums \mathbf{r}_{n+1} nach den Materialparametern nehmen die folgende Gestalt an, wobei der einzige

existierende Gradient des Potentials ϕ_{n+1} nach dem Materialparameter μ_v bereits eingearbeitet ist. Alle weiteren Ableitungen des Potentials nach den verbleibenden Materialparametern ist gleich Null, ebenso wie die Gradienten der Richtung \mathbf{N}_{n+1} nach den Materialparametern.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r}_{n+1,\mu_v} &= \mathbf{E}_{n,\mu_v}^v + \frac{\Delta t}{\mu_v \eta} m \phi_{n+1}^m \mathbf{N}_{n+1} \\ \mathbf{r}_{n+1,\eta} &= \mathbf{E}_{n,\eta}^v + \frac{\Delta t}{\eta^2} \phi_{n+1}^m \mathbf{N}_{n+1} \\ \mathbf{r}_{n+1,m} &= \mathbf{E}_{n,m}^v + \frac{\Delta t}{\eta} \phi_{n+1}^m \ln[\phi_{n+1}] \mathbf{N}_{n+1} \end{aligned} \right\} \quad (5.96)$$

Zu beachten ist, dass die Gradienten der viskosen Verzerrungen keine Abhängigkeit von den elastischen Parametern aufweisen. Damit sind die Gradienten der Hill-Spannungen \mathbf{T}_{n+1} nach den Materialparametern auf Materialebene bestimmt. Diese können der Parameteridentifikation zugeführt werden. Siehe hierzu Gleichung (5.34) in Tabelle 9 für deformationsgetriebene axiale Prozesse oder Gleichung (5.52) in Tabelle 10 für spannungsgetriebene axiale Prozesse. Ebenso bleibt die Struktur des Materialmodells und der Gradienten erhalten, wenn die Parameteridentifikation mittels inhomogener Deformationsprozesse (Kapitel 6) betrieben wird.

Re-Identifikation, Leistungsfähigkeit der Gradienten

Mit einem vorgegebenen Materialparametersatz $\boldsymbol{\kappa}^*$ und einer sinnvoll gewählten Prozessführung wird eine Simulation durchgeführt. In diesem Fall der Viskoelastizität wird ein verzerrungsgesteuerter Prozess gewählt, der aus einem linearen Anfahren auf eine Verzerrung von 5 % und einer anschließenden Haltezeit besteht. In Abbildung 35 ist die Steuerung der Verzerrung über der Prozesszeit dargestellt, ebenso wie der daraus resultierende Verlauf der Spannung über der Zeit. Der simulierte Spannungsverlauf, der ein

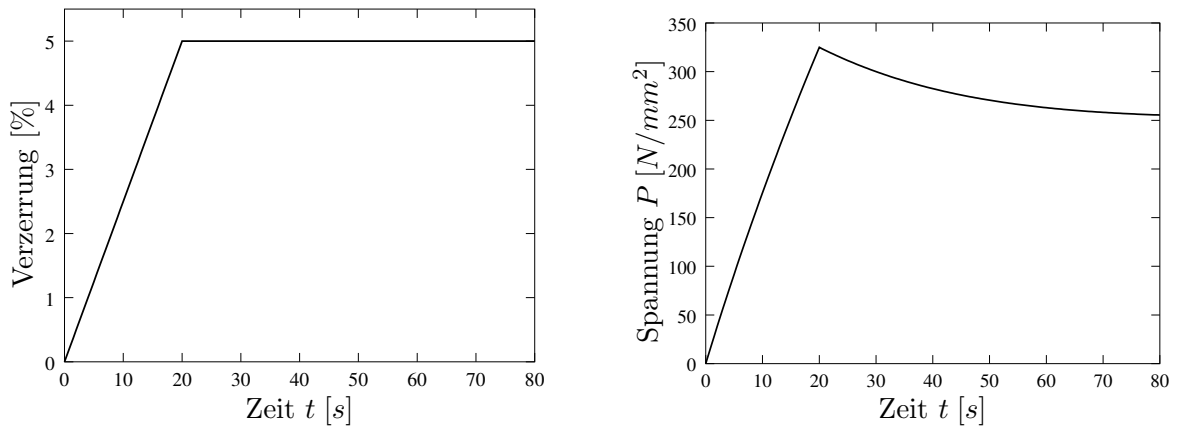


Abbildung 35: Verzerrungsgesteuerte Prozessführung. Darstellung der axialen Spannung P über der Prozesszeit t für das viskoelastische Materialmodell. Es ist ein deutliches Relaxationsverhalten zu erkennen.

deutliches Relaxationsverhalten aufweist, wird nun als “experimenteller Datensatz” betrachtet, wobei die zugrunde liegenden Materialparameter bekannt sind. Diese sind

$$\boldsymbol{\kappa}^* = [175000.0, 80000.0, 40000.0, 5.0 \cdot 10^5, 0.8]^T. \quad (5.97)$$

Das übliche Vorgehen bei einem gradientenbasierten Optimierungsverfahren erfordert die Vorgabe eines möglichst nahe an der Lösung gelegenen Startparametersatzes. In diesem

Beispiel werden, ausgehend von dem Lösungsparametersatz, die drei zur Viskosität assoziierten Parameter verändert. Die rein elastischen Parameter behalten ihren ursprünglichen Wert. Zur Veranschaulichung ist in Abbildung 36 die Simulation mit verändertem Parametersatz und das Experiment gezeigt, wobei der veränderte Parametersatz die folgenden Werte annimmt.

$$\kappa^0 = [175000.0, 80000.0, 50000.0, 5.0 \cdot 10^6, 1.0]^T \quad (5.98)$$

Nach erfolgreicher Optimierung mit dem in Abschnitt 3.3.2 vorgestellten SQP-Algorithmus,

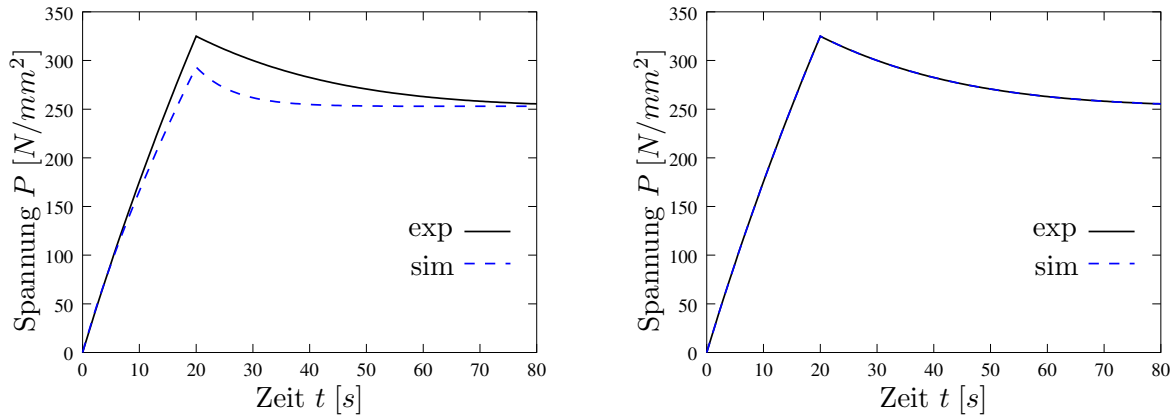


Abbildung 36: Spannungsantwort des viskoelastischen Materialmodells über der Zeit. Links für den Startwert der Materialparameter und rechts für den optimierten Materialparametersatz jeweils inklusive der experimentellen Daten.

rithmus, im folgenden O1 genannt, werden die vorgegebenen Materialparameter exakt wiedergefunden. Die Simulation deckt sich genau mit den “experimentellen Daten”. Dieses Ergebnis wird sowohl mit den über eine Störungsrechnung numerisch bestimmten Gradienten als auch mit den analytischen Gradienten der axialen Spannung nach den Materialparametern erreicht. Die gradientenbasierte Optimierung mit numerischen oder mit analytischen Gradienten benötigt gleich viele Iterationen zur Optimierung. Der große Unterschied in der benötigten Rechenzeit liegt darin begründet, dass die numerische Gradientenbildung zusätzliche Funktionsauswertungen benötigt, um diese Gradienten zu approximieren. Diese Beobachtung ist in nachfolgender Tabelle 12 und in Abbildung 37 dokumentiert. Die Optimierung mit dem Schittkowski Algorithmus (O2) liefert sowohl mit analytischen als auch mit numerischen Gradienten keine optimale Lösung. Der Algorithmus bricht nach Erreichen der maximal zulässigen Anzahl an Iterationen ab.

Algorithmus	O1		O2	
	analytisch	numerisch	analytisch	numerisch
SQP-Iterationen	21	21	300	300
Funktionsaufrufe	34	97	305	1207
CPU Zeit [s]	9.32	26.12	83.74	320.69
LSF-Wert	$6.2188 \cdot 10^{-19}$	$2.6040 \cdot 10^{-20}$	$1.2092 \cdot 10^{+1}$	$9.8441 \cdot 10^{+0}$

Tabelle 12: SQP-Iterationen, Funktionsaufrufe, Rechenzeit und LSF-Wert für die Reidentifikation der drei Materialparameter der Viskosität mit analytischen und numerischen Gradienten für die beiden SQP-Algorithmen.

In Abbildung 38 sind die Gradienten der Spannung bezüglich der im Materialmodell enthaltenen Parameter über der Prozesszeit aufgetragen. Diese Gradienten sind abhängig

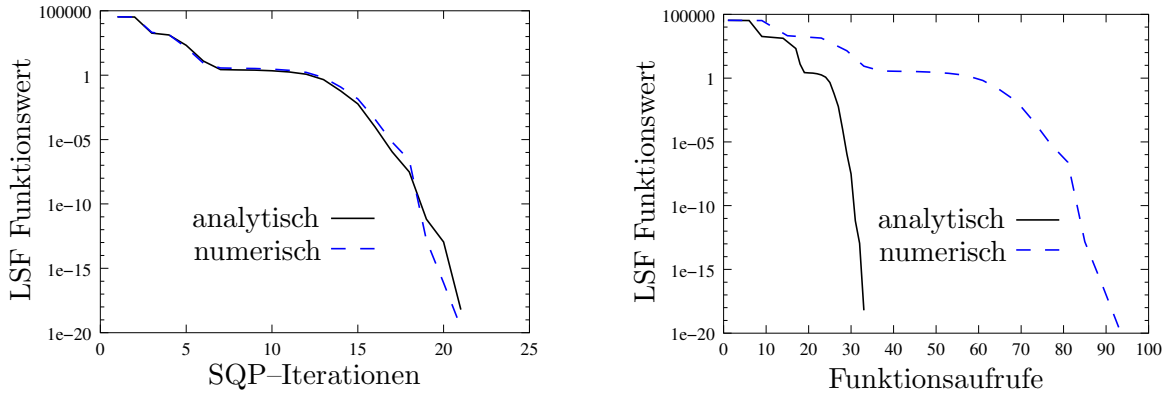


Abbildung 37: Darstellung des Funktionsverlaufs der Least-Squares Funktion über der Anzahl der SQP-Iterationen (links) bzw. über der Anzahl der Funktionsauswertungen (rechts) für den Algorithmus O1, jeweils für analytisch und numerisch berechnete Gradienten.

von dem aktuellen Parametersatz, d.h. sie ändern sich im Lauf der Optimierung. In der linken Spalte sind die Gradienten bei Startwert gezeigt, in der rechten Spalte bei optimalem Parametersatz. An dieser Stelle ist zu erkennen, dass die numerisch und analytisch berechneten Gradienten nur minimal voneinander abweichen.

5.3.4. Elastoplastizität mit linearer kinematisch/isotroper Verfestigung

Unter Verwendung der in Kapitel 5.3.2 eingeführten Prä- und Postprocessing Prozeduren wird das elastoplastische Materialmodell mit linearer kinematisch/isotroper Verfestigung ausschließlich im logarithmischen Unterraum dargestellt. Die additive Aufspaltung der Verzerrungen in einen elastischen und einen inelastischen Teil ergibt sich zu

$$\mathbf{E}^e = \mathbf{E} - \mathbf{E}^p \quad \text{mit} \quad \mathbf{E} := \frac{1}{2} \ln[\mathbf{C}] \quad \text{und} \quad \mathbf{E}^p := \frac{1}{2} \ln[\mathbf{G}^p] \quad (5.99)$$

mit den plastischen Verzerrungen \mathbf{E}^p als verzerrungsähnliche interne Variablen. Zur Modellierung der isotropen Verfestigung wird eine weiter skalare interne Variable A benötigt, die die Bogenlänge der plastischen Verzerrungen beschreibt. Die zwei konstitutiven Gleichungen, die das Material beschreiben sind die freie Energiefunktion

$$\psi = \frac{1}{2} \kappa (\text{tr}[\mathbf{E}^e])^2 + \mu \|\text{dev}[\mathbf{E}^e]\|^2 + \frac{1}{2} h A^2 + \frac{1}{2} H \|\mathbf{A}\|^2 \quad (5.100)$$

und das Fließkriterium

$$\phi = \|\boldsymbol{\xi}\| - \sqrt{\frac{2}{3}}(y_0 + B) \leq 0 \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\xi} := \text{dev}[\mathbf{T}] - \mathbf{B}. \quad (5.101)$$

Hierbei wird die relative Spannung $\boldsymbol{\xi}$ eingeführt. Das Material wird durch fünf Materialparameter beschrieben. Diese sind $\boldsymbol{\kappa} = [\kappa, \mu, y_0, h, H]^T$. Die Spannungen ergeben sich aus der Ableitung der freien Energie nach den Verzerrungen.

$$\mathbf{T} = \psi(\mathbf{E}^e, \mathbf{A}, A)_{,\mathbf{E}^e} = \kappa \text{tr}[\mathbf{E}] \mathbf{1} + 2\mu(\text{dev}[\mathbf{E}] - \mathbf{E}^p) \quad (5.102)$$

In obiger Gleichung (5.101) wird die thermodynamischen Kräfte, assoziiert zu den internen Variablen eingeführt. Diese sind definiert über

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{B} &= \psi(\mathbf{E}^e, \mathbf{A}, A)_{,\mathbf{A}} \\ B &= \psi(\mathbf{E}^e, \mathbf{A}, A)_{,A} \end{aligned} \right\} \quad (5.103)$$

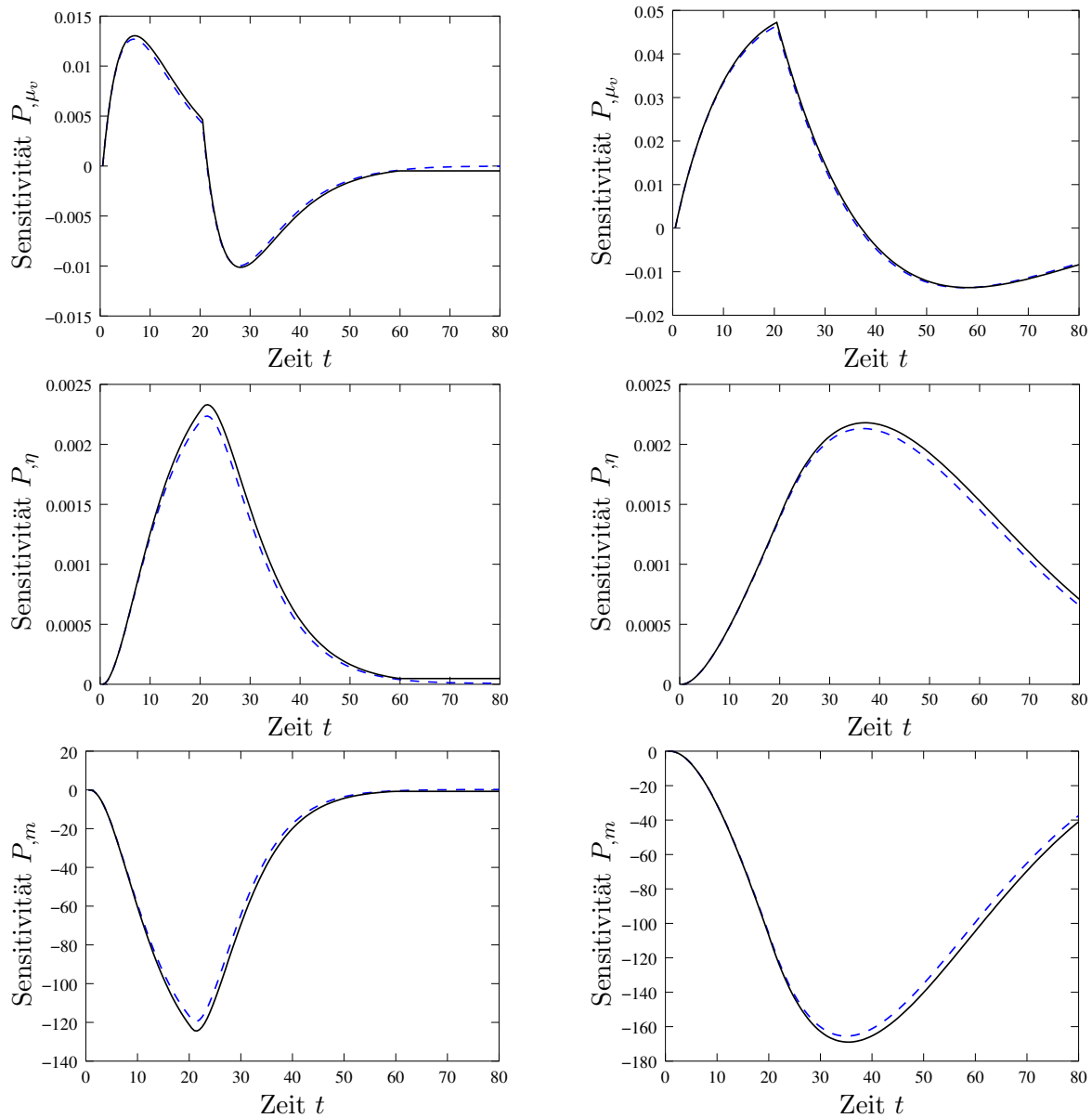


Abbildung 38: Vergleich der Gradienten der axialen Spannung P für die drei Materialparameter der Viskosität. Links die Gradienten bei Startparametersatz, rechts für den optimierten Parametersatz. Es ist eine sehr gute Übereinstimmung der analytisch (— —) und numerisch (—) gewonnenen Gradienten erkennbar.

Die Fließfunktion (5.101) definiert ein elastisches Gebiet im Spannungsraum in folgender Weise.

$$\mathcal{E} := \{(\mathbf{T}, \mathbf{B}, B) \mid \phi(\mathbf{T}, \mathbf{B}, B) \leq 0\} \quad (5.104)$$

Durch Anwenden des Prinzips der maximalen Dissipation

$$\mathcal{D} := \max_{(\mathbf{T}, \mathbf{B}, B) \in \mathcal{E}} \{\mathbf{T} : \dot{\mathbf{E}}^p - \mathbf{B} : \dot{\mathbf{A}} - B\dot{A}\} \quad (5.105)$$

wird das Maximierungsproblem in ein Optimierungsproblem mit Nebenbedingung überführt, das mit der Lagrange Multiplikator Methode gelöst wird.

$$\mathcal{L}(\mathbf{T}, \mathbf{B}, B, \lambda) = -\mathbf{T} : \dot{\mathbf{E}}^p + \mathbf{B} : \dot{\mathbf{A}} + B\dot{A} + \lambda\phi(\mathbf{T}, \mathbf{B}, B) \rightarrow \text{stat.} \quad (5.106)$$

Hieraus ergibt sich einen Satz an Evolutionsgleichungen für die internen Variablen und die zugehörigen Be- und Entlastungsbedingungen.

$$\left. \begin{aligned} \dot{\mathbf{E}}^p &= +\lambda\phi,_{\mathbf{T}} \quad \text{mit} \quad \mathbf{E}(t=0) = \mathbf{0} \\ \dot{\mathbf{A}} &= -\lambda\phi,_{\mathbf{B}} \quad \text{mit} \quad \mathbf{A}(t=0) = \mathbf{0} \\ \dot{A} &= -\lambda\phi,_{B} \quad \text{mit} \quad A(t=0) = 0 \\ \lambda &\geq 0 \quad , \quad \phi \leq 0 \quad , \quad \lambda\phi = 0 \end{aligned} \right\} \quad (5.107)$$

Als Konsequenz der Normalenfließregel und der Anfangsbedingungen in (5.107) ergibt sich die Gleichheit der kinematischen Verfestigungsvariablen und der plastischen Verzerrungen, d.h. $\mathbf{A} = \mathbf{E}^p$.

Tabelle 13: Zusammenfassung des elastoplastischen Materialmodells mit linearer kinematisch/isotroper Verfestigung.

1. Kinematik	$\mathbf{E}^e = \mathbf{E} - \mathbf{E}^p$
2. Interne Variablen	$\mathbf{E}^p, \mathbf{A}, A$
3. Freie Energie	$\psi = \frac{1}{2} \kappa (\text{tr}[\mathbf{E}^e])^2 + \mu \ \text{dev}[\mathbf{E}^e]\ ^2 + \frac{1}{2} h A^2 + \frac{1}{2} H \ \mathbf{A}\ ^2$
4. Hill-Spannungen	$\mathbf{T} = \psi(\mathbf{E}^e, \mathbf{A}, A),_{\mathbf{E}^e} = \kappa \text{tr}[\mathbf{E}] \mathbf{1} + 2\mu(\text{dev}[\mathbf{E}] - \mathbf{E}^p)$
5. Thermodyn. Kräfte	$\mathbf{B} = \psi(\mathbf{E}^e, \mathbf{A}, A),_{\mathbf{A}} = H \mathbf{A}$ $B = \psi(\mathbf{E}^e, \mathbf{A}, A),_A = h A$
6. Fließbedingung	$\phi = \phi(\mathbf{T}, \mathbf{B}, B) \phi = \ \text{dev}[\mathbf{T}] - \mathbf{B}\ - \sqrt{\frac{2}{3}}(y_0 + B) \leq 0$
7. Evolutionsgleichungen	$\dot{\mathbf{E}}^p = \lambda\phi,_{\mathbf{T}} = \lambda(\text{dev}[\mathbf{T}] - \mathbf{B}) / \ \text{dev}[\mathbf{T}] - \mathbf{B}\ $ $\dot{\mathbf{A}} = \dot{\mathbf{E}}^p$ $\dot{A} = -\lambda\phi,_{B} = \lambda \sqrt{\frac{2}{3}}$
8. Be- und Entlastung	$\lambda \geq 0, \phi \leq 0, \lambda\phi = 0$

Algorithmische Umsetzung des Materialmodells

Zur Integration der Evolutionsgleichungen wird das implizite Backward Euler Verfahren angewendet. Die Aufdatierungsvorschrift für die plastischen Verzerrungen und die plastische Bogenlänge lauten

$$\mathbf{E}_{n+1}^p = \mathbf{E}_n^p + \gamma \mathbf{N}_{n+1} \quad \text{und} \quad A_{n+1} = A_n + \gamma \sqrt{\frac{2}{3}} \quad (5.108)$$

wobei hier die Definition der Normalenrichtung

$$\mathbf{N}_{n+1} := \frac{\partial \phi_{n+1}}{\partial \mathbf{T}_{n+1}} = \frac{\boldsymbol{\xi}_{n+1}}{\|\boldsymbol{\xi}_{n+1}\|} \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\xi}_{n+1} = \text{dev}[\mathbf{T}_{n+1}] - \mathbf{B}_{n+1} \quad (5.109)$$

eingeführt wird. Die aktuellen deviatorischen Spannungen lassen sich unter Beachtung eines sogenannten *trial*-Wertes, der im Folgenden mit einem * gekennzeichnet wird, berechnen.

$$\text{dev}[\mathbf{T}_{n+1}] = 2\mu \text{dev}[\mathbf{E}^*] - 2\mu\gamma \mathbf{N}_{n+1} \quad \text{mit} \quad \text{dev}[\mathbf{E}^*] = \text{dev}[\mathbf{E}_{n+1}] - \mathbf{E}_n^p \quad (5.110)$$

Die Konsistenzbedingung $\phi = 0$ muss am Ende jedes Zeitschrittes erfüllt sein.

$$\phi_{n+1} = \phi^* - 2\mu\gamma - H\gamma - \frac{2}{3}h\gamma = 0 \quad (5.111)$$

wobei auch hier der *trial*-Wert der Fließfunktion eingeführt wird.

$$\phi^* = \|\boldsymbol{\xi}^*\| - \sqrt{\frac{2}{3}}(y_0 + hA_n) \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\xi}^* = \text{dev}[\mathbf{T}_n] - \mathbf{B}_n \quad (5.112)$$

Aus Gleichung (5.111) kann der plastische Multiplikator λ in geschlossener Form berechnet werden.

$$\gamma = \frac{\phi^*}{(2\mu + H + \frac{2}{3}h)} \quad (5.113)$$

Dies ist nur für dieses sehr einfache Plastizitätsmodell möglich, da es sich hier um lineare Evolutionsgleichungen handelt. Die algorithmischen Spannungen ergeben sich zu

$$\mathbf{T}_{n+1} = \kappa \text{tr}[\mathbf{E}_{n+1}^e] \mathbf{1} + 2\mu \text{dev}[\mathbf{E}^*] - 2\mu\gamma \mathbf{N}_{n+1} \quad (5.114)$$

und der konsistente Tangentenmodul zu

$$\left. \begin{aligned} \mathbb{E}^{ep} &= \mathbf{T}_{n+1, \mathbf{E}_{n+1}} \\ &= \kappa \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2\mu \left[1 - \frac{\gamma}{\|\text{dev}[\mathbf{E}^*]\|} \right] \mathbb{P} \\ &\quad + 2\mu \left[\frac{\gamma}{\|\text{dev}[\mathbf{E}^*]\|} - \frac{2\mu}{(2\mu + H + \frac{2}{3}h)} \right] \mathbf{N}^* \otimes \mathbf{N}^* \end{aligned} \right\} \quad (5.115)$$

Sensitivitätsanalyse der algorithmischen Spannungen

Ziel ist es, für eine deformationsgetriebene Materialformulierung die Sensitivität der algorithmischen Hill-Spannung \mathbf{T}_{n+1} nach den Materialparametern $\boldsymbol{\kappa}$ zu bestimmen. Diese Sensitivitätsanalyse muss wie in Kapitel 5.3.3 und Abbildung 34 bereits beschrieben, konsistent mit dem gewählten Integrationsalgorithmus sein. Zusammengefasst bedeutet dies: Berechne $\mathbf{T}_{n+1, \boldsymbol{\kappa}}$, $\mathbf{E}_{n+1, \boldsymbol{\kappa}}^p$ und $A_{n+1, \boldsymbol{\kappa}}$ mit gegebenen Geschichtsvariablen $\mathbf{E}_{n, \boldsymbol{\kappa}}^p$, $A_{n, \boldsymbol{\kappa}}$ und $\mathbf{E}_{n+1, \boldsymbol{\kappa}} = \mathbf{0}$.

Die Gradienten der algorithmischen Spannungen berechnen sich zu

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{T}_{n+1, \boldsymbol{\kappa}} &= \text{tr}[\mathbf{E}_{n+1}] \mathbf{1} \\ \mathbf{T}_{n+1, \mu} &= 2 \text{dev}[\mathbf{E}^*] - 2\mu \mathbf{E}_{n, \mu}^p - 2\gamma \mathbf{N}^* - 2\mu \gamma_{, \mu} \mathbf{N}^* - 2\mu \gamma \mathbf{N}^*_{, \mu} \\ \mathbf{T}_{n+1, y_0} &= -2\mu \mathbf{E}_{n, y_0}^p - 2\mu \gamma_{, y_0} \mathbf{N}^* - 2\mu \gamma \mathbf{N}^*_{, y_0} \\ \mathbf{T}_{n+1, h} &= -2\mu \mathbf{E}_{n, h}^p - 2\mu \gamma_{, h} \mathbf{N}^* - 2\mu \gamma \mathbf{N}^*_{, h} \\ \mathbf{T}_{n+1, H} &= -2\mu \mathbf{E}_{n, H}^p - 2\mu \gamma_{, H} \mathbf{N}^* - 2\mu \gamma \mathbf{N}^*_{, H} \end{aligned} \right\} \quad (5.116)$$

Hierin enthalten sind die Ableitungen des plastischen Multiplikators nach den Materialparametern sowie die Ableitung der Normalenrichtung, die im Folgenden bestimmt werden.

$$\left. \begin{aligned} \gamma_{, \mu} &= \frac{\mathbf{N}^* : (2 \text{dev}[\mathbf{E}^*] - (2\mu + H) \mathbf{E}_{n, \mu}^p) - \sqrt{\frac{2}{3}} h A_{n, \mu}}{2\mu + H + \frac{2}{3}h} - \frac{2\phi^*}{(2\mu + H + \frac{2}{3}h)^2} \\ \gamma_{, y_0} &= \frac{-(2\mu + H) \mathbf{N}^* : \mathbf{E}_{n, y_0}^p - \sqrt{\frac{2}{3}} (1 + h A_{n, y_0})}{2\mu + H + \frac{2}{3}h} \\ \gamma_{, h} &= \frac{-(2\mu + H) \mathbf{N}^* : \mathbf{E}_{n, h}^p - \sqrt{\frac{2}{3}} (A_n + h A_{n, h})}{2\mu + H + \frac{2}{3}h} - \frac{\frac{2}{3} \phi^*}{(2\mu + H + \frac{2}{3}h)^2} \\ \gamma_{, H} &= \frac{\mathbf{N}^* : (- (2\mu + H) \mathbf{E}_{n, H}^p - \mathbf{E}_n^p) \sqrt{\frac{2}{3}} (h A_{n, H})}{2\mu + H + \frac{2}{3}h} - \frac{\phi^*}{(2\mu + H + \frac{2}{3}h)^2} \end{aligned} \right\} \quad (5.117)$$

Die Gradienten der *trial*-Normalenrichtung ergeben sich zu

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{N}_{,\mu}^* &= \mathbb{Q} : \mathbf{E}_{n,\mu}^p + \frac{2 \operatorname{dev}[\mathbf{E}^*]}{\|\boldsymbol{\xi}^*\|} (\mathbb{I} - \mathbf{N}^* \otimes \mathbf{N}^*) \\ \mathbf{N}_{,y_0}^* &= \mathbb{Q} : \mathbf{E}_{n,y_0}^p \\ \mathbf{N}_{,h}^* &= \mathbb{Q} : \mathbf{E}_{n,h}^p \\ \mathbf{N}_{,H}^* &= \mathbb{Q} : \mathbf{E}_{n,H}^p + \frac{\mathbf{E}_n^p}{\|\boldsymbol{\xi}^*\|} (\mathbb{I} - \mathbf{N}^* \otimes \mathbf{N}^*) \end{aligned} \right\} \quad (5.118)$$

wobei hier die Definition des vierstufigen Tensors \mathbb{Q} eingeführt wird.

$$\mathbb{Q} := \frac{\partial \mathbf{N}^*}{\partial \mathbf{E}^p} = -\frac{(2\mu + H)}{\|\boldsymbol{\xi}^*\|} (\mathbb{I} - \mathbf{N}^* \otimes \mathbf{N}^*) \quad (5.119)$$

Da für die Gradientenbestimmung zum aktuellen Zeitpunkt die Gradienten der Geschichtsvariablen vorgehalten werden müssen, muss in einem weiteren Schritt sichergestellt werden, dass diese Gradienten aufdatiert werden, um so für den nächsten Zeitschritt bereit zu stehen. Es ergibt sich für die Gradienten der plastischen Verzerrung die folgende Aufdatierungsvorschrift.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{E}_{n+1,\mu}^p &= \mathbf{E}_{n,\mu}^p + \gamma_{,\mu} \mathbf{N}^* + \gamma \mathbf{N}_{,\mu}^* \\ \mathbf{E}_{n+1,y_0}^p &= \mathbf{E}_{n,y_0}^p + \gamma_{,y_0} \mathbf{N}^* \\ \mathbf{E}_{n+1,h}^p &= \mathbf{E}_{n,h}^p + \gamma_{,h} \mathbf{N}^* \\ \mathbf{E}_{n+1,H}^p &= \mathbf{E}_{n,H}^p + \gamma_{,H} \mathbf{N}^* + \gamma \mathbf{N}_{,H}^* \end{aligned} \right\} \quad (5.120)$$

Analog ergibt sich die Aufdatierung der Gradienten der plastischen Bogenlänge.

$$\left. \begin{aligned} A_{n+1,\mu} &= A_{n,\mu} + \sqrt{\frac{2}{3}} \gamma_{,\mu} \\ A_{n+1,y_0} &= A_{n,y_0} + \sqrt{\frac{2}{3}} \gamma_{,y_0} \\ A_{n+1,h} &= A_{n,h} + \sqrt{\frac{2}{3}} \gamma_{,h} \\ A_{n+1,H} &= A_{n,H} + \sqrt{\frac{2}{3}} \gamma_{,H} \end{aligned} \right\} \quad (5.121)$$

Re-Identifikation, Qualität der analytischen Gradienten

Mit der in Abbildung 39 dargestellten verzerrungsgesteuerten Prozessführung wird eine Referenzsimulation durchgeführt. Die Materialparameter sind so gewählt, dass das Modell nur die kinematische Verfestigung wiedergibt, d.h. die isotrope Verfestigung ist zu Null gesetzt. Damit ergibt sich der Parametervektor $\boldsymbol{\kappa} = [\kappa, \mu, y_0, h, H]^T$ zu

$$\boldsymbol{\kappa} = [175000.0, 80000.0, 500.0, 0.0, 15000.0]^T. \quad (5.122)$$

Die Spannungsantwort, die mit der oben beschriebenen Prozessführung gewonnen wird, ist in Abbildung 40 zum einen über die Zeit, zum Anderen über die Verzerrung aufgetragen. Zur Re-Identifikation der Materialparameter wird ein bezüglich der Fließgrenze y_0 und der kinematischen Verfestigungsvariablen H veränderter Materialparametervektor als Startwert für die Optimierung herangezogen. Dieser enthält folgende Werte.

$$\boldsymbol{\kappa} = [175000.0, 80000.0, 300.0, 0.0, 40000.0]^T \quad (5.123)$$

Die Simulation mit verändertem Parametervektor und die dazugehörigen “experimentellen Daten” sind Abbildung 41 zu entnehmen. Es ist deutlich zu erkennen, dass die

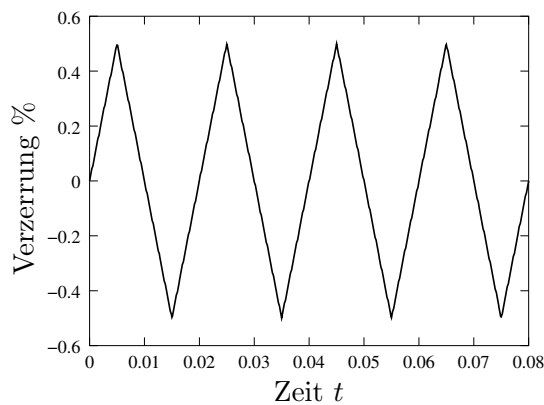


Abbildung 39: Verzerrungsgesteuerte Prozessführung zur Generierung von “experimentellen Daten”.

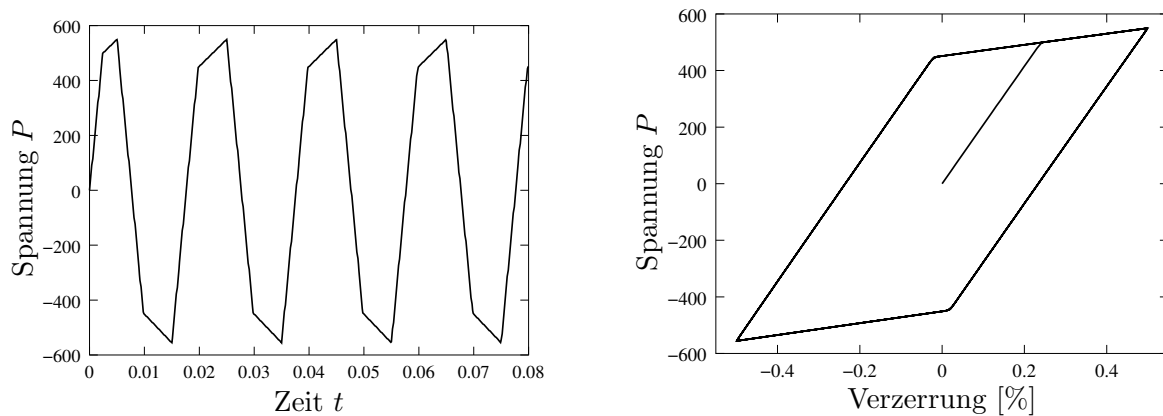


Abbildung 40: Spannungsantwort des elastoplastischen Materialmodells. Links: Spannung über Zeit. Rechts: Spannung über Verzerrung.

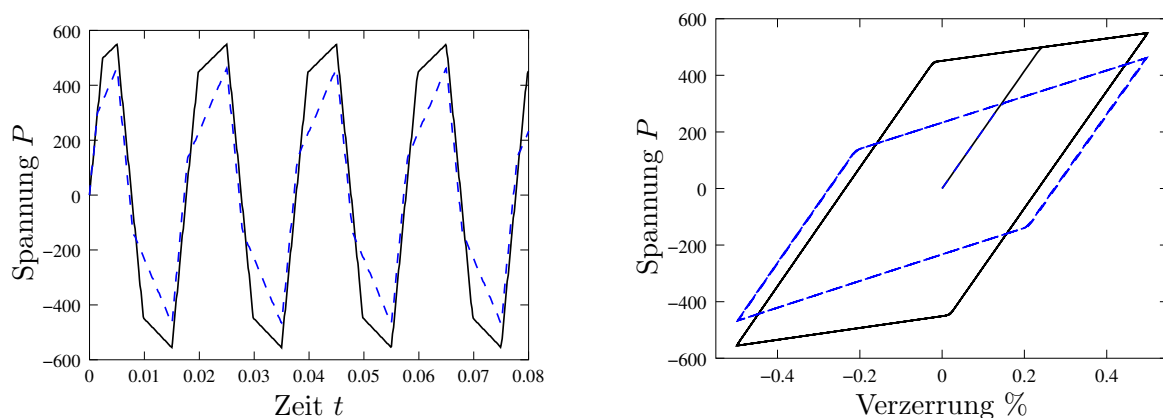


Abbildung 41: Spannungsantwort des Materialmodells (---) und virtuelle Daten (—). Links: Spannung über Zeit. Rechts: Spannung über Verzerrung.

Simulation nicht mit den experimentellen Daten übereinstimmt. Nach durchgeführter Optimierung der beiden Parameter mit dem in Kapitel 3 beschriebenen gradientenbasierten Optimierungsverfahren (O1) bzw. dem Schittkowski Algorithmus (O2), wird in drei von vier Optimierungsläufen eine perfekte Übereinstimmung der experimentellen und simulierten Daten erkennbar. Die zur Erzeugung der Daten benutzten Parameter werden exakt wiedergefunden. Dieses Ergebnis kann mit beiden Optimierungsalgorithmen mit den über

eine Störungsrechnung numerisch bestimmten Gradienten erreicht werden. Die Optimierung mit analytischen Gradienten ist in einem Fall abgebrochen. Das Ergebnis ist in Tabelle 14 dokumentiert.

Algorithmus Gradienten	O1		O2	
	analytisch	numerisch	analytisch	numerisch
SQP-Iterationen	3	10	227	7
Funktionsaufrufe	14	36	276	22
CPU Zeit [s]	14.21	35.66	312.07	23.30
LSF-Wert	*) $1.4644 \cdot 10^{+6}$	$3.9632 \cdot 10^{-7}$	$8.3461 \cdot 10^{-6}$	$2.3947 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 14: Re-Identifikation der Fließgrenze y_0 und der kinematischen Verfestigung H mit analytischen und numerischen Gradienten. *) Der Optimierungslauf O1/analytisch ist aufgrund der Überschreitung der maximal zulässigen Anzahl an Funktionsauswertungen in einem "Linesearch" abgebrochen.

In Abbildung 42 sind die Gradienten der Spannungen der vier im Materialmodell enthaltenen Parameter über der Prozesszeit aufgetragen. Der Gradient der isotropen Verfestigungsparameter h wird hier nicht berücksichtigt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die

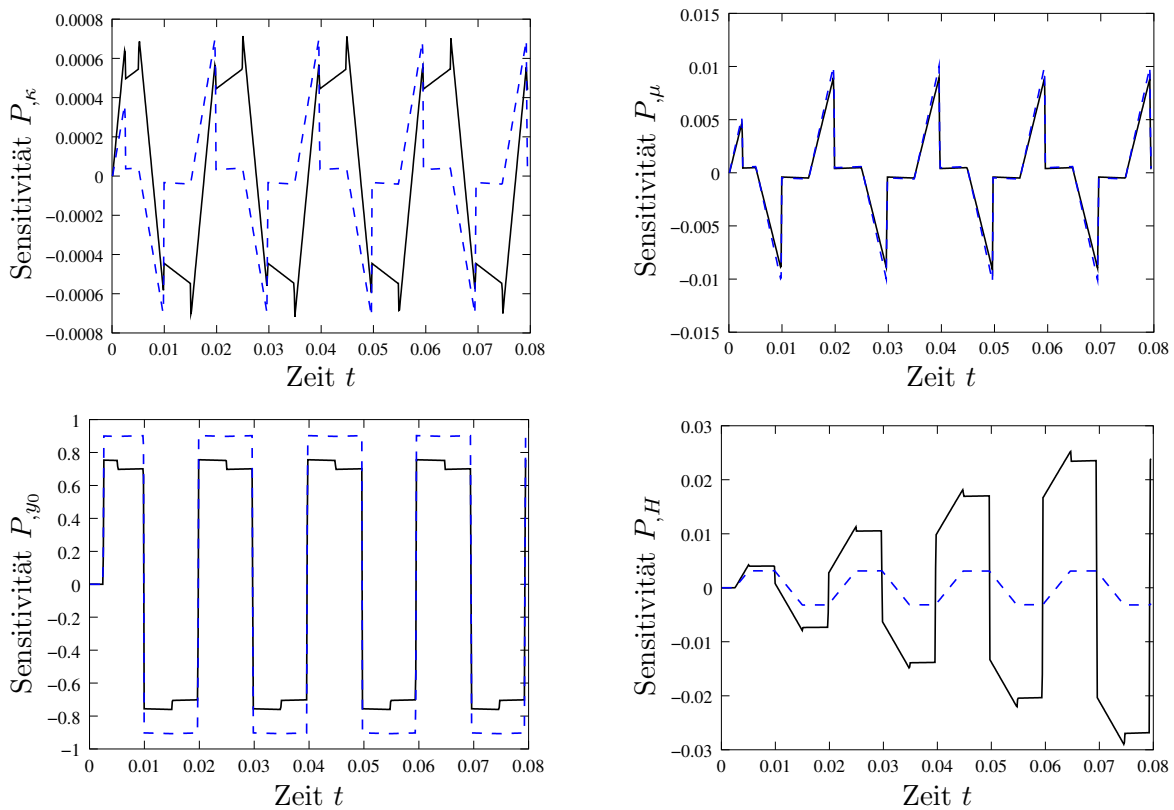


Abbildung 42: Analytische (—) und numerische Gradienten (---) der ersten Piola-Kirchhoff Spannungen P bezüglich der Materialparameter κ , μ , y_0 und H . Es ist deutlich ein Abweichen der Gradienten voneinander zu erkennen. Insbesondere bei dem Kompressionsmodul und der kinematischen Verfestigungsvariablen.

numerischen und analytischen Gradienten weit aus mehr differieren, als bei dem zuvor betrachteten Materialmodell zur Viskoelastizität. Besonders auffällig ist, dass sich ein Fehler bei den analytischen Gradienten der kinematischen Verfestigungsvariablen akkumuliert.

Dieser Fehler tritt bei jeder Lastumkehr auf. Durch eine einfache Überlegung anhand eines eindimensionalen Materialmodells ist sofort ersichtlich, dass der Gradient der Spannung bezüglich der kinematischen Verfestigung aber nicht von der Anzahl der Belastungszyklen abhängen darf.

Im Folgenden werden zwei weitere eindimensionale Identifikationsläufe durchgeführt, die die Leistungsfähigkeit der Gradienten der plastischen Parameter untersuchen sollen. Im ersten Fall wird der Parameter y_0 auf einen Startwert von 600 gesetzt. Die anderen Parameter des Materialmodells sind auf dem optimalen Wert festgehalten. Bei dieser eindimensionalen Optimierung wird ein Endwert von 500 und ein Minimum der Fehlerquadratfunktion von Null erwartet. Die Tabelle 15 gibt einen Überblick über die Optimierung mit analytischen als auch mit numerisch berechneten Gradienten für die beiden SQP-Algorithmus. Bei diesem Beispiel wird das Optimum bei allen vier Testläufen wiedergefunden.

Algorithmus Gradienten	O1		O2	
	analytisch	numerisch	analytisch	numerisch
SQP-Iterationen	4	5	7	5
Funktionsaufrufe	5	11	8	11
CPU Zeit [s]	5.42	11.34	9.12	11.77
LSF-Wert	$5.8635 \cdot 10^{-7}$	$5.8501 \cdot 10^{-7}$	$6.8896 \cdot 10^{-7}$	$7.0125 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 15: Re-Identifikation der Fließgrenze y_0 mit analytischen und numerischen Gradienten. Die Leistungsfähigkeit ist anhand der SQP-Iterationen, der Funktionsauswertungen und der CPU-Zeit dokumentiert.

Als zweites eindimensionales Optimierungsbeispiel wird die Re-Identifikation der kinematischen Verfestigungsvariablen H betrachtet. Der Parameter wird auf einen Startwert von 1000.0 gesetzt. Die restlichen Parameter sind wiederum auf ihrem optimalen Wert festgehalten. Hier wird der Wert der Verfestigungsvariablen in drei von vier Fällen wiedergefunden. Bei einem Lauf wird die maximale Anzahl an Funktionsauswertungen erreicht,

Algorithmus Gradienten	O1		O2	
	analytisch	numerisch	analytisch	numerisch
SQP-Iterationen	7	6	8	4
Funktionsaufrufe	11	15	479	9
CPU Zeit [s]	11.61	15.36	498.95	9.66
LSF-Wert	$6.7298 \cdot 10^{-7}$	$5.2841 \cdot 10^{-7}$	*) $1.1925 \cdot 10^{+5}$	$1.1593 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 16: Re-Identifikation der kinematischen Verfestigung H mit analytischen und numerischen Gradienten. *) Der Optimierungslauf O2/analytisch ist aufgrund der Überschreitung der maximal zulässigen Anzahl an Funktionsauswertungen abgebrochen.

wobei der Materialparameter nicht wiedergefunden wird.

In der eindimensionalen Re-Identifikation kann der Gradient der Zielfunktion als Tangente an diese Funktion dargestellt werden. Hier zeigt es sich, dass die numerische Approximation eine bessere Tangente als die analytisch berechnete darstellt. Dies ist in Abbildung 43 dokumentiert. Die Qualität der ersten Ableitung wirkt sich auf die Approximation der Hesse-Matrix im SQP-Verfahren aus. Dieses konvergiert mit den schlechteren analytischen Gradienten langsamer, es werden mehr Funktionsauswertungen im Linesearch

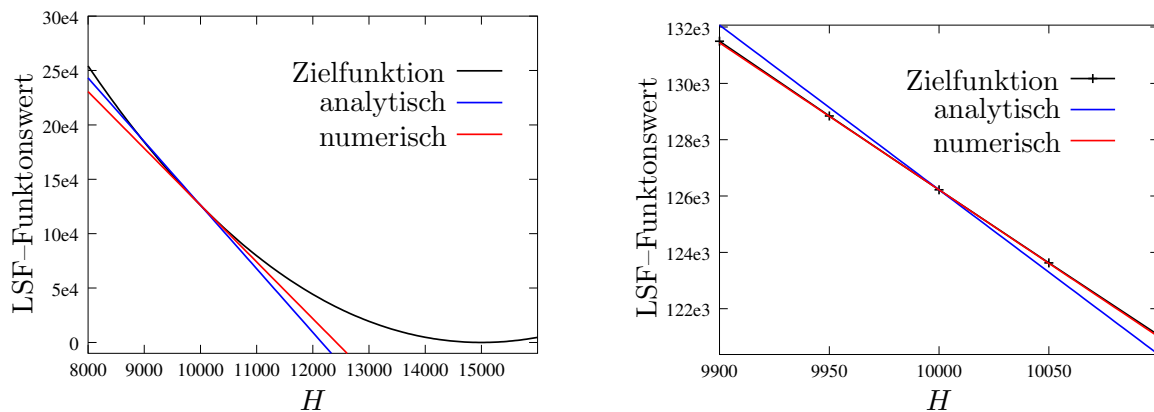


Abbildung 43: Darstellung der numerisch und analytisch berechneten Gradienten der eindimensionalen Zielfunktion. Der numerische Gradient gibt eine wesentlich bessere Approximation der lokalen Steigung im aktuellen Punkt $H = 10000.0$.

benötigt, oder es konvergiert überhaupt nicht, so dass dann die maximale Anzahl an Funktionsauswertungen erreicht wird. Im Gegensatz dazu steht die von Vorne herein höhere Anzahl an Funktionsauswertungen zur Bestimmung der besseren numerischen Gradienten.

Zusammenfassung

Die Umsetzung der Sensitivitäten erfordert einen erheblichen Berechnungs- und Programieraufwand. Angesichts, dass bei den Materialmodellen mit internen Variablen die analytischen Gradienten Probleme bei der Optimierung bereiten können, und der rechenzeitliche Mehraufwand zur Berechnung numerischer Gradienten gering ist, lohnt dieser Aufwand nicht. Die analytischen Gradienten werden interessant, wenn die Rechenzeit einer zusätzlichen Simulation im Bereich von Stunden liegt. Für die Treiber Rechnungen ist dies jedoch nicht der Fall.

5.4. Identifikation der Materialparameter von kurzglasfaserverstärktem Polyamid

Die erarbeiteten Grundlagen der eindimensionalen Parameteridentifikation werden in diesem Abschnitt auf die Identifikation der Materialparameter eines realen Materials angewendet. Hierbei handelt es sich um ein mit 35 % Kurzglasfasern verstärktes Polyamid 66, das von der Robert Bosch GmbH zur Verfügung gestellt wurde. Dieses Material wird üblicherweise in einem Spritzgießvorgang verarbeitet, bei dem sich durch die Ausrichtung der Glasfasern an der Strömungsrichtung der Polyamidschmelze ein anisotropes Material ergibt. Ausgiebige Untersuchungen dieses Materials wurden bereits in RIEGER, S. [109] durchgeführt. Hier werden einige experimentelle Ergebnisse bei Raumtemperatur aufgegriffen und hinsichtlich der Vielfalt der Versuche und der untersuchten Faserorientierungen erweitert. Auf der Grundlage der Messergebnisse wird ein visko-elastoplastisches Materialmodell mit Schädigung entwickelt und an die experimentellen Daten angepasst. Um eine kompakte Darstellung von experimentellen Daten und zugehörigen Simulationen zu erhalten, wird zuerst das Materialmodell beschrieben und dann die experimentellen Ergebnisse den Simulationen gegenübergestellt.

5.4.1. Ein visko-elastoplastisches Materialmodell mit Schädigung

Zur qualitativen Abbildung der in den Experimenten beobachteten Phänomene wird ein superponiertes transversal isotropes visko-elastoplastisches Materialmodell mit Schädigung vorgestellt. Die Kinematik ergibt sich mit den im vorigen Abschnitt beschriebenen logarithmischen Verzerrungen als additive Aufspaltung in elastische und inelastische Verzerrungen, sowohl im elastoplastischen, als auch in den viskoelastischen Teilmodellen.

$$\mathbf{E}^{ep} = \mathbf{E} - \mathbf{E}^p \quad , \quad \mathbf{E}_i^{ev} = \mathbf{E} - \mathbf{E}_i^v \quad (5.124)$$

Hierbei werden die internen Variablen der plastischen Verzerrungen \mathbf{E}^p und der i -ten viskosen Verzerrungen \mathbf{E}_i^v eingeführt. Es wird angenommen, dass die beobachteten inelastischen Phänomene rein deviatorischer Natur sind, d.h. $\text{tr}[\mathbf{E}^p] = \text{tr}[\mathbf{E}_i^v] = 0$. Somit liegt inelastische Inkompressibilität vor. Für die Modellierung der Schädigung wird die zusätzliche Annahme getroffen, dass sich diese nur auf das elastoplastische Teilwerkstoffgesetz bezieht. Die Superposition der einzelnen Teilwerkstoffgesetze kann der Abbildung 44 entnommen werden.

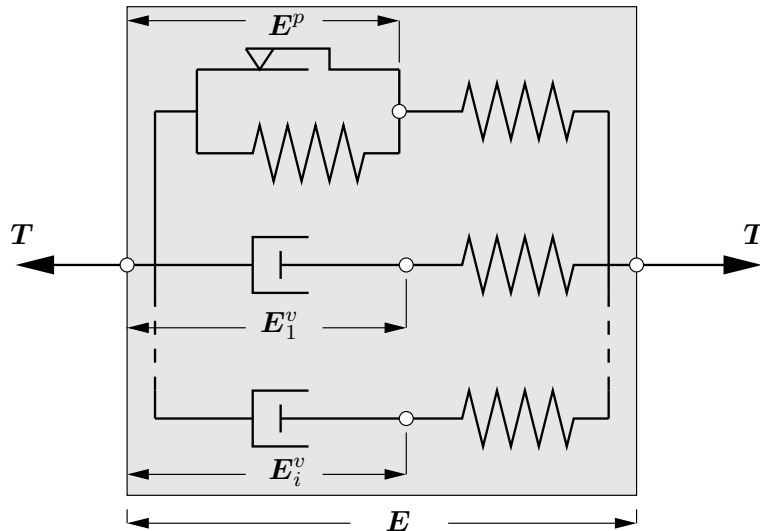


Abbildung 44: Rheologisches Modell für das superponierte visko-elastoplastische Material. Die totale Deformation ist mit \mathbf{E} gekennzeichnet. \mathbf{E}^p , \mathbf{E}_1^v , \dots , \mathbf{E}_i^v sind die internen plastischen und viskosen Variablen.

Die freie Energiefunktion setzt sich unter Berücksichtigung der Schädigung aus folgenden Anteilen zusammen.

$$\psi = (1 - d)\psi^{ep}(\mathbf{E}^{ep}, \mathbf{M}) + \sum_i \psi_i^{ev}(\mathbf{E}_i^{ev}, \mathbf{M}) \quad (5.125)$$

Für die einzelnen Teile wird jeweils eine quadratische Form angesetzt, die in den weiteren Abschnitten konkretisiert werden. Die konstante elastische Tangente für ein transversal isotropes Material mit dem zweistufigen Strukturtensor $\mathbf{M} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{A}$ ist hinreichend bekannt und ergibt sich zu

$$\mathbb{E} = \kappa \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2\mu_T \mathbb{P} + \alpha(\mathbf{1} \otimes \mathbf{M} + \mathbf{M} \otimes \mathbf{1}) + \beta \mathbf{M} \otimes \mathbf{M} + 2(\mu_L - \mu_T) \mathbb{A} \quad (5.126)$$

mit dem vierstufigen deviatorischen Projektionstensor $\mathbb{P} = \mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$ und dem vierstufigen Tensor $\mathbb{A} = \frac{1}{2} [A_i A_l \delta_{jk} + A_i A_k \delta_{jl} + A_j A_k \delta_{il} + A_j A_l \delta_{ik}]$. Dieser anisotrope Tangentenmodul liegt allen Teilwerkstoffgesetzen zugrunde.

Das plastische Teilwerkstoffgesetz mit Schädigung

Für die Modellierung des elastoplastischen Teilwerkstoffgesetzes wird eine fließflächenfreie Theorie für die Plastizität gewählt, wie sie in VALANIS [132, 133] beschrieben wird. Diese Plastizitätstheorie unterscheidet sich zu den Theorien für metallische Werkstoffe dadurch, dass sie keine Fließfläche aufweist, d.h. es gibt keinen rein elastischen Bereich. Die quadratische freie Energie wird zu

$$\psi^{ep}(\mathbf{E}^{ep}, \mathbf{M}) = \frac{1}{2} \mathbf{E}^{ep} : \mathbb{E} : \mathbf{E}^{ep} + \frac{1}{2} \mathbf{E}^p : \mathbb{E}_0 : \mathbf{E}^p \quad (5.127)$$

angenommen. Dies repräsentiert einen Ansatz für eine kinematische Verfestigung. Es wird die Abkürzung $\mathbb{E}_0 = r^p \mathbb{E}$ eingeführt, wobei r^p einen skalaren Faktor darstellt und als Materialparameter aufgefasst wird. Die Spannungen ergeben sich durch partielles Ableiten der Gleichung (5.127) nach den totalen Verzerrungen \mathbf{E} . Es gilt

$$\mathbf{T}^{ep}(\mathbf{E}^{ep}, \mathbf{M}) = \frac{\partial \psi^{ep}}{\partial \mathbf{E}} = \mathbb{E} : \mathbf{E}^{ep}. \quad (5.128)$$

Die thermodynamische Kraft, die die Evolution der plastischen Verzerrungen bestimmt, ist durch die Ableitung

$$\mathbf{T}^p = -\frac{\partial \psi^{ep}}{\partial \mathbf{E}^p} = \mathbb{E} : \mathbf{E}^{ep} - \mathbb{E}_0 : \mathbf{E}^p \quad (5.129)$$

gegeben. Als einfachste Form für die Evolution der internen plastischen Verzerrungen wird der folgende lineare Ansatz

$$\dot{\mathbf{E}}^p = \frac{\dot{z}}{\eta^p} \mathbf{T}^{ep} \quad \text{mit} \quad \dot{z} = \|\dot{\mathbf{E}}\| \quad (5.130)$$

gewählt. Zur Modellierung der Schädigung wird das in MIEHE [71] vorgestellte Modell zur diskontinuierlichen Schädigung herangezogen. Dieser Ansatz bezieht einen ratenunabhängigen Schädigungseffekt auf das Maximum der deviatorischen Verzerrungen, d.h. die Schädigung entwickelt sich nur bei Überschreiten der bis zu diesem Zeitpunkt aufgetretenen maximalen deviatorischen Verzerrungen. Hierbei beeinflusst die Schädigung lediglich den elastoplastischen Anteil des Materialmodells. Zur ratenunabhängigen Beschreibung der Belastungsgeschichte wird eine interne Schädigungsvariable

$$\alpha := \max_{s \in (0, t)} \|\text{dev}[\mathbf{E}]\| \quad (5.131)$$

eingeführt, die ein Maß für die bisher aufgetretenen maximalen deviatorischen Verzerrungen ist. Als Schädigungsfunktion wird der Exponentialansatz

$$d(\alpha) := d^\infty \left(1 - \exp \left[-\frac{\alpha}{\eta^d} \right] \right) \quad (5.132)$$

gewählt. Dies ist eine Sättigungsfunktion, die über die beiden Materialparameter η^d und d^∞ gesteuert wird. Im Grenzfall konvergiert die Schädigungsfunktion aus Gleichung (5.132) gegen den Wert d^∞ . Dieser Wert entspricht der maximal auftretenden Schädigung. Die Geschwindigkeit in der die Schädigungsfunktion d gegen diesen Wert konvergiert, wird über den Faktor $1/\eta^d$ geregelt. Aus physikalischen Gründen muss die Schädigungsvariable d im Intervall $[0, 1]$ liegen.

Das viskoelastische Teilwerkstoffgesetz

Bei der folgenden Darstellung des viskoelastischen Teilwerkstoffgesetzes wird lediglich das i -te Maxwell Element behandelt. Die freie Energie ergibt sich als quadratische Funktion in den elastischen Verzerrungen zu

$$\psi_i^{ev}(\mathbf{E}_i^v, \mathbf{M}) = \frac{1}{2} \mathbf{E}_i^{ev} : \mathbb{E}_i : \mathbf{E}_i^{ev} \quad (5.133)$$

mit der Abkürzung $\mathbb{E}_i = r_i^v \mathbb{E}$. Hieraus ergeben sich die Spannungen des i -ten Maxwell Elementes unter Beachtung von Gleichung (5.124) zu

$$\mathbf{T}_i^v = \mathbb{E}_i : \mathbf{E}_i^{ev} = \mathbb{E}_i : (\mathbf{E} - \mathbf{E}_i^v). \quad (5.134)$$

Die hier angesetzte lineare Evolutionsgleichung verknüpft die Evolution der viskosen Verzerrungen mit der thermodynamischen Kraft in einfachster Form unter Einführung der Viskosität η_i^v .

$$\dot{\mathbf{E}}_i^v = \frac{1}{\eta_i^v} \mathbf{T}_i^v \quad (5.135)$$

Auf die Darstellung der algorithmischen Spannungen und Moduli im Rahmen einer impliziten Zeitintegration der Evolutionsgleichungen wird hier verzichtet. Da es sich ausschließlich um lineare Evolutionsgleichungen handelt, kann diese Integration geschlossen ausgeführt werden. Die Moduli ergeben sich direkt aus der Ableitung der algorithmischen Spannungen nach den aktuellen Verzerrungen.

5.4.2. Experimentelle Daten und Identifikation der Materialparameter

Der Identifikation liegen zwei unterschiedliche axiale Experimententypen zugrunde. Dabei handelt es sich um die in Abbildung 46 dargestellten zyklischen Versuche, bei denen die maximale Verzerrung in Stufen von 1 auf 1.5 und 2 % gesteigert wird. Bei jeder Stufe werden fünf Zyklen gefahren. Als zweites werden zyklische Versuche mit Haltezeiten durchgeführt, siehe Abbildung 47. Hier werden zwei Zyklen gefahren, bei denen die Haltezeiten im aufsteigenden Bereich zu 12 Stunden und im absteigenden Bereich zu 8 Stunden gewählt wurden. Die Haltepunkte werden alle 0.25 % angeordnet. Die aufgezeigten Experimente wurden an Proben mit der in Abbildung 45 dargestellten Probengeometrie durchgeführt. Die unterschiedlichen Faserorientierungen von 0, 15, 30, 45 und 90 Grad

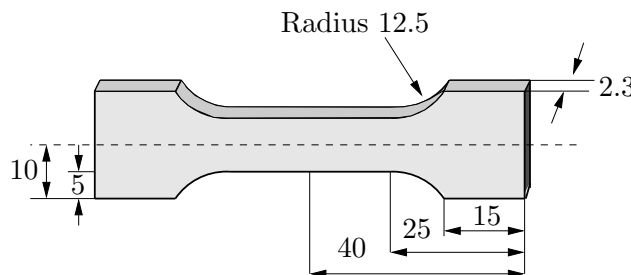


Abbildung 45: Geometrie und Abmessungen in mm des transversal isotropen Probekörpers aus kurzglasfaserverstärktem Polyamid 66. Die Anisotropierichtung ergibt sich aus dem Winkel unter dem die Probe aus der Rohmaterialplatte herausgearbeitet wird.

ergeben sich aus dem Herstellungsprozess, bei dem die Probekörper mit unterschiedlicher Orientierung aus der Rohmaterialplatte herausgearbeitet werden.

Die durchgeführten Experimente zeigen ein deutlich richtungsabhängiges Verhalten des Materials. Die Versuche in Faserlängsrichtung ergeben ein steiferes Verhalten als in Querrichtung. In Abbildung 46 ist das Schädigungsverhalten des Materials sichtbar. Bei einer Steigerung der maximalen Verzerrung ist ein Abfallen der Zyklen sichtbar. Im Langzeitverhalten, Abbildung 47, ist eine Spannungsrelaxation in den einzelnen Haltezeiten zu erkennen. Die Haltezeiten sind nicht ausreichend um eine vollständige Relaxation zu erzielen. In weiteren Experimenten mit längeren Haltezeiten ist jedoch eine plastische Hysterese zu erkennen.

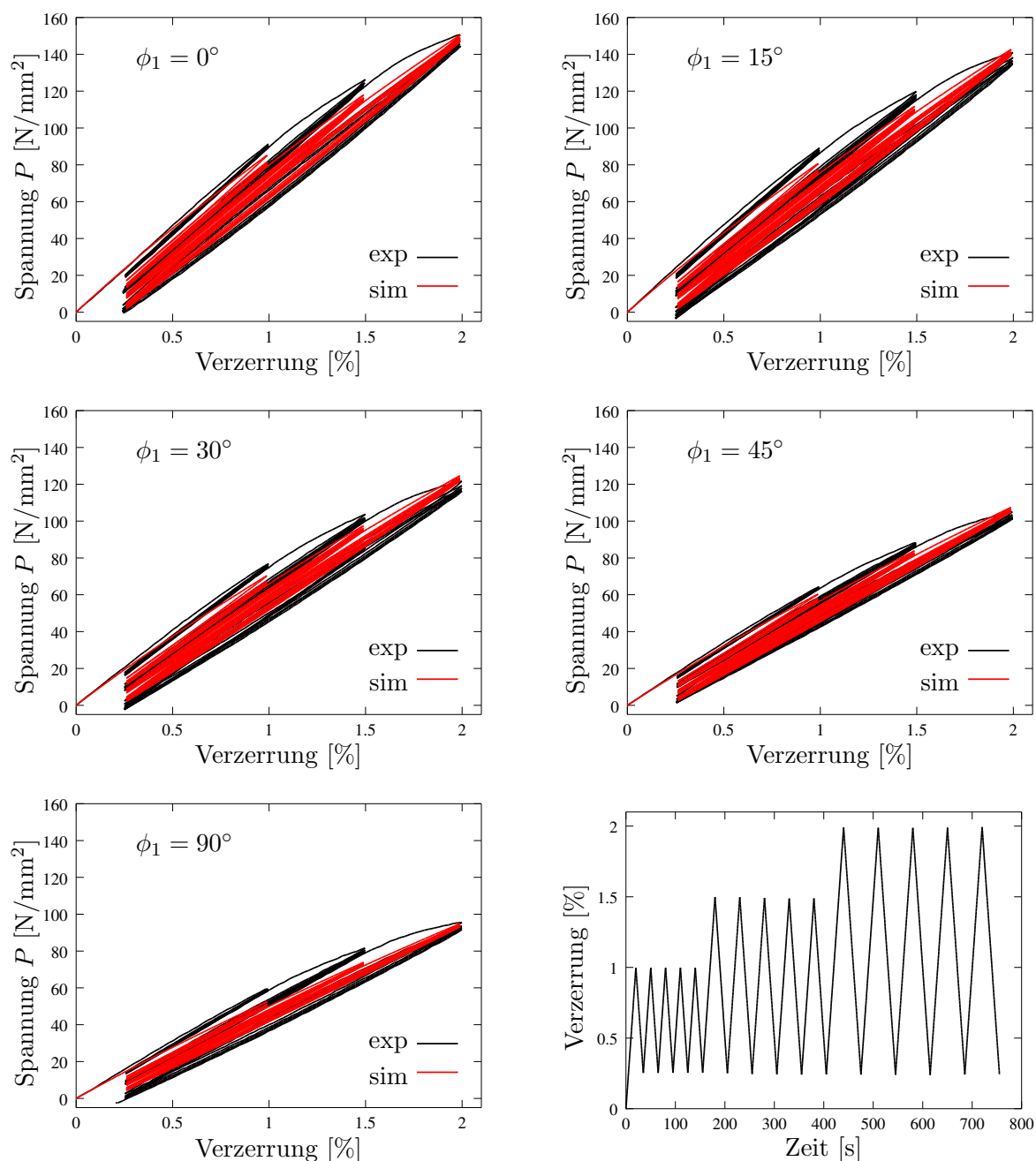


Abbildung 46: Nominalspannung der fünf Versuche mit Faserorientierungen 0, 15, 30, 45 und 90 Grad für Experiment und Simulation. Das Bild unten rechts stellt die Versuchssteuerung über der Prozesszeit dar.

Um die Anzahl der Parameter auf eine vertretbare und identifizierbare Anzahl zu be-

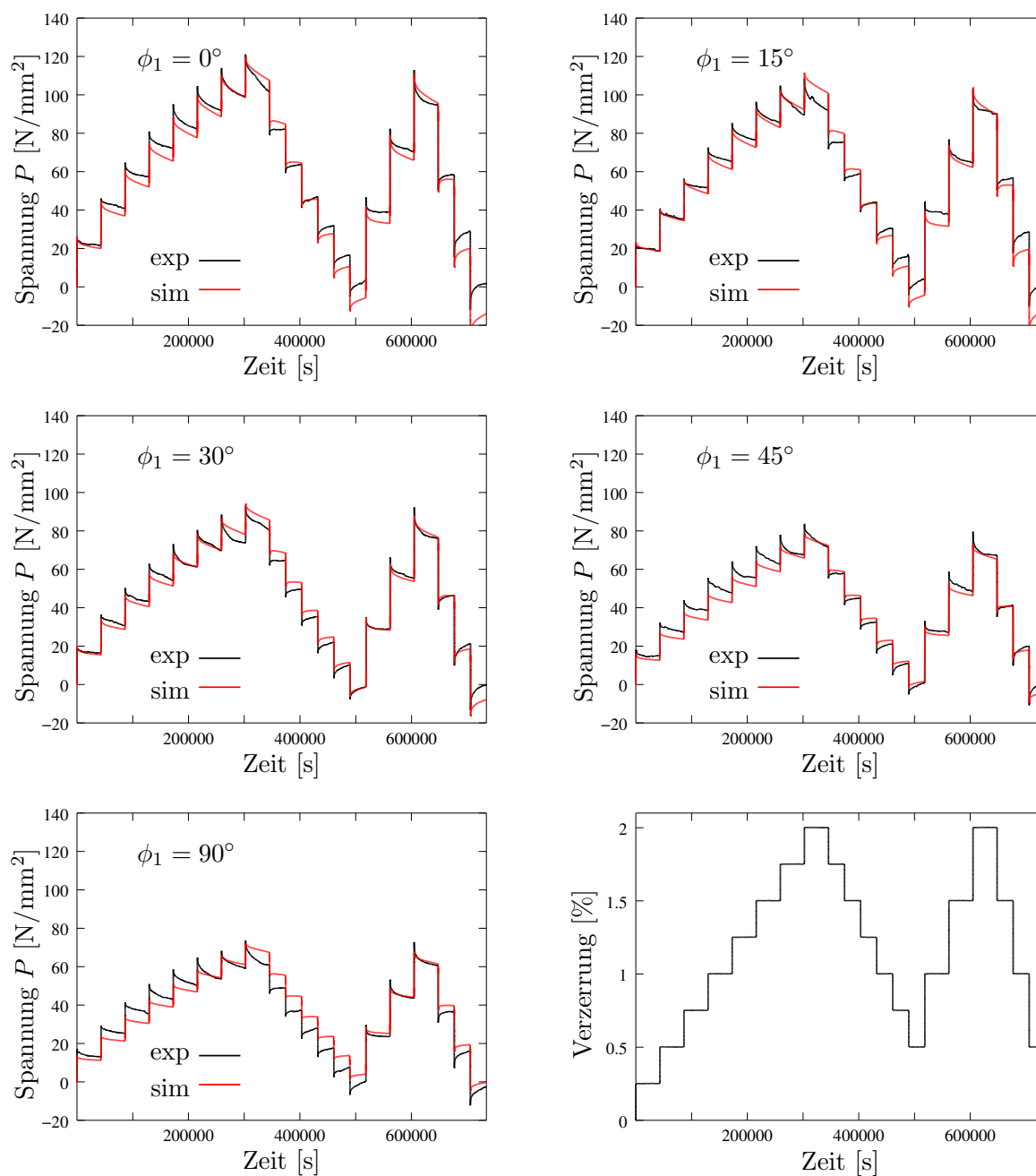


Abbildung 47: Nominalspannung der fünf Versuche mit Faserorientierungen 0, 15, 30, 45 und 90 Grad für Experiment und Simulation. Das Bild unten rechts stellt die Versuchssteuerung der Verzerrung über der Prozesszeit dar.

grenzen, wird die in Gleichung (5.126) eingeführte Tangentensteifigkeit als Referenzwert betrachtet. Alle weiteren Tangentenmoduli werden hieraus durch Skalieren mit einem Vorfaktor erzeugt und nicht für jedes Teilwerkstoffgesetz unabhängig aufgestellt. Die viskosen Maxwell-Elemente werden über Zehnerpotenzen in den Relaxationszeiten miteinander verbunden. Somit muss lediglich für ein Element die Viskosität und der Skalierungsfaktor bestimmt werden. Für jedes weitere Element bleibt nur der Skalierungsfaktor zu bestimmen.

In Tabelle 17 sind die optimierten Parameter angegeben. Diese basieren auf einer iterativen Anpassung einzelner Parameter oder Parametergruppen an die dargestellten Experimen-

te. Es wird die Charakteristik der Viskosität anhand der Relaxationsversuche eingestellt. Danach werden die Parameter der anisotropen Tangente und der Plastizität optimiert. Der Kompressionsmodul wird aus hier nicht angegebenen Versuchen zur Querkontraktion bestimmt, die bei der Robert Bosch GmbH durchgeführt wurden. Da die elastischen Konstanten auch die Viskosität beeinflussen, wird diese Prozedur mehrmals wiederholt, bis keine wesentliche Änderung in den Parametern mehr zu erkennen ist. Die Abbildungen 46 und 47 unterstreichen die sehr gute Übereinstimmung von Simulation und Experiment bei beiden Experimenttypen und allen Faserorientierungen.

Parameter	κ	μ_T	α	β	μ_L	η_p	r_p
Lösung	1064.21	1081.20	689.84	1601.84	901.09	60.102	5.666
Parameter	d_∞	η_d	η_v	r_{v1}	r_{v2}	r_{v3}	r_{v4}
Lösung	0.500	0.035	$1.0 \cdot 10^9$	0.986	0.085	0.220	0.217

Tabelle 17: Identifizierte Materialparameter für das visko-elastoplastische Materialmodell.

5.4.3. Validation mit Kriechversuchen

Zur Validation des Modells samt optimierten Parametern wird eine dritte Art an Experimenten durchgeführt. Dies sind spannungsgesteuerte Kriechversuche, wobei die Probe sukzessive mit den Spannungen 25, 50 und wieder mit 25 N/mm² belastet wird. Die experimentellen Ergebnissen sind der Abbildung 48 zu entnehmen. Gleichzeitig ist auch die Simulation mit den Materialparametern aus Tabelle 17 dargestellt. Es ist eine gute Übereinstimmung im Kriechverhalten des Materials zu erkennen.

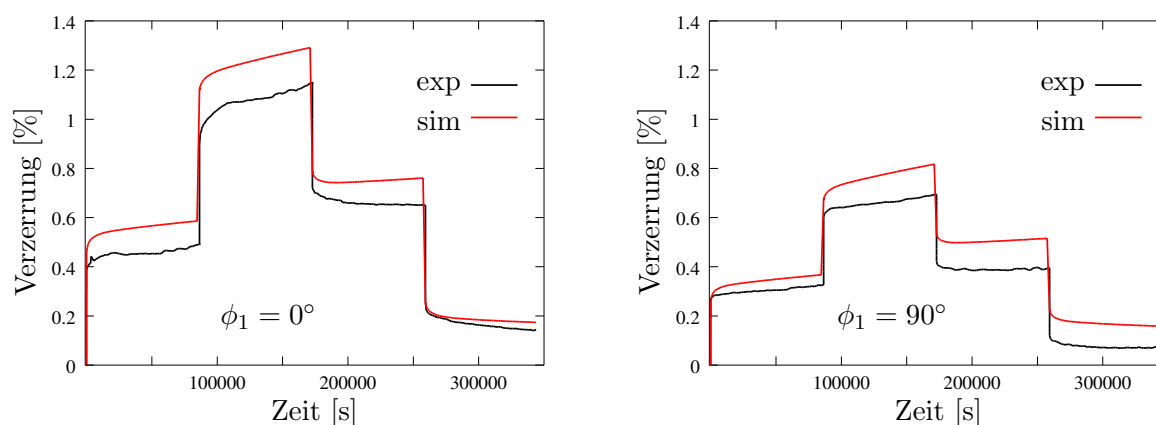


Abbildung 48: Verzerrung über Zeit für die Kriechversuche bei den Faserorientierungen 0 und 90 Grad.

5.5. Zug-Treiber bei anisotropem Materialverhalten

Im Rahmen der herkömmlichen Parameterbestimmung werden Experimente an eindimensionalen isotropen Probekörpern durchgeführt. Die Spannungen und Verzerrungen werden als homogen über den Probenquerschnitt angenommen und die Simulation kann sich auf einen einzigen materiellen Punkt beschränken und muss nicht das gesamte Randwertproblem in Betracht ziehen. Wird im Vergleich dazu eine anisotrope Probe getestet, sind die Spannungen und Verzerrungen nicht mehr homogen über den Probenquerschnitt verteilt. Sie hängen stark von der Richtung der Anisotropie und der Probengeometrie ab.

Dies resultiert daraus, dass Normal- und Schubkomponenten nicht entkoppelt sind wie es bei isotropem Material der Fall ist. Für eine korrekte Simulation müsste das gesamte Randwertproblem simuliert werden. Dies lässt jedoch die Rechenzeit einer Optimierung sehr stark ansteigen. Aus diesem Grund wird versucht, auch bei der Simulation anisotropem Werkstoffverhaltens einen Treiberalgorithmus zu verwenden. Bei einer Vorgabe der Deformation in e_1 -Richtung werden zwei Extremfälle untersucht. Dies ist zum einen

- 1.) das seitliche Ausweichen ist behindert. Die rechten Winkel bleiben erhalten. Es treten dementsprechend Schubspannungskomponenten auf, die ungleich Null sind. Dies ist durch den Deformationsgradienten \mathbf{F}_1 in Gleichung (5.136) gegeben.

$$\mathbf{F}_1 = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & f_1(\lambda) & 0 \\ 0 & 0 & f_2(\lambda) \end{bmatrix} \quad (5.136)$$

- 2.) das seitliche Ausweichen ist völlig frei, d.h. die Schubspannungen werden zu Null angenommen. Die Querdeformationen werden iteriert, so dass diese Spannungskomponenten Null werden, siehe (5.137).

$$\mathbf{F}_2 = \begin{bmatrix} \lambda & f_3(\lambda) & f_5(\lambda) \\ f_6(\lambda) & f_1(\lambda) & f_4(\lambda) \\ f_8(\lambda) & f_7(\lambda) & f_2(\lambda) \end{bmatrix} \quad (5.137)$$

Die beiden Fälle sind bei der Simulation mit einem isotropen Material identisch, da hier die Schubkomponenten entkoppelt von den Normalkomponenten sind. In nachfolgender Abbildung 49 sind die beiden Varianten verdeutlicht. Die Iterationsvorschrift für die unbe-

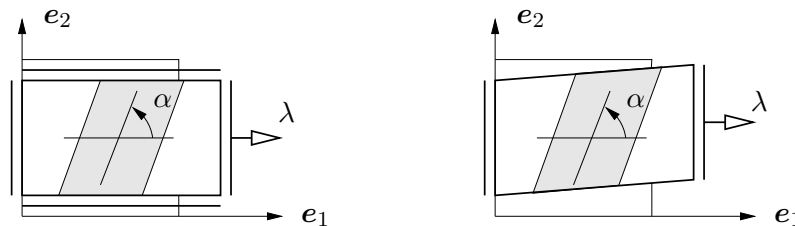


Abbildung 49: Unterschiedliche Randbedingungen bei Treiber-Tests mit anisotropem Material. Links: Schubdeformationen sind nicht erlaubt. Daraus resultieren Schubspannungen. Rechts: Schubdeformationen sind zugelassen. Die zugehörigen Spannungskomponenten sind Null.

stimmten Komponenten des Deformationsgradienten, die der Treiber-Rechnung zugrunde liegt ist

$$\bar{\mathbf{F}}_{n+1} = \bar{\mathbf{F}}_{n+1} + \Delta \bar{\mathbf{F}}_{n+1} = \bar{\mathbf{F}}_{n+1} + \bar{\mathbf{A}}_{n+1}^{-1} : \bar{\mathbf{P}}_{n+1} \quad (5.138)$$

Werden nun Schubverzerrungen zugelassen, d.h. die Schubspannungen werden ebenfalls wie die Normalspannungen quer zur Belastungsrichtung zu Null iteriert, so gilt

$$\bar{\mathbf{F}}_{n+1} \in \mathbb{R}^8 \quad \text{und} \quad \bar{\mathbf{A}}_{n+1} \in \mathbb{R}^{8 \times 8} \quad (5.139)$$

mit den Einträgen

$$\bar{\mathbf{F}}_{n+1} = \begin{bmatrix} F_{22} \\ F_{33} \\ F_{12} \\ F_{23} \\ \vdots \\ F_{31} \end{bmatrix}, \quad \mathbb{A}_{n+1} = \begin{bmatrix} \mathbb{A}_{2222} & \mathbb{A}_{2233} & \mathbb{A}_{2212} & \mathbb{A}_{2223} & \cdots & \mathbb{A}_{2231} \\ \mathbb{A}_{3322} & \mathbb{A}_{3333} & \mathbb{A}_{3312} & \mathbb{A}_{3323} & \cdots & \mathbb{A}_{3331} \\ \mathbb{A}_{1222} & \mathbb{A}_{1233} & \mathbb{A}_{1212} & \mathbb{A}_{1223} & \cdots & \mathbb{A}_{1231} \\ \mathbb{A}_{2322} & \mathbb{A}_{2333} & \mathbb{A}_{2312} & \mathbb{A}_{2323} & \cdots & \mathbb{A}_{2331} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbb{A}_{3122} & \mathbb{A}_{3133} & \mathbb{A}_{3112} & \mathbb{A}_{3123} & \cdots & \mathbb{A}_{3131} \end{bmatrix}. \quad (5.140)$$

Werden keine Schubverzerrungen zugelassen, d.h. es treten Schubspannungen auf, so reduziert sich das zu lösende System auf

$$\bar{\mathbf{F}}_{n+1} \in \mathbb{R}^2 \quad \text{und} \quad \bar{\mathbb{A}}_{n+1} \in \mathbb{R}^{2 \times 2} \quad (5.141)$$

mit den Einträgen

$$\bar{\mathbf{F}}_{n+1} = \begin{bmatrix} F_{22} \\ F_{33} \end{bmatrix}, \quad \bar{\mathbb{A}}_{n+1} = \begin{bmatrix} \mathbb{A}_{2222} & \mathbb{A}_{2233} \\ \mathbb{A}_{3322} & \mathbb{A}_{3333} \end{bmatrix}. \quad (5.142)$$

Bei einer endlichen anisotropen Probe wird sich weder der eine, noch der andere Zustand einstellen, sondern ein Zustand der dazwischen liegt. Hierzu wird die in Abbildung 45 verwendete Probengeometrie diskretisiert und mit einem rein elastischen transversal isotropen Materialmodell mit den optimierten elastischen Parametern aus Tabelle 17 einer Belastung unterworfen. Die Deformation der Probe in Probenlängsrichtung wird so gewählt, dass in der Messlänge von 20 mm im homogenen Teil der Probe eine Verzerrung von 2 % auftritt. In Abbildung 50 sind die Spannungen in Probenlängsrichtung für unterschiedliche Anisotropierichtungen dargestellt. Dies wird mit den zwei beschriebenen möglichen

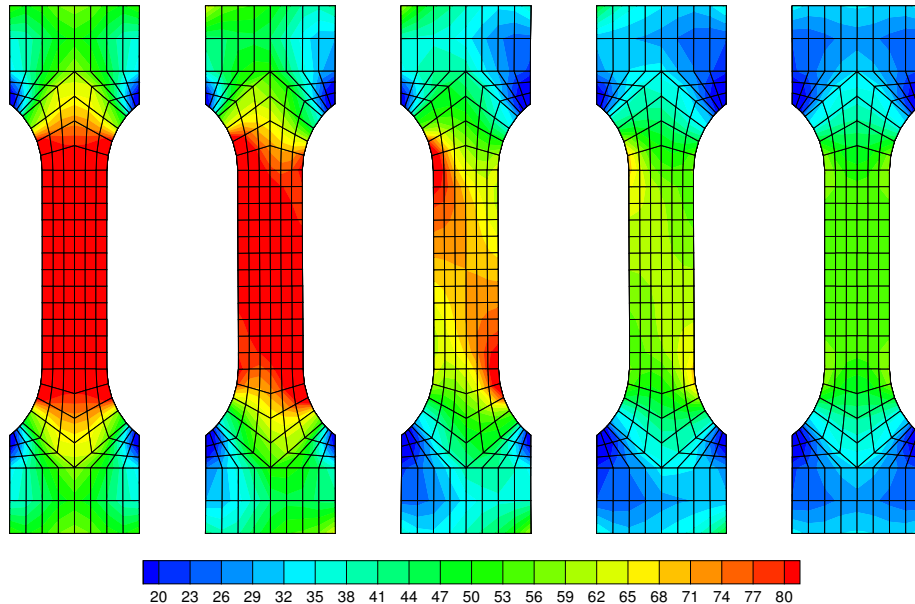


Abbildung 50: Spannungsverteilung in Längsrichtung der transversal isotropen Probekörper. Die Richtung der Anisotropie wurde zu 0 Grad (Fasern in Zugrichtung), 15, 30, 45 und 90 Grad gewählt.

Treiber-Rechnungen verglichen. Dabei wird der Faserwinkel im Bereich $\phi_1 \in [0^\circ, 90^\circ]$ variiert. Das Ergebnis ist in Abbildung 51 dargestellt. Hierbei ist zu erkennen, dass bei einer

Faserrichtung senkrecht oder quer zur Zugrichtung die beiden Treiber-Varianten die selbe Spannungsantwort liefern. Bei dazwischenliegenden Faserorientierungen, hauptsächlich im Bereich von 10 bis 40 Grad, differieren die Spannungen, wobei die Variante 2 ein etwas steiferes Verhalten in Zugrichtung zeigt. Wie zu erwarten war, liegt die Spannungsantwort der diskreten Struktur zwischen den beiden Extremfällen, wobei zu erkennen ist, dass die Lösung näher an der weichen Version liegt. Dies ist nur ein exemplarisches Ergebnis. Die

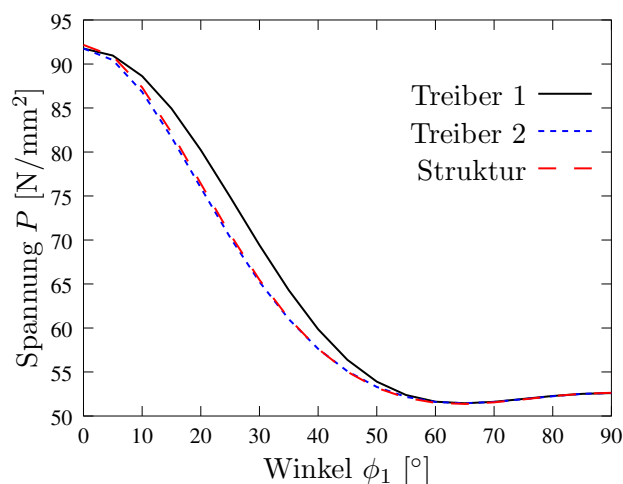


Abbildung 51: Vergleichsrechnung der zwei Treiber-Varianten und der Strukturberechnung. Darstellung der e_1 -Komponente der Nominalspannung über dem Faserwinkel ϕ_1 für eine Verzerrung von 2 %.

Ausprägung dieses Effektes ist von der Struktur und von der Art und Stärke der Anisotropie abhängig. Für diesen untersuchten Fall ist die Berechnung der eindimensionalen Spannungszustände mit der Treiber-Variante 1 gerechtfertigt, da diese nicht allzu sehr von der Variante 2 abweicht und weniger rechenintensiv ist.

6. Parameteridentifikation mit der Finite Elemente Methode

6.1. Variationsformulierung der Finite Elemente Methode

Betrachtet wird die Diskretisierung der Referenzkonfiguration \mathcal{B} und die Diskretisierung der Momentankonfiguration \mathcal{S} des deformierten elastischen Körpers über der Zeit. Das

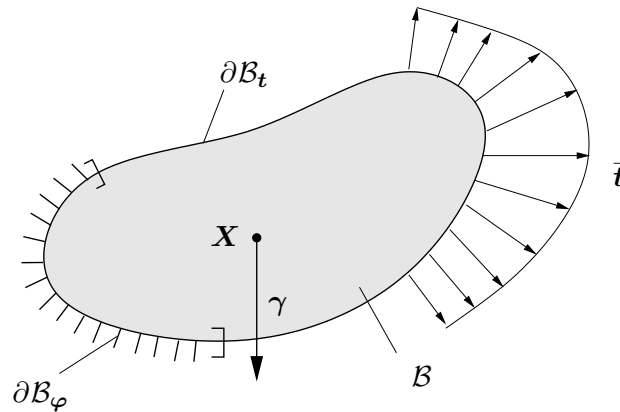


Abbildung 52: Materieller Körper \mathcal{B} mit gegebener Belastung $\bar{\mathbf{t}}$ auf dem Rand $\partial\mathcal{B}_t$ und gegebenen Volumenlasten γ . Auf dem Rand $\partial\mathcal{B}_\varphi$ sind die Verschiebungen vorgegeben.

Randwertproblem wird durch die lokale Impulsbilanz in der Referenz- oder Lagrange'schen Konfiguration beschrieben.

$$\text{DIV}[\mathbf{P}] + \rho_0\gamma = \mathbf{0} \quad \text{in } \mathcal{B} \quad \text{mit} \quad \mathbf{P} = \partial_{\mathbf{F}}\psi(\mathbf{F}) \quad (6.1)$$

Für eine quasistatische Betrachtung werden die Beschleunigungsterme in Gleichung (6.1) nicht berücksichtigt. Zur vollständigen Beschreibung des Randwertproblems sind die Angaben der Randbedingungen erforderlich. Auf dem Rand des betrachteten Körpers $\partial\mathcal{B}$ werden Spannungs- und Verschiebungsrandbedingungen vorgegeben, wobei die Spannungen dem Cauchy Theorem unterliegen.

$$\mathbf{t} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{N} \quad \text{auf } \partial\mathcal{B}_t \quad \text{und} \quad \varphi = \bar{\varphi} \quad \text{auf } \partial\mathcal{B}_\varphi \quad (6.2)$$

Um diese Aufteilung durchführen zu können, ist die Oberfläche $\partial\mathcal{B}$ wie in Abbildung 52 gezeigt, in einen Bereich mit vorgegebenen Verschiebungen $\partial\mathcal{B}_\varphi$ und einen Bereich mit vorgegebenen Spannungen $\partial\mathcal{B}_t$ aufgeteilt. Für die Bereiche gilt weiterhin

$$\partial\mathcal{B} = \partial\mathcal{B}_\varphi \cup \partial\mathcal{B}_t \quad \text{und} \quad \partial\mathcal{B}_\varphi \cap \partial\mathcal{B}_t = \emptyset. \quad (6.3)$$

Die Gleichungen (6.1) und (6.2) charakterisieren die starke Form des Randwertproblems der finiten Elastostatik. Dies kann in der üblichen Potentialform

$$\Pi(\varphi) = \int_{\mathcal{B}} \psi(\nabla\varphi) dV - \Pi^{ext}(\varphi) \rightarrow \min. \quad (6.4)$$

geschrieben werden, wobei mit Π^{ext} das äußere Potential, assoziiert zu den Volumenkräften γ und den Oberflächenlasten $\bar{\mathbf{t}}$, darstellt. Das äußere Potential ist definiert zu

$$\Pi^{ext}(\varphi) = \int_{\mathcal{B}} \varphi \cdot \rho_0\gamma dV + \int_{\partial\mathcal{B}_t} \varphi \cdot \bar{\mathbf{t}} dA. \quad (6.5)$$

Die Variation des Potentials (6.4) liefert $\delta\Pi(\boldsymbol{\varphi}, \delta\boldsymbol{\varphi}) = \frac{\partial\Pi}{\partial\boldsymbol{\varphi}}\delta\boldsymbol{\varphi} = G(\boldsymbol{\varphi}, \delta\boldsymbol{\varphi})$ mit den Ausdrücken

$$G(\boldsymbol{\varphi}, \delta\boldsymbol{\varphi}) = \int_{\mathcal{B}} \delta\mathbf{F} : \mathbf{P} \, dV - G^{ext}(\delta\boldsymbol{\varphi}) = 0 \quad , \quad (6.6)$$

wobei für die Variation des äußeren Potentials mit Volumenkräften und Oberflächenlasten

$$G^{ext} = \int_{\mathcal{B}} \delta\boldsymbol{\varphi} \cdot \rho_0 \boldsymbol{\gamma} \, dV + \int_{\partial\mathcal{B}_t} \delta\boldsymbol{\varphi} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, dA \quad (6.7)$$

gilt. Infolge des nichtlinearen Zusammenhangs der Deformation $\boldsymbol{\varphi}$ und der Spannungen $\mathbf{P} = \mathbf{P}(\mathbf{F})$ muss die Gleichung (6.6) iterativ im Rahmen einer Newton-Iteration gelöst werden. Das Newton Verfahren basiert auf der Linearisierung der Gleichung (6.6) an der Stelle $\bar{\boldsymbol{\varphi}}$ und nimmt folgende Gestalt an.

$$\text{Lin } G(\bar{\boldsymbol{\varphi}}, \delta\boldsymbol{\varphi}, \Delta\boldsymbol{\varphi}) = G(\bar{\boldsymbol{\varphi}}, \delta\boldsymbol{\varphi}) + \Delta G(\bar{\boldsymbol{\varphi}}, \delta\boldsymbol{\varphi}, \Delta\boldsymbol{\varphi}) \quad (6.8)$$

Das Inkrement ΔG besitzt die Form

$$\Delta G(\bar{\boldsymbol{\varphi}}, \delta\boldsymbol{\varphi}, \Delta\boldsymbol{\varphi}) = \int_{\mathcal{B}} \delta\mathbf{F} : \mathbb{A} : \Delta\mathbf{F} \, dV \quad (6.9)$$

wobei mit $\mathbb{A} := \partial_{\mathbf{F}\mathbf{F}}^2\psi$ der momentane Elastizitätstensor eingeführt wird, der das lineare Inkrement der Spannungen $\Delta\mathbf{P}$ mit einer Änderung der Deformation $\Delta\mathbf{F}$ verknüpft.

$$\Delta\mathbf{P} = \mathbb{A} : \Delta\mathbf{F} \quad (6.10)$$

6.2. Finite Elemente Diskretisierung mit der Standard Verschiebungsmethode

Es wird eine Diskretisierung sowohl der Lagrange'schen als auch der Euler'schen Konfiguration durch ein Finite Elemente Netz betrachtet. Diese Netze bestehen aus Lagrange'schen und Euler'schen Knoten und der dazugehörigen Topologie, die den jeweiligen Elementgebieten \mathcal{B}^e und \mathcal{S}_t^e die globalen Knotennummern zuweist. Die Referenz- und Momentankonfiguration wird in m Finite Elemente unterteilt,

$$\mathcal{B} = \bigcup_{e=1}^m \mathcal{B}^e \quad \text{und} \quad \mathcal{S}_t = \bigcup_{e=1}^m \mathcal{S}_t^e. \quad (6.11)$$

Es werden zwei Abbildungen betrachtet, die die Position von materiellen Punkten innerhalb eines Finiten Elements parametrisieren. Dies sind die Lagrange'sche und Euler'sche Parameterabbildung

$$\left. \begin{aligned} \hat{\mathbf{X}} : & \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{A}^e \rightarrow \mathcal{B}^e \\ \boldsymbol{\xi} \mapsto \mathbf{X} = \hat{\mathbf{X}}(\boldsymbol{\xi}) \end{array} \right\} \\ \hat{\mathbf{x}}_t : & \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{A}^e \rightarrow \mathcal{S}_t^e \\ \boldsymbol{\xi} \mapsto \mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\xi}) \end{array} \right\} \end{aligned} \right\}. \quad (6.12)$$

Diese beiden Abbildungen werden mit gegebenen Ansatzfunktionen und diskreten Knotenpositionen definiert. Damit erhalten wir die Approximation der Geometrie in der Referenz-

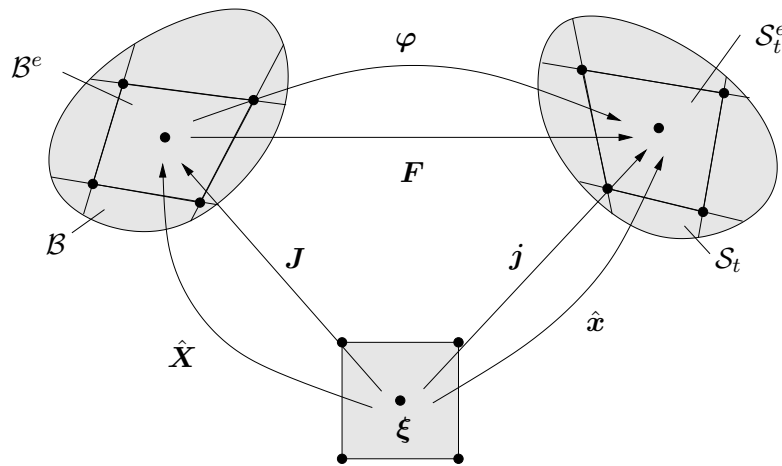


Abbildung 53: Parametrisierung der Referenzkonfiguration \mathcal{B} durch $\mathbf{X} = \hat{\mathbf{X}}(\xi, \eta, \zeta)$ und der Momentankonfiguration \mathcal{S}_t durch $\mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}}(\xi, \eta, \zeta)$.

und Momentankonfiguration für ein achtknotiges Volumenelement zu

$$\left. \begin{aligned} \hat{\mathbf{X}} &= \sum_{I=1}^8 N^I(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{D}_I \\ \hat{\mathbf{x}} &= \sum_{I=1}^8 N^I(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{d}_I \end{aligned} \right\} \quad (6.13)$$

mit der bekannten isoparametrischen Abbildung der Referenzkonfiguration und der unbekannt isoparametrischen Abbildung der Momentankonfiguration mit den Ansatzfunktionen N^I in natürlichen Koordinaten $\boldsymbol{\xi}^T = (\xi, \eta, \zeta)$ und den Definitionsbereichen $\xi \in [-1, 1]$, $\eta \in [-1, 1]$ und $\zeta \in [-1, 1]$ im isoparametrischen Unterraum. Die Ansatzfunktionen lassen sich über

$$N^I := \frac{1}{8}(1 + \xi\xi_I)(1 + \eta\eta_I)(1 + \zeta\zeta_I) \quad (6.14)$$

berechnen. Dabei stellen die Werte (ξ_I, η_I, ζ_I) die Knotenkoordinaten im isoparametrischen Unterraum und $\mathbf{D}_I, \mathbf{d}_I$ die Knotenkoordinaten in der Referenz- bzw. in der Momentankonfiguration dar, siehe Abbildung 53. Mit den beiden Parameterabbildungen (6.13) ergibt sich die Deformationsabbildung des Finiten Elements

$$\varphi_t : \begin{cases} \mathcal{B}^e \rightarrow \mathcal{S}_t^e \\ \mathbf{X} \mapsto \mathbf{x} = \varphi_t(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (6.15)$$

durch die Komposition

$$\varphi_t = \hat{\mathbf{x}}_t \circ \hat{\mathbf{X}}^{-1} \quad \text{in } \mathcal{B}^e \subset \mathcal{B} \quad (6.16)$$

mit bekannten Ansatzfunktionen und bekannten Lagrange'schen Knotenkoordinaten.

Im Folgenden wird der Deformationsgradient $\mathbf{F} := \nabla_{\mathbf{X}} \varphi_t$ im Finiten Element berechnet. Hierzu berechnet sich die Jacobi-Abbildungen als Gradienten der Euler'schen und Lagrange'schen Parameterabbildungen und sind definiert zu

$$\mathbf{J} := \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}}{\partial \boldsymbol{\xi}} \quad \text{und} \quad \mathbf{j} := \frac{\partial \hat{\mathbf{x}}}{\partial \boldsymbol{\xi}}. \quad (6.17)$$

Diese Ableitungen können für die Finite Elemente Diskretisierung über

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{J} &= J^A_i = \frac{\partial X^A}{\partial \xi^i} = \sum_{I=1}^n N_{,i}^I \mathbf{D}^I \\ \mathbf{j} &= j^a_i = \frac{\partial x^A}{\partial \xi^i} = \sum_{I=1}^n N_{,i}^I \mathbf{d}^I \end{aligned} \right\} \quad (6.18)$$

berechnet werden, wobei von den Ableitungen $N_{,i}^I$ der Ansatzfunktionen nach den natürlichen Koordinaten Gebrauch gemacht wird. Der Deformationsgradient berechnet sich dann aus der Komposition

$$\mathbf{F} := \nabla_{\mathbf{X}} \varphi_t = \nabla_{\mathbf{X}} (\hat{\mathbf{x}}_t \circ \hat{\mathbf{X}}^{-1}) = \nabla_{\xi} \hat{\mathbf{x}}_t \circ (\nabla_{\xi} \hat{\mathbf{X}})^{-1}. \quad (6.19)$$

Daraus ergibt sich die fundamentale Darstellung des Deformationsgradienten für ein Finites Element zu

$$\mathbf{F} = \mathbf{j} \mathbf{J}^{-1} \quad \text{in} \quad \mathcal{B}^e \in \mathcal{B}. \quad (6.20)$$

Der Deformationsgradient ist eine Funktion der aktuellen euler'schen Knotenpositionen \mathbf{d}^I . Aus der letzten Gleichung lässt sich der Deformationsgradient in folgender Form darstellen.

$$\mathbf{F} = \left(\sum_{I=1}^n N_{,i}^I \mathbf{d}_t^I (\mathbf{J}^{-1})^i_A = \sum_{I=1}^n N_{,i}^I (\mathbf{J}^{-1})^i_A \mathbf{d}_t^I = \sum_{I=1}^n N_{,A}^I \mathbf{d}_t^I =: \sum_{I=1}^n B_{,A}^I \mathbf{d}_t^I \right) \quad (6.21)$$

mit den B-Matrizen assoziiert zum Knotenpunkt I .

$$B_{,A}^I = N_{,A}^i = N_{,j}^I (\mathbf{J}^{-1})^j_A \quad (6.22)$$

Gleichung (6.21) wird üblicherweise in Matrixform dargestellt

$$\boxed{\mathbf{F} = \mathbf{B}^e(\xi) \mathbf{d}_t^e \quad \text{in} \quad \mathcal{B}^e \subset \mathcal{B}} \quad (6.23)$$

wobei in \mathbf{d}_t^e alle Knotenpositionen \mathbf{d}_t^I des Finiten Elements I zusammengefasst werden. Dasselbe gilt für die Assemblierung aller Knoten B-Matrizen $B_{,A}^I$ in der Element B-Matrix \mathbf{B}^e .

Analog zu Gleichung (6.21) lassen sich die in (6.9) eingeführten virtuellen und inkrementellen Deformationsgradienten über die eingeführte B-Matrix auf Elementebene approximieren.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{F} &= \sum_{I=1}^8 B^I \mathbf{d}^I \\ \delta \mathbf{F} &= \sum_{I=1}^8 B^I \delta \mathbf{d}^I \\ \Delta \mathbf{F} &= \sum_{I=1}^8 B^I \Delta \mathbf{d}^I \end{aligned} \right\} \quad (6.24)$$

Durch Einsetzen in die Linearisierung (6.8) ergibt sich

$$\begin{aligned} \text{Lin } G &= G + \int_{\mathcal{B}} \delta \mathbf{F} : \mathbb{A} : \Delta \mathbf{F} \, dV \\ &= \sum_{e=1}^{n_{ele}} \delta \mathbf{d}^T \left[\int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T \cdot \mathbf{P} \, dV - \mathbf{f}_{ext} \right] + \sum_{e=1}^{n_{ele}} \delta \mathbf{d}^T \left[\int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T : \mathbb{A} : \mathbf{B} \, dV \Delta \mathbf{d} \right] = 0 \end{aligned} \quad (6.25)$$

wobei \mathbf{f}_{ext} dem externen Lastvektor entspricht. Assemblieren über alle Elemente liefert das zu lösende Gleichungssystem für die globalen Knotenpositionen \mathbf{d} in der Form

$$\delta \mathbf{d}[\mathbf{r} + \mathbf{k} \Delta \mathbf{d}] = \mathbf{0} \quad (6.26)$$

das für alle zulässigen virtuellen Knotenpositionen gelten muss. Hier werden die assemblierten Werten des Elementresiduums und der Elementsteifigkeitsmatrix

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r} &:= \bigwedge_{e=1}^{n_{elem}} \mathbf{r}^e & \text{mit} & \quad \mathbf{r}^e := \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T \cdot \mathbf{P} dV - \mathbf{f}_{ext} \\ \mathbf{k} &:= \bigwedge_{e=1}^{n_{elem}} \mathbf{k}^e & \text{mit} & \quad \mathbf{k}^e := \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T : \mathbb{A} : \mathbf{B} dV \end{aligned} \right\} \quad (6.27)$$

eingeführt. Das Inkrement der Positionen $\Delta \mathbf{d}$ wird in jedem Iterationsschritt auf die aktuellen Positionen aufdatiert, $\mathbf{d} \leftarrow \mathbf{d} + \Delta \mathbf{d}$. Dies wird wiederholt, bis Konvergenz eintritt, d.h. bis das Residuum \mathbf{r} oder das Inkrement $\Delta \mathbf{d}$ in einer geeigneten Norm kleiner ist als eine vorgegebene Toleranz.

$$\|\mathbf{r}\| < tol \quad \text{oder} \quad \|\Delta \mathbf{d}\| < tol \quad (6.28)$$

6.3. Aufbau der Zielfunktion

Für ein gegebenes Randwertproblem wird das Fehlerfunktional der Parameteridentifikation aufgestellt. Dies erfolgt über die Differenzen diskreter Oberflächenpositionen von Simulation $\mathbf{d}(\boldsymbol{\kappa})$ und Experiment \mathbf{d}^{exp} . In das Fehlerfunktional gehen eine Reihe diskreter Zeitpunkte t_n , eine diskrete Anzahl an Identifikationsknoten m ein. Die räumliche Dimension wird über die Größe n berücksichtigt. Bei ebenen Problemen ist $n = 2$, bei räumlichen ist $n = 3$. Die zu minimierende Zielfunktion ergibt sich zu

$$f(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{t_n} \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^n [W_{ijk}(d_{ijk}(\boldsymbol{\kappa}) - d_{ijk}^{exp})]^2 \rightarrow \min_{\boldsymbol{\kappa} \in \mathcal{P}}. \quad (6.29)$$

Die Koordinaten, an denen Informationen über die experimentell ermittelten Verschiebungen vorliegen, stimmen im Allgemeinen nicht mit den Koordinaten der Finite Elemente Diskretisierung überein. Der in Gleichung (5.1) eingeführte Projektionsoperator $\mathcal{M} : \mathcal{U}^{exp} \rightarrow \mathcal{U}^{sim}$ bildet hier den Raum der experimentellen Daten in den Raum der diskreten Simulationsdaten ab. Dieser Projektionsoperator interpoliert die zu einem FE-Knoten nächstgelegenen experimentellen Verschiebungsdaten auf die Koordinaten des FE-Knotens. Zur Interpolation der n Verschiebungskomponenten wird der lineare Ansatz in n Variablen gewählt.

$$d(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=0}^n a_i d_i(x_1, \dots, x_n) = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_n x_n \quad (6.30)$$

Für diesen Ansatz ergibt sich die Koeffizientenmatrix \mathbf{G} der Normalenform zu den Koordinaten der Stützstellen. Der Vektor \mathbf{d} enthält die diskreten Verschiebungen der $n + 1$ Messpunkte und \mathbf{a} enthält die zu berechnenden Koeffizienten der Ansatzfunktion.

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 1 & x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & \dots & x_n^{(1)} \\ 1 & x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & \dots & x_n^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_1^{(n+1)} & x_2^{(n+1)} & \dots & x_n^{(n+1)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{d} = \begin{pmatrix} d^{(1)} \\ d^{(2)} \\ \vdots \\ d^{(n+1)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad (6.31)$$

Durch Lösen des linearen Gleichungssystems $\mathbf{G}\mathbf{a} = \mathbf{d}$ ergeben sich die Koeffizienten \mathbf{a} . Anschließend lässt sich mit bekannten Koeffizienten die Verschiebung an der Position des Finite Element Knotens aus Gleichung (6.30) interpolieren. Anschaulich lässt sich dieses

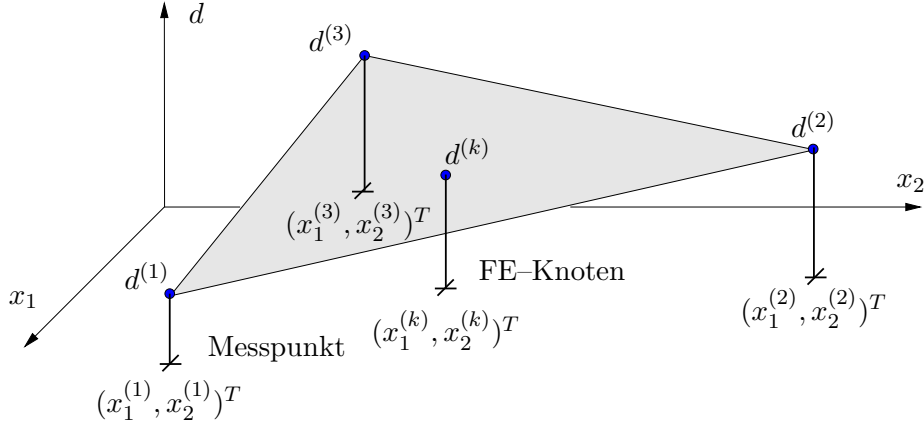


Abbildung 54: Interpolation der Verschiebung d der $n + 1$ nächstgelegenen Datenpunkte des Experiments auf die Position des FE-Knotens für den zweidimensionalen Fall, $n = 2$.

Verfahren nur für den zweidimensionalen Fall darstellen, siehe Abbildung 54.

6.4. Sensitivitätsanalyse im Rahmen der FEM

Im folgenden Abschnitt wird die Sensitivitätsanalyse auf Finite-Element-Ebene dargestellt, die für eine gradientenbasierte Optimierung mit analytischen Gradienten nötig ist. Hierzu muss die Gradientenbildung der Zielfunktion (6.29) bezüglich der Materialparameter durchgeführt werden.

6.4.1. Analytische Gradientenbildung im FE Kontext

Es werden algorithmische Materialmodelle mit der Struktur, die bereits in Abschnitt 2.4.4 beschrieben wurde betrachtet. Die ersten Piola-Kirchhoff Spannungen sind abhängig von den Materialparametern $\boldsymbol{\kappa}$, dem aktuellen lokalen Deformationszustand \mathbf{F} zum Zeitpunkt t_{n+1} und einem Satz an bekannten internen Variablen \mathcal{I}_n zum Zeitpunkt t_n .

$$\mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}(\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{F}_{n+1}; \{\mathbf{F}_n, \mathcal{I}_n\}). \quad (6.32)$$

Der Gradient der Fehlerfunktion (6.29) bezüglich der Materialparameter ergibt sich zu

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}) = \sum_{i=1}^{t_n} \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^n [d_{ijk}(\boldsymbol{\kappa}) - d_{ijk}^{exp}] \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} d_{ijk}(\boldsymbol{\kappa}) \quad (6.33)$$

und enthält die zu bestimmenden Gradienten der Knotenpositionen bezüglich der Materialparameter. Die Positionen selbst sind bereits aus der Messung oder der Simulation bekannt.

Ausgangspunkt der Überlegungen zur Bestimmung der gesuchten Gradienten ist, dass das Residuum am Ende jedes Zeitschrittes t_{n+1} Null sein muss. Die funktionale Abhängigkeit des kontinuierlichen Residuums wird zu $\mathbf{r}(\mathbf{d}(\boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa})$ angenommen, somit ergibt sich für das Residuum

$$\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}(\mathbf{d}(\boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa}) = \mathbf{0}. \quad (6.34)$$

Ist das Residuum Null, so muss auch der Gradient des Residuums bezüglich der Materialparameter verschwinden. Dieser ist

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{r}(\mathbf{d}(\boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa}) = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} + \frac{d\mathbf{r}}{d\mathbf{d}} : \frac{d\mathbf{d}}{d\boldsymbol{\kappa}} = \mathbf{0} \quad (6.35)$$

Dies ist ein System linearer algebraischer Gleichungen mit den Unbekannten $\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{d}$. Umformen der Gleichung ergibt

$$\frac{d\mathbf{r}}{d\mathbf{d}} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{d} = -\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \quad (6.36)$$

mit $\mathbf{k} := \frac{d\mathbf{r}}{d\mathbf{d}}$ als globale Steifigkeitsmatrix, die in ihrer diskreten Form bereits in (6.27)₂ angegeben wurde. Die Analogie zur Finiten-Element Methode wird sichtbar, wenn das Residuum bezüglich der Verschiebungen \mathbf{d} linearisiert wird.

$$\mathbf{r}(\mathbf{d}) + \Delta \mathbf{r} = \mathbf{0} \quad \text{mit} \quad \Delta \mathbf{r}(\mathbf{d}) = \frac{d\mathbf{r}}{d\mathbf{d}} \Delta \mathbf{d} \quad (6.37)$$

Dies ergibt die Struktur

$$\frac{d\mathbf{r}}{d\mathbf{d}} \Delta \mathbf{d} = -\mathbf{r}(\mathbf{d}). \quad (6.38)$$

In beiden Fällen wird die globale Steifigkeitsmatrix $\mathbf{k} := \frac{d\mathbf{r}}{d\mathbf{d}}$ benötigt. Für die Gleichgewichtsberechnung wird die Steifigkeitsmatrix einmal faktorisiert und das Gleichungssystem gelöst. Dann wird diese faktorisierte Steifigkeitsmatrix für die Sensitivitätsanalyse benutzt. Das Gleichungssystem wird mehrfach gelöst, je nach dem wieviele Parameter involviert sind.

Unter Beachtung der Gleichung (6.27)₁ ergibt sich der Gradient der Knotenpositionen $\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{d}(\boldsymbol{\kappa})$ aus Gleichung (6.36) über den Gradienten des Residuums bezüglich der Materialparameter. Der Gradient des Residuums ist

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{r} = \mathbf{A} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{P} dV = \mathbf{0}. \quad (6.39)$$

Der hier enthaltene Gradient der Spannungen ist über die in (6.32) genannte Abhängigkeit zu

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{P} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{F}} : \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{F} \quad (6.40)$$

gegeben. Wird hier die Definition der nominellen Moduli $\mathbb{A} := \partial \mathbf{P} / \partial \mathbf{F}$ und der Finite-Element Ansatz für die Gradienten des Deformationsgradienten $\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{F} = \mathbf{B} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{d}$ eingesetzt, so erhält man

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{P} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} + \mathbb{A} \mathbf{B} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{d}. \quad (6.41)$$

Mit der Steifigkeitsmatrix $\mathbf{K} := \mathbf{A} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T \mathbb{A} \mathbf{B} dV$ ergibt sich der Gradient des Residuums zu

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{r} = \mathbf{K} \nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{d} + \mathbf{A} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} dV = \mathbf{0}. \quad (6.42)$$

Diese Gleichung kann nach den gesuchten Gradienten der Knotenpositionen aufgelöst werden.

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{d} = -\mathbf{K}^{-1} \mathbf{s} \quad \text{mit} \quad \mathbf{s} = \mathbf{A} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} dV \quad (6.43)$$

Die Größe \mathbf{s} kann als Lastvektor interpretiert werden. Somit werden lediglich die Gradienten der ersten Piola–Kirchhoff Spannungen bezüglich der Materialparameter benötigt. Diese werden im Rahmen der Parameteridentifikation als Teil der Materialroutine betrachtet und auch an dieser Stelle bereitgestellt. Die Tabelle 18 die entscheidenden Schritte der Gradientenbestimmung zusammen.

Tabelle 18: Algorithmische Struktur zur Bestimmung der Gradienten.

1. Initialisiere Zeitschritt $t = 1$ und Geschichtsvariablen $\mathcal{I}_n = \mathbf{0}$ und $\mathcal{I}_{n,\boldsymbol{\kappa}} = \mathbf{0}$.
2. *Standard FEM Iteration für das diskrete Problem.*
Berechne interne Variablen $\mathcal{I}(\boldsymbol{\kappa})$ durch eine lokale Iteration in jedem Gauss-Punkt.
Berechne die Verschiebungen $\mathbf{d}(\boldsymbol{\kappa})$ durch eine globale Iteration.
3. *Präprozessor für die Sensitivitätsanalyse.*
Berechne $\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \boldsymbol{\kappa}}$ in allen Integrationspunkten auf Materialebene.
Assembliere ‐Lastvektor‐ für die Gesamtstruktur

$$\mathbf{s} = \mathbf{A} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} dV$$

4. Löse das Gleichungssystem mit der faktorisierten globalen Steifigkeitsmatrix des direkten Problems

$$\nabla_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{d} = -\mathbf{K}^{-1} \mathbf{s} \quad \text{mit} \quad \mathbf{K} := \mathbf{A} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T \mathbb{A} \mathbf{B} dV$$

5. *Postprozessor für die Sensitivitätsanalyse.*
Datiere interne Variablen \mathcal{I} und zusätzliche Geschichtsvariablen $\mathcal{I}_{,\boldsymbol{\kappa}}$ auf.
6. Erhöhe Zeitschritt $t = t + 1$ und gehe zu 2.

6.4.2. Numerische Gradientenbildung im FE Kontext

Wie bereits in Kapitel 5.2.6 für eindimensionale Prozesse beschrieben, lässt sich der Gradient der Knotenverschiebung bezüglich der Materialparameter sehr einfach über eine Störungsrechnung und einen Differenzenquotienten berechnen. Für die Gradienten gilt die komponentenweise Darstellung wie bereits in Gleichung (5.57) gezeigt. Bei der numerischen Gradientenbildung wird eine Simulation als Referenzwert benötigt. Diese wird

an der Position $\boldsymbol{\kappa}^*$ durchgeführt, an dem der Gradient approximiert werden soll. Hieraus ergibt sich nach Gleichung (6.29) der Wert der Zielfunktion $f^* = f(\boldsymbol{\kappa}^*)$. Danach wird der Materialparametervektor im Eintrag i mit einem Wert $\epsilon \ll 1$ gestört. Nach einer weiteren Simulation mit gestörtem Materialparametervektor ergibt sich der Funktionswert $f_i = f(\boldsymbol{\kappa}^* + \epsilon \mathbf{e}_i)$ mit $\mathbf{e}_i \in \mathbb{R}^n$ als i -tem Einheitsvektor. Der Gradient bezüglich des einen gestörten Parameters kann über einen Differenzenquotienten approximiert werden.

$$\left. \frac{\partial f(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \kappa_i} \right|_{\boldsymbol{\kappa}^*} \approx \frac{f_i - f^*}{\epsilon} = \frac{f(\boldsymbol{\kappa}^* + \epsilon \mathbf{e}_i) - f(\boldsymbol{\kappa}^*)}{\epsilon} \quad \text{für } i = 1, \dots, n \quad (6.44)$$

Diese Vorgehensweise erfordert zusätzlich zu der Funktionsauswertungen an der Stelle $\boldsymbol{\kappa}^*$ weitere n Funktionsauswertungen mit gestörtem Parametersatz. Der erhöhte Rechenaufwand kann dadurch gerechtfertigt werden, dass diese Art der Gradientenbildung immer und zuverlässig funktioniert. Dies ist vor allem auch praktikabel, wenn dem Anwender keine Zugriffsmöglichkeiten auf den Quellcode des Programms zur Lösung des Anfangsrandwertproblems gegeben ist, wie dies bei der Anwendung kommerzieller FEM Programme wie ABAQUS oder ANSYS üblich ist.

6.5. Strukturproblem der transversal isotropen Elastizität

Als erstes Beispiel der Identifikation von Materialparametern über Knotenverschiebungen eines mit der Finite Elemente Methode diskretisierten Strukturproblems soll der in Abbildung 55 beschriebene Kragarm betrachtet werden. Im ersten Schritt wird das Problem mit einem vorgegebenen transversal isotropen St. Venant–Kirchhoff Material mit vorgegebenen Referenzmaterialparametern berechnet. Das Materialmodell wird ausführlich in Kapitel 7.2.3 beschrieben. Die Materialparameter $\boldsymbol{\kappa} = [\kappa, \mu_T, \alpha, \beta, \mu_L, \phi_1, \phi_2]^T$ werden hier zu

$$\boldsymbol{\kappa} = [42.0, 80.0, -38.0, 194.0, 2.0, 30.0, 10.0]^T \quad (6.45)$$

gewählt. Die ausgezeichnete Anisotropierichtung folgt der in Abbildung 72 auf Seite 116 dargestellten Konvention. Da diese Anisotropierichtung aus der Symmetrieebene herausragt, ist unter Belastung ein seitliches Ausweichen des Kragarms zu erwarten. Die bei

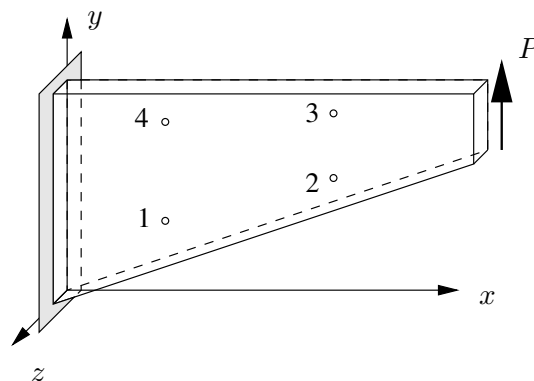


Abbildung 55: Probengeometrie des Kragarms. Die Last \mathbf{P} wird linear in zehn Inkrementen gesteigert. Die Verschiebungen der Knoten 1 (10.0/4.7916/1.5), 2 (20.0/7.7083/1.5), 3 (20.0/13.9583), und 4 (10.0/13.5416/1.5) dienen als experimentelle Daten. Die Probe hat eine Länge von 30, eine Breite von 5 - 15 und eine Dicke von 1.5.

dieser Berechnung gewonnenen Knotenpositionen der vier ausgewählten Punkte werden

als experimentelle Messdaten betrachtet und dienen als Grundlage zur Re-Identifikation der Materialparameter. Die in Kapitel 5.3 beschriebenen Vorteile dieser künstlich erzeugten Messdaten gelten hier in analoger Weise.

6.5.1. Generierung der experimentellen Daten

Durch eine Simulation des Randwertproblems mit den zuvor angegebenen Parametern ergibt sich die im Folgenden dargestellte Lösung. Die Last wird in zehn Inkrementen zu je $\Delta F = 3.2$ aufgebracht. In der Abbildung 56 sind die Verformungszustände zum Anfangszeitpunkt, nach 2, 4, 6, 8 Inkrementen und unter voller Belastung aufgezeigt. Wie in

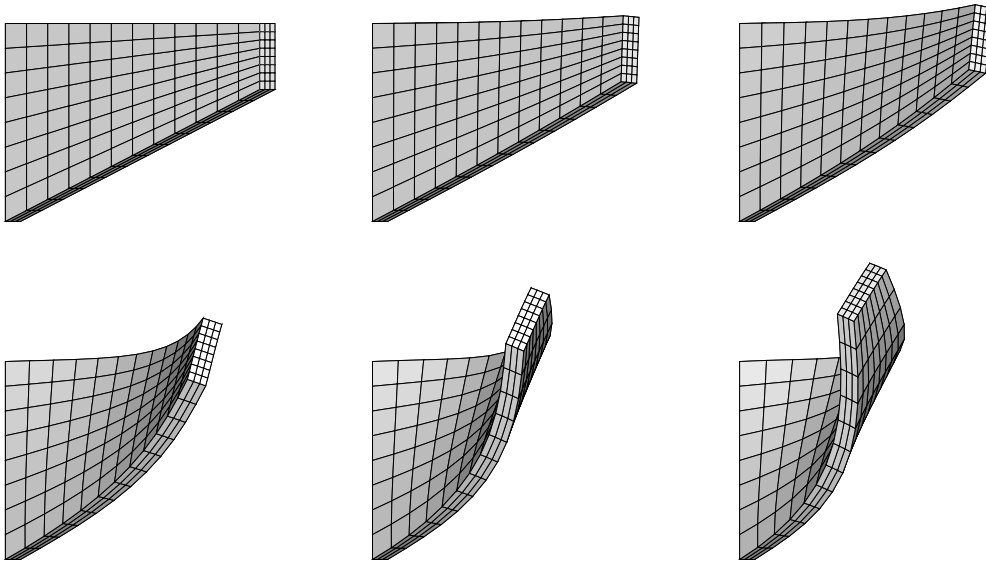


Abbildung 56: Simulation des Kragarms mit gegebenem Materialparametersatz zur Erzeugung der virtuellen Testdaten. Darstellung zur Zeit $t = 0, 2, 4, 6, 8$ und 10 s.

Abbildung 55 gezeigt, werden die Knotenverschiebungen der Knoten 1, 2, 3 und 4 über der Prozesszeit aufgezeichnet. Die Verschiebungen der vier Knoten in die x , y und z -Richtung können den nachfolgenden Diagrammen der Abbildung 58 entnommen werden.

6.5.2. Zielfunktion und Parameteranpassung

Wie in Kapitel 6.3 beschrieben, wird die Zielfunktion als Least-Squares Minimierungsfunktion über die diskreten Knotenpositionen der überwachten Knoten formuliert.

$$f(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{d}(\boldsymbol{\kappa}) - \mathbf{d}^{exp}\|^2 \rightarrow \min_{\boldsymbol{\kappa} \in \mathcal{P}} \quad (6.46)$$

Beide Optimierungsverfahren, das gradientenbasierte SQP-Verfahren aus Abschnitt 3.3.2, und das Simplex-Verfahren aus Abschnitt 3.3.4, benötigen eine Angabe eines Startparametersatzes. Zur Visualisierung der Optimierung wird im Folgenden der Fall der Re-Identifizierung der ausgezeichneten Richtung betrachtet. Für diesen Fall von zwei freien Parametern lässt sich die Zielfunktion und der Suchweg für die verschiedenen Optimierungsmethoden grafisch aufbereiten.

6.5.3. Identifikation der ausgezeichneten Richtung

Mit einem Startwertepaar von $\phi_1 = 30^\circ$ und $\phi_2 = 150^\circ$ wird die Richtung so gewählt, dass die Struktur zur entgegengesetzten Seite ausweicht, wie es im Lösungspunkt zu erwarten ist. Die Knotenverschiebungen der vier Knoten für die Simulation mit Startparametersatz

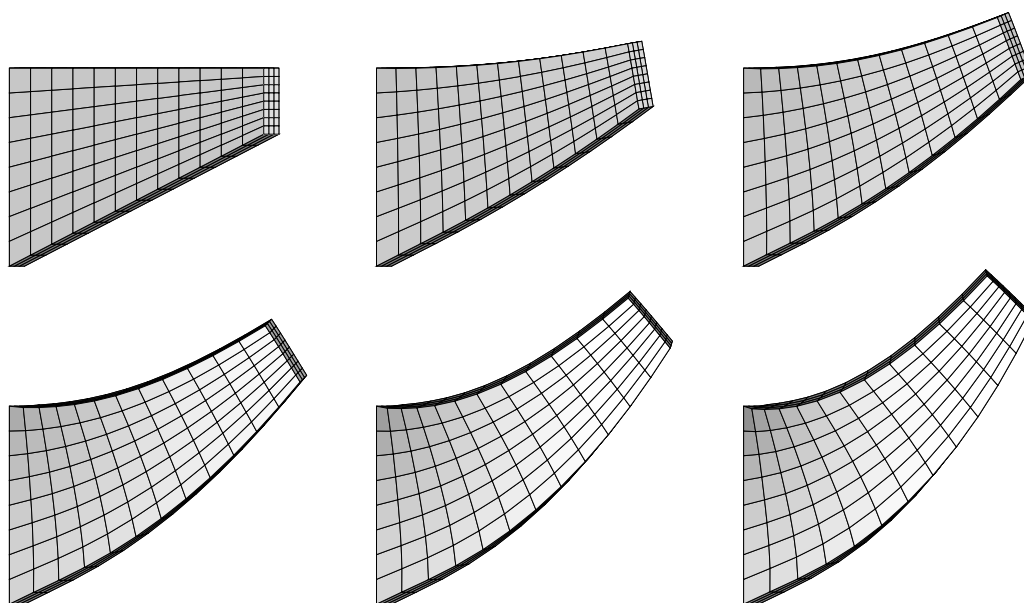


Abbildung 57: Simulation des Kragarms mit Startparametersatz. Es ist ein Ausweichen in die entgegengesetzte Richtung zu erkennen. Darstellung zur Zeit $t = 0, 2, 4, 6, 8$ und 10 s.

und die dazugehörigen experimentellen Daten, die der optimalen Lösung entsprechen, sind der Abbildung 58 zu entnehmen.

Parameter	κ	μ_T	α	β	μ_L	ϕ_1	ϕ_2	LSF
Freie Parameter						×	×	
Startwert	42.0	80.0	-38.0	194.0	2.0	30.0	150.0	836.76
Lösung 1	42.0	80.0	-38.0	194.0	2.0	30.019	10.003	$3.325 \cdot 10^{-6}$
Lösung 2	42.0	80.0	-38.0	194.0	2.0	29.994	9.999	$9.651 \cdot 10^{-5}$
Lösung 3	42.0	80.0	-38.0	194.0	2.0	30.385	10.070	$6.981 \cdot 10^{-4}$
Optimum	42.0	80.0	-38.0	194.0	2.0	30.000	10.000	0.0

Tabelle 19: Materialparameter für die Optimierung. Startwert, Lösungen und bekanntes Optimum mit den dazugehörigen Werten der Least-Squares Funktion. 1) Simplex-Methode, 2) Schittkowski SQP und 3) SQP-Algorithmus.

Nach erfolgreicher Optimierung werden im Rahmen der Genauigkeit, die dem Optimierungsalgorithmus vorgegeben wird, die Winkel eindeutig wiedergefunden. Als Konsequenz hieraus stimmen die Knotenverschiebungen von Experiment und Simulation mit optimiertem Parametersatz exakt überein. Das Ergebnis ist in Tabelle 19 für die drei betrachteten Algorithmen dokumentiert. Dies ist der Simplex-Algorithmus, der SQP-Algorithmus von Schittkowski und der in dieser Arbeit dargestellte implementierte SQP-Algorithmus.

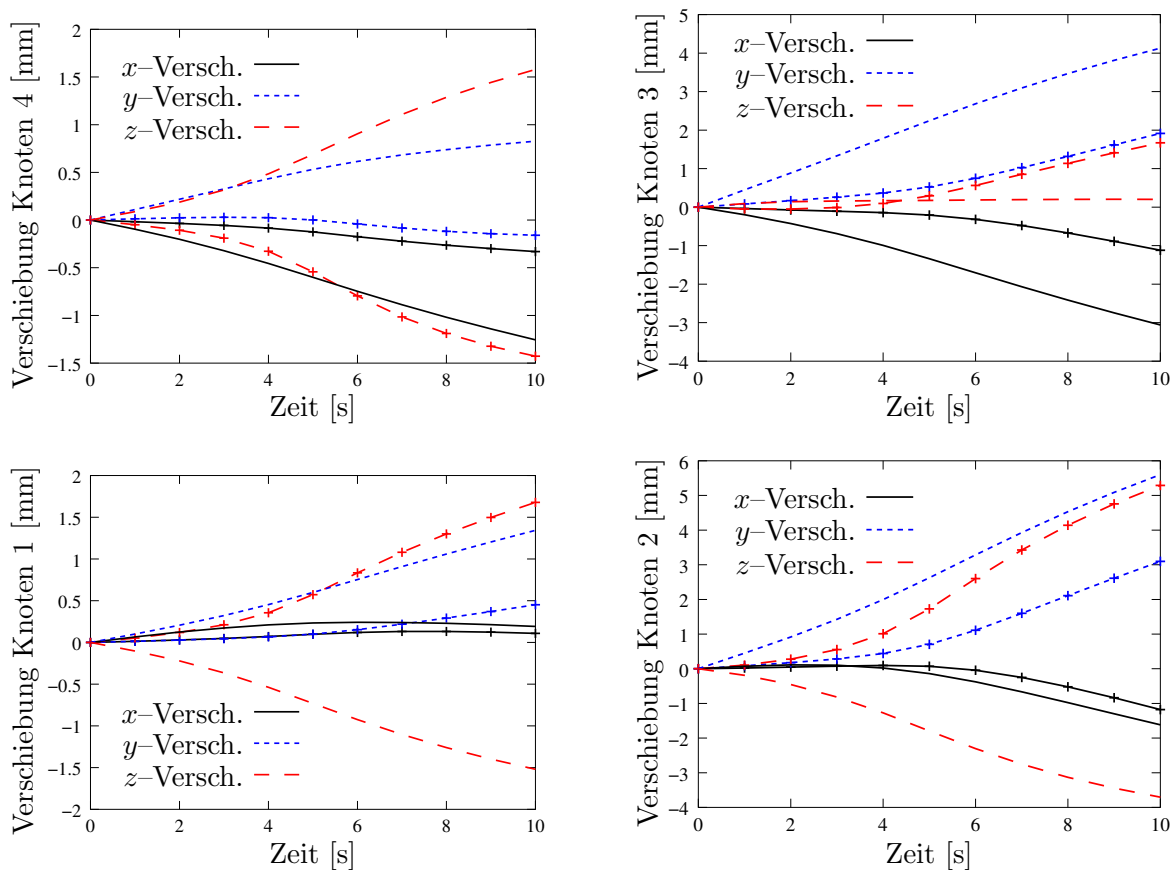


Abbildung 58: Darstellung der Knotenverschiebungen in x , y und z -Richtung der vier überwachten Knoten. Vergleich von Simulation mit Startparametersatz (durchgezogen) und experimentellen Daten (gepunktet). An den Verschiebungen der Knoten in z -Richtung ist zu erkennen, dass die Struktur mit geänderten Winkeln zur entgegengesetzten Seite ausweicht.

6.5.4. Topologie der Zielfunktion

Die Eigenschaften des Identifikationsproblems lassen sich anhand der Darstellung der Zielfunktion über einem entsprechend gewählten zweidimensionalen Parameterraum darstellen. Hierbei werden zwei Parameter systematisch variiert, die restlichen Parameter bleiben auf dem optimalen Wert festgehalten. Die Funktion wird über einem gleichmäßigen Raster von Punkten in den Grenzen von $\phi_1 \in [0, 90]$ und $\phi_2 \in [0, 160]$ ausgewertet. Die Nichtlinearität des Identifikationsproblems spiegelt sich in der Topologie der Zielfunktion wieder. Sie besitzt ein langgestrecktes Tal in der das absolute Minimum bei $(30.0/10.0)$ liegt. Ferner besitzt die Funktion ein lokales Minimum und einen Sattelpunkt. Die SQP-Methode nach Schittkowski steuert zuerst auf den Sattelpunkt zu und findet dann den Weg zum absoluten Minimum. Die Simplex Methode folgt dem Steilsten Abstieg und findet von diesem Startpunkt aus das globale Minimum. Der selbst implementierte SQP-Algorithmus stößt in der ersten Iteration an die obere Grenze des Parameters $\phi_1 = 80^\circ$. Nach zwei weiteren Iterationen ist die Optimierung wieder unrestringiert, und der Algorithmus findet ebenfalls das globale Minimum.

6.5.5. Gradienten der Knotenpositionen

Für die Identifikation von Materialparametern über Knotenpositionen müssen für eine gradientenbasierte Optimierung die Gradienten dieser Positionen bezüglich der zu opti-

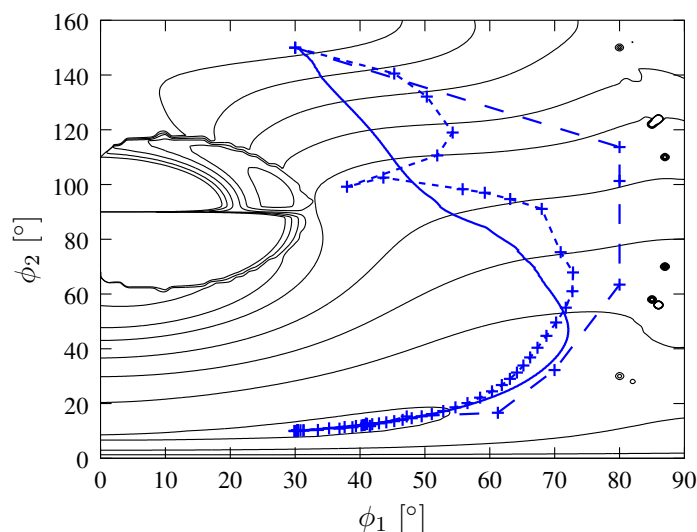


Abbildung 59: Abhängigkeit der Zielfunktion von den Winkeln der ausgezeichneten Richtung ϕ_1 und ϕ_2 . Dargestellt sind die Höhenlinien der Zielfunktion und die Optimierungspfade für das Simplex-Verfahren (—), das SQP-Verfahren nach SCHITTKOWSKI [116] (-+--) und den Algorithmus aus Kapitel 3.3.2 (-+). Die obere Grenze des Parameters ϕ_1 wird zu 80° gewählt.

mierenden Materialparameter bestimmt werden. Da es sich hier um ein rein elastisches Problem handelt, ist wie auch im eindimensionalen Beispiel aus Abschnitt 5.3.1 eine Übereinstimmung von analytisch und numerisch bestimmten Gradienten zu erwarten. Dies wird in den Berechnungen bestätigt, so dass im Folgenden lediglich von Gradienten gesprochen wird, diese aber nicht in analytisch oder numerisch unterschieden werden. Die folgenden Darstellungen geben an, wie sich die Verschiebung eines Knotens bei einer Änderung eines Winkels verhält. Diese Sensitivitäten werden exemplarisch für den Startparametersatz bestimmt. Dies ist jedoch in gleicher Art und Weise für jeden anderen Parametersatz möglich. Hier ist ebenso wie in den Abbildungen zur Verschiebung der Knoten eine deutliche Nichtlinearität zu beobachten.

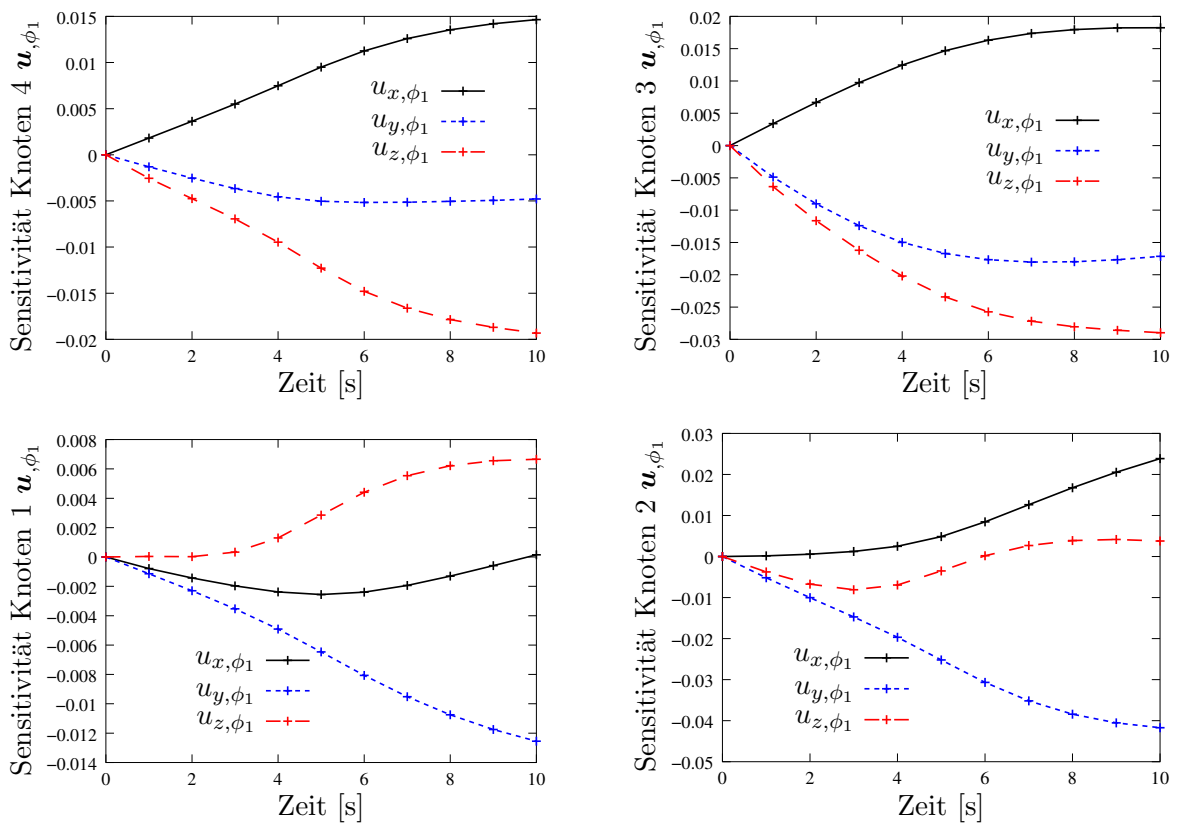


Abbildung 60: Darstellung der Knotensensitivität in x , y und z -Richtung für den Winkel ϕ_1 der vier überwachten Knoten für den Startwert der Optimierung (30/150).

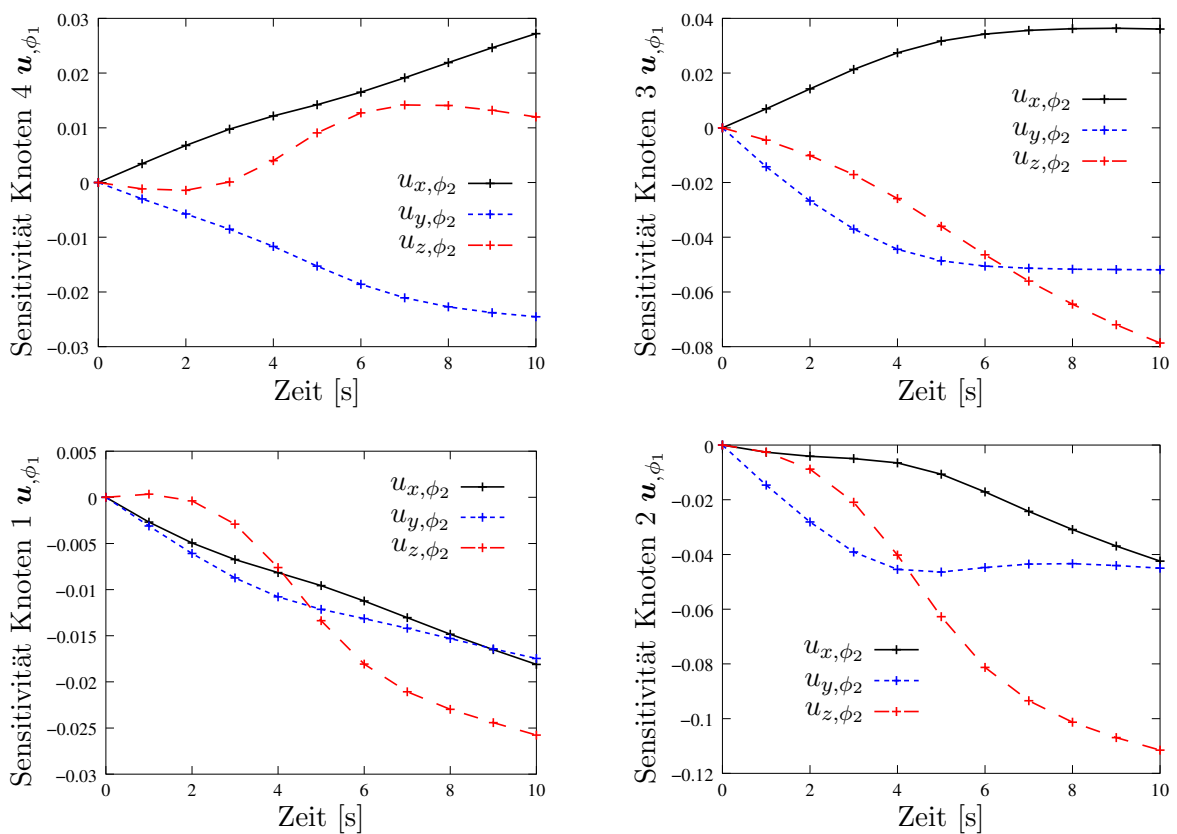


Abbildung 61: Darstellung der Knotensensitivität in x , y und z -Richtung für den Winkel ϕ_2 der vier überwachten Knoten für den Startwert der Optimierung (30/150).

6.6. Inhomogener Zugstab aus Aluminium

In diesem Beispiel wird die in den Kapiteln zuvor beschriebene Methode der Identifikation über Knotenpositionen auf einen inhomogenen Zugstab aus der Aluminiumlegierung AlMgSi0.5 angewendet, siehe RIEGER, SCHEDAY, MIEHE [108]. Der gelochte Zugstab ist in Abbildung 62 dargestellt und wird mit der in Kapitel 4.9 beschriebenen Prüfmaschine getestet. Hierbei wird die Last–Verschiebungskurve über die Kraftmessdose und den Dehnungsmesser bestimmt. Andererseits werden mit dem optischen Messverfahren die Oberflächenpositionen aufgezeichnet. Aufgrund der Probengeometrie reichte es aus, den

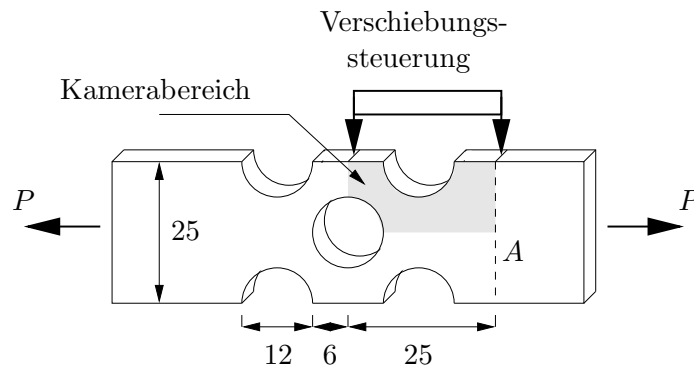


Abbildung 62: Probengeometrie des inhomogenen Zugstabs aus Aluminium. Verschiebungssteuerung über den Dehnungsaufnehmer und Messung der Last–Verschiebungskurve der gesamten Probe. Bestimmung von Verschiebungsfeldern im markierten Kamerabereich. Die Probe hat die Dicke 6 mm.

Dehnungsmesser, über den die Verschiebung gesteuert wird, in der Symmetrieachse der Probe anzusetzen. Um den Rechenaufwand der Finite Elemente Simulation gering zu halten, wird lediglich ein Achtel der Probe mit den entsprechenden Symmetriebedingungen diskretisiert.

6.6.1. Experimentelle Daten

Die experimentellen Daten, die der Identifikation zugrunde liegen, sind zum einen die Informationen aus den Verschiebungsfeldern zu diskreten Zeitpunkten des Experiments. Zum anderen liegt die Last–Verschiebungskurve vor. Die Verschiebung am Extensometer, siehe Abbildung 62, wird in einem Zeitraum von 60 s linear von Null auf 0.75 mm gesteigert. Die Aufnahmen zur Auswertung der Verschiebungsfelder werden in Inkrementen von 3 s aufgenommen, so dass Daten zu 20 diskreten Zeitpunkten vorliegen. Im ersten

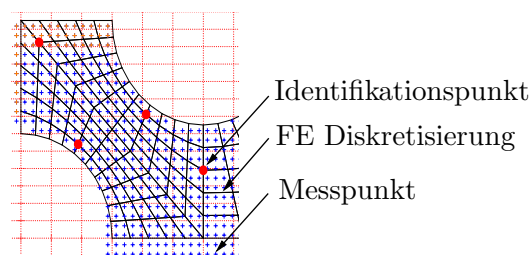


Abbildung 63: Interpolation der Messungen aus dem optischen Messverfahren auf die zu überwachenden Knoten der Finite Element Diskretisierung.

Schritt wird mit Hilfe der Software ARAMIS und einer Referenzlänge auf der Oberfläche der Probe die deformierte Konfiguration bestimmt. Dies geschieht über einen Vergleich

von Referenzbild und dem jeweils aktuellen Bild. Danach werden die Koordinatensysteme von Messung und Simulation in Einklang gebracht, um die Informationen auf speziell ausgesuchte Knotenkoordinaten des Finite Elemente Netzes interpolieren zu können, siehe Abbildung 63, so dass vergleichbare Größen gegeben sind. Die Last–Verschiebungskurve und die Verschiebungen der ausgewählten Knoten sind der Abbildung 65 zu entnehmen. Hierbei wird ein Viertel der Kraft betrachtet, da die Simulation aus Symmetriegründen nur mit einem Achtel der Probe durchgeführt wird. Zur Verdeutlichung der auftretenden Deformationen sind in der Abbildung 64 die undeformierte Ausgangskonfiguration und die deformierte Struktur zum Zeitpunkt $t = 60$ s dargestellt.

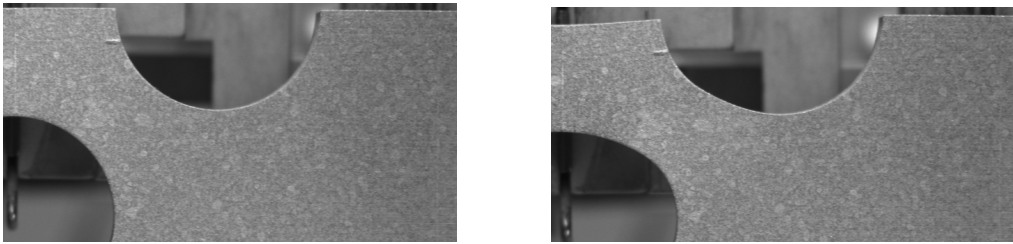


Abbildung 64: Undeformierter und maximal deformierter Zustand des gelochten Zugstabs aus Aluminium.

6.6.2. Ein nichtlineares isotropes Plastizitätsmodell für Aluminium

Das betrachtete Materialmodell ist das in SCHEDAY [110] ausführlich besprochene Plastizitätsmodell mit nichtlinearer isotroper und kinematischer Verfestigung. Hier ist dieses Materialmodell auf eine rein nichtlineare isotrope Verfestigung reduziert worden. Es enthält 6 Materialparameter, die zwei elastischen Konstanten κ und μ , eine Anfangsfließspannung y_0 , eine Sättigungsfließspannung y_∞ , eine lineare Verfestigung h und einen Sättigungsparameter ω .

$$\boldsymbol{\kappa} = [\kappa, \mu, y_0, y_\infty, h, \omega]^T \quad (6.47)$$

Die folgende Tabelle 20 fasst das Modell zusammen, wobei auf die algorithmische Umsetzung im Rahmen einer impliziten Zeitintegration der Evolutionsgleichungen verzichtet wird. Beispiele hierzu wurden bereits in Kapitel 5.3.3 und 5.3.4 besprochen und sind auf dieses Modell übertragbar.

6.6.3. Zielfunktion und Parameteranpassung

Die bereits beschriebene Methode der Parameteridentifikation wird nun erweitert, um nicht nur die Informationen der Knotenpositionen zu berücksichtigen, sondern auch die Informationen aus der Last–Verschiebungskurve. Somit besteht die zu minimierende Fehlerquadratfunktion aus zwei Teilen. Ein Teil beinhaltet die Knotenpositionen \mathbf{d} , wobei im Vektor \mathbf{d} die Positionen der zu überwachenden Knoten in beide Koordinatenrichtungen zu allen diskreten Zeitpunkten zusammengefasst sind. Dieser Vektor hat die Dimension $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^{n_{dim} \times n_{time} \times n_{dat}}$. Die Informationen aus der Last–Verschiebungskurve liegen zu den diskreten Zeitpunkten n_{time} vor. Der Vektor \mathbf{P} hat die Dimension $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n_{time}}$. Die Matrizen \mathbf{W}_d und \mathbf{W}_P sind Wichtungsmatrizen mit Diagonalstruktur. Die Einträge können problemspezifisch angepasst werden um eine möglichst stabile Identifikation und gute Übereinstimmung zu erzielen. Damit lautet die zu optimierende Funktion

$$f(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{W}_d(\mathbf{d}(\boldsymbol{\kappa}) - \mathbf{d}^{exp})\|^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{W}_P(\mathbf{P}(\boldsymbol{\kappa}) - \mathbf{P}^{exp})\|^2 \rightarrow \min_{\boldsymbol{\kappa} \in \mathcal{P}}. \quad (6.48)$$

Tabelle 20: Plastizität mit nichtlinearer isotroper Verfestigung.

1. Interne Variablen	\mathcal{I}	$= \{\mathbf{E}^p, \alpha\}$
2. Freie Energie	ψ	$= \frac{1}{2} \kappa (\text{tr}[\mathbf{E}^e])^2 + \mu \text{dev}[\mathbf{E}^e] : \text{dev}[\mathbf{E}^e]$ $+ (\frac{1}{2} h \alpha^2 + (y_\infty - y_0)(\alpha + \frac{1}{\omega}(\exp[-\omega \alpha] - 1)))$
3. Spannung	\mathbf{T}	$= \psi(\mathbf{E}^e, \alpha),_{\mathbf{E}^e} = \kappa \text{tr}[\mathbf{E}^e] \mathbf{1} + 2\mu \text{dev}[\mathbf{E}^e]$
4. Interne Kräfte	\mathbf{T}^p	$= -\psi(\mathbf{E}^e, \alpha),_{\mathbf{E}^p} \equiv \mathbf{T}$
	β	$= -\psi(\mathbf{E}^e, \alpha),_{\alpha} = -h\alpha - (y_\infty - y_0)(1 - \exp[-\omega \alpha])$
5. Fließbedingung	ϕ	$= \ \text{dev}[\mathbf{T}]\ - \sqrt{\frac{2}{3}}(y_0 - \beta) \leq 0$
6. Evolutionsgleichungen	$\dot{\mathbf{E}}^p$	$= \lambda \text{dev}[\mathbf{T}] / \ \text{dev}[\mathbf{T}]\ $
	$\dot{\alpha}$	$= \lambda \sqrt{\frac{2}{3}}$
7. Be- und Entlastung		$\lambda \geq 0; \phi \leq 0; \lambda \phi = 0$

Die Funktion $f(\boldsymbol{\kappa})$ wird mit den aus Kapitel 3 zur Verfügung stehenden Methoden minimiert. In der nachfolgenden Tabelle 21 sind die optimierten plastischen Materialparameter und die gewählten Startwerte angegeben. Die elastischen Parameter sind der Arbeit von SCHEDAY [110] entnommen und werden nicht erneut identifiziert. Es ist anzumerken, dass dieser Startwert nicht als Startwert einer einmaligen Optimierungsprozedur gesehen werden darf. Die Optimierung ist ein iterativer Prozess, bei dem viele Optimierungen mit zum Teil nur wenigen freien Parametern durchgeführt werden. Insbesondere werden die Wichtungsfunktionen unterschiedlich gewählt, so dass beispielsweise einmal die Last–Verschiebungskurve oder ein anders Mal die Knotenverschiebungen stärker gewichtet werden. Anhand der dargestellten Fehlerfunktion für die Startwerte und die optimierten

Parameter	κ	μ	y_0	y_∞	h	ω	LSF
Freie Parameter			×	×	×	×	
Startwert	49800.00	28000.00	130.00	130.00	10000.00	1.00	$8.21 \cdot 10^6$
Lösung	49800.00	28000.00	279.92	751.43	0.59	3.99	$1.41 \cdot 10^5$

Tabelle 21: Materialparameter für das in Tabelle 20 zusammengefasste Materialmodell mit Angabe der Fehlerquadratfunktion für die Start- und optimierten Werte.

Werte wird die Verbesserung deutlich. Die Fehlerfunktion sinkt auf etwa ein sechzigstel des ursprünglichen Wertes ab. Dies wird außerdem in der nachfolgenden Abbildung 65 verdeutlicht, in denen die Last–Verschiebungskurve von Experiment und Simulation mit dem Startparametersatz und dem optimiertem Parametervektor dargestellt sind, als auch die Knotenverschiebungen für beide Fälle in x - und y -Richtung. Im Vergleich zu der gezeigten Re–Identifikation ist hier kein Funktionswert von Null zu erwarten, da sowohl Modellfehler als auch Messfehler in den Prozess einfließen.

Zusammenfassung

Die Identifikation der Materialparameter für diese Kombination aus gewählter Struktur, Material und Materialmodell gestaltet sich als relativ aufwendig und kompliziert im Vergleich zur vorherigen Re–Identifikation. Es kann keine gleichzeitige Identifikation

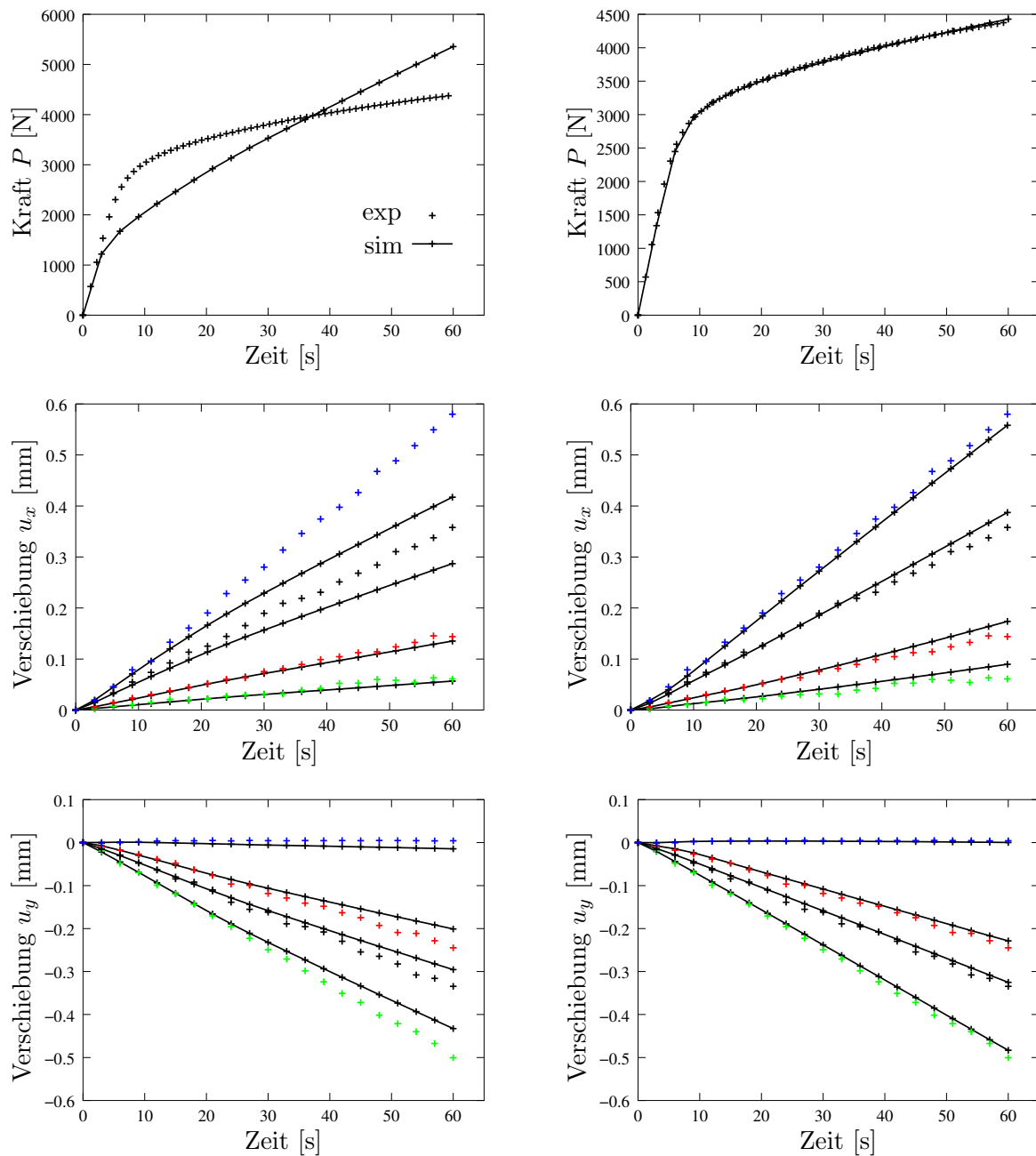


Abbildung 65: Experimentelle und simulierte Daten für den gelochten Zugstab aus Aluminium. Links: Last–Verschiebungskurve und Knotenverschiebungen der ausgewählten Knoten in x - und y -Richtung für Experiment und Simulation mit Startwert über der Zeit aufgetragen. Rechts: Experimente und Simulationen mit optimierten Parametern.

aller plastischen Materialparameter vorgenommen werden. Vielmehr ist die Anpassung ein iterativer Prozess, in dem sukzessive verschiedene Kombinationen von Materialparametern optimiert werden. Desweiteren ist die Wichtung der einzelnen Anteile in der Fehlerquadratfunktion von entscheidender Bedeutung. Die hochgradig nichtlineare Last–Verschiebungskurve beinhaltet einen wesentlich höheren Informationsgehalt als die mehr oder weniger linearen Verschiebungsverläufe der beobachteten Knoten. Somit liefert die Last–Verschiebungskurve, wie im eindimensionalen Fall, die entscheidenden Informationen. Die Knotenverschiebungen sind von untergeordneter Bedeutung, tragen aber dennoch zur Identifikation bei.

7. Parameteridentifikation auf der Basis virtueller Testdaten

In diesem Abschnitt wird die Identifikation von Materialparametern makroskopischer Materialmodelle durchgeführt, wobei die zugrunde liegenden Daten nicht von realen Materialprüfungen stammen. Sie sind das Ergebnis einer Strukturberechnung mit Mikro–Makro Übergang. Beispielhaft ist dies an einer diskretisierten Zugprobe und den daraus resultierenden uniaxialen Last–Verschiebungskurven dargestellt. In der Anwendung beschränkt sich diese Arbeit auf die Berechnung eines materiellen Punktes, wie es in der Abbildung auf der Titelseite dargestellt ist. Diese Daten beinhalten mehrdimensionale homogenisierte

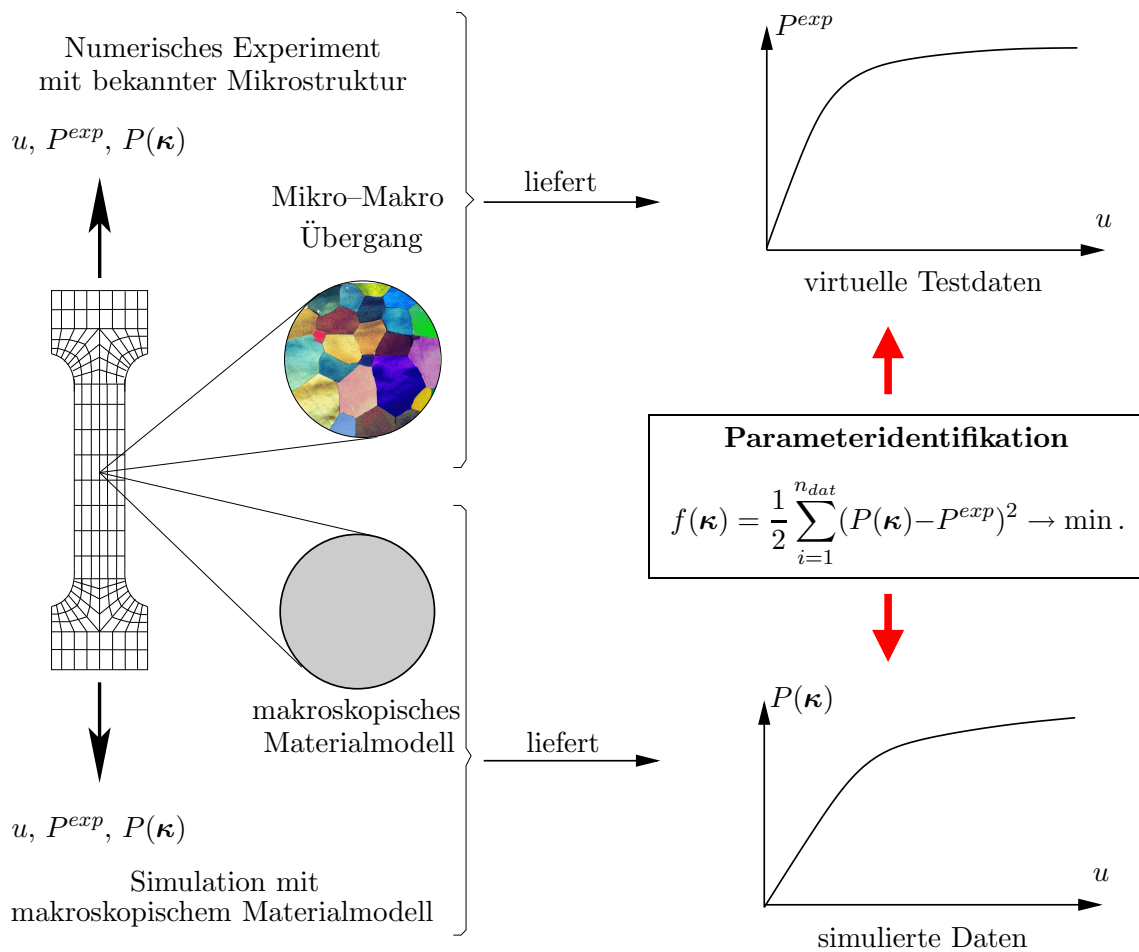


Abbildung 66: Schematische Darstellung der Kopplung von virtuellem Labor und Parameteridentifikation. Ein virtuelles Experiment mit bekannter Mikrostruktur liefert virtuelle Testdaten. Die Simulation desselben Experiments mit einem makroskopischen Materialmodell liefert Simulationsdaten. Die Parameteridentifikation erzielt eine möglichst gute Übereinstimmung der Daten durch Optimierung der Fehlerquadratfunktion.

Spannungsantworten $\mathbf{P}(t)$ unter beliebig vorgegebenem Deformationsgradient $\mathbf{F}(t)$.

Für viele Mikrostrukturen sind die konstitutiven Variablen auf Mikroebene bestimmbar. Bei Faserverbundwerkstoffen ist beispielsweise die Geometrie der Mikrostruktur durch die verwendeten Fasern und durch das Volumenverhältnis zwischen Faser- und Matrixmaterial bestimmt. In der Kristallplastizität lässt sich die Schubfließspannung von Einkristallen in Experimenten bestimmen. Die Gleitmechanismen auf Mikroebene können als bekannt

vorausgesetzt werden. Damit sind die Voraussetzungen gegeben, modellierte Mikrostrukturen virtuellen Tests zu unterziehen. Die numerische Homogenisierung, wie sie in Arbeiten von MIEHE [78], MIEHE ET AL. [88, 87, 86] oder KOUZNETSOVA [55] vorgestellt wird, dient als ein Werkzeug zur Generierung künstlicher Messdaten. Dieses Verfahren ist in der Literatur unter “virtual testing” oder “numerisches Labor” bekannt. Hierzu wird das repräsentative Volumenelement (RVE) einer Mikrostruktur, wie beispielsweise von Kompositwerkstoffen oder faserverstärkte Materialien mit der Methode der Finiten Elemente diskretisiert. Obwohl die einzelnen Phasen des Materials mit relativ einfachen phänomenologischen Materialmodellen beschrieben werden können, kann das Gesamtverhalten der Mikrostruktur unter einer beliebigen Belastung sehr komplex ausfallen. Die gewonnenen virtuellen Testdaten dienen als Grundlage um die Materialparameter eines entsprechenden komplexen makroskopischen Materialmodells zu identifizieren. Die makroskopischen Materialmodelle müssen in der Lage sein, die grundlegenden Phänomene des beobachteten Materialverhaltens abbilden zu können. Dies sind bei Materialien mit Mikrostrukturen vor allem Anisotropieeffekte, die durch die Mikrostruktur induziert werden. Phänomene wie Plastizität, Viskosität und Schädigung müssen in der Modellierung des makroskopischen Modells ebenso berücksichtigt werden.

Virtuelles Testen lässt sich auf eine Vielzahl von Materialien mit Mikrostruktur anwenden, wie beispielsweise auf die in Abbildung 67 dargestellten Komposit- oder Faserwerkstoffe, Polykristalle oder granulare Materialien wie Sande oder Schüttgüter.

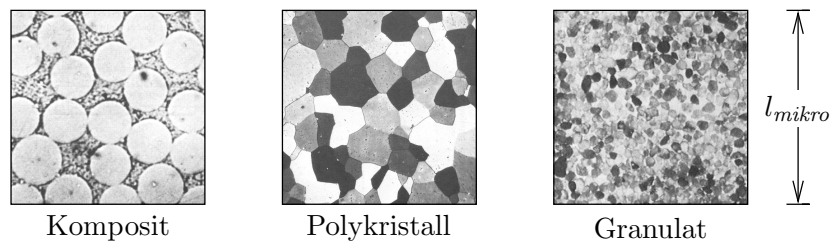


Abbildung 67: Beispiele realer Mikrostrukturen. Kompositwerkstoffe, metallische Polykristalle und granulare Materialien.

7.1. Homogenisierung im Rahmen finiter Deformationen

Das Ziel ist die makroskopische Spannungsantwort eines repräsentativen Volumenelements einer Mikrostruktur als eine gemittelte oder homogenisierte Spannungsantwort zu erhalten. Dies soll mit Hilfe eines numerischen Verfahrens für allgemeine inelastische Materialien bei großen Verzerrungen durchgeführt werden. Das grundlegende Konzept ist die Finite Elemente Diskretisierung der Mikrostruktur unter Berücksichtigung eines feinkaligen Fluktuationfeldes. Im Folgenden wird ein homogenisiertes Makrokontinuum mit lokal angehefteter Mikrostruktur betrachtet, siehe Abbildung 68. Die Deformation der Mikrostruktur wird von der Deformation des Makrokontinuums an dieser Stelle bestimmt, wobei der homogenen Deformation der Mikrostruktur ein Fluktuationfeld überlagert wird das unterschiedlichen Bedingungen genügen kann. Der Fluktuationsteil ist die Primärvariable, die durch den Finite Elemente Ansatz diskretisiert wird. Wie in der Arbeit von HILL [50] vorgeschlagen, werden die makroskopischen Spannungen als Volumenmittelwert der mikroskopischen Spannungen in einem Gleichgewichtszustand definiert.

Für die Bedingungen an das Fluktuationfeld werden vier mögliche Fälle unterschieden.

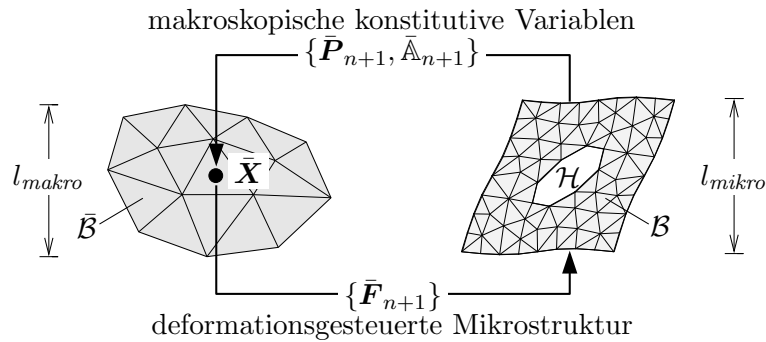


Abbildung 68: Typischer zweiskaliger Aufbau mit sehr großen Skalenunterschieden in der Makro- und Mikroskala, $l_{makro} \gg l_{mikro}$. Für eine vorgegebene Deformation $\bar{\mathbf{F}}_{n+1}$ wird die homogenisierte makroskopische Spannungsantwort $\bar{\mathbf{P}}_{n+1}$ berechnet.

Dies sind

- die homogenen Verschiebungen,
- die homogenen Verschiebungsrandbedingungen,
- die periodischen Verschiebungsrandbedingungen,
- und die konstante Spannungsrandbedingung.

Von besonderem Interesse sind die periodischen Fluktuationen oder periodischen Verschiebungsrandbedingungen. Bei dieser Art der Randbedingung ist es möglich mit einer beliebigen Wahl der Elementarzelle ein periodisches Medium zu erzeugen, das hinsichtlich der Randverschiebungen und der Randspannungen kompatibel ist. Die homogenen Verschiebungsrandbedingungen gewährleisten eine Kompatibilität hinsichtlich der Randverschiebungen, verletzen aber die Kompatibilität der Spannungen. Dieser Fall stellt eine obere Schranke für die homogenisierte Spannungsantwort dar, wird aber häufig in der Kristallplastizität angewendet. Bei den Spannungsrandbedingungen verhält es sich umgekehrt. Die Kompatibilität der Spannungen ist gewährleistet, nicht aber die der Verschiebungen. Dieser Fall stellt die untere Schranke der Spannungsantwort des RVEs dar.

7.1.1. Randwertproblem der Makrostruktur

Mit $\bar{\varphi}_t : \bar{\mathcal{B}} \rightarrow \bar{\mathcal{S}}$ wird die nichtlineare Punktabbildung des Makrokontinuums $\bar{\mathcal{B}} \subset \mathbb{R}^3$ bezeichnet. $\bar{\mathbf{F}} = \nabla_{\bar{\mathbf{x}}} \bar{\mathbf{x}}$ ist der dazugehörige Deformationsgradient mit $\bar{J} = \det[\bar{\mathbf{F}}] > 0$. Das makroskopische Randwertproblem wird durch die Gleichgewichtsbedingung

$$\text{DIV}[\bar{\mathbf{P}}] + \bar{\boldsymbol{\gamma}} = \mathbf{0} \quad \text{in } \bar{\mathcal{B}} \quad (7.1)$$

bestimmt. Hierbei wird mit $\bar{\mathbf{P}}$ der makroskopische erste Piola–Kirchhoff Spannungstensor und mit $\bar{\boldsymbol{\gamma}}$ die eingepprägten Kräfte bezüglich des Ausgangsvolumens bezeichnet. Im Folgenden wird angenommen, dass alle Variablen ohne Index zum aktuellen Zeitpunkt t_{n+1} ausgewertet sind. Die makroskopischen ersten Piola–Kirchhoff Spannungen sind definiert durch den Volumenmittelwert

$$\bar{\mathbf{P}} := \frac{1}{V} \int_{\mathcal{B}} \mathbf{P} \, dV \quad \text{in } \bar{\mathcal{B}} \quad (7.2)$$

der zu $\bar{\mathbf{P}}$ assoziierten mikroskopischen Variablen \mathbf{P} . Diese ist punktweise in $\mathbf{X} \in \mathcal{B}$ der lokal angehängten Mikrostruktur definiert. Die Deformation der Mikrostruktur ist durch den

makroskopischen Deformationsgradienten $\bar{\mathbf{F}}$ gegeben. Die wesentlichen Randbedingungen für die Verschiebungen und die Oberflächenspannungen auf dem Rand der Mikrostruktur sind gegeben durch

$$\bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{x}}_b \quad \text{auf} \quad \partial\bar{\mathcal{B}}_{\bar{\mathbf{x}}} \quad \text{und} \quad \bar{\mathbf{t}} := \bar{\mathbf{P}}\bar{\mathbf{N}} = \bar{\mathbf{t}}_b \quad \text{auf} \quad \partial\bar{\mathcal{B}}_{\bar{\mathbf{t}}}, \quad (7.3)$$

wobei die übliche Aufteilung der Oberfläche der Referenzkonfiguration $\partial\bar{\mathcal{B}} = \partial\bar{\mathcal{B}}_{\bar{\mathbf{x}}} \cup \partial\bar{\mathcal{B}}_{\bar{\mathbf{t}}}$ und $\partial\bar{\mathcal{B}}_{\bar{\mathbf{x}}} \cap \partial\bar{\mathcal{B}}_{\bar{\mathbf{t}}} = \emptyset$ vorgenommen wird. Mit $\bar{\mathbf{N}}$ wird die nach außen gerichtete Normale auf den Körper $\bar{\mathcal{B}}$ bezeichnet. Die schwache Form des Gleichgewichts (7.1), die als Prinzip der virtuellen Arbeit bezeichnet wird, hat die Form

$$\bar{G} := \int_{\bar{\mathcal{B}}} \nabla \delta \bar{\mathbf{x}} : \bar{\mathbf{P}} \, d\bar{V} - \int_{\bar{\mathcal{B}}} \delta \bar{\mathbf{x}} \cdot \bar{\boldsymbol{\gamma}} \, d\bar{V} - \int_{\bar{\mathcal{B}}_{\bar{\mathbf{t}}}} \delta \bar{\mathbf{x}} \cdot \bar{\mathbf{t}}_b \, d\bar{A} = 0 \quad (7.4)$$

mit dem Feld der virtuellen Verschiebungen $\delta \bar{\mathbf{x}}$, die der Bedingung $\delta \bar{\mathbf{x}} = \mathbf{0}$ auf $\partial\bar{\mathcal{B}}_{\bar{\mathbf{x}}}$ genügen. Die Linearisierung von Gleichung (7.4) ergibt sich für den Fall von Eigenlasten zu

$$\text{Lin } \bar{G} = \bar{G} + \Delta \bar{G} = \bar{G} + \int_{\bar{\mathcal{B}}} \delta \bar{\mathbf{x}} : \bar{\mathbb{A}} : \Delta \bar{\mathbf{x}} \, d\bar{V} \quad (7.5)$$

mit dem inkrementellen makroskopischen Verschiebungsfeldern $\Delta \bar{\mathbf{x}}$. In Gleichung (7.5) wird die Linearisierung

$$\Delta \bar{\mathbf{P}} = \bar{\mathbb{A}} : \Delta \bar{\mathbf{F}} \quad (7.6)$$

der makroskopischen ersten Piola–Kirchhoff Spannungen und der dazugehörige nominelle makroskopische Tangentenmodul $\bar{\mathbb{A}} := \partial_{\bar{\mathbf{F}}} \bar{\mathbf{P}}$ eingeführt.

7.1.2. Finite Elemente Lösung des makroskopischen Randwertproblems

Zur Lösung des makroskopischen Randwertproblems wird eine typische Newton–Iteration betrachtet. Die Finite Elemente Methode diskretisiert die linearisierte schwache Form (7.5) auf Elementebene mit dem Ansatz

$$\bar{\mathbf{x}}^h(\bar{\mathbf{X}}) = \bar{\mathbf{N}}(\bar{\mathbf{X}})\bar{\mathbf{d}}^e \quad \text{und} \quad \nabla \bar{\mathbf{x}}^h(\bar{\mathbf{X}}) = \bar{\mathbf{B}}(\bar{\mathbf{X}})\bar{\mathbf{d}}^e \quad (7.7)$$

für die aktuelle Position $\bar{\mathbf{x}}^h(\bar{\mathbf{X}})$ und die dazugehörigen Gradienten $\nabla \bar{\mathbf{x}}^h(\bar{\mathbf{X}})$. Hierbei ist $\bar{\mathbf{N}}$ die Matrix der Ansatzfunktionen, $\bar{\mathbf{B}}$ ist die Matrix der Gradienten und $\bar{\mathbf{d}}^e$ sind die aktuellen Knotenkoordinaten des Finiten Elements. Durch Einsetzen von Gleichung (7.7) in die linearisierte schwache Form (7.5) ergibt sich das lineare Gleichungssystem

$$\bar{\mathbf{K}} \Delta \bar{\mathbf{d}} = -\bar{\mathbf{r}} \quad (7.8)$$

mit der makroskopischen Steifigkeitsmatrix $\bar{\mathbf{K}}$ und dem Residuumsvektor $\bar{\mathbf{r}}$.

$$\left. \begin{aligned} \bar{\mathbf{K}} &= \left. \begin{aligned} &\mathbf{A}_{e=1}^{\bar{n}_{elem}} \int_{\bar{\mathcal{B}}^e} \bar{\mathbf{B}}^T \bar{\mathbb{A}} \bar{\mathbf{B}} \, d\bar{V} \\ \bar{\mathbf{r}} &= \mathbf{A}_{e=1}^{\bar{n}_{elem}} \left[\int_{\bar{\mathcal{B}}^e} \bar{\mathbf{B}}^T \bar{\mathbf{P}} \, d\bar{V} - \int_{\bar{\mathcal{B}}^e} \bar{\mathbf{N}}^T \bar{\boldsymbol{\gamma}} \, d\bar{V} - \int_{\partial\bar{\mathcal{B}}_{\bar{\mathbf{t}}}^e} \bar{\mathbf{N}}^T \bar{\mathbf{t}}_b \, d\bar{A} \right] \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (7.9)$$

Dieses System kann nach den Inkrementen der globalen Knotenkoordinaten $\Delta \bar{\mathbf{d}}$ gelöst werden. Daraus ergibt sich die Aufdatierungsgleichung des Newton–Verfahrens.

$$\bar{\mathbf{d}} \Leftarrow \bar{\mathbf{d}} - \bar{\mathbf{K}}^{-1} \bar{\mathbf{r}} \quad (7.10)$$

Die Makrostruktur wird mit \bar{n}_{elem} Elementen diskretisiert und das Symbol $\mathbf{A}_{e=1}^{\bar{n}_{elem}}$ steht für den Assemblierungsoperator.

7.1.3. Randwertproblem der Mikrostruktur

Mit $\varphi_t : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{S}$ wird die nichtlineare Punktabbildung des Mikrokontinuums $\mathcal{B} \subset \mathbb{R}^3$ bezeichnet, $\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{x}$ ist der zugehörige Deformationsgradient mit der Determinante $J = \det[\mathbf{F}] > 0$. Die makroskopischen und mikroskopischen Gradienten $\bar{\mathbf{F}}$ und \mathbf{F} sind wie die arbeitskonjugierten ersten Piola–Kirchhoff Spannungen $\bar{\mathbf{P}}$ und \mathbf{P} über die Volumenmittelungen

$$\bar{\mathbf{F}} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{B}} \mathbf{F} \, dV \quad \text{und} \quad \bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{B}} \mathbf{P} \, dV \quad (7.11)$$

verbunden. Hierbei wird mit $V := \text{vol}(\mathcal{B})$ das Volumen der Mikrostruktur \mathcal{B} bezeichnet. Im Folgenden wird ein statischer Gleichgewichtszustand angenommen, wobei die Volumenlasten aufgrund des großen Skalenunterschieds auf Mikroebene vernachlässigt werden. Dieser Gleichgewichtszustand wird durch die Feldgleichung

$$\text{DIV}[\mathbf{P}] = \mathbf{0} \quad \text{in} \quad \mathcal{B} \quad (7.12)$$

bestimmt. Durch Anwenden des Divergenz–Theorems und einigen weiteren Umformungen werden die Volumenintegrale (7.11) durch Oberflächenintegrale ausgedrückt. Es gilt

$$\bar{\mathbf{F}} = \frac{1}{V} \int_{\partial \mathcal{B}} \mathbf{x} \otimes \mathbf{N} \, dA \quad \text{und} \quad \bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{V} \int_{\partial \mathcal{B}} \mathbf{t} \otimes \mathbf{X} \, dA \quad (7.13)$$

mit der aktuellen Deformation \mathbf{x} und den Spannungen $\mathbf{t} = \mathbf{P}\mathbf{N}$ in $\mathbf{X} \in \partial \mathcal{B}$ auf dem Rand $\partial \mathcal{B}$ der Mikrostruktur mit der auswärtigen Normalen \mathbf{N} . Die Deformation der Mikrostruktur wird über den Ansatz

$$\mathbf{x} = \bar{\mathbf{F}}\mathbf{X} + \tilde{\omega} \quad \text{in} \quad \mathcal{B} \quad (7.14)$$

mit den lokalen Größen des Makrokontinuums gekoppelt. Die Deformation besteht aus

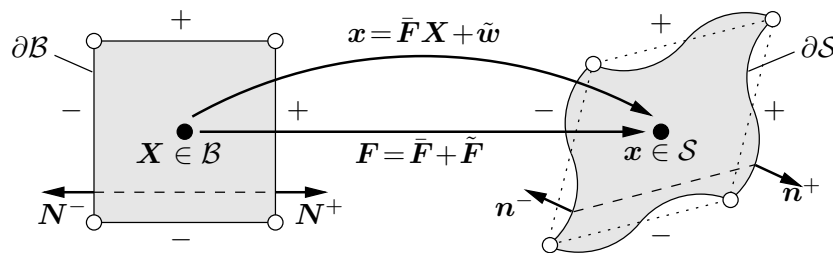


Abbildung 69: Die Deformation \mathbf{x} der Mikrostruktur ist durch den lokalen makroskopischen Deformationsgradienten $\bar{\mathbf{F}}$ und einen Fluktuationsanteil $\tilde{\omega}$ vorgegeben. Hier ist dies am Beispiel der periodischen Randbedingungen gezeigt.

einem homogenen Anteil $\bar{\mathbf{F}}\mathbf{X}$ und einem inhomogenen superponierten Teil $\tilde{\omega}(\mathbf{X})$, der als Fluktuationsfeld bezeichnet wird. Hieraus folgt die Beziehung zwischen dem mikroskopischen und dem makroskopischen Deformationsgradient

$$\mathbf{F} = \bar{\mathbf{F}} + \tilde{\mathbf{F}} \quad \text{mit} \quad \tilde{\mathbf{F}} := \nabla \tilde{\omega}. \quad (7.15)$$

Durch Einsetzen von Gleichung (7.15) in (7.11)₁ ergibt sich die Bedingung

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{B}} \tilde{\mathbf{F}} \, dV = \frac{1}{V} \int_{\partial\mathcal{B}^-} \tilde{\boldsymbol{\omega}}^- \otimes \mathbf{N}^- \, dA + \frac{1}{V} \int_{\partial\mathcal{B}^+} \tilde{\boldsymbol{\omega}}^+ \otimes \mathbf{N}^+ \, dA = \mathbf{0} \quad (7.16)$$

für das superponierte Fluktuationsfeld $\tilde{\boldsymbol{\omega}}$. Der Rand der Mikrostruktur $\partial\mathcal{B}$ unterliegt der Aufteilung $\partial\mathcal{B} = \partial\mathcal{B}^- \cup \partial\mathcal{B}^+$ mit den Normalen $\mathbf{N}^+ = -\mathbf{N}^-$ an den beiden gegenüberliegenden Punkten $\mathbf{X}^+ \in \partial\mathcal{B}^+$ und $\mathbf{X}^- \in \partial\mathcal{B}^-$, siehe Abbildung 69. Die Gleichung (7.16) wird von den alternativen Bedingungen

$$\left. \begin{array}{ll} (i) & \tilde{\boldsymbol{\omega}} = \mathbf{0} \quad \text{in } \mathcal{B} \\ (ii) & \tilde{\boldsymbol{\omega}} = \mathbf{0} \quad \text{auf } \partial\mathcal{B} \\ (iii) & \tilde{\boldsymbol{\omega}}^+ = \tilde{\boldsymbol{\omega}}^- \quad \text{auf } \partial\mathcal{B} \end{array} \right\} \quad (7.17)$$

erfüllt. Die erste triviale Bedingung erzwingt eine homogene Deformation im gesamten Gebiet der Mikrostruktur und wird als Taylor-Ansatz bezeichnet. Dieser Ansatz wird häufig in der Kristallplastizität verwendet, siehe Abschnitt 7.3. Die zweite Bedingung postuliert eine homogene Deformation auf dem Rand der Mikrostruktur. Aus der dritten Bedingung ergibt sich die nicht-triviale Periodizität des superponierten Fluktuationsfeldes $\tilde{\boldsymbol{\omega}}$ auf dem Rand $\partial\mathcal{B}$ der Mikrostruktur. Eine weitere Bedingung, die Gleichung (7.16) in schwacher Form erfüllt ist

$$(iv) \quad \frac{1}{V} \int_{\partial\mathcal{B}} \tilde{\boldsymbol{\omega}} \cdot (\bar{\mathbf{P}}\mathbf{N}) \, dA = 0. \quad (7.18)$$

Auf diese Form der Spannungsrandbedingung wird im Weiteren nicht näher eingegangen.

Die Spannungen \mathbf{P} in $\mathbf{X} \in \mathcal{B}$ zur aktuellen Zeit t_{n+1} sind durch ein numerisches Materialmodell im Rahmen der finiten Inelastizität bestimmt. Der Spannungsalgorithmus kann in der Form

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}(\mathbf{F}; \mathcal{I}_n) \quad \text{mit} \quad \mathbf{F} = \bar{\mathbf{F}} + \tilde{\mathbf{F}} \quad (7.19)$$

dargestellt werden, wobei \mathcal{I}_n den Vektor von internen Variablen zum Zeitpunkt t_n charakterisiert. Für einen gegebenen makroskopischen Deformationsgradienten $\bar{\mathbf{F}}$ ist das Randwertproblem der Mikrostruktur durch die Gleichgewichtsbedingung (7.12), die Konstitutivgleichung (7.19) und eine der Randbedingungen aus (7.17) bestimmt. Das Einsetzen von Testfunktionen, d.h. von virtuellen Fluktuationen $\delta\tilde{\boldsymbol{\omega}}$ mit $\delta\tilde{\boldsymbol{\omega}}^+ = \delta\tilde{\boldsymbol{\omega}}^-$ auf $\partial\mathcal{B}$ führt auf das Standard Galerkin Verfahren mit der schwachen Form von (7.12)

$$G := \int_{\mathcal{B}} \nabla \delta\tilde{\boldsymbol{\omega}} : \mathbf{P} \, dV = 0. \quad (7.20)$$

Die Linearisierung von (7.20) nimmt folgende Gestalt an,

$$\text{Lin } G = G + \Delta G = G + \int_{\mathcal{B}} \nabla \delta\tilde{\boldsymbol{\omega}} : \mathbb{A} : [\Delta \bar{\mathbf{F}} + \nabla \Delta \tilde{\boldsymbol{\omega}}] \, dV, \quad (7.21)$$

mit den Inkrementen der makroskopischen Deformationsgradienten $\Delta \bar{\mathbf{F}}$ und den Inkrementen des Gradienten des Fluktuationsfeldes $\nabla \Delta \tilde{\boldsymbol{\omega}}$. Analog zu Gleichung (7.6) führen wir die Linearisierung der mikroskopischen Spannungen ein.

$$\Delta \mathbf{P} = \mathbb{A} : \Delta \mathbf{F} \quad \text{mit} \quad \mathbb{A} := \partial_{\mathbf{F}} \mathbf{P} \quad (7.22)$$

Diese werden mit Hilfe des mikroskopischen Tangentenmoduls \mathbb{A} konsistent zu dem Spannungsalgorithmus (7.19) bestimmt.

7.1.4. Finite Elemente Lösung des mikroskopischen Randwertproblems

Zur Lösung des mikroskopischen Randwertproblems wird eine typische Newton–Iteration betrachtet. Die Standard Finite Elemente Methode diskretisiert die linearisierte schwache Form (7.21) auf Elementebene mit dem Ansatz

$$\tilde{\omega}^h(\mathbf{x}) = \mathbf{N}(\mathbf{x})\tilde{\mathbf{d}}^e \quad \text{und} \quad \nabla\tilde{\omega}^h(\mathbf{x}) = \mathbf{B}(\mathbf{x})\tilde{\mathbf{d}}^e \quad (7.23)$$

für die Fluktuationen und die dazugehörigen Gradienten. Hierbei ist \mathbf{N} die Matrix der Ansatzfunktionen, \mathbf{B} ist die Matrix der Gradienten und $\tilde{\mathbf{d}}^e$ sind die Knotenfluktuationen des Finiten Elements. Durch Einsetzen von (7.23) in die linearisierte schwache Form (7.21) ergibt sich das lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{K} \Delta\tilde{\mathbf{d}} = -[\mathbf{L}\Delta\bar{\mathbf{F}} + \mathbf{r}] \quad (7.24)$$

mit den zwei Fluktuationssteifigkeitsmatrizen

$$\mathbf{K} = \mathbf{A}_{e=1}^{n_{elem}} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T \mathbb{A} \mathbf{B} dV \quad \text{und} \quad \mathbf{L} = \mathbf{A}_{e=1}^{n_{elem}} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T \mathbb{A} dV \quad (7.25)$$

und dem Residuumsvektor

$$\mathbf{r} = \mathbf{A}_{e=1}^{n_{elem}} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T \mathbf{P} dV \quad (7.26)$$

der Mikrostruktur. Die Mikrostruktur wird durch n_{elem} Elemente diskretisiert. Dieses Gleichungssystem kann nach den Inkrementen der Knotenfluktuationen $\Delta\tilde{\mathbf{d}}$ gelöst werden.

$$\Delta\tilde{\mathbf{d}} = -\mathbf{K}^{-1}[\mathbf{L}\Delta\bar{\mathbf{F}} + \mathbf{r}] \quad (7.27)$$

Dies ergibt die typische Aufdatierungsgleichung des Newton–Verfahrens. Bei gegebenem makroskopischem Deformationsgradient $\bar{\mathbf{F}} = konst.$ erhalten wir $\Delta\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{0}$. Die diskreten Fluktuationen werden somit durch

$$\tilde{\mathbf{d}} \Leftarrow \tilde{\mathbf{d}} - \mathbf{K}^{-1}\mathbf{r} \quad (7.28)$$

aufdatiert. Die Implementierung der Randbedingungen (7.17) erfolgt über die diskrete Form dieser Randbedingungen

$$\left. \begin{array}{l} (i) \quad \tilde{\mathbf{d}} = \mathbf{0} \quad \text{in} \quad \mathcal{B}^h \\ (ii) \quad \tilde{\mathbf{d}} = \mathbf{0} \quad \text{auf} \quad \partial\mathcal{B}^h \\ (iii) \quad \tilde{\mathbf{d}}^+ = \tilde{\mathbf{d}}^- \quad \text{auf} \quad \partial\mathcal{B}^h \end{array} \right\} \quad (7.29)$$

Die Bedingungen (7.29)₁ und (7.29)₂ sind trivial. Die diskrete Periodizität aus (7.29)₃ kann bei einem regulären Finite Element Netz leicht über das “Linken” von Knotenverschiebungen im Topologiefeld realisiert werden. Auf die Umsetzung der schwachen Randbedingung (7.18) wird hier nicht weiter eingegangen, sie kann in den Arbeiten von MIEHE [74, 78] nachgelesen werden.

Zur vollständigen Betrachtung wird im Folgenden der konsistente Tangentenmodul angegeben. Die Linearisierung der homogenisierten Spannungen (7.2) ergibt den Ausdruck

$$\Delta\bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{B}} \Delta\mathbf{P} dV = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{B}} \mathbb{A} : [\Delta\bar{\mathbf{F}} + \nabla\Delta\tilde{\omega}] dV. \quad (7.30)$$

Das Inkrement des Fluktuationsgradienten $\nabla\Delta\tilde{\omega}$ wird über (7.23)₂ und (7.27) zu folgendem Ausdruck bestimmt.

$$\nabla\Delta\tilde{\omega} = \mathbf{B}\Delta\tilde{\mathbf{d}} = -\mathbf{B}\mathbf{K}^{-1}[\mathbf{L}\Delta\bar{\mathbf{F}} + \mathbf{r}] \quad (7.31)$$

Mit der Annahme eines Gleichgewichtszustands auf der Mikrostruktur, $\mathbf{r} = \mathbf{0}$, ergibt sich durch Einsetzen von (7.31) in (7.30)

$$\Delta\bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{B}} \mathbb{A} : [\Delta\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{B}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{L}\Delta\bar{\mathbf{F}}] dV, \quad (7.32)$$

woraus der makroskopische Tangentenmodul identifiziert werden kann.

$$\bar{\mathbb{A}} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{B}} \mathbb{A} dV - \frac{1}{V} \mathbf{L}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{L} \quad (7.33)$$

Dieser Tangentenmodul besteht aus dem Volumenmittelwert der mikroskopischen Moduli und einem Teil, der die Flexibilität der Mikrostruktur durch die Ausbildung der diskreten Fluktuationsfelder berücksichtigt.

7.2. Identifikation transversal isotroper finiter Elastizität

Die zur Beschreibung des Materialverhaltens auf der Mikroebene als auch auf der Makroebene nötigen phänomenologischen Materialmodelle werden in diesem Abschnitt dargestellt. Zusätzlich zu den Konstituierenden auf der Mikroebene muss die Geometrie der Mikrostruktur bekannt sein. Auf der Makroebene wird ein entsprechendes Materialgesetz formuliert, um die auf der Mikroebene beobachteten Phänomene beschreiben zu können.

7.2.1. Mikrostrukturen für transversal isotropes Material

Die zu untersuchende Mikrostruktur ist ein Boron-Laminat. Es besteht aus Boron Fasern in einer Epoxydharz Matrix und ist in der folgenden Abbildung 70 dargestellt. Das

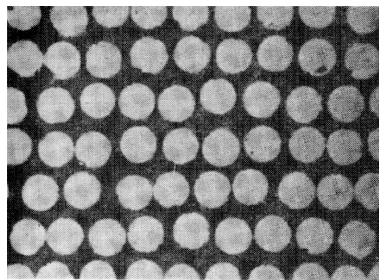


Abbildung 70: Mikrostruktur von Boron-Epoxydharz Laminat aus HALPIN [36].

repräsentative Volumenelement wird mit $14 \times 14 \times 14$ linearen Verschiebungselementen diskretisiert. Der Volumengehalt an Fasern liegt bei 50 %. Als alternative Mikrostruktur wird ein geschichtetes Material bestehend aus zwei Phasen gleichen Anteils untersucht, das mit $12 \times 12 \times 12$ Elementen diskretisiert wird. Das unterschiedliche Materialverhalten von Faser und Matrix bzw. der beiden laminaren Schichten wird durch eine unterschiedliche Wahl der Materialparameter realisiert. Die für weitere Rechnungen verwendeten Materialparameter sind in Tabelle 22 zusammengefasst. Die angegebene Lamé-Konstante und der Schubmodul lassen sich über $\mu = E/[2(1 + \nu)]$ und $\lambda = E\nu/[(1 + \nu)(1 - 2\nu)]$ aus den angegebenen Werten für den E -Modul und die Querkontraktion ν berechnen.

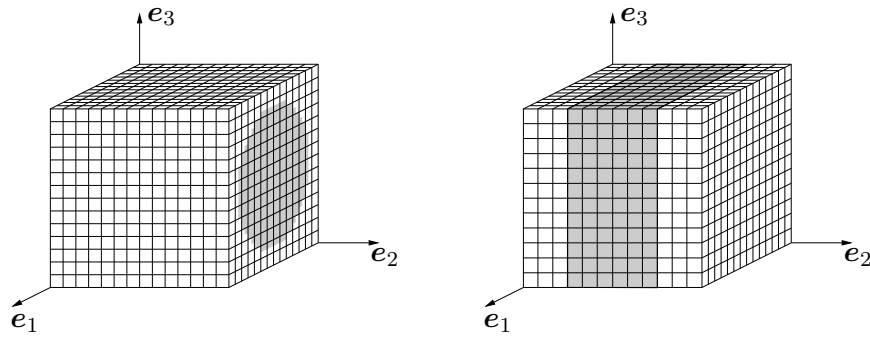


Abbildung 71: Diskretisierungen der beiden untersuchten transversal isotropen Mikrostrukturen. Links: Diskretisierung des Boron-Laminats. Rechts: Diskretisierung einer geschichteten Mikrostruktur. In beiden Fällen ist die ausgezeichnete Richtung parallel zur e_2 -Richtung.

	E [kN/mm ²]	ν [-]	λ [kN/mm ²]	μ [kN/mm ²]
Matrix	2.8	0.35	2.420	1.037
Faser	380.0	0.20	105.556	158.333

Tabelle 22: Materialparameter der Boron Fasern und des Epoxydharz Matrixmaterials aus KALISKE [52].

7.2.2. Materialmodell auf der Mikroebene

Zur Beschreibung des Materials auf der Mikroebene wird sowohl für die Matrix als auch für die eingebetteten Fasern ein Elastizitätsgesetz vom St. Venant–Kirchhoff Typ verwendet. Dieses Stoffgesetz ist die direkte Erweiterung des linearen Elastizitätsgesetzes aus der Theorie kleiner Verzerrungen. Der lineare Verzerrungstensor $\boldsymbol{\varepsilon}$ wird durch das nichtlineare Verzerrungsmaß \boldsymbol{E} ersetzt. Das Material ist in den beiden Materialparametern λ und μ formuliert. Der Green–Lagrange Verzerrungstensor \boldsymbol{E} ist mit dem rechten Cauchy–Green Tensor \boldsymbol{C} bzw. dem Deformationsgradienten \boldsymbol{F} folgendermaßen verknüpft.

$$\boldsymbol{E} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{F}^T \boldsymbol{F} - \mathbf{1}) = \frac{1}{2} (\boldsymbol{C} - \mathbf{1}) \quad (7.34)$$

Die freie Energie wird durch die Gleichung

$$\psi = \psi(\boldsymbol{E}) = \frac{1}{2} \lambda (\text{tr}[\boldsymbol{E}])^2 + \mu \text{tr}[\boldsymbol{E}^2] \quad (7.35)$$

angegeben. Aus der Ableitung dieser freien Energiefunktion lassen sich die zweiten Piola–Kirchhoff Spannungen \boldsymbol{S}

$$\boldsymbol{S} = \partial_{\boldsymbol{E}} \psi(\boldsymbol{E}) = \lambda \text{tr}[\boldsymbol{E}] \mathbf{1} + 2\mu \boldsymbol{E} \quad (7.36)$$

und der elastische Tangentenmodul

$$\boldsymbol{C} = \partial_{\boldsymbol{E}\boldsymbol{E}}^2 \psi(\boldsymbol{E}) = \lambda \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2\mu \mathbb{I} \quad (7.37)$$

berechnen. Die Umrechnung der zweiten Piola–Kirchhoff Spannungen auf die ersten Piola–Kirchhoff Spannungen \boldsymbol{P} oder die Kirchhoff Spannungen $\boldsymbol{\tau}$ folgt den üblichen Transformationen.

7.2.3. Makroskopisches Materialmodell

Auf der Makroebene wird das Material als ein transversal isotropes elastisches Material beschrieben. Diese Annahme wird aus der vorgegebenen Mikrostruktur motiviert, die eine ausgezeichnete Faserrichtung enthält. Dieses Materialmodell ist deutlich komplexer, da es einen Strukturtensor \mathbf{M} enthält, der die ausgezeichnete Richtung \mathbf{A} des Materials charakterisiert. Das Modell ist für moderate große Verzerrungen geeignet, da die freie Energiefunktion bei extremen Verzerrungen ihre Konvexitätseigenschaft verliert. Es enthält fünf Materialparameter λ , μ_T , α , β und μ_L und die ausgezeichnete Richtung, die durch zwei Winkel ϕ_1 und ϕ_2 beschrieben wird. Die Angabe der Winkel folgt der Konvention, die in Abbildung 72 dargestellt ist. Die Faserrichtung wird in Kugelkoordinaten

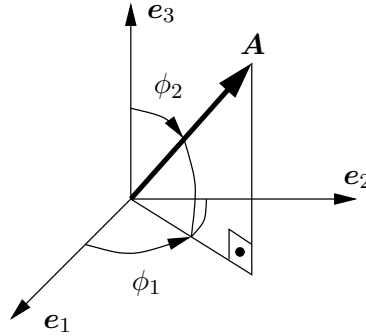


Abbildung 72: Angabe der ausgezeichneten Raumrichtung \mathbf{A} durch Kugelkoordinaten ϕ_1 und ϕ_2 .

angegeben. Somit ergibt sich der Richtungsvektor zu

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \cos[\phi_1] \sin[\phi_2] \\ \sin[\phi_1] \cos[\phi_2] \\ \cos[\phi_2] \end{pmatrix}. \quad (7.38)$$

Der Strukturtensor ergibt sich als dyadisches Produkt des Richtungsvektors \mathbf{A} .

$$\mathbf{M} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{A} \quad \text{mit} \quad \|\mathbf{M}\| = 1 \quad (7.39)$$

Die freie Energie ist als Funktion des Green'schen Verzerrungstensors \mathbf{E} und des konstanten Strukturtenors \mathbf{M} formuliert. Damit ergibt sich die freie Energie als Erweiterung der freien Energie, die aus der Theorie kleiner Verzerrungen bekannt ist.

$$\left. \begin{aligned} \psi &= \psi_{iso}(\mathbf{E}) + \psi_{aniso}(\mathbf{E}, \mathbf{M}) \\ &= \frac{1}{2} \lambda (\text{tr}[\mathbf{E}])^2 + \mu_T \text{tr}[\mathbf{E}^2] \\ &\quad + \alpha \text{tr}[\mathbf{E}] \text{tr}[\mathbf{M}\mathbf{E}] + \frac{1}{2} \beta (\text{tr}[\mathbf{M}\mathbf{E}])^2 + 2(\mu_L - \mu_T) \text{tr}[\mathbf{M}\mathbf{E}^2] \end{aligned} \right\} \quad (7.40)$$

Die Spannungen und der Tangentenmodul ergeben sich wiederum als erste Ableitung bzw. als zweite Ableitung von (7.40) nach den Verzerrungen. Es gilt

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{S} &= \lambda \text{tr}[\mathbf{E}] \mathbf{1} + 2\mu_T \mathbf{E} \\ &\quad + \alpha (\text{tr}[\mathbf{M}\mathbf{E}] \mathbf{1} + \text{tr}[\mathbf{E}]\mathbf{M}) + 2(\mu_L - \mu_T)(\mathbf{E}\mathbf{M} + \mathbf{M}\mathbf{E}) + \beta \text{tr}[\mathbf{M}\mathbf{E}]\mathbf{M} \\ \mathbb{C} &= \lambda \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2\mu_L \mathbb{I} + \alpha (\mathbf{M} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{M}) + 2(\mu_L - \mu_T) \mathbb{I}_{\mathbf{A}} + \beta \mathbf{M} \otimes \mathbf{M}, \end{aligned} \right\} \quad (7.41)$$

mit der Definition $\{\mathbb{I}_{\mathbf{A}}\}_{ijkl} = \frac{1}{2} A_i (\delta_{jk} a_l + \delta_{jl} A_k) + \frac{1}{2} A_j (\delta_{il} A_k + \delta_{ki} A_l)$.

Sensitivitäten

Für die Parameteridentifikation mit analytischen Gradienten müssen die Ableitungen der ersten Piola–Kirchhoff Spannungen nach den Materialparametern bereitgestellt werden. Die Ableitungen der zweiten Piola–Kirchhoff Spannungen nach den Materialparametern ergeben sich zu

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{S}_{,\lambda} &= \operatorname{tr}[\mathbf{E}] \mathbf{1} \\ \mathbf{S}_{,\mu_T} &= 2\mathbf{E} - 2(\mathbf{E}\mathbf{M} + \mathbf{M}\mathbf{E}) \\ \mathbf{S}_{,\alpha} &= \operatorname{tr}[\mathbf{M}\mathbf{E}] \mathbf{1} + \operatorname{tr}[\mathbf{E}]\mathbf{M} \\ \mathbf{S}_{,\beta} &= \operatorname{tr}[\mathbf{M}\mathbf{E}]\mathbf{M} \\ \mathbf{S}_{,\mu_L} &= 2(\mathbf{E}\mathbf{M} + \mathbf{M}\mathbf{E}). \end{aligned} \right\} \quad (7.42)$$

Die Ableitungen der Spannungen nach den Winkeln werden über die Kettenregel berechnet. Es gilt

$$\mathbf{S}_{,\phi_1} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{M}} : \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \phi_1} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{S}_{,\phi_2} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{M}} : \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \phi_2} \quad (7.43)$$

mit den Ableitungen der Spannungen nach dem Strukturtenor

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{M}} &= \alpha(\mathbf{1} \otimes \mathbf{E} + \operatorname{tr}[\mathbf{E}]\mathbb{I}) \\ &+ 2(\mu_L - \mu_T)((\mathbf{E} \otimes \mathbf{1})^{\overset{23}{T}} + (\mathbf{1} \otimes \mathbf{E})^{\overset{23}{T}}) + \beta(\mathbf{M} \otimes \mathbf{E} + \operatorname{tr}[\mathbf{M}\mathbf{E}]\mathbb{I}), \end{aligned} \right\} \quad (7.44)$$

wobei für die Ausdrücke $\{(\mathbf{E} \otimes \mathbf{1})^{\overset{23}{T}}\}_{ijkl} = E_{ik}\delta_{jl}$ und $\{(\mathbf{1} \otimes \mathbf{E})^{\overset{23}{T}}\}_{ijkl} = \delta_{ik}E_{jl}$ gilt. Weiterhin werden die Ableitungen des Strukturtenors nach den Winkeln benötigt. Diese sind

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \phi_1} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \phi_1} \otimes \mathbf{A} + \mathbf{A} \otimes \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \phi_1} \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \phi_2} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \phi_2} \otimes \mathbf{A} + \mathbf{A} \otimes \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \phi_2} \quad (7.45)$$

mit

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \phi_1} = \begin{bmatrix} -2s[\phi_1]c[\phi_1]s^2[\phi_2] & -s^2[\phi_1]s^2[\phi_2] + s^2[\phi_2]c^2[\phi_1] & -s[\phi_1]s[\phi_2]c[\phi_2] \\ \operatorname{sym.} & 2s[\phi_1]s^2[\phi_2]c[\phi_1] & s[\phi_2]c[\phi_1]c[\phi_2] \\ & & 0 \end{bmatrix} \quad (7.46)$$

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \phi_2} = \begin{bmatrix} 2s[\phi_2]c^2[\phi_1]c[\phi_2] & 2s[\phi_2]c[\phi_1]s[\phi_1]c[\phi_2] & c^2[\phi_2]c[\phi_1] - s^2[\phi_2]c[\phi_1] \\ \operatorname{sym.} & 2s^2[\phi_1]s[\phi_2]c[\phi_2] & c^2[\phi_2]s[\phi_1] - s^2[\phi_2]s[\phi_1] \\ & & -2c[\phi_2]s[\phi_2] \end{bmatrix}. \quad (7.47)$$

Um die Gradienten der ersten Piola–Kirchhoff Spannungen zu erhalten, wird eine Transformation durchgeführt. Es gilt

$$\mathbf{P}_{,\kappa} = \mathbf{F}\mathbf{S}_{,\kappa} \quad \text{oder} \quad \boldsymbol{\tau}_{,\kappa} = \mathbf{F}\mathbf{S}_{,\kappa}\mathbf{F}^T. \quad (7.48)$$

Damit stehen die Gradienten der ersten Piola–Kirchhoff Spannungen oder der Kirchhoff–Spannungen für eine gradientenbasierte Identifikation zur Verfügung.

7.2.4. Generierung der virtuellen Testdaten

Die aus der Homogenisierungsanalyse der Mikrostruktur mit vorgegebenem Deformationsgradienten gewonnenen Kirchhoff–Spannungen $\boldsymbol{\tau}$ werden als virtuelle Messdaten betrachtet. Mit Hilfe dieser generierten Daten werden die Materialparameter des makroskopischen Materialmodells angepasst. Im Vergleich zu realen Experimenten an einer Zug–Druck Prüfmaschine ist hier beim Generieren der Daten eine größere Flexibilität vorhanden. Es kann ein Folge beliebiger Deformationszustände aufgebracht werden, aus denen jeweils komplette Spannungstensen resultieren. Diese multidimensionalen Spannungs–Verzerrungs Beziehungen beinhalten eine reichere Datenmenge als eindimensionale Experimente. In Abbildung 73 sind einige ausgewählte Deformationszustände dargestellt aus deren Überlagerung beliebig komplexe Deformationen generiert werden können, die unabhängig von den betrachteten Randbedingungen sind.

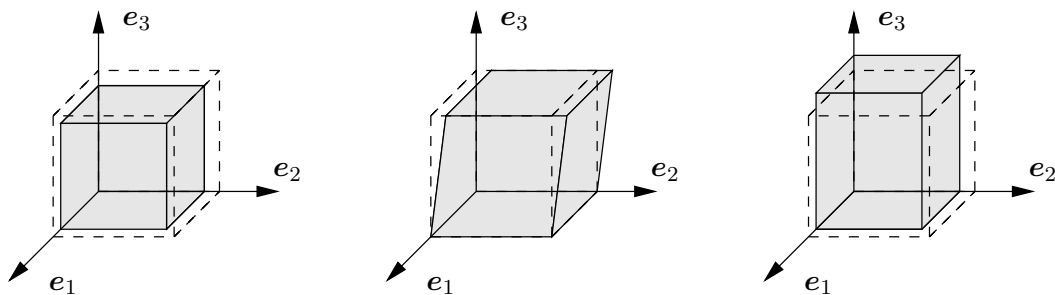


Abbildung 73: Verschiedene Deformationmoden für Treiber–Berechnungen. Links: Volumetrische Deformation. Mitte: Schubdeformation. Rechts: Isochorer Zug.

Die Mikrostruktur wird unter Beachtung der periodischen Verschiebungsrandbedingungen, der homogenen Verschiebungsrandbedingungen und der Spannungsrandbedingungen nacheinander denselben Deformationszuständen unterworfen. Dies sind ein volumetrischer Extensionsmode \mathbf{F}_1 , zwei isochore kombinierte Schubmoden \mathbf{F}_2 und \mathbf{F}_3 bei dem alle drei Schubkomponenten besetzt sind und drei isochore Zugmoden \mathbf{F}_{4-6} in die drei Achsenrichtungen. Für diese Deformationszustände nimmt der Deformationsgradient mit der Definition $\lambda = 1 + \varepsilon$ die folgende Form an.

$$\mathbf{F}_1 = \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon & & \\ & 1 + \varepsilon & \\ & & 1 + \varepsilon \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_2 = \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon & \varepsilon \\ & 1 & \varepsilon \\ & & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_3 = \begin{pmatrix} 1 & & \\ \varepsilon & 1 & \\ \varepsilon & \varepsilon & 1 \end{pmatrix}, \quad (7.49)$$

$$\mathbf{F}_4 = \begin{pmatrix} \lambda & & \\ & \frac{1}{\sqrt{\lambda}} & \\ & & \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_5 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\lambda}} & & \\ & \lambda & \\ & & \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_6 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\lambda}} & & \\ & \frac{1}{\sqrt{\lambda}} & \\ & & \lambda \end{pmatrix}. \quad (7.50)$$

Nach dem Durchführen der virtuellen Tests $\mathbf{F}_1(t), \dots, \mathbf{F}_6(t)$ steht der komplette symmetrische Spannungstensor der Kirchhoff–Spannungen $\{\boldsymbol{\tau}_1(t_n), \dots, \boldsymbol{\tau}_6(t_n)\}_{n=1, \dots, m}$ zu jedem diskreten Zeitpunkt t_n zur Verfügung. Die Deformation wird über die Größe ε mit der Sägezahnfunktion aus Abbildung 74 aufgebracht.

7.2.5. Identifikation der Materialparameter für das Boron–Laminat

Ausgehend von einem Startparametersatz, der nicht zu weit von der Lösung entfernt liegen sollte, werden alle fünf Parameter sukzessive für die verschiedenen Randbedingungen

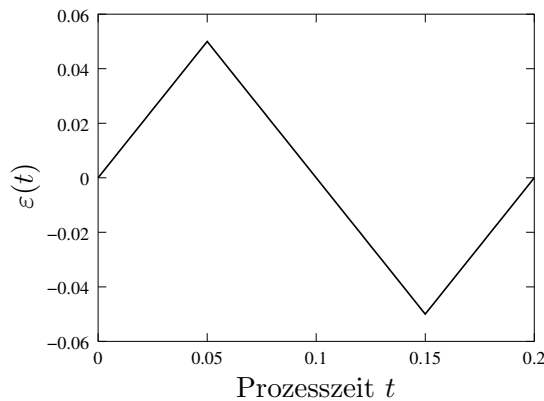


Abbildung 74: Belastungsfunktion zur Generierung von künstlichen Messdaten.

identifiziert. Um eine stabile Identifikation zu erzielen, ist es besonders wichtig alle physikalischen Deformationsmoden anzuregen, die durch die Materialparameter im Modell beschrieben werden. Auf eine gute Wichtung der zur Verfügung stehenden Daten ist zu achten. Hier wird die Wichtung der einzelnen Experimente so angepasst, dass im Lösungspunkt die drei Gruppen von Deformationsmoden einen in etwa gleich großen Anteil an der Fehlerquadratfunktion ausmachen.

Identifikation mit periodischen Randbedingungen

Zuerst werden die Winkel auf den durch die Mikrostruktur vorgegebene Winkel festgehalten. Dies ist nach der Konvention von Abbildung 72 ein Wert von $\phi_1 = 90^\circ$ und $\phi_2 = 90^\circ$, da die ausgezeichnete Richtung durch die Anordnung der Faser in der Mikrostruktur parallel zur e_2 -Richtung vorgegeben ist. Die Identifikation wird ausgehend von zwei unterschiedlichen Werten gestartet. Zum einen ist dies der Materialparametersatz des reinen Matrixmaterials, zum anderen die Parameter des Fasermaterials. Beide Identifikationen liefern exakt denselben optimalen Materialparametersatz bei identischer Fehlerfunktion. Ein Stören des gefundenen Parametersatzes und anschließendes Optimieren ergab erneut dasselbe Optimum. In der folgenden Tabelle 23 sind die Angaben zusammengefasst.

	λ	μ_T	α	β	μ_L	LSF
Startwert 1	2.420	1.037	0.000	0.000	1.037	$1.920 \cdot 10^{+3}$
Startwert 2	105.556	158.333	0.000	0.000	158.333	$2.306 \cdot 10^{+4}$
Lösung	5.261	5.436	0.305	180.635	4.726	$2.451 \cdot 10^{+0}$

Tabelle 23: Angaben der fünf Materialparameter für das transversal isotrope Material für die rundfaserverstärkte Struktur: Startparametersätze, Lösung und Wert der Least-Squares-Funktion. Startwert 1 bezieht sich auf die Materialparameter der Matrix, Startwert 2 bezieht sich auf die Parameter der Faser.

Nun wird die Identifikation zusätzlich mit der ausgezeichneten Richtung durchgeführt. Hier ist die Richtung durch die Diskretisierung der Mikrostruktur vorgegeben. In der üblichen Darstellung über die Winkel $\{\phi_1, \phi_2\}$ ist eine Richtung von $\{90, 90\}$ Grad zu erwarten. Auf einen zweiten Startwert wird verzichtet, da wie oben gezeigt, eine stabile Identifikation vorliegt. Das Ergebnis dieser Identifikation ist in Tabelle 24 dargestellt. Die Winkel werden im Rahmen der Genauigkeit des Optimierers wiedergefunden. Die übrigen fünf Konstanten werden erwartungsgemäß zu den selben Werten identifiziert wie bei festgehaltenen Winkeln.

	λ	μ_T	α	β	μ_L	ϕ_1	ϕ_2	LSF
Startwert 1	2.240	1.037	0.000	0.000	1.037	100.0	80.0	$5.689 \cdot 10^{+1}$
Lösung	5.260	5.436	0.305	180.637	4.726	89.996	89.997	$2.451 \cdot 10^{+0}$

Tabelle 24: Angabe der fünf Materialparameter der Transversalisotropie mit der ausgezeichneten Richtung für die rundfaserverstärkte Mikrostruktur: Startparametersatz, Lösung und Wert der Least-Squares-Funktion.

Die nachfolgenden Grafiken in Abbildung 75 visualisieren den Verlauf einiger ausgewählter Spannungskomponenten, wobei sowohl die virtuellen Daten als auch die Simulationsdaten mit Startwert und mit optimiertem Parametersatz dargestellt sind. Wie bereits durch den starken Abfall der Fehlerfunktion zu erkennen ist, ist ein sehr gute Übereinstimmung von experimentellen und simulierten Daten nach der Optimierung zu erwarten.

Identifikation mit homogenen und Spannungs-Randbedingungen

Die oben beschriebenen Schritte werden auch für die experimentellen Daten, die mit homogenen Randbedingungen bzw. Spannungsrandbedingungen generiert wurden durchgeführt. Auf die Identifikation der Winkel wird an dieser Stelle verzichtet. Ausgehend von dem Materialparametersatz des reinen Matrixmaterials werden auch hier stabile Minima der Zielfunktion gefunden. Diese sind in nachfolgender Tabelle 25 für die verschiedenen Randbedingungen dargestellt. Es ist deutlich zu beobachten, dass die homogenen Verschie-

Lösung	λ	μ_T	α	β	μ_L	LSF
homogene RB	9.034	22.797	4.921	53.014	42.901	$1.190 \cdot 10^{+0}$
periodische RB	5.261	5.436	0.305	180.635	4.726	$2.451 \cdot 10^{+0}$
spannungs RB	7.946	3.105	-1.542	6.814	3.697	$3.017 \cdot 10^{+1}$

Tabelle 25: Angaben zur Parameteridentifikation für unterschiedliche Randbedingungen der Mikrostruktur: Lösungen für homogene Verschiebungsrandbedingungen, periodische Randbedingungen und Spannungsrandbedingungen.

bungsrandbedingungen das steifste Verhalten hervorrufen. Dies äußert sich durch große Lamé-Konstanten λ , μ_L und μ_T in der Parameteranpassung. Weiterhin ist zu erkennen, dass die Anpassung an die Daten, die mit periodischen Randbedingungen generiert wurden, den kleinsten Wert der Zielfunktion aufweist. Dies bedeutet, dass das makroskopische Modell diese Daten besonders gut approximieren kann.

7.2.6. Ein Beispiel zu unvollständigen Messdaten

Liegt einer Identifikation ein unvollständiger Satz an Messdaten zugrunde, so kann es vorkommen, dass kein eindeutiges Minimum gefunden wird. Es gibt eine Vielzahl an Parameterkombinationen, die denselben minimalen Funktionswert besitzen. Als Beispiel wird hier die Identifikation der vorherigen Seiten benutzt, um dieses Phänomen mit einem, um die volumenerhaltenden Zugmoden verringerten Satz an experimentellen Daten, zu zeigen. Dies bedeutet, die Deformationsgradienten aus Gleichung (7.50) bleiben unberücksichtigt.

Es zeigte sich das typische Verhalten, das bei linear abhängigen Materialparametern zu erwarten ist. Je nach verwendetem Startpunkt und/oder Optimierungsverfahren werden unterschiedliche Lösungen gefunden, wobei diese Lösungen zum Teil physikalisch bedeutungslos sind. In Tabelle 26 sind die Lösungen für die Kombinationen aus Startwert entspricht dem reinen Matrixmaterial, Startwert entspricht dem reinen Fasermaterial, Op-

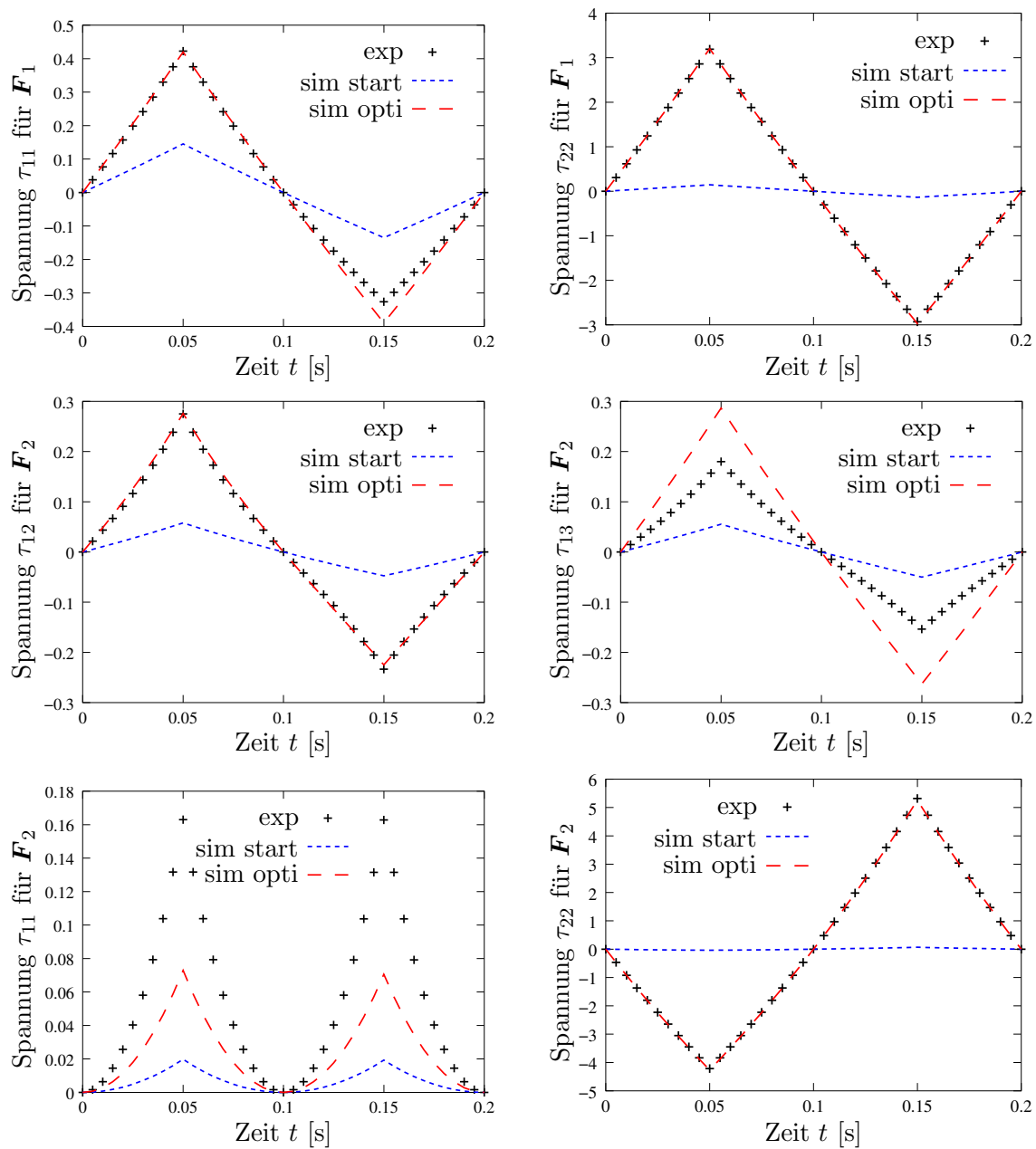


Abbildung 75: Darstellung ausgewählter Komponenten des Kirchhoff-Spannungstensors τ [kN/mm²] über der Prozesszeit für das Experiment, die Simulation mit Startwert 1 und die Simulation mit optimiertem Parametersatz.

timierungsverfahren O1 (SQP-Verfahren) und Optimierungsverfahren O2 (Simplex Methode) dargestellt. Bei allen diesen Lösungen werden die Schubmoduli exakt identifiziert. Es besteht jedoch eine lineare Abhängigkeit zwischen den Parametern λ , α und β , wobei die Fehlerquadratfunktion denselben minimalen Wert annimmt.

Durch gezieltes Festhalten der Lamé-Konstanten λ auf einer Reihe von vorgegebenen Werten und anschließendes Identifizieren der übrigen Parameter, ergibt sich eine Vielzahl an möglichen Kombinationen, deren lineare Abhängigkeit in der nachfolgenden Abbildung 76 im λ - α - β -Raum dargestellt ist.

	λ	μ_T	α	β	μ_L	LSF
Matrix, O1	-122.732	3.262	388.068	-991.851	4.736	$8.485 \cdot 10^{-1}$
Matrix, O2	-10.423	3.262	51.140	18.932	4.736	$8.485 \cdot 10^{-1}$
Faser, O1	263191.147	3.262	-789553.529	2368833.413	4.736	$8.485 \cdot 10^{-1}$
Faser, O2	-9.055	3.262	47.039	31.238	4.736	$8.485 \cdot 10^{-1}$

Tabelle 26: Lösungen bei unvollständigen Daten. Je nach Startwert und Optimierungsalgorithmus wird eine abweichende Lösung gefunden, die denselben minimalen Funktionswert besitzt.

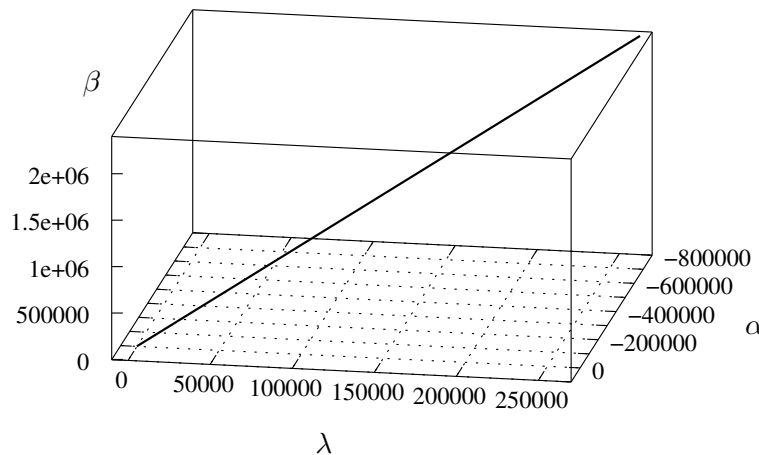


Abbildung 76: Darstellung der linearen Abhängigkeit der Materialparameter λ , α und β bei unvollständigen Messdaten.

7.2.7. Validation der Materialparameter mit Treiber-Rechnung

Um eine Validation der zuvor gefundenen Materialparameter durchzuführen, wird die runde Mikrostruktur und das makroskopische Materialmodell mit angepassten Materialparametern zwei unterschiedlichen Treiber Test unterworfen, die bereits in Abbildung 49 auf Seite 85 dargestellt wurden. Wie zu erwarten war, ist eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse, d.h. des E -Moduls und der Querkontraktion ν aus der Homogenisierungsanalyse und der Berechnung mit dem makroskopischen Materialmodell zu erkennen. Der E -Modul wird hier zu $E := P_{11}/(\lambda - 1)$ und die Querkontraktion zu $\nu := -(1 - f_1(\lambda))/(\lambda - 1)$ definiert. Die Ergebnisse in den Abbildungen 77 und 78 sind in Polarkoordinaten über dem Winkel der Faserrichtung in der y - z -Ebene dargestellt. Für alle vier durchgeführten Vergleichsrechnungen ist eine sehr gute, von der Faserrichtung abhängige Übereinstimmung der Homogenisierungsanalyse mit der makroskopischen Berechnung mit angepassten Materialparametern zu beobachten. Hieraus ergibt sich, dass es bei einer Strukturberechnung Sinn macht, das makroskopische Materialmodell einzusetzen, anstatt eine Homogenisierungsanalyse durchzuführen. Das Ergebnis einer Strukturberechnung liegt nicht nur wesentlich schneller vor, sondern auch die Ergebnisse stimmen gut mit der durch die Homogenisierung erzielten Ergebnisse überein.

7.2.8. Parameteridentifikation der laminaren Mikrostruktur

Die laminare Mikrostruktur ist ebenso wie die Mikrostruktur mit eingebetteter Faser durch eine ausgezeichnete Richtung charakterisiert. Diese ist der Normalenvektor auf die laminare Schicht. Das Material ist invariant bezüglich Rotationen um diese Richtung. Wie zuvor wird die Parameteridentifikation für experimentelle Daten durchgeführt, die

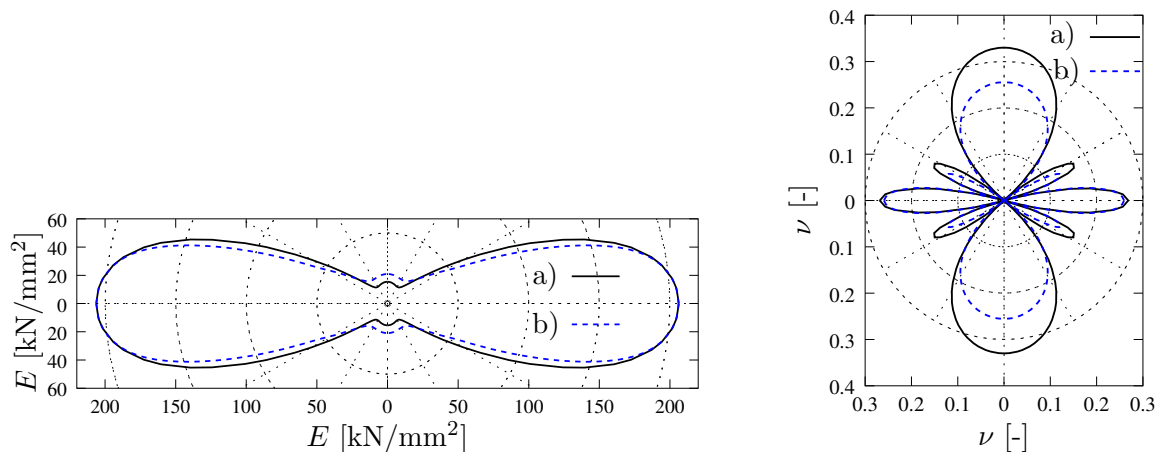


Abbildung 77: Richtungsabhängigkeit der elastischen Konstanten in Polarkoordinaten bei einer vorgegebenen Streckung von $\lambda = 1.05$ a) für das makroskopische Modell und b) für die Mikrostrukturberechnung. Die Schubverzerrungen werden auf Null gehalten.

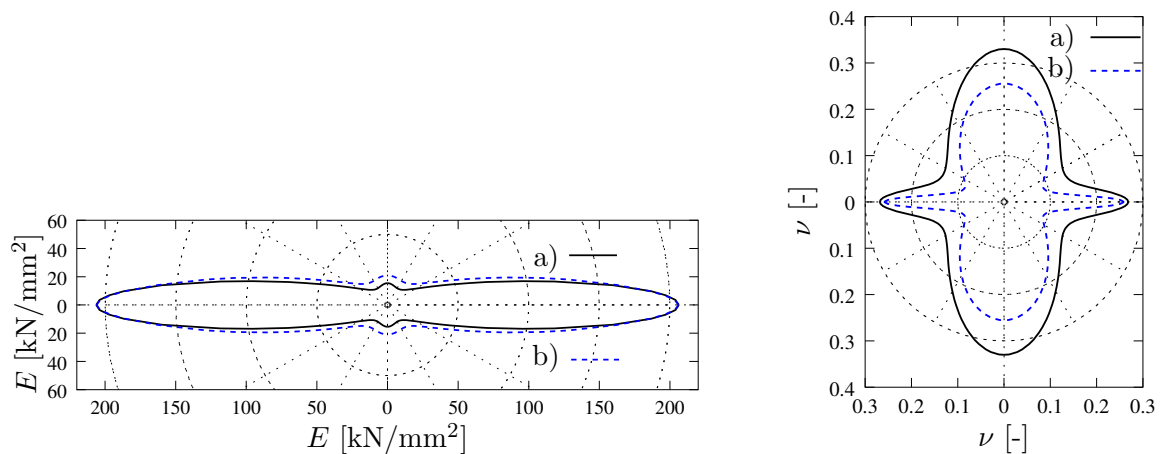


Abbildung 78: Richtungsabhängigkeit der elastischen Konstanten in Polarkoordinaten bei einer vorgegebenen Streckung von $\lambda = 1.05$ a) für das makroskopische Modell und b) für die Mikrostrukturberechnung. Die Schubverzerrungen werden zugelassen.

mit homogenen, periodischen und Spannungsrandbedingungen erzeugt wurden.

Lösung	λ	μ_T	α	β	μ_L	LSF
homogene RB	45.041	79.710	-27.549	64.54	42.528	$1.565 \cdot 10^{-1}$
periodische RB	41.582	79.690	-38.005	194.374	2.112	$2.248 \cdot 10^{-2}$
spannungs RB	5.502	5.353	-0.461	6.699	2.195	$7.988 \cdot 10^{-1}$

Tabelle 27: Angaben zur Parameteridentifikation für unterschiedliche Randbedingungen der laminaren Mikrostruktur: Lösungen für homogene Verschiebungsrandbedingungen, periodische Randbedingungen und Spannungsrandbedingungen.

Auch hier wird unter Verwendung aller Deformationszustände ein stabiles Minimum gefunden. Das makroskopische Modell lässt sich am besten an die mit periodischen Randbedingungen generierten Daten anpassen. Da sowohl die runde als auch die laminare Mikrostruktur denselben Volumengehalt beider Phasen enthalten und mit denselben Materialmodellen und Parametern beschrieben wurden, weichen die Ergebnisse in den einzelnen Parametern deutlich voneinander ab. Diese Abweichung ist bei einem Vergleich der Tabellen 25 und 27 zu erkennen.

7.3. Identifikation finiter orthotroper Plastizität

Der nachfolgende Abschnitt beschäftigt sich mit der Identifikation finiter orthotroper Plastizität, wobei die virtuellen Testdaten durch Testen eines Polykristalls erzeugt werden. Im ersten Schritt wird ein Modell zur Einkristallplastizität vorgestellt, um anschließend mit dem Taylor–Ansatz die Homogenisierung für ein Polykristall durchzuführen. Das Polykristall wird einer Walz–Simulation unterworfen. Hierdurch wird eine Anisotropie durch die Neuorientierung der Einkristalle und durch die unterschiedliche Verfestigungen auf den Gleitsystemen induziert. Ausgehend von diesem Zustand wird das Material virtuellen Tests unterzogen, um Daten zu erhalten, die in einem weiteren Schritt der Parameteridentifikation eines makroskopischen anisotropen Plastizitätsmodells zugeführt werden.

7.3.1. Homogenisierungskonzept in der Kristallplastizität

Ausgehend von der Gleichung (7.16), die bereits im Kapitel 7.1 für die Homogenisierung hergeleitet wurde, wird beim Taylor–Ansatz die gesamten Fluktuationen $\tilde{\omega}$ im Gebiet \mathcal{B} zu Null angenommen, d.h.

$$\tilde{\omega} = \mathbf{0} \text{ in } \mathcal{B}. \quad (7.51)$$

Dies bedeutet für den Fluktuationsanteil des Deformationsgradienten $\nabla \tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{0}$. Daraus

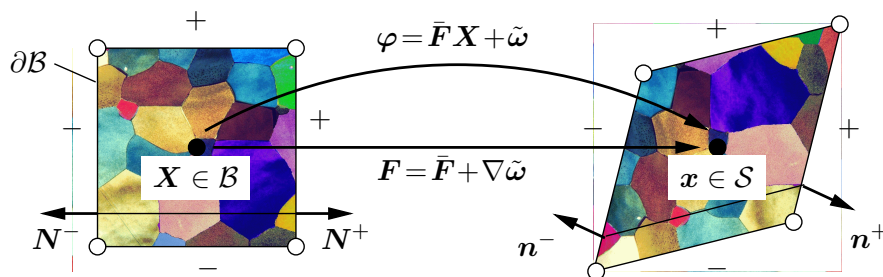


Abbildung 79: Homogenisierung mit dem Taylor–Ansatz. Die Fluktuationen $\tilde{\omega}$ werden im gesamten Gebiet der Mikrostruktur zu Null angenommen.

folgt weiterhin $\mathbf{F} = \bar{\mathbf{F}}$ in \mathcal{B} . Die Spannungen in einem Punkt $\mathbf{X} \in \mathcal{B}$ werden nur durch Funktionsauswertung bestimmt und nicht durch Lösen eines Randwertproblems. Wird der Berechnung ein Polykristall mit N gleich großen Körnern zugrunde gelegt, so kann die makroskopische Spannung durch den Volumenmittelwert der Mikrospannungen in den einzelnen Körnern ausgedrückt werden. Gleiches gilt für den makroskopischen Tangentenmodul.

$$\bar{\mathbf{P}} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{P}_i \quad , \quad \bar{\mathbf{A}} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{A}_i \quad (7.52)$$

Der Taylor–Ansatz erfüllt die Kompatibilität der Mikrostruktur mit den benachbarten Zellen, die Gleichgewichtsbedingung wird jedoch verletzt. Das Taylor–Modell gibt eine obere Grenze für die Steifigkeit des Polykristalls an und ist im Rahmen der Kristallplastizität ein gängiger Ansatz.

7.3.2. Ein Modell zur Einkristallplastizität

Es wird ein kurzer Überblick über ein konstitutives Modell zur Einkristallplastizität gegeben, das den in Arbeiten von MIEHE & SCHOTTE [85] und RICE [105] vorgestellten

Konzepten folgt. Diesem Modell liegt die lokale multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten in einen elastischen und einen plastischen Teil, $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p$ zugrunde. Der plastische Anteil \mathbf{F}^p beschreibt den Teil der lokalen Deformation, der rein auf dem Gleiten der atomistischen Struktur beruht. Der elastische Teil \mathbf{F}^e enthält die Gitterverformungen und die lokalen Starrkörperrotationen, siehe Abbildung 80.

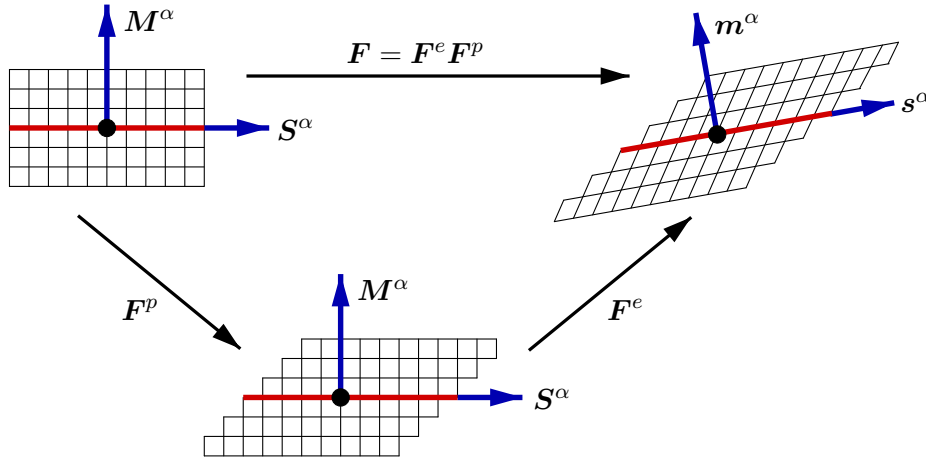


Abbildung 80: Finite Einkristallplastizität auf der Meso-Ebene. Der Deformationsgradient \mathbf{F} wird gemäß $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p$ in einen plastischen Teil und einen elastischen Teil zerlegt. Der plastische Teil beinhaltet die Gleitungen auf den Gleitsystemen mit Gleitrichtung \mathbf{S}^α und Normalen \mathbf{M}^α . Der elastische Anteil enthält die Gitterverformungen und lokale Rotationen.

Der elastische Teil ist definiert zu

$$\mathbf{F}^e := \mathbf{F} \mathbf{F}^{p-1} \quad (7.53)$$

wobei der inverse plastische Deformationsgradient \mathbf{F}^{p-1} als interne Variable aufgefasst wird. Die elastische Spannungsantwort ist durch die Annahme einer Energiespeicherfunktion mit der entkoppelten Struktur gegeben.

$$\psi = \psi^e(\mathbf{F} \mathbf{F}^{p-1}) + \psi^p(\gamma^1, \dots, \gamma^m) \quad (7.54)$$

Einsetzen der obigen Gleichung in die Clausius-Planck Ungleichung $\mathcal{D} := \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \dot{\psi} \geq 0$ liefert mit dem Standardargument der rationalen Thermodynamik die Gleichung für die Spannungen.

$$\mathbf{P} = \partial_{\mathbf{F}} \psi^e(\mathbf{F}^e) = \partial_{\mathbf{F}^e} \psi^e(\mathbf{F}^e) \mathbf{F}^{p-T} \quad (7.55)$$

Werden die zu den internen Variablen konjugierten spannungsähnlichen Variablen definiert

$$\mathbf{P}^p := -\psi^e_{,\mathbf{F}^{p-1}} = -\mathbf{F}^T \psi^e_{,\mathbf{F}^e} \quad \text{und} \quad g^\alpha := -\psi^p(\gamma^1, \dots, \gamma^m)_{,\gamma^\alpha}, \quad (7.56)$$

so erhält die Dissipation die folgende reduzierte Form $\mathcal{D} = \mathbf{P}^p : \dot{\mathbf{F}}^{p-1} + \sum_{\alpha=1}^m g^\alpha \dot{\gamma}^\alpha \geq 0$ mit der kompakten Darstellung $\mathcal{D} = \mathcal{F} \cdot \dot{\mathcal{I}} \geq 0$. Hierzu werden die generalisierten Vektoren der internen Variablen $\mathcal{I} := \{\mathbf{F}^{p-1}, \gamma^1, \dots, \gamma^m\}$ und die dazu dualen internen Kräfte $\mathcal{F} := \{\mathbf{P}^p, g^1, \dots, g^m\}$ eingeführt. Zur Bestimmung des plastischen Fließens wird ein nicht glattes konvexes elastisches Gebiet \mathcal{E} definiert.

$$\mathcal{E} := \{\mathcal{F} | \phi^\alpha(\mathcal{F}) \leq 0 \text{ für } \alpha = 1, \dots, m\} \quad (7.57)$$

ϕ^α sind die Fließfunktionen, die zum Gleitsystem α gehören mit der speziellen Form

$$\phi^\alpha = \tau^\alpha - (\tau_0 + g^\alpha) \quad \text{mit} \quad \tau^\alpha := -\mathbf{P}^p : \mathbf{F}^{p-1}(\mathbf{S}^\alpha \otimes \mathbf{M}^\alpha). \quad (7.58)$$

Die Größe τ^α ist die auf das Gleitsystem projizierte Schubspannung, auch Schmid Spannung genannt. Das Gleitsystem α wird durch die zwei orthonormalen Vektoren \mathbf{S}^α und \mathbf{M}^α definiert, die die Gleitrichtung und die Normale auf die Gleitebene angeben. Die Verfestigung auf den Gleitsystemen wird durch die Variable g^α bestimmt. Die Fließbedingung für das plastische Fließen und die Evolutionsgleichung für die Verfestigungsvariable sind über das Prinzip der maximalen Dissipation

$$\dot{\mathbf{F}}^{p-1} = \mathbf{F}^{p-1} \left(- \sum_{\alpha=1}^m \lambda^\alpha \mathbf{S}^\alpha \otimes \mathbf{M}^\alpha \right) \quad \text{und} \quad \dot{\gamma}^\alpha = \lambda^\alpha \quad (7.59)$$

gegeben. Hierbei sind die m plastischen Parameter über separate Be- und Entlastungsbedingungen für jedes Gleitsystem definiert.

$$\gamma^\alpha \geq 0; \quad \phi^\alpha \leq 0; \quad \gamma^\alpha \phi^\alpha = 0 \quad (7.60)$$

Tabelle 28 fasst das konstitutive Modell zusammen.

Tabelle 28: Konstitutiver Gleichungssatz der Einkristallplastizität.

	$\mathbf{F}^e := \mathbf{F} \mathbf{F}^{p-1}$
1. Freie Energie	$\psi = \psi^e(\mathbf{F} \mathbf{F}^{p-1}) + \psi^p(\gamma^1 \dots \gamma^m)$
2. Spannungen	$\mathbf{P} = \partial_{\mathbf{F}^e} \psi^e \mathbf{F}^{p-T}$
3. Interne Kräfte	$\mathbf{P}^p := -\mathbf{F}^T \partial_{\mathbf{F}^e} \psi^e \quad \text{und} \quad g^\alpha := -\partial_{\gamma^\alpha} \psi^p$
3. Schmid Spannungen	$\tau^\alpha = -\mathbf{P}^p : \mathbf{F}^{p-1}(\mathbf{S}^\alpha \otimes \mathbf{M}^\alpha)$
4. Fließkriterium	$\phi^\alpha = \tau^\alpha - (\tau_0 + g^\alpha)$
5. Fließregel	$\dot{\mathbf{F}}^{p-1} = \mathbf{F}^{p-1} \left(- \sum_{\alpha=1}^m \lambda^\alpha \mathbf{S}^\alpha \otimes \mathbf{M}^\alpha \right) \quad \text{und} \quad \dot{\gamma}^\alpha = \lambda^\alpha$
8. Be- und Entlastungsbed.	$\gamma^\alpha \geq 0, \quad \phi^\alpha \leq 0, \quad \gamma^\alpha \phi^\alpha = 0$

Als konkrete Form der freien Energie wird der folgende Ansatz gewählt,

$$\left. \begin{aligned} \psi^e &= \frac{\mu}{2} [\|\mathbf{F}^e\|^2 - 3] + \kappa [J^e - \ln[J^e] - 1] \\ \psi^p &= \frac{1}{2} h (\sum_{\alpha} \gamma^\alpha)^2 \end{aligned} \right\} \quad (7.61)$$

mit den Materialparametern aus Tabelle 29.

Kompressionsmodul	κ	98000.0 MPa
Schubmodul	μ	45000.0 MPa
Schmid Spannung	τ	16.0 MPa
Verfestigung	h	40.0 MPa

Tabelle 29: Materialparameter für die Einkristallberechnung.

7.3.3. Vorprozess zur Induktion der Anisotropie

Der polykristalline Werkstoff ist bei einer zufälligen Anfangsverteilung der Einkristalle quasi isotrop. Erst durch einen Vorprozess wird die Anisotropie induziert. Die Einkristalle ändern je nach Deformationsprozess ihre Ausrichtung. Hinzu kommt, dass sich die Anisotropie durch die unterschiedlichen Verfestigungen der Gleitsysteme verstärkt. Der Vorprozess wird so gewählt, dass dieser dem Ausrollen eines Metalls zu einem flachen Blech nachempfunden wird. Dies bedeutet, dass die Dickenrichtung stark reduziert und gleichzeitig die Ausdehnung in Querrichtung unterdrückt wird. Lediglich die Ausdehnung in Längsrichtung ist unbehindert. Diese Deformation wird durch den Deformationsgradienten

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} f(\lambda) & & \\ & 1 & \\ & & \lambda \end{bmatrix} \quad (7.62)$$

bestimmt, wobei $f(\lambda)$ so gewählt wird, dass die zugehörige Spannungskomponente Null ist. Diese Behandlung induziert ein orthotropes Verhalten des Materials. Der Deformationsvorgang ist anschaulich in Abbildung 81 dargestellt. Die Neuorientierung der Richtungen

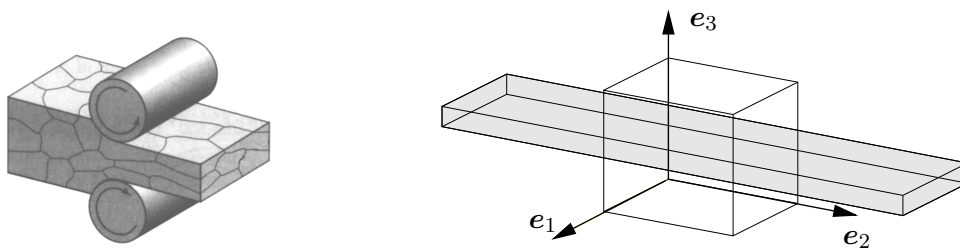


Abbildung 81: Rollprozess und Visualisierung des Treibers zur Simulation des Rollprozesses. Die e_3 -Richtung wird auf 2 % der Ausgangshöhe zusammengedrückt.

der Einkristalle kann durch eine sogenannte Polfigur visualisiert werden. In Abbildung 82 sind die $\langle 111 \rangle$ -Richtungen der Kristalle in einer stereografischen Projektion dargestellt. Die Richtungen der Anisotropie bilden sich parallel zur Walz- und Querrichtung aus. Die

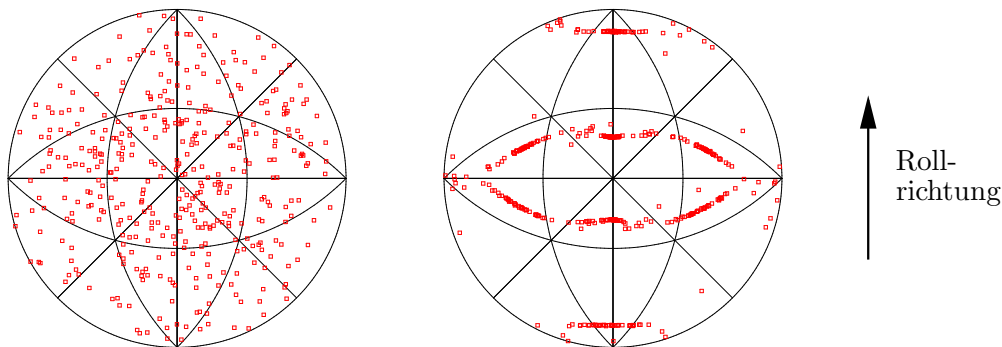


Abbildung 82: Darstellung der Polfiguren mit einer zufälligen Anfangsverteilung der $\langle 111 \rangle$ -Richtungen. Rechts ist die Verteilung am Ende des Vorprozesses dargestellt bei einer Simulation mit 100 Kristallen.

Dickenrichtung stellt die dritte unabhängige Richtung der induzierten Orthotropie dar.

7.3.4. Generierung der virtuellen Testdaten

Das, durch den oben beschriebenen Vorprozess entstandene, anisotrope elastoplastische Material wird virtuellen Tests unterzogen. Die Spannungsantworten dieser beliebigen dreidimensionalen Deformationsprozesse werden als Grundlage der Parameteridentifikation eines makroskopischen orthotropen elastoplastischen Materialmodells, das in Kapitel 7.3.5 beschrieben wird, herangezogen. Aus der Struktur des Materialmodells ist zu erkennen, dass für reine Zugtests und reine Schubtests in die drei Achsrichtungen ein entkoppeltes Identifizieren der Fließspannungen möglich ist. Dies ist der Grund für die Wahl der Deformationsgradienten für die virtuellen Tests. Im Einzelnen sind dies drei Schubdeformationen, die durch die Deformationsgradienten

$$\mathbf{F}_1 = \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_2 = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \varepsilon \\ & & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{F}_3 = \begin{pmatrix} 1 & & \varepsilon \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix} \quad (7.63)$$

bestimmt sind, und drei reine Zugtests in \mathbf{e}_1 -, \mathbf{e}_2 - und \mathbf{e}_3 -Richtung. Diese Deformationen werden durch die Deformationsgradienten

$$\mathbf{F}_4 = \begin{pmatrix} \lambda & & \\ f_1(\lambda) & & \\ & & f_2(\lambda) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_5 = \begin{pmatrix} f_1(\lambda) & & \\ & \lambda & \\ & & f_2(\lambda) \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{F}_6 = \begin{pmatrix} f_1(\lambda) & & \\ & f_2(\lambda) & \\ & & \lambda \end{pmatrix} \quad (7.64)$$

beschrieben, wobei die Definition $\lambda := 1 + \varepsilon$ gilt. Die Komponenten $f_1(\lambda)$ bzw. $f_2(\lambda)$ sind so zu bestimmen, dass die zugehörige Spannungskomponente verschwindet. Die Steuerung der Deformation erfolgt linear über der Zeit mit $\varepsilon = m \cdot t$. Hier wird die Steigung m zu 1 gewählt, wie es der Abbildung 83 zu entnehmen ist. Die Spannungsantworten der sechs

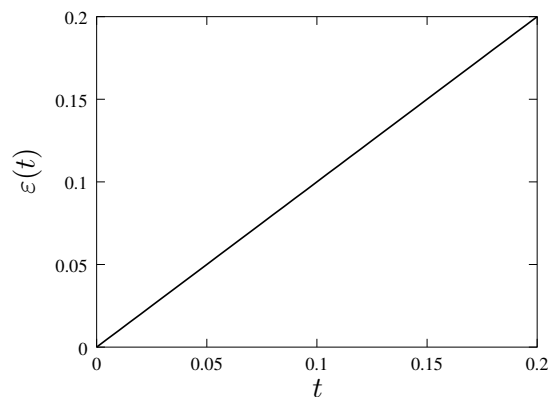


Abbildung 83: Steuerung der Deformation $\varepsilon(t) = m \cdot t$ über der Zeit.

oben beschriebenen virtuellen Tests sind in Abbildung 84 dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Zug- und die Schubtests in die drei ausgezeichneten Richtungen des Materials jeweils unterschiedliche Spannungsantworten liefern, d.h. es liegt orthotropes Materialverhalten vor.

7.3.5. Konstitutives Modell im logarithmischen Verzerrungsraum

In dem konstitutiven Modell für Metallplastizität, das zur Identifikation der Parameter herangezogen wird, ist lediglich eine plastische Anisotropie berücksichtigt, siehe APEL [2]. Elastisch verhält sich das Modell isotrop. Durch die bereits in Kapitel 5.3.2 beschriebene

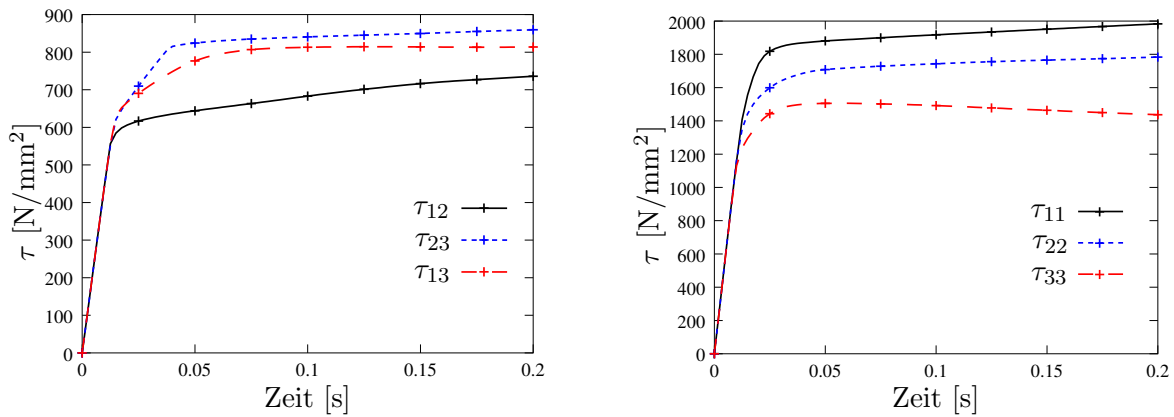


Abbildung 84: Darstellung der Schub- und Normalspannungskomponenten für die virtuell generierten Daten der oben aufgezeigten Deformationszustände.

modulare Struktur der logarithmischen Verzerrungen wird eine identische Struktur zur geometrisch linearen Theorie beibehalten.

Die betrachtete freie Energiefunktion, die lokal die Speicherung der Energie pro Volumen beschreibt, hat die Form

$$\psi = \psi(\mathbf{E}^e, \alpha) \quad (7.65)$$

mit den logarithmischen elastischen Verzerrungen \mathbf{E}^e . Es gilt die additive Zerlegung $\mathbf{E} = \mathbf{E}^e + \mathbf{E}^p$, wobei \mathbf{E}^p die verzerrungsähnlichen internen Variablen sind und α die interne Verfestigungsvariable darstellt. Um ein thermodynamisch konsistentes Materialmodell zu erhalten, wird die Gleichung (7.65) in die Clausius–Planck Ungleichung eingesetzt. Die Standardargumentation der rationalen Thermodynamik besagt, dass diese Ungleichung für beliebige Prozesse erfüllt sein muss. Daraus ergibt sich die Definitionen der spannungsähnlichen Variablen.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{T} &:= +\partial_{\mathbf{E}^e}\psi(\mathbf{E}^e, \alpha) \\ \mathbf{T}^p &:= -\partial_{\mathbf{E}^p}\psi(\mathbf{E}^e, \alpha) \\ \beta &:= -\partial_{\alpha}\psi(\mathbf{E}^e, \alpha) \end{aligned} \right\} \quad (7.66)$$

Die erste Gleichung beschreibt die Spannungen im logarithmischen Verzerrungsraum. Die zweite Gleichung stellt die thermodynamische Kraft dual zu den internen Variablen \mathbf{E}^p dar. Die additive Aufspaltung der Verzerrungen führt zur Gleichheit der Spannungen und der thermodynamischen Kraft $\mathbf{T} = \mathbf{T}^p$. Die Dissipationsungleichung nimmt die folgende Gestalt an.

$$\mathcal{D} = \mathbf{T} : \dot{\mathbf{E}}^p + \beta \dot{\alpha} \geq 0 \quad (7.67)$$

Die internen Kräfte werden durch das elastische Gebiet \mathcal{E} im Spannungsraum beschränkt.

$$\mathcal{E} := \{(\mathbf{T}, \beta) | \phi(\mathbf{T}, \beta) \leq 0\} \quad (7.68)$$

Eine kanonische Form der Evolutionsgleichungen für die internen Variablen für assoziierte Plastizität kann über das Prinzip der maximalen plastischen Dissipation erhalten werden.

$$\min_{(\mathbf{T}, \beta) \in \mathcal{E}} \{-\mathcal{D}\} \quad \text{mit} \quad \phi(\mathbf{T}, \beta) \leq 0 \quad (7.69)$$

Gleichung (7.69) stellt ein nichtlineares gekoppeltes Gleichungssystem dar, das nicht direkt gelöst werden kann. Es wird eine Lagrangefunktion

$$\mathcal{L}(\mathbf{T}, \beta, \lambda) := -\mathbf{T} : \dot{\mathbf{E}}^p - \beta \dot{\alpha} + \lambda \phi(\mathbf{T}, \beta) \rightarrow \text{stat.} \quad (7.70)$$

mit $\lambda > 0$ definiert, die das obige Problem in ein Sattelpunktsproblem umwandelt. Die Lösung ist gegeben für

$$\left. \begin{aligned} \partial_{\mathbf{T}} \mathcal{L} = \mathbf{0} &= -\dot{\mathbf{E}}^p + \lambda \partial_{\mathbf{T}} \phi(\mathbf{T}, \beta) \\ \partial_{\beta} \mathcal{L} = 0 &= -\dot{\alpha} + \lambda \partial_{\beta} \phi(\mathbf{T}, \beta) \\ \partial_{\lambda} \mathcal{L} = 0 &= \phi(\mathbf{T}, \beta). \end{aligned} \right\} \quad (7.71)$$

Zu Beginn des Prozesses werden die internen Variablen zu Null angenommen.

Für das hier betrachtete Problem wird eine entkoppelte Struktur der freien Energiefunktion in zwei Anteile $\psi = \psi^e + \psi^p$ mit dem Satz an internen Variablen $\mathcal{I} := \{\mathbf{E}^p, \alpha\}$ angenommen.

$$\left. \begin{aligned} \psi &= \psi^e(\mathbf{E}^e) + \psi^p(\alpha) \\ \psi^e &= \frac{1}{2} \|\mathbf{E}^e\|_{\mathbb{E}}^2 \\ \psi^p &= \frac{1}{2} h \alpha^2 \end{aligned} \right\} \quad (7.72)$$

Die Funktion $\|\mathbf{E}\|_{\mathbb{E}}^2 = \mathbf{E} : \mathbb{E} : \mathbf{E}$ ist ein typisches Beispiel für eine quadratische freie Energie und kann durch jede beliebige anisotrope Funktion ersetzt werden. Die dualen Kräfte ergeben sich nach (7.66) zu

$$\mathbf{T} = \mathbb{E} : \mathbf{E}^e \quad \text{und} \quad \beta = -h\alpha. \quad (7.73)$$

Eine klassische Form der Fließfunktion, die isotrope Verfestigung beschreiben kann, hat folgende Gestalt.

$$\phi(\mathbf{T}, \beta) = \|\mathbf{T}\|_{\mathbb{H}} - \sqrt{\frac{2}{3}} (y_0 - \beta) \quad (7.74)$$

Eine mögliche Struktur für \mathbb{H} ist in Gleichung (7.78) gegeben. Durch eine geeignete Wahl können spezielle Arten der plastischen Anisotropie dargestellt werden. Um inkompressibles Fließen, wie es in der Metallplastizität üblich ist, zu modellieren, muss der Tensor \mathbb{H} der Bedingung

$$\mathbb{H} : \mathbf{1} = \mathbf{0} \quad (7.75)$$

genügen. Durch Umformen der Gleichungen (7.71) ergeben sich die Evolutionsgleichungen und die Be- und Entlastungsbedingungen zu

$$\dot{\mathbf{E}}^p = \lambda \partial_{\mathbf{T}} \phi \quad , \quad \dot{\alpha} = \lambda \partial_{\beta} \phi \quad , \quad \lambda \geq 0 \quad , \quad \phi \leq 0 \quad , \quad \lambda \phi = 0. \quad (7.76)$$

Im betrachteten Modellproblem werden die beiden vierstufigen Tensoren \mathbb{E} und \mathbb{H} folgendermaßen angenommen. Der elastische Tangentenoperator \mathbb{E} ergibt sich zu

$$\mathbb{E} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ & & & \mu & 0 & 0 \\ \text{sym.} & & & & \mu & 0 \\ & & & & & \mu \end{bmatrix}. \quad (7.77)$$

Der anisotrope Tensor \mathbb{H} hat die Darstellung

$$\mathbb{H} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \alpha_4 & \alpha_6 & 0 & 0 & 0 \\ & \alpha_2 & \alpha_5 & 0 & 0 & 0 \\ & & \alpha_3 & 0 & 0 & 0 \\ & & & \frac{1}{2}\alpha_7 & 0 & 0 \\ & \text{sym.} & & & \frac{1}{2}\alpha_8 & 0 \\ & & & & & \frac{1}{2}\alpha_9 \end{bmatrix} \quad (7.78)$$

mit den Abkürzungen

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{2}{3} \frac{y_0^2}{y_{11}^2}, \quad \alpha_2 = \frac{2}{3} \frac{y_0^2}{y_{22}^2}, \quad \alpha_3 = \frac{2}{3} \frac{y_0^2}{y_{33}^2}, \\ \alpha_7 &= \frac{1}{3} \frac{y_0^2}{y_{12}^2}, \quad \alpha_8 = \frac{1}{3} \frac{y_0^2}{y_{23}^2}, \quad \alpha_9 = \frac{1}{3} \frac{y_0^2}{y_{13}^2}. \end{aligned} \right\} \quad (7.79)$$

Die Parameter $\alpha_{4,5,6}$ ergeben sich aus der Bedingung (7.75) zu

$$\alpha_4 = \frac{1}{2}(\alpha_3 - \alpha_1 - \alpha_2) \quad , \quad \alpha_5 = \frac{1}{2}(\alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3) \quad , \quad \alpha_6 = \frac{1}{2}(\alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_1). \quad (7.80)$$

Diese hier dargestellte Form repräsentiert ein elastisch isotropes und plastisch orthotropes Materialverhalten. Die nachfolgende Tabelle 30 fasst das Materialmodell zusammen.

Tabelle 30: Anisotrope Plastizität im logarithmischen Verzerrungsraum.

1. Interne Variablen	\mathcal{I}	$= \{\mathbf{E}^p, \alpha\}$
2. Freie Energie	ψ	$= \frac{1}{2} \ \mathbf{E} - \mathbf{E}^p\ _{\mathbb{E}} + \frac{h}{2} \alpha^2$
3. Spannung	\mathbf{T}	$= \psi(\mathbf{E}^e, \alpha), \mathbf{E}^e$
4. Interne Kräfte	\mathbf{T}^p	$\equiv \mathbf{T}$
	β	$= -h\alpha$
5. Fließbedingung	ϕ	$= \ \mathbf{T}\ _{\mathbb{H}} - \sqrt{\frac{2}{3}}(y_0 - \beta) \leq 0$
6. Evolutionsgleichungen	$\dot{\mathbf{E}}^p$	$= \lambda \mathbb{H} : \mathbf{T} / \ \mathbf{T}\ _{\mathbb{H}} \quad \text{mit} \quad \mathbb{H} : \mathbf{1} = \mathbf{0}$
	$\dot{\alpha}$	$= \lambda \sqrt{\frac{2}{3}}$
7. Be- und Entlastung		$\lambda \geq 0; \phi \leq 0; \lambda\phi = 0$

Algorithmische Spannungen

Der Startpunkt für die algorithmische Formulierung der konstitutiven Gleichungen ist eine implizite Zeitintegration der Evolutionsgleichungen der internen Variablen (7.76). Betrachtet wird ein Zeitintervall $[t_n, t_{n+1}]$ und die gegebenen internen Variablen \mathbf{E}_n^p und α_n zur Zeit t_n . Alle Größen ohne Zeitindex werden zum Zeitpunkt t_{n+1} angenommen. Die implizite Integration der Evolutionsgleichungen (7.76) mit dem sogenannten Backward Euler Verfahren ergibt

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{E}^p &= \mathbf{E}_n^p + \gamma \mathbf{N}, \\ \alpha &= \alpha_n + \gamma \sqrt{\frac{2}{3}}, \\ \gamma &\geq 0 \quad , \quad \phi \leq 0 \quad , \quad \gamma\phi = 0, \end{aligned} \right\} \quad (7.81)$$

mit der Abkürzung $\mathbf{N} = \partial_{\mathbf{T}}\phi = \mathbb{H} : \mathbf{T} / \|\mathbf{T}\|_{\mathbb{H}}$ und $\partial_{\beta}\phi = \sqrt{2/3}$. Weiterhin wird der plastische Multiplikator $\gamma := \lambda\Delta t$ eingeführt. Der erste Schritt um das Problem (7.81) zu lösen, ist zu prüfen, ob plastisches Fließen auftritt oder nicht. Hierzu werden sogenannte *trial*-Werte definiert, die durch Einfrieren der internen Variablen erhalten werden. Diese sind durch das Symbol \star gekennzeichnet.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{E}^{e\star} &:= \mathbf{E} - \mathbf{E}_n^p, & \mathbf{E}^{p\star} &= \mathbf{E}_n^p, & \mathbf{T}^{\star} &= \mathbb{E} : \mathbf{E}^{e\star}, \\ \alpha^{\star} &:= \alpha_n, & \beta^{\star} &= -h\alpha^{\star}. \end{aligned} \right\} \quad (7.82)$$

Einsetzen dieser *trial*-Werte in (7.74) ergibt die *trial*-Fließfunktion $\phi^{\star} := \phi(\mathbf{T}^{\star}, \beta^{\star})$. Plastisches Fließen tritt auf, wenn die Belastungsbedingung nicht erfüllt ist, d.h. wenn $\phi^{\star} \geq 0$. Für den Fall von plastischem Fließen muss das nichtlinear gekoppelte Gleichungssystem (7.81) mit einem General Return Algorithmus iterativ nach den Unbekannten \mathbf{E}^p und α gelöst werden. Das iterative Newton Verfahren zur Lösung des Problems basiert auf der Linearisierung der Residuen.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{R} &:= -\mathbf{E}^p + \mathbf{E}_n^p + \gamma\mathbf{N} = \mathbf{0} \\ R_{\beta} &:= -\alpha + \alpha_n + \gamma\sqrt{\frac{2}{3}} = 0 \\ R_{\phi} &:= \phi(\mathbf{T}, \beta) = 0 \end{aligned} \right\} \quad (7.83)$$

Die Linearisierung der definierten Residuen ergibt

$$\left. \begin{aligned} \text{Lin } \mathbf{R} &= \mathbf{R} - \Delta\mathbf{E}^p + \Delta\gamma\mathbf{N} + \gamma\Delta\mathbf{N} = \mathbf{0}, \\ \text{Lin } R_{\beta} &= R_{\beta} - \Delta\alpha + \Delta\gamma\sqrt{\frac{2}{3}} = 0, \\ \text{Lin } R_{\phi} &= R_{\phi} + \partial_{\mathbf{T}}\phi : \Delta\mathbf{T} + \partial_{\beta}\phi\Delta\beta = 0. \end{aligned} \right\} \quad (7.84)$$

Innerhalb des Zeitschrittes ist die totale Verzerrung konstant. Hieraus lässt sich die kinematische Beziehung $\Delta\mathbf{E}^p = -\Delta\mathbf{E}^e$ ableiten. Die Inkremente der Spannungen ergeben sich zu

$$\left. \begin{aligned} \Delta\mathbf{T} &= \psi_{,\mathbf{E}^e\mathbf{E}^e} : \Delta\mathbf{E}^e = -\mathbb{E} : \Delta\mathbf{E}^p, \\ \Delta\beta &= -\psi_{,\alpha\alpha}\Delta\alpha = -h\Delta\alpha. \end{aligned} \right\} \quad (7.85)$$

Das Inkrement der Richtung \mathbf{N} ergibt sich mit $\mathbb{F} := \phi_{,\mathbf{T}\mathbf{T}}$ zu

$$\Delta\mathbf{N} = \mathbb{F} : \Delta\mathbf{T}. \quad (7.86)$$

Einsetzen dieser Beziehungen in (7.84) ergibt das zu lösende Gleichungssystem (7.87).

$$\left. \begin{aligned} \text{Lin } \mathbf{R} &= \mathbf{R} - \Delta\mathbf{E}^p + \Delta\gamma\mathbf{N} - \gamma\mathbb{F} : \mathbb{E} : \Delta\mathbf{E}^p = \mathbf{0}, \\ \text{Lin } R_{\beta} &= R_{\beta} - \Delta\alpha + \Delta\gamma\sqrt{\frac{2}{3}} = 0, \\ \text{Lin } R_{\phi} &= R_{\phi} - \mathbf{N} : \mathbb{E} : \Delta\mathbf{E}^p - \sqrt{\frac{2}{3}}h\Delta\alpha = 0. \end{aligned} \right\} \quad (7.87)$$

Die ersten zwei Gleichungen werden nach den Verzerrungsincrementen aufgelöst.

$$\left. \begin{aligned} \Delta\mathbf{E}^p &= \mathbb{E}^{-1} : \bar{\mathbb{E}} : (\mathbf{R} + \Delta\gamma\mathbf{N}) \\ \Delta\alpha &= R_{\beta} + \Delta\gamma\sqrt{\frac{2}{3}} \end{aligned} \right\} \quad (7.88)$$

Hierbei wird die Abkürzung $\bar{\mathbb{E}} := (\mathbb{E}^{-1} + \gamma\mathbb{F})^{-1}$ eingeführt. Einsetzen von (7.88) in die linearisierte diskrete Konsistenzbedingung (7.87)₁ ergibt die Inkremente des plastischen Multiplikators

$$\Delta\gamma = \underbrace{(\mathbf{N} : \bar{\mathbb{E}} : \mathbf{N} + \sqrt{\frac{2}{3}} h \sqrt{\frac{2}{3}})}_{=:T}^{-1} \underbrace{(R_\phi - \mathbf{N} : \bar{\mathbb{E}} : \mathbf{R} - \sqrt{\frac{2}{3}} h R_\beta)}_{=:R} \quad (7.89)$$

mit dem Residuum R und der Tangente $T := \partial_\gamma R$. Der plastische Multiplikator wird nun nach der Vorschrift

$$\gamma \leftarrow \gamma + \Delta\gamma \quad (7.90)$$

aufdatiert. Die Iteration wird abgebrochen, wenn das Residuum R kleiner einer vorgegebenen Toleranz ist. Die Gleichungen (7.88) definieren die Aufdatierungen der Verzerrungsincremente. Die nachfolgende Tabelle 31 fasst den Algorithmus zusammen.

Konsistente Tangente

Der algorithmische elastoplastische Tangentenmodul setzt die Inkremente der Spannungen mit den Inkrementen der totalen Verzerrung in Zusammenhang, d.h. es gilt

$$\Delta\mathbf{T} = \mathbb{E}^{ep} : \Delta\mathbf{E}. \quad (7.91)$$

Der Ausgangspunkt zur Bestimmung des Tangentenmoduls ist die additive Zerlegung der Verzerrungen und das inkrementelle Elastizitätsgesetz.

$$\Delta\mathbf{T} = \mathbb{E} : (\Delta\mathbf{E} - \Delta\mathbf{E}^p) \quad (7.92)$$

Die Inkremente der plastischen Verzerrung lassen sich aus der Residuungsgleichung (7.83) bestimmen, wobei hier die Abhängigkeit auch von den totalen Verzerrungen betrachtet wird.

$$\Delta\mathbf{E}^p = \Delta\gamma \partial_{\mathbf{T}} \phi + \gamma \partial_{\mathbf{T}\mathbf{T}} \phi : \mathbb{E} : (\Delta\mathbf{E} - \Delta\mathbf{E}^p) \quad (7.93)$$

Nach einigen Umformungen ergibt sich

$$\left. \begin{aligned} \Delta\mathbf{E}^p &= \mathbb{E}^{-1} : \bar{\mathbb{E}} : (\Delta\gamma \mathbf{N} + \gamma \mathbb{F} : \mathbb{E} : \Delta\mathbf{E}), \\ \Delta\alpha &= \Delta\gamma \sqrt{\frac{2}{3}}. \end{aligned} \right\} \quad (7.94)$$

Zur Bestimmung des Inkrements des plastischen Multiplikators wird die inkrementelle Konsistenzbedingung betrachtet.

$$\Delta\phi = \mathbf{N} : \mathbb{E} : \Delta\mathbf{E} - \mathbf{N} : \mathbb{E} : \Delta\mathbf{E}^p - \sqrt{\frac{2}{3}} h \Delta\alpha = 0 \quad (7.95)$$

Einsetzen und Umformen liefert

$$\Delta\gamma = T^{-1} \mathbf{N} : (\mathbb{I} - \gamma \bar{\mathbb{E}} : \mathbb{F}) : \mathbb{E} : \Delta\mathbf{E} \quad (7.96)$$

mit der Tangente T die schon in Gleichung (7.89) definiert wurde. Mit den Verzerrungsincrementen (7.93) und (7.92) kann der elastoplastische Tangentenmodul durch Vergleich mit Gleichung (7.91) identifiziert werden. Mit der Definition der vierstufigen Tensoren

$$\mathbb{B} := (\gamma \mathbb{F}^{-1} + \mathbb{E})^{-1} \quad \text{und} \quad \bar{\mathbb{E}} = \{(\mathbb{I} - \bar{\mathbb{E}} : \mathbb{F}) : \mathbb{E}\}^T \quad (7.97)$$

ergibt sich die kompakte Darstellung des symmetrischen elastoplastischen Tangentenmoduls zu

$$\mathbb{E}^{ep} = \mathbb{E} - \mathbb{E} : \mathbb{B} : \mathbb{E} - T^{-1} \bar{\mathbb{E}} : \mathbf{N} \otimes \mathbf{N} : \bar{\mathbb{E}}. \quad (7.98)$$

Tabelle 31: General Return Algorithmus für Elastoplastizität.

1. Initialisiere Startwerte
 $\mathbf{E}^e = \mathbf{E}^{e,*}$, $\mathbf{E}^p = \mathbf{E}_n^p$, $\alpha = \alpha^* = \alpha_n$, $\gamma = 0$.
 und berechne die *trial*-Werte
 $\mathbf{T}^* = \mathbb{E} : \mathbf{E}^{e,*}$, $\beta^* = -h\alpha^*$.
2. Berechne *trial*-Fließfunktion
 $\phi^* = \phi(\mathbf{T}^*, \beta^*)$.
 Überprüfe plastisches Fließen
 IF $\phi^* < 0 \rightarrow$ *elastisch*, ELSE \rightarrow *plastisch*.
3. Berechne Spannungen und Ableitungen der Fließfunktion
 $\mathbf{T} = \psi_{,\mathbf{E}^e}$, $\beta = -\psi_{,\alpha}$, $\mathbf{N} = \phi_{,\mathbf{T}}$
4. Berechne Residuen und prüfe Toleranz
 $\mathbf{R} = -\mathbf{E}^p + \mathbf{E}_n^p + \gamma\mathbf{N}$,
 $R_\beta = -\alpha + \alpha_n + \gamma\sqrt{\frac{2}{3}}$,
 $R_\phi = \phi(\mathbf{T}, \beta)$.
 Wenn $\sqrt{\|\mathbf{R}\|^2 + |R_\beta|^2 + |R_\phi|^2} < tol \rightarrow$ gehe zu Ende.
5. Berechne zweite Ableitungen
 $\mathbb{E} = \psi_{,\mathbf{E}^e\mathbf{E}^e}$, $\mathbb{F} = \phi_{,\mathbf{T}\mathbf{T}}$.
6. Berechne plastisches Inkrement
 $\Delta\gamma = (\mathbf{N} : \mathbb{E} : \mathbf{N} + \sqrt{\frac{2}{3}}h\sqrt{\frac{2}{3}})^{-1}(R_\phi - \mathbf{N} : \mathbb{E} : \mathbf{R} - \sqrt{\frac{2}{3}}hR_\beta)$.
7. Datiere Interne Variablen auf
 $\mathbf{E}^p \Leftarrow \mathbf{E}^p + \mathbb{E}^{-1} : \mathbb{E} : (\mathbf{R} + \Delta\gamma\mathbf{N})$,
 $\alpha \Leftarrow \alpha + R_\beta + \Delta\gamma\sqrt{\frac{2}{3}}$,
 $\gamma \Leftarrow \gamma + \Delta\gamma$.
 Gehe zu 2.
 ENDIF
8. Ende.

Sensitivitäten

Auf die Bildung der konsistenten Gradienten der Spannungen bezüglich der Materialparameter wird an dieser Stelle verzichtet, da sich die Rechenzeiten von zusätzlichen Simulationen im Bereich von Sekunden abspielt.

7.3.6. Parameteridentifikation des orthotropen Plastizitätsmodells

Bei der Parameteridentifikation werden durch den Vergleich der virtuellen Testdaten aus Kapitel 7.3.4 mit den Simulationsdaten die im makroskopischen Plastizitätsmodell enthaltenen plastischen Materialparameter bestimmt. Die elastischen Materialparameter $\lambda = 68000.0 \text{ N/mm}^2$ und $\mu = 45000.0 \text{ N/mm}^2$ werden durch Versuche mit sehr kleinen

Verzerrungen, bei denen keine plastischen Verformungen auftreten, im Vorfeld bestimmt. Die Referenzfließspannung y_0 wird auf den festen Wert $y_0 = 1300.0 \text{ n/mm}^2$ gesetzt und nicht mit identifiziert, da diese keinen unabhängigen Parameter darstellt. Die Identifikation wird von einem Startparametersatz gestartet, der ein ideal plastisches isotropes Materialverhalten charakterisiert. Dies ist gegeben durch die Bedingungen an die Normal- und Schubfließspannungen

$$y_{11} = y_{22} = y_{33} = y_0 \quad \text{und} \quad y_{12} = y_{23} = y_{13} = y_0/\sqrt{3}, \quad (7.99)$$

die in der Tabelle 32 zu finden sind. Nach der erfolgreichen Optimierung der Zielfunk-

Parameter	y_{11}	y_{22}	y_{33}	y_{12}	y_{23}	y_{13}	h	LSF
Startwert	1300.0	1300.0	1300.0	750.6	750.6	750.6	0.0	$5.03 \cdot 10^7$
Lösung	1825.6	1667.6	1410.6	631.4	818.5	799.1	501.5	$2.67 \cdot 10^6$

Tabelle 32: Plastische Materialparameter des makroskopischen Modells. Startwert der Optimierung und identifizierter Materialparametersatz. Der Startwert entspricht einem ideal plastischen isotropen von Mises Plastizitätsmodell.

tion werden die aufgeführten plastischen Materialparameter gefunden, wobei während der Optimierung die Fehlerfunktion auf etwa 5 % ihres ursprünglichen Wertes abfällt. Anschaulich wird dies durch die Auswertungen der Spannungsverläufe demonstriert. In Abbildung 85 sind die virtuellen Testdaten und die Simulation mit Startparametersatz abgebildet. Nach erfolgreicher Optimierung ergibt sich das in Abbildung 86 dargestellte Bild,

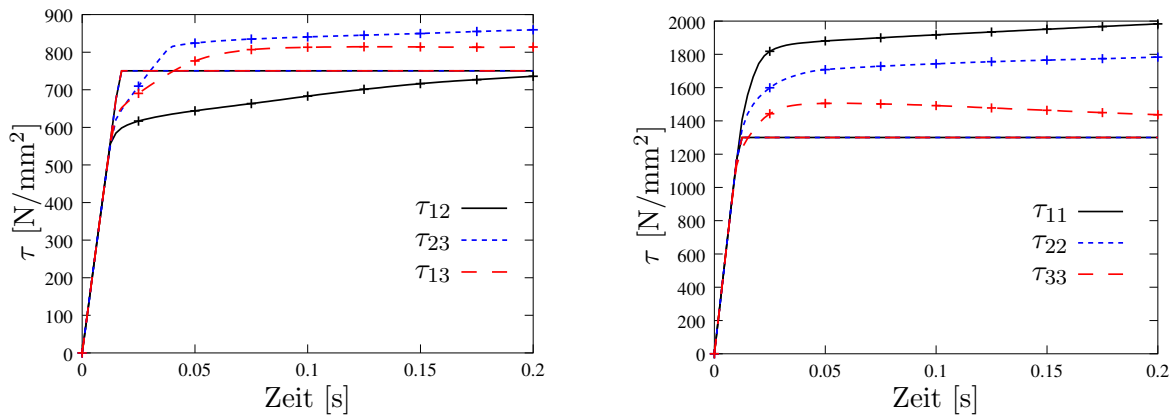


Abbildung 85: Darstellung der Schub- und Normalspannungskomponenten für virtuelle Daten und Simulation mit makroskopischem Modell mit Startparametersatz. Die Wahl der Startparameter entspricht einem isotropen Verhalten, so dass die drei Spannungsantworten der Simulation aufeinanderfallen.

wobei hier eine sehr gute Übereinstimmung von virtuellen Testdaten und Simulation erreicht wird. Dies gilt sowohl für die in Abbildung 86 dargestellten Schubspannungsverläufe, als auch für die dargestellten Normalspannungsverläufe.

Verifikation

Das makroskopische Materialmodell mit angepassten Materialparametern ist in der Lage die virtuellen Testdaten sehr gut zu reproduzieren. Aufgrund der Formulierung mit einer linearen Verfestigung ist eine scharfe Fließgrenze in der Simulation zu beobachten, die im Experiment nicht auftritt. Dies kann für diese Beispiel akzeptiert werden. Abhilfe kann eine Formulierung mit nichtlinearer isotroper Verfestigung mit exponentiellem Sättigungsansatz schaffen, der hier nicht weiter verfolgt wird.

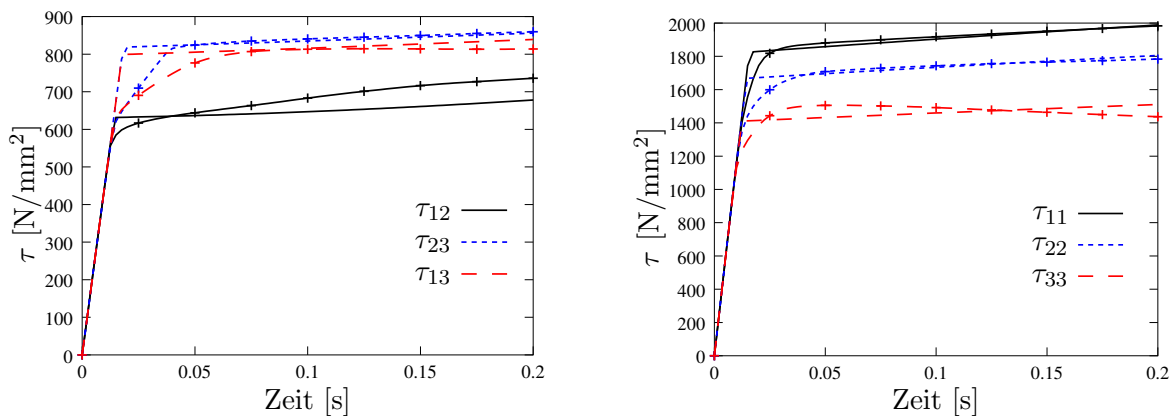


Abbildung 86: Darstellung der Schub- und Normalspannungskomponenten für virtuelle Daten und Simulation mit makroskopischem Modell nach der Anpassung der Materialparameter. Es ist eine sehr gute Übereinstimmung von Simulation und virtuellem Experiment zu beobachten.

7.3.7. Validation der identifizierten Materialparameter

Zur Validation der im vorherigen Abschnitt identifizierten Materialparameter wird ein Randwertproblem betrachtet. Dies ist ein kreisförmiger Ring im ebenen Verzerrungszustand, dessen Inneres deformationsgesteuert in Inkrementen von $\Delta u = 0.1$ mm um $u = 75$ mm radial nach Innen gezogen wird. Das Problem ist als Benchmark zur Analyse elastisch-plastischer Deformationen bekannt und wurde bereits in PAPADOPOULOS & LU [93] behandelt. Die Geometrie und Randbedingungen sind der Abbildung 87 zu entnehmen. Zur Berechnung wird ein Viertel der Probe mit 10×10 Kontinuumselementen mit linearen Ansatzfunktionen diskretisiert. Das Problem wird zum einen mit dem durch den Vorprozess behandelten Polykristall und zum anderen mit dem makroskopischen Material mit identifizierten Materialparametern aus Abschnitt 7.3.6 berechnet. Um

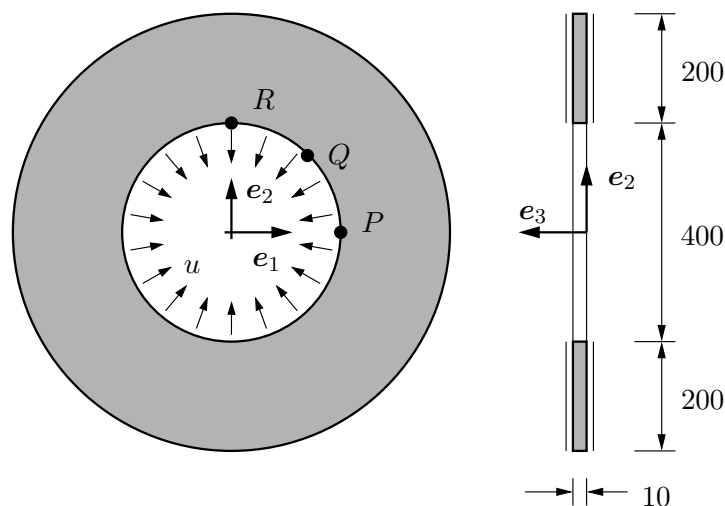


Abbildung 87: Geometrie und Randbedingungen des Randwertproblems zur Validation des Modells und der Materialparameter. Die Koordinaten der Punkte sind $P(200/0/0)$, $Q((200/\sqrt{2})/(200/\sqrt{2})/0)$ und $R(0/200/0)$. Alle Angaben in mm.

Aussagen über die Gültigkeit des Modells und der Anpassung zu machen, werden die globale Last-Verschiebungskurve und die diskreten Knotenlasten an den Punkten P , Q und R betrachtet. Desweiteren werden die radialen und tangentialen Verschiebungsfelder

gegenübergestellt.

Die Last–Verschiebungskurve wird aus der Summe aller radialen Knotenlasten ermittelt. Diese homogenisierte Größe liefert eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Referenzberechnung mit dem Texturmodell und makroskopischer Berechnung. Die diskreten radia-

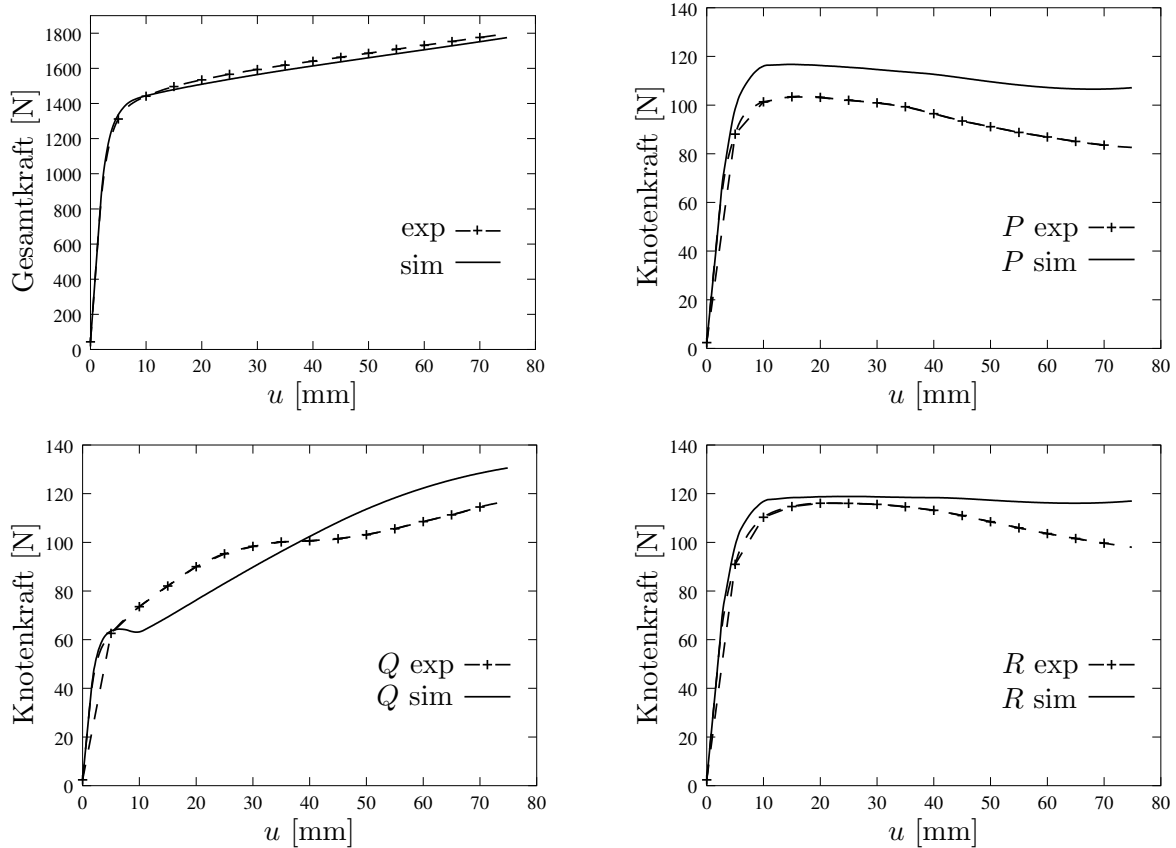


Abbildung 88: Validation. Darstellung der Last–Verschiebungskurve, Darstellung der Knotenkräfte an den Knoten P , Q und R .

len Knotenkräfte liefern eine gute Übereinstimmung. Es ist zu erkennen, dass bei beiden Rechnungen die Knotenlast am Knoten R größer ist als am unter 90 Grad versetzten Knoten P . Allerdings fällt der Unterschied in der Texturberechnung größer aus als bei der Mikrostrukturberechnung. Bei dem unter 45 Grad angeordneten Knoten Q ist bei wesentlich kleineren Kräften ein Abknicken der Last–Verschiebungskurve und eine stetige Verfestigung zu erkennen. Dies kann sowohl bei der Texturberechnung als auch bei der Berechnung mit makroskopischem Modell beobachtet werden. Die Ergebnisse können der Abbildung 88 entnommen werden. Die Verschiebungsfelder aus den Abbildungen 89 und 90 spiegeln das wieder, was bereits bei den Knotenkräften beobachtet werden konnte. Die Anisotropie ist bei dem Texturmodell stärker ausgeprägt. Das globale Verhalten kann jedoch vom makroskopischen Modell gut approximiert werden. Festzuhalten ist, dass das makroskopische Modell nicht in der Lage ist, die komplexen Vorgänge auf der Mikroebene komplett wiederzugeben, wie beispielsweise eine sich weiter entwickelnde Textur während des virtuellen Testens. Allerdings stellt das makroskopische Modell vor dem Hintergrund der begrenzten Rechenkapazität eine sehr gute Approximation dar. Die Berechnung mit Mikrostruktur benötigte etwa 8 Tage, die Rechnung mit makroskopischem Modell war hingegen in nicht einmal 20 Minuten beendet.

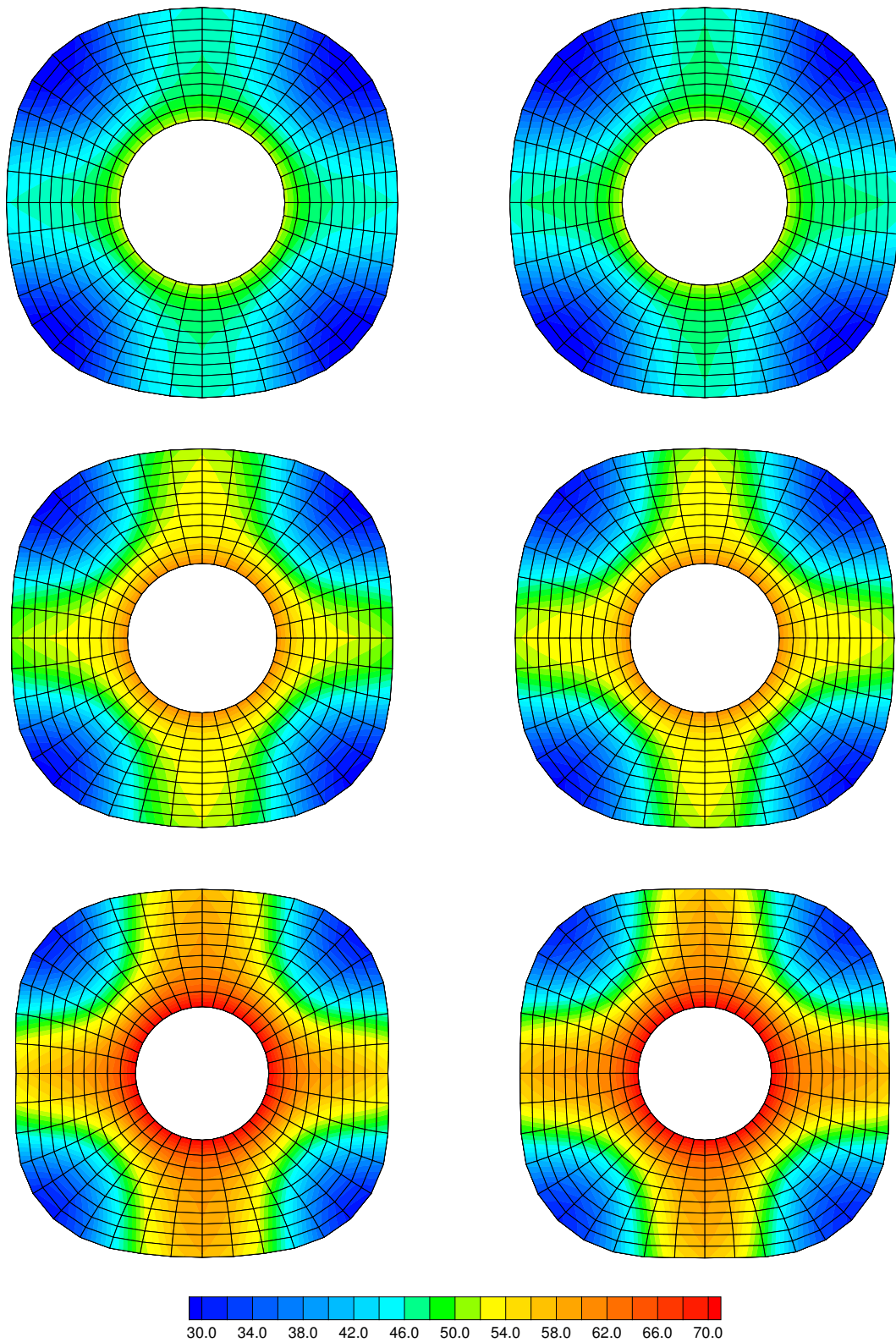


Abbildung 89: Validation: Darstellung der Verschiebungsfelder [mm] für die Zeitpunkte 45, 60 und 75 s in radialer Richtung für die Berechnung mit Texturmodell (links) und makroskopischem Modell (rechts).

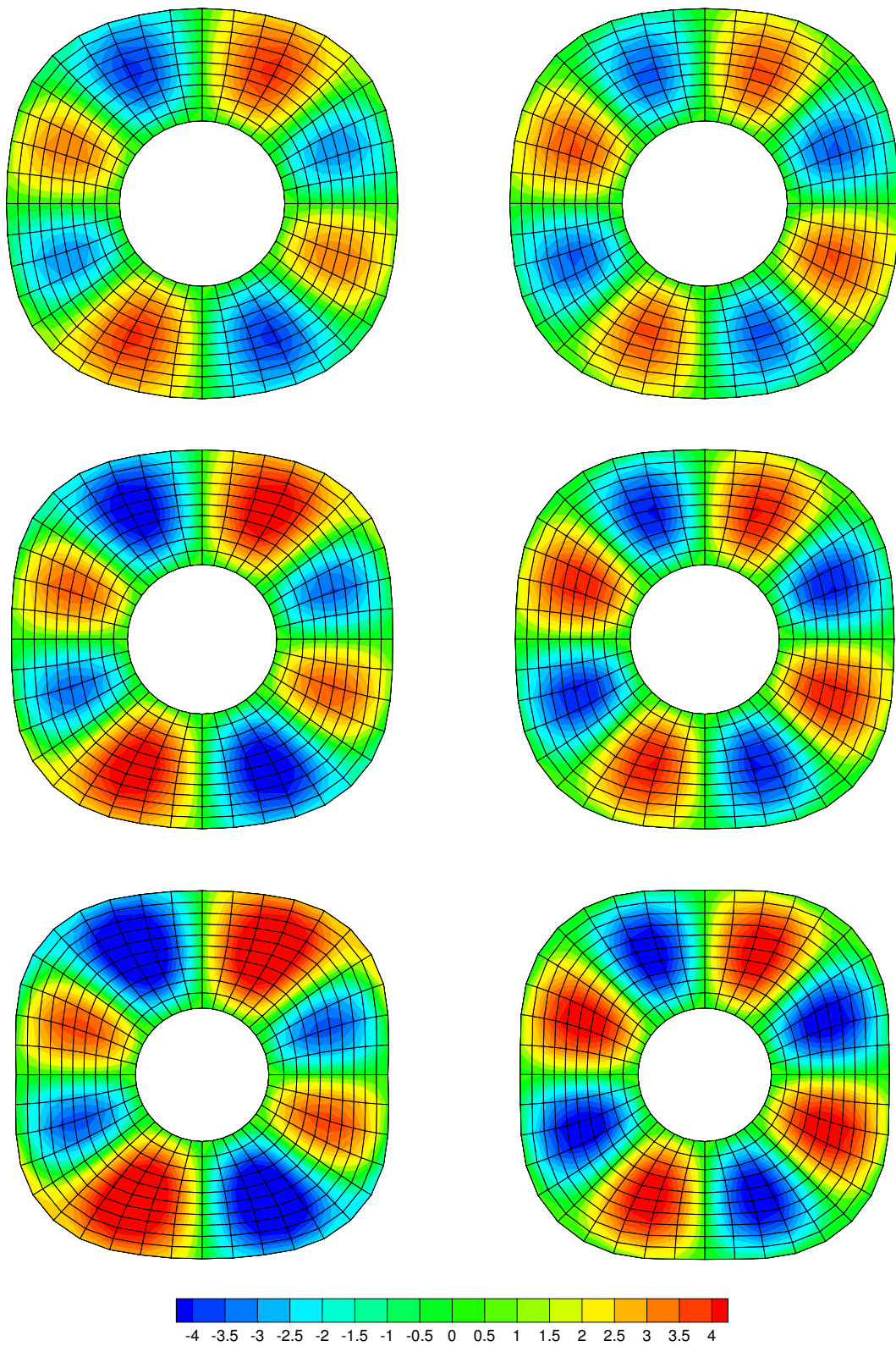


Abbildung 90: Validation: Darstellung der Verschiebungsfelder [mm] für die Zeitpunkte 45, 60 und 75 s in tangentialer Richtung für die Berechnung mit Texturmodell (links) und makroskopischem Modell (rechts).

8. Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Parameteridentifikation makroskopischer Materialmodelle auf der Basis von realen und virtuellen experimentellen Daten. Dabei werden die Daten aus eindimensionalen Zug-Druck Versuchen an homogenen Probekörpern, aus optischen Verschiebungsmessungen an inhomogenen Probekörpern und aus virtuellen Tests von Mikrostrukturen gewonnen.

Grundlage der Parameteridentifikation stellt die nichtlineare Optimierung dar. Diese wird benötigt um die Güte- oder Fehlerfunktion vom Least-Squares Typ zu minimieren. Es wird eine optimale Anpassung der simulierten an die experimentellen Daten angestrebt. Von den zahlreichen Möglichkeiten der nichtlinearen Optimierung wird speziell ein SQP-Verfahren und ein Simplex-Verfahren dargestellt. Das SQP-Verfahren, das sich durch eine schnelle Konvergenz auszeichnet, benötigt die Gradienten der Zielfunktion bezüglich der zu optimierenden Materialparameter. Diese können numerisch approximiert oder analytisch berechnet werden. Die Bestimmung analytischer Gradienten erfordert einen Eingriff in die Programmstruktur und ist bei kommerziellen Programmen nicht möglich. Das Simplex-Verfahren kommt mit Funktionsauswertungen aus, wobei relativ viele benötigt werden um ein Minimum exakt zu finden. Durch die einfache Handhabung ist dieses Optimierungswerkzeug attraktiv, besonders wenn die Simulation wenig Rechenzeit in Anspruch nimmt. Andere gängige Optimierungsverfahren wie die Evolutionstrategie oder die Response Surface Methode werden in dieser Arbeit nicht betrachtet.

Ein spezieller Augenmerk wird auf die Bestimmung der konsistenten analytischen Gradienten der Zielfunktion bezüglich der Materialparameter gelegt. Die Gradientenbildung wird grundlegend durch die Art der Simulation bestimmt. Dies ist der Treiber-Algorithmus oder die Finite Elemente Berechnung. Im Fall des Treiber-Algorithmus wird der Gradient der axialen Spannung bzw. der axialen Deformation benötigt. Für die Strukturberechnung sind die Gradienten der Knotenpositionen der Finiten Elemente Diskretisierung zu berechnen. In beiden Fällen führt die Sensitivitätsanalyse auf Materialebene auf die Bestimmung der Ableitungen der algorithmischen Spannungen nach den Materialparametern. Dies wird für ein Elastizitätsgesetz und jeweils ein Gesetz zur Viskoelastizität und Plastizität untersucht. Anhand eindimensionaler Prozesse werden die analytisch berechneten Gradienten den numerisch approximierten Gradienten gegenübergestellt. Für den Fall der Elastizität liefern beide Varianten ein identisches Ergebnis. Bei der Viskoelastizität und der Plastizität weichen die numerisch und analytisch berechneten Gradienten voneinander ab. Durch eine gezielte Re-Identifikation von bekannten Materialparametern lässt sich zeigen, dass die numerischen Gradienten oft eine schnellere Konvergenz erlauben. Dies relativiert den zusätzlichen Rechenaufwand zur Bestimmung dieser numerischen Gradienten. Bei der analytischen Sensitivitätsanalyse akkumuliert sich ein Fehler, der insbesondere bei zyklischen Prozessen sichtbar wird. Die Parameteridentifikation axialer Prozesse schließt mit der Identifikation eines transversal isotropen visko-elastoplastischen Materialmodells anhand realer Experimente mit einem kurzglasfaserverstärkten Polyamid.

Im Rahmen der Identifikation über Verschiebungsfelder eines Strukturproblems wird die Methode anhand eines Kragarms mit transversal isotropem elastischen Material untersucht. Als experimentelle Daten werden die räumlichen Verschiebungen von ausgewählten Knoten der Finite Elemente Diskretisierung herangezogen. In einem zweiten Beispiel wird die Methode auf die Identifikation von Materialparametern einer Aluminium Legierung angewendet. Die gekerbte Probe wird deformationsgesteuert getestet. Zusätzlich zu

den Oberflächenverschiebungen wird die Last–Verschiebungskurve des Systems gemessen. Diese weiteren Informationen sind für eine stabile Identifikation des verwendeten Plastizitätsgesetzes von besonderer Bedeutung, da hierdurch die Datenbasis angereichert wird.

Die neue Entwicklung auf dem Gebiet der Parameteridentifikation ist die Identifikation auf der Basis von virtuellen Testdaten. Hierbei werden heterogene Mikrostrukturen virtuellen Tests unterzogen. Die durch einen Mikro–Makro Übergang gewonnenen makroskopischen Spannungen werden der Parameteridentifikation zugeführt, um die Parameter makroskopischer Materialgesetze anzupassen. Die Geometrie der Mikrostruktur und die Konstituierenden auf Mikroebene werden als bekannt vorausgesetzt. Diese Annahme ist in vielen Fällen zulässig, da sich diese Parameter oft bestimmen lassen und die einzelnen Konstituierenden einfachen Materialgesetzen folgen. Dieses Vorgehen wird zum einen auf die Identifikation der Mikrostruktur eines Boron Epoxydharz Laminats angewendet. Die Simulation zeigt eine nahezu perfekte Übereinstimmung mit dem virtuellen Experiment. Zum anderen wird ein Polykristall einem Vorprozess unterworfen um eine Anisotropie zu induzieren. Das so entstandene Material wird virtuellen Tests unterzogen. An die generierten Daten wird ein anisotropes Plastizitätsgesetz angepasst. Zur Validation wird ein Randwertproblem sowohl mit dem Polykristallmodell als auch mit dem makroskopischen Materialmodell berechnet. Die betrachteten Last–Verschiebungskurven und die Verschiebungsfelder zeigen eine gute Übereinstimmung und rechtfertigen die Verwendung des makroskopischen Modells mit angepassten Materialparametern zur Approximation der Mikrostrukturberechnung.

Die dargestellte Methode des virtuellen Testens muss weiter ausgebaut und verifiziert werden. Am Beispiel des vorgestellten Boron Laminats bedeutet dies, dass die Modellierung des RVEs hinsichtlich eines viskoelastischen Matrixmaterials und der Einbeziehung von Grenzschichteffekten zwischen Matrix- und Fasermaterial erweitert wird. Hierfür muss ein adäquates makroskopisches Materialmodell entwickelt werden, das an die virtuellen Testdaten angepasst wird. Weiterhin ist empfehlenswert einen Vergleich der virtuellen Testdaten mit realen Testdaten anzustrengen und auch das Modell der Mikrostruktur zu validieren.

Literatur

- [1] ANDERSEN, K.; DANNEMEYER, S.; FRIEBE, H.; MAHNKEN, R.; RITTER, R.; STEIN, E. [1996], “Parameteridentifikation für ein plastisches Stoffgesetz mit FE-Methoden und Rasterverfahren”, *Bauingenieur*, Vol. 71, 21–31, Springer-Verlag
- [2] APEL, N. [2004], “Approaches to the Description of Anisotropic Material Behaviour at Finite Elastic and Plastic Deformations – Theory and Numerics –”, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart, Dissertation
- [3] BAIER H.; SEESSELBERG C.; SPECHT B. [1994], “Optimierung in der Strukturmechanik”, Vieweg & Sohn, Braunschweig
- [4] BANKS, H.T.; KUNISCH, K. [1989], “Estimation Techniques for Distributed Parameter Systems”, Birkhäuser Verlag, Boston
- [5] BARD, Y. [1974], “Nonlinear Parameter Estimation”, Academic Press, New York
- [6] BASAR, Y.; WEICHERT, D. [2000], “Nonlinear Continuum Mechanics of Solids. Fundamental mathematical and physical concepts”, Springer-Verlag
- [7] BAUMEISTER, J. [1987], “Stable Solution of Inverse Problems”, Vieweg & Sohn, Braunschweig
- [8] BAZARAA, M.S.; SHERALI, H.D.; SHETTY, C.M. [1993], “Nonlinear Programming”, John Wiley & Sons Inc., New York
- [9] BERTSEKAS, D.P. [1992], “Projected Newton Methods for Optimization Problems with simple Constraints”, *SIAM Journal for Control and Optimization*, Vol. 20 (2), 221–246
- [10] BERTSEKAS, D.P. [1996], “Constrained Optimization and Lagrange Multiplier Methods”, Athena Scientific, Belmont
- [11] BERTSEKAS, D.P. [1999], “Nonlinear Programming”, Second Edition, Athena Scientific, Belmont
- [12] BESTLE, D. [1994] “Analyse und Optimierung von Mehrkörpersystemen”, Springer-Verlag, Berlin
- [13] BJÖRK, A. [1996] “Numerical methods for least squares problems”, SIAM, Philadelphia
- [14] BRONSTEIN, I.N.; SEMENDJAJEW, K.A.; MUSIOL, G.; MÜHLIG, H. [1999] “Taschenbuch der Mathematik”, Verlag Harri Deutsch
- [15] BROYDEN, C.G. [1970] “The convergence of a class of double-rank minimization algorithms 2. The new algorithm”, *Journal of the Institute for Mathematics and Applications*, Vol. 6, 222–231.
- [16] BÖHM, H.J. [1991] “Computer Based Micromechanical Investigations of the Thermomechanical Behaviour of Metal Matrix Composites”, VDI Fortschritt-Berichte, Reihe 18, Nr. 101, VDI Verlag, Düsseldorf
- [17] BUB, W.; LUGNER, P. [1992] “Systematik der Modellbildung, Teil 2: Verifikation und Validation”, VDI Fortschritt-Berichte, Nr. 925, VDI Verlag, Düsseldorf
- [18] BUI, H.D. [1994] “Inverse Problems in the Mechanics of Materials, an Introduction”, CRC Press, Boca Raton, London

-
- [19] CHRISTENSEN, R.M. [1979], “Mechanics of Composite Materials”, John Wiley & Sons Inc., New York
- [20] CIARLET, P.G. [1988], “Mathematical Elasticity”, Elsevier Science Publishers B. V., Amsterdam, Vol. 4, 681–702.
- [21] COLEMAN, B.D.; GURTIN, M.E. [1967], “Thermodynamics with Internal State Variables”, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 47 (2), 597–613
- [22] CONN A.R.; SCHEINBERG K.; TOINT PH.L. [1997], “Recent progress in unconstrained nonlinear optimization without derivatives”, Invited semi-plenary presentation at the ISMP97, Lausanne
- [23] DEL LINZ, S.; MAHNKEN, R.; STEIN, E. [2000], “Non-linear Mixed Isotropic-kinematic Hardening Coupled with Damage in the Framework of Finite Deformation Elasto-plasticity”, ECCOMAS 2000, Barcelona, 11-14 September 2000
- [24] DEMING, S.N.; PARKER, L.R. [1978] “A review of simplex optimization in analytical chemistry”, *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, Vol. 7, 187–202.
- [25] DENNIS, J.E.; SCHNABEL, R.B. [1996], “Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations”, SIAM, Philadelphia. Originally published by Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1983
- [26] FINDLEY, W.N.; LAI, J.S.; ONARAN, K. [1976], “Creep and relaxation of nonlinear viscoelastic materials”, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, New York, Oxford.
- [27] FLETCHER, R. [1970] “A new approach to variable metric algorithms”, *Computer Journal*, Vol. 13, 317–322.
- [28] FLETCHER, R. [1972] “Minimizing general functions subject to linear constraints”, in *Numerical Methods for Non-linear Optimization*, ed. Lootsma, F. A., Academic Press, London, New York
- [29] FLETCHER, R.; REEVES, C. [1964] “Function Minimization by Conjugate Gradients”, *Computer Journal*, Vol. 7, 149–154
- [30] FROST, H.J.; ASHBY, M.F. [1982], “The plasticity and creep of metals and ceramics”, Pergamon Press, Oxford
- [31] FURKAWA, T.; YAGAWA, G. [1997], “Inelastic Constitutive Parameter Identification using an Evolutionary Algorithm with Continuous Individuals”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 40, 1071–1090
- [32] GILL, P.E.; MURRAY, W.; WRIGHT, M.H. [1981] “Practical Optimization”, Academic Press, Inc., London, 1981.
- [33] GOLDFARB, D. [1970] “A family of variable metric methods derived by variational means”, *Mathematics of Computation*, Vol. 24, 23–26.
- [34] GROSSMANN, CH.; TERNO, J. [1997], “Numerik der Optimierung”, Teubner-Verlag, Stuttgart
- [35] HADAMARD, J. [1923], “Lectures on Cauchy’s Problem in Linear Partial Differential Equations”, Yale University Press, New Haven
- [36] HALPIN, J. [1984], “Primer on composite materials analysis”, Lancaster, Pa.: Technomic Publishing

- [37] HARTMANN, S. [2001], “Parameter Estimation of Hypereleastic Relations of Generalized Ploynomial-Type with Constraint Conditions”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 38 (44-45), 7999–8018
- [38] HARTMANN, S. [2001], “Numerical Studies on the Identification of the Material Parameters of Rivlin’s Hyperelasticity using Tension-Torsion Tests”, *Acta Mechanica*, Vol. 148, 129–155
- [39] HARTMANN, S.; HAUPT, P.; TSCHÖPE, T. [2001], “Parameter identification with a direct search method using finite elements”, in: Constitutive Models for Rubber II, D. Besdo / R.H. Schuster / J. Ihlemann (Eds.), Proceedings of the 2nd European Conference on Constitutive Models for Rubber 10-12. Sep. 2001, 249-256, Balkema: Rotterdam 2001
- [40] HAUPT, P. [1993], “On the Mathematical Modelling of Material Behavior in Continuum Mechanics”, *Acta Mechanica*, Vol. 100, 129–154.
- [41] HAUPT, P. [2000] “Continuum mechanics and theory of materials”, Springer-Verlag, Berlin
- [42] HAUPT, P.; KAMLAH, M. [1995], “Representation of Cyclic Hardening and Softening Properties using continous Variables”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 11, No. 3, 267–291
- [43] HAUPT, P.; KAMLAH, M.; TSAKMAKIS, CH. [1992], “Continuous Representation of Hardening Properties in Cyclic Plasticity”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 8, 803–817.
- [44] HOLZAPFEL, G.A. [2000], “Nonlinear solid mechanics”, John Wiley & Sons Inc., New York
- [45] HERAKOVICH, C.T. [1998], “Mechanics of fibrous composites”, John Wiley & Sons Inc., New York
- [46] HESSANI B.; HINTON E. [1997] “A review of homogenization and topology optimization: Part 1 Homogenization theory for media with periodic structure”, *Computers & Structures*, 69, 707–717.
- [47] HESSANI B.; HINTON E. [1998] “A review of homogenization and topology optimization: Part 2 Analytical and numerical solutions of homogenization equations”, *Computers & Structures*, 69, 719–738.
- [48] HESTENS, M.R.; STIEFEL, E. [1952], “Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems”, *Journal Research National Bureau of Standards*, Vol. 49, 409–436
- [49] HILL, R. [1950], “The mathematical theory of plasticity”, Oxford University Press
- [50] HILL, R. [1972], “On constitutive macro-variables for heterogeneous solids at finite strains”, *Proceedings of the Royal Society, Ser. A*, 326, 131–147
- [51] HUGHES, T.J.R. [1987], “The Finite Element Method, Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis”, Dover Publications, Inc. Mineola, New York
- [52] KALISKE, M. [1999], “Zur Theorie und Numerik von Strukturen aus Faserverbundmaterial.”, Habilitationsschrift

- [53] KECK, J. [1998], “Zur Beschreibung finiter Deformationen von Polymeren: Experimente, Modellbildung, Parameteridentifikation und Finite-Elemente-Formulierung”, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart, Dissertation
- [54] KHAN, A.S.; HUANG, S. [1995], “Continuum Theory of Plasticity”, John Wiley & Sons, Inc.
- [55] KOUZENTSOVA, V. [2002], Computational homogenization for the multi-scale analysis of multiphase materials, Doktorarbeit, Institute of Mechanics of Materials, TU Eindhoven
- [56] LEMAITRE, J.; CHABOCHE J.-L. [1990], “Mechanics of solid Materials”, Cambridge University Press, Cambridge
- [57] LOUIS, A.K. [1989], “Inverse und schlecht gestellte Probleme”, Teubner-Verlag, Stuttgart
- [58] LUENBERGER, D.G. [1989], “Linear and Nonlinear Programming”, Second Edition, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts
- [59] MAHNKEN, R. [1992], “Duale Methoden für nichtlineare Optimierungsprobleme in der Strukturmechanik”, Bericht Nr. F 92/3, Universität Hannover
- [60] MAHNKEN, R. [1998], “Theoretische und numerische Aspekte zur Parameteridentifikation und Modellierung bei metallischen Werkstoffen”, Bericht Nr. F 98/2, Universität Hannover
- [61] MAHNKEN, R. [1999], “Aspects on the finite-element implementation of the Gurson model including parameter identification”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 15. 1111–1137
- [62] MAHNKEN, R. [2000] “An inverse finite-element algorithm for parameter identification of thermoelastic damage models” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 48, 1015-1036
- [63] MAHNKEN, R.; KUHL, E. [1999], “Parameteridentification of gradient enhanced damage models with the finite element method”, *European Journal of Mechanics, A/Solids*, Vol. 18, 819–835
- [64] MAHNKEN, R.; STEIN, E. [1994], “Parameter Identification of Viscoplastic Models Based on First and Second Order Information of a Regularized Least-Squares Functional”, Inst. f. Baumechanik u. Numerische Mechanik, Universität Hannover, Bericht 94/13
- [65] MAHNKEN, R.; STEIN, E. [1996] “A unified approach for parameter identification of inelastic material models in the frame of the finite element method”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 136, 225–258
- [66] MAHNKEN, R.; STEIN, E. [1997] “Parameter identification for finite deformation elasto-plasticity in principal directions” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 147, 17-39
- [67] MAHNKEN, R.; JOHANSSON, M.; RUNESSON, K. [1998], “Parameter Estimation for a Viscoplastic Damage Model using a Gradient-based Optimization Algorithm”, *Engineering Computations*, Vol. 15, No. 7, 925–955

- [68] MARSDEN, J.E.; HUGHES, J.R. [1983], “Mathematical Foundations of Elasticity”, Prentice–Hall Inc., New Jersey
- [69] MIEHE, C. [1994], “Aspects of the Formulation and Finite Element Implementation of Large Strain Isotropic Elasticity”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 37, 1981–2004
- [70] MIEHE, C. [1994], “Computation of Isotropic Tensor Functions”, *Communications in Applied Numerical Methods*, Vol. 9, 889–896
- [71] MIEHE, C. [1995], “Discontinuous and Continuous Damage Evolution in Ogden-Type Large-Strain Elastic Materials”, *European Journal of Mechanics, A/Solids*, Vol. 14, 697–720
- [72] MIEHE, C. [1996], “Numerical Computation of Algorithmic (Consistent) Tangent Moduli in Large-Strain Computational Inelasticity”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 134, 1543–1562
- [73] MIEHE, C. [1998], “Comparison of two Algorithms for the Computation of Fourth-Order Isotropic Tensor Functions”, *Computers & Structures*, Vol. 66, 37–43
- [74] MIEHE, C. [2000], “Strain-Driven Homogenization of Inelastic Microstructures and Composites Based on an Incremental Variational Formulation”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 11, 1285–1322
- [75] MIEHE, C. [2000], “Geometrische Methoden der nichtlinearen Kontinuumsmechanik”, Vorlesungsmitschrieb, Universität Stuttgart
- [76] MIEHE, C. [2001], “Computational Mechanics of Materials”, Vorlesungsmitschrieb, Universität Stuttgart
- [77] MIEHE, C. [2002], “Micromechanics of Materials and Homogenization Methods”, Vorlesungsmitschrieb, Universität Stuttgart
- [78] MIEHE, C. [2003], “Computational micro-to-macro transitions for discretized microstructures of heterogeneous materials at finite strains based on the minimization of averaged incremental energy”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192, 559–591.
- [79] MIEHE, C. [2004], “Theoretical and Computational Mechanics of Materials at Large Strains”, Vorlesungsmitschrieb, Universität Stuttgart
- [80] MIEHE, C.; APEL, N.; LAMBRECHT, M. “Anisotropic Additive Plasticity in the Logarithmic Strain Space. Modular Kinematic Formulation and Implementation based on Incremental Minimization Principles for Standard Materials”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 191, 5383–5425.
- [81] MIEHE, C.; KECK, J. [1998], “Superimposed Finite Elastic-Viscoelastic-Plastoelastic Stress Response with Damage in filled rubbery Polymers. Experiments, Modelling and algorithmic Implementation”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48, 323–365
- [82] MIEHE, C.; LAMBRECHT, M. [2000] “Algorithms for Computation of Stresses and Elasticity Moduli in Terms of Seth–Hill’s Family of Generalized Strain Tensors.”, *Communications in Numerical Methods in Engineering*, Vol. 17, 337–353
- [83] MIEHE, C.; SCHEDAY, G. [1999] “Parameteridentifikation ausgewählter makroskopischer Materialmodelle zur finiten Elastizität und Inelastizität auf der Grundlage

- optischer Feldmessmethoden. ”, Report No. 99-I-01, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart
- [84] MIEHE, C.; SCHEDAY, G. [2000], “Identifikation eines Materialmodells für viskoplastische Deformationen”, *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik*, Vol. 80, Suppl. 3, S603–S604
- [85] MIEHE, C.; SCHOTTE, J. [2004] “Anisotropic finite elastoplastic analysis of shells: simulation of earing in deep-drawing of single- and polycrystalline sheets by Taylor-type micro-to-macro transitions”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 193, 25–57
- [86] MIEHE, C.; SCHOTTE, J.; LAMBRECHT, M. [2002], “Homogenization of inelastic Solid Materials at Finite Strains based on Incremental Minimization Principles”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 50, 2123–2167
- [87] MIEHE, C.; SCHOTTE, J.; SCHRÖDER, J. [1999], “Computational micro-macro transitions and overall moduli in the analysis of polycrystals at large strains”, *Computational Materials Science*, Vol. 16, 372–382
- [88] MIEHE, C.; SCHRÖDER, J.; SCHOTTE, J. [1999], “Computational homogenization analysis in finite plasticity. Simulation of texture development in polycrystalline materials”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 171, 387–418
- [89] MYERS, R.H.; MONTGOMERY, D.C. [2002], “Response Surface Methodology. Process and Product Optimization Using Design Experiments”, John Wiley & Sons Inc., New York
- [90] NEDLER, J.A.; MEAD, R. [1965], “A simplex method for function minimization”, *Computer Journal*, Vol. 7, 1965, 308–313
- [91] NOCEDAL, J.; WRIGHT, S.J. [1999], “Numerical Optimization”, Springer-Verlag
- [92] OGDEN, R.W. [1984], “Nonlinear Elastic Deformations”, Ellis Horwood, Chichester
- [93] PAPADOPOULOS, P.; LU, J. [2001] “On the formulation and numerical solution of problems in anisotropic finite plasticity”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 190, 4889–4910
- [94] PEDERSEN, P. [2000], “On Optimal Shapes in Materials and Structures.” *Structural Optimization*, Vol. 19, 169–182.
- [95] POLAK, E. [1971], “Computational Methods in Optimization: A Unified Approach”, Academic Press, New York
- [96] POWELL, M.D.J. [1964], “An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives”, *Computer Journal*, Vol. 7, 155–162.
- [97] POWELL, M.D.J. [1973] “On search directions for minimization algorithms”, *Mathematical Programming*, Vol. 4, 193–201.
- [98] POWELL, M.D.J. [1978], “Algorithms for nonlinear Constraints that use Lagrangian Functions”, *Mathematical Programming*, Vol. 14, 224–248
- [99] POWELL, M.D.J. [1994], “A direct search optimization method that models the objective function and constraint functions by linear interpolation”, *Advances in*

- Optimization and Numerical Analysis, S. Gomez and J.-P. Hennart (eds.), Kluwer Academic Publishers, 51–67.
- [100] POWELL, M.D.J. [1998], “Direct search algorithms for optimization calculations”, *Acta Numerica*, Vol. 7, 287–336, Cambridge University Press
- [101] [HTTP://WWW.PLATO.LA.ASU.EDU/TOPICS/PROBLEMS/NLORES.HTML](http://www.plato.la.asu.edu/topics/problems/nlores.html)
- [102] RECHENBERG, I. [1973], “Evolutionsstrategie: Optimierung technischer Systeme nach Prinzipien der biologischen Evolution”, Frommann–Holzboog, Stuttgart
- [103] REESE, S.; WRIGGERS, P. [1997], “A material model for rubber-like polymers exhibiting plastic deformation: computational aspects and a comparison with experimental results”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 148, 279–298
- [104] REESE, S. [2003], “Meso-macro modelling of fibre-reinforced rubber-like composites exhibiting large elastoplastic deformation”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 40, 951–980
- [105] RICE, J.R. [1971] “Inelastic constitutive relations for solids: An internal variable approach and its application to metal plasticity”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 19 433–455
- [106] RIEGER, A. [2000], “Parameteridentifikation Finiter Elastizität rußgefüllter Polymere bei homogenen und inhomogenen Deformationen”, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart, Diplomarbeit
- [107] RIEGER, A.; MIEHE, C. [2004], “Parameter-identification of macroscopic material models based on virtual testing of given material mesostructures”, Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics, in Druck
- [108] RIEGER, A.; SCHEDAY, G.; MIEHE, C. [2003], “Parameter Identification of a Finite Viscoplastic Material Model using Deterministic Optimization Methods.” Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics, Vol. 2, 525–526
- [109] RIEGER, S. [2004], “Temperaturabhängige Beschreibung visko-elasto-plastischer Deformationen kurzglasfaserverstärkter Thermoplaste: Modellbildung, Numerik und Experimente.” Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart, Dissertation
- [110] SCHEDAY, G. [2003], “Theorie und Numerik der Parameteridentifikation von Materialmodellen der finiten Elastizität und Inelastizität auf der Grundlage optischer Feldmessmethoden.”, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart, Dissertation
- [111] SCHEDAY, G.; MIEHE, C. [2000], “Identifikation eines Materialmodells für viskoplastische Deformationen”, *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik*, Vol. 80, Suppl. 3, S603–S604.
- [112] SCHEDAY, G.; MIEHE, C. [2001], “Parameteridentifikation finiter Elastizität bei inhomogenen Deformationen.” *ZAMM Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik*, Vol. 81, Suppl. 2, S425–S426.
- [113] SCHEDAY, G.; MIEHE, C. [2002], “A Unified Computational Framework for Parameter Identification of Material Models in Finite Inelasticity.” Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics, Vol. 1, 189–190.

- [114] SCHITTKOWSKI, K. [1981], “The Nonlinear Programming Method of Wilson, Han and Powell with an augmented Lagrangian type Line Search: Part 1”, *Numerische Mathematik*, Vol. 38, 83ff
- [115] SCHITTKOWSKI, K. [1983], “On the Convergence of a Sequentiel Quadratic Programming Method with an augmented Lagrangian Line Search Function”, *Mathematische Operationsforschung und Statistik*, Vol. 14, 197ff
- [116] SCHITTKOWSKI, K. [1985], “NLPQL: A Fortran Subroutine for Solving Constrained Nonlinear Programming Problems”, *Annals of Operations Research*, Vol. 5, 485–500
- [117] SCHITTKOWSKI, K. [1988], “Solving Constrained Nonlinear Least Squares Problems by a General Purpose SQP-Method”, *International Series of Numerical Mathematics*, Vol. 84, 295–309
- [118] SCHRÖDER, J. [1996], “Theoretische und algorithmische Konzepte zur phänomenologischen Beschreibung anisotropen Materialverhaltens”, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart, Dissertation
- [119] SHANNO, D.F. [1970] “Conditioning of quasinewton methods for function minimization”, *Mathematics of Computation*, Vol. 24, 647–656.
- [120] SURESH, S.; MORTENSEN, A.; NEEDLEMAN, A. [1993], “Fundamentals of Metal-Matrix Composites”, Butterworth-Heinemann
- [121] SCHWEFEL, H.-P. [1977], “Numerische Optimierung von Computer-Modellen mittels der Evolutionsstrategie”, Birkhäuser Verlag, Basel, Stuttgart
- [122] SCHWEFEL, H.-P. [1995], “Evolution and Optimum Seeking”, John Wiley & Sons Inc., New York
- [123] SIGMUND, O. [1994] “Materials with prescribed constitutive parameters: an inverse homogenization problem.” *International Journal of Solids and Structures*, 31 (17), 2313–2329.
- [124] SIGMUND, O.; TORQUATO, S. [1999], “Design of smart composite materials using topology optimization.” *Smart Materials and Structures*, Vol. 8, 365–379.
- [125] SIMO, J.C.; HUGHES, T.J.R. [1998], “Computational Inelasticity”, Springer
- [126] SPELLUCCI, P. [1993], “Numerische Verfahren der nichtlinearen Optimierung”, Birkhäuser, Basel–Boston–Berlin
- [127] TEMAM, R.; MIRANVILLE, A. [2000], “Mathematical Modelling of Continuum Mechanics”, Cambridge Universtiy Press
- [128] THIELECKE, F. [1998], “Parameteridentifizierung von Simulationsmodellen für das viskoplastische Verhalten von Metallen - Theorie, Numerik, Anwendung”, Braunschweiger Schriften zur Mechanik, No. 34-1998
- [129] TÖRNIG, W.; SPELLUCCI, P. [1990], “Numerische Mathematik für Ingenieure und Physiker”, Springer-Verlag, Berlin
- [130] TRUESDELL, C.; NOLL, W. [1965], “The Nonlinear Field Theories of Mechanics”, *Handbuch der Physik Bd. III/3, Edited by S. Flügge, Springer*
- [131] TWIZELL, E.H.; OGDEN, R.W. [1983], “Non-linear Optimization of the Material Constants in Ogden’s Stress–Deformation Function for Incompressible Isotropic Elastic Materials”, *Journal of the Australian Mathematical Society*, Vol. 24, 424–434

-
- [132] VALANIS, K.C. [1971], “A Theory of Viscoplasticity without a Yield Surface, Part I”, *Archives of Mechanics*, Vol. 23, 4, 517–533
- [133] VALANIS, K.C. [1971], “A Theory of Viscoplasticity without a Yield Surface, Part II”, *Archives of Mechanics*, Vol. 23, 4, 535–551
- [134] WINTER, D. [1993], “Optische Verschiebungsmessung nach dem Objektrasterprinzip mit Hilfe eines flächenorientierten Ansatzes”, Institut für Technische Mechanik, Abteilung Experimentelle Mechanik, TU Braunschweig
- [135] ZANGWILL, W.I. [1967], “Minimizing a function without calculating derivatives”, *Computer Journal*, Vol. 10, 293–296
- [136] ZIENKEWICZ, O.C.; TAYLOR, R.L. [1989], “The Finite Element Method”, McGraw–Hill, London

Abbildungsverzeichnis

1. Bestimmung des E -Moduls aus experimentellen Daten.	2
2. Kontinuierliche Folge von Abbildungen χ_t des materiellen Körpers B	7
3. Nichtlineare Punktabbildung eines Punktes P	8
4. Tangentenabbildung materieller Kurven.	9
5. Normalen- oder Flächenabbildung.	10
6. Jacobi- oder Volumenabbildung.	11
7. Parametrisierung der Momentan- und Referenzkonfiguration.	11
8. Basiswechsel durch Metrikensoren \mathbf{G} und \mathbf{g}	13
9. Euler'sches Schnittprinzip.	14
10. Kommutative Abbildungen der Spannungsbeziehungen.	16
11. Konzept interner Variablen.	20
12. Grafische Darstellung des Armijo Backtracking.	26
13. Suchpfad des steilsten Abstieges und der Newton-Methode.	28
14. Iterationsschritte mit dem Projektionsalgorithmus nach Bertsekas.	34
15. Minimierungsschritte des Simplex-Algorithmus.	35
16. Iterationsschritte des steilsten Abstiegs mit und ohne Skalierung.	36
17. Minimierung der Rosenbrock Funktion.	38
18. Ablaufdiagramm der Parameteridentifikation.	40
19. Homogenes Verhalten eines Probekörpers unter Zugbelastung.	41
20. Testprogramme: Zugbelastung und Be- und Entlastung.	42
21. Testprogramme: Zyklische Belastung und unterschiedliche Geschwindigkeiten.	43
22. Testprogramme: Relaxation und Kriechversuch.	43
23. Gegenüberstellung von direktem und inversem Problem.	45
24. Spannungs-Verzerrungskurve eines Zugexperiments und Simulationen.	45
25. Schematisch Darstellung der MTS Prüfmaschine.	47
26. Optisches Messverfahren mit der Objektrastermethode.	48
27. Interpolation der Spannungen der Simulation auf den Zeitpunkt des Experiments.	49
28. Lastfunktionen zur Steuerung des Treibers.	53
29. Spannungsantwort des Neo-Hooke Modells.	61
30. Gradienten der axialen Spannung bezüglich der Materialparameter.	62
31. Verlauf der LSF-Funktion über der Anzahl der Funktionsauswertungen.	62
32. Optimierungsverlauf für das SQP-Verfahren und den Simplex-Algorithmus.	62
33. Rheologisches Modell des viskoelastischen Materials.	65
34. Ablauf zur Berechnung der Sensitivitäten der algorithmischen Spannungen.	67

35. Experimentelle Daten für das viskoelastische Materialmodell.	68
36. Spannungsantwort des viskoelastischen Materialmodells.	69
37. LSF-Funktion über Anzahl der Iterationen bzw. Anzahl der Funktionsaufrufe. .	70
38. Vergleich der Gradienten der Spannung für die Materialparameter der Viskosität.	71
39. Verzerrungsgesteuerte Prozessführung zur Datengenerierung.	75
40. Spannungsantwort des elastoplastischen Materialmodells.	75
41. Spannungsantwort des Materialmodells und virtuelle Daten.	75
42. Gradienten der ersten P.-K. Spannungen bezüglich der Materialparameter. . . .	76
43. Numerisch und analytisch berechneten Gradienten der Zielfunktion.	78
44. Rheologisches Modell für das visko-elastoplastische Material.	79
45. Geometrie und Abmessungen des transversal isotropen Probekörpers.	81
46. Simulationen und Experimente für die zyklische Belastung des Polyamids. . . .	82
47. Simulationen und Experimente für die stufenförmigen Belastungen.	83
48. Verifikationsexperiment und Simulation mit optimierten Parametern.	84
49. Unterschiedliche Randbedingungen bei Treiber-Tests mit anisotropen Material.	85
50. Simulation des transversal isotropen Probekörpers.	86
51. Vergleichsrechnung der zwei Treiber-Varianten mit der Strukturberechnung. . .	87
52. Materieller Körper mit Randbedingungen.	89
53. Parametrisierung der Referenz- und Momentankonfiguration.	91
54. Interpolation der Verschiebung des Experiments auf die Position des FE-Knotens	94
55. Probengeometrie des Strukturproblems zur Parameteridentifikation.	97
56. Simulation des Kragarms mit gegebenem Materialparametersatz.	98
57. Simulation des Kragarms mit Startparametersatz.	99
58. Knotenverschiebungen für Experiment und Simulation mit Startparametern. . .	100
59. Optimierungsverlauf bezüglich der Winkel der ausgezeichneten Richtung.	101
60. Knotensensitivität in x , y und z -Richtung für den Winkel ϕ_1	102
61. Knotensensitivität in x , y und z -Richtung für den Winkel ϕ_2	102
62. Probengeometrie des inhomogenen Zugstabs aus Aluminium.	103
63. Interpolation der Messungen auf die Knoten der Finite Element Diskretisierung.	103
64. Undeformierter und maximal deformierter Zustand des gelochten Zugstabs. . .	104
65. Experimentelle und simulierte Daten für den gelochten Zugstab aus Aluminium.	106
66. Kopplung von virtuellem Labor und Parameteridentifikation.	107
67. Beispiele realer Mikrostrukturen.	108
68. Schematische Darstellung der Makro- und Mikroskale.	109
69. Kopplung der Deformation von Makro- und Mikrostruktur.	111

70. Mikrostruktur von Boron–Epoxydharz Laminat.	114
71. Diskretisierungen der untersuchten transversal isotropen Mikrostrukturen.	115
72. Angabe der Raumrichtung durch Kugelkoordinaten.	116
73. Deformationsmoden für Treiber–Berechnungen.	118
74. Belastungsfunktion zur Generierung von künstlichen Messdaten.	119
75. Darstellung ausgewählter Komponenten des Kirchhoff–Spannungstensors $\boldsymbol{\tau}$	121
76. Lineare Abhängigkeit der Materialparameter bei unvollständigen Messdaten.	122
77. Verifikation der Parameter mit Treibervariante 1.	123
78. Verifikation der Parameter mit Treibervariante 2.	123
79. Homogenisierung mit dem Taylor–Ansatz.	124
80. Finite Einkristallplastizität auf der Meso–Ebene.	125
81. Treiber zur Simulation des Rollprozesses.	127
82. Polfiguren mit Ausgangs- und Endverteilung der Kristallorientierungen.	127
83. Steuerung der Deformation über der Zeit.	128
84. Schub- und Normalspannungskomponenten der virtuellen Testdaten.	129
85. Virtuelle Daten und Simulation mit Startparametersatz.	135
86. Virtuelle Daten und Simulation mit optimiertem Parametersatz.	136
87. Randwertproblem zur Validation der Materialparameter.	136
88. Validation über Last–Verschiebungskurve und diskrete Knotenkräfte.	137
89. Validation über Verschiebungsfelder in radialer Richtung.	138
90. Validation über Verschiebungsfelder in tangentialer Richtung.	139

Tabellenverzeichnis

1. Klassifizierung numerischer Optimierungsverfahren	24
2. Algorithmus des Armijo Backtracking.	26
3. SQP–Algorithmus mit Active–Set Strategie.	32
4. Schritte der Parameteridentifikation.	39
5. Das direkte Problem.	44
6. Das inverse Problem der Parameteridentifikation.	44
7. Axialer Treiber für deformationsgesteuerte Zug- Drucktests.	52
8. Axialer Treiber für spannungsgesteuerte Zug- Drucktests.	53
9. Zielfunktion- und Gradientenbestimmung deformationsgesteuerter Prozesse.	56
10. Zielfunktion- und Gradientenbestimmung spannungsgesteuerter Prozesse.	59
11. Geometrischer Prä- und Postprozessor für Spannungen und Moduli.	64
12. Leistungsfähigkeit bei der Re–Identifikation von Materialparametern.	69

13. Elastoplastisches Materialmodell mit linearer kinematisch/isotroper Verfestigung.	72
14. Re-Identifikation der Fließgrenze und der kinematischen Verfestigungsvariablen.	76
15. Re-Identifikation der Fließgrenze mit analytischen und numerischen Gradienten.	77
16. Re-Identifikation der kinematischen Verfestigung.	77
17. Identifizierte Materialparameter für das visko-elastoplastische Materialmodell. . .	84
18. Algorithmische Struktur zur Bestimmung der Gradienten.	96
19. Parameter für die Optimierung mit Simplex-Methode und zwei SQP-Varianten.	99
20. Plastizität mit nichtlinearer isotroper Verfestigung.	105
21. Identifizierte Materialparameter für den inhomogenen Zugstab aus Aluminium. .	105
22. Materialparameter von Boron Fasern und Epoxydharz Matrixmaterial	115
23. Parameter der Transversalisotropie für die rundfaserverstärkte Probe.	119
24. Parameter der Transversalisotropie inklusive der ausgezeichneten Richtung. . . .	120
25. Parameter für unterschiedliche Randbedingungen der Mikrostruktur.	120
26. Lineare Abhängigkeit der Lösungen bei unvollständigen Daten.	122
27. Parameter für unterschiedliche Randbedingungen der laminaren Mikrostruktur.	123
28. Konstitutiver Gleichungssatz der Einkristallplastizität.	126
29. Materialparameter für die Einkristallberechnung.	126
30. Anisotrope Plastizität im logarithmischen Verzerrungsraum.	131
31. General Return Algorithmus für Elastoplastizität.	134
32. Plastische Materialparameter des makroskopischen Modells.	135

Lebenslauf

Name: Andreas Rieger

Geburtsdatum: 25. August 1973

Geburtsort: Ruit auf den Fildern

Familienstand: verheiratet, ein Kind

Schulbildung: 1980 – 1984 Grundschule Nürtingen
1984 – 1993 Hölderlin Gymnasium, Nürtingen

Zivildienst: 07/1993 – 09/1994 Dr. Vöhringer Heim, Nürtingen

Studium: 10/1994 – 02/2000 Studiengang Bauingenieurwesen an der
Universität Stuttgart
09/1997 – 05/1998 Integriertes Auslandsstudium an der
"University of Calgary", Kanada
02/2000 Abschluß als Diplom-Ingenieur

Berufstätigkeit: seit 03/2000 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl I
des Instituts für Mechanik (Bauwesen),
Universität Stuttgart und
Kursdirektor des internationalen Master-of-
Science Studiengangs "Computational Mechanics
of Materials and Structures"

In dieser Schriftenreihe bisher erschienene Berichte:

- I-1(1996) *Theoretische und algorithmische Konzepte zur phänomenologischen Beschreibung anisotropen Materialverhaltens*, J. Schröder, Dissertation, 1996.
- I-2(1996) *Zur Theorie und Numerik finiter elastoplastischer Deformationen von Schalenstrukturen*, B. Seifert, Dissertation, 1996.
- I-3(1996) *Zur Modellierung des künstlichen Infrarot-Dichroismus in Polymerfolien bei großen Deformationen*, J. Buhler, Dissertation, 1996.
- I-4(1998) *Verfahren zur Ermittlung der Erdbebenlasten mit Berücksichtigung des stochastischen Charakters des Bebens*, S. Zhang, Dissertation, 1998.
- I-5(1998) *Zur Beschreibung finiter Deformationen von Polymeren: Experimente, Modellbildung, Parameteridentifikation und Finite-Elemente-Formulierung*, J. Keck, Dissertation, 1998.
- I-6(1999) *Berechnungsverfahren instationär erregter Systeme in Frequenzbereich*, A. Jaworek, Dissertation, 1999.
- I-7(2000) *Homogenisierungsmethoden der nichtlinearen Kontinuumsmechanik unter Beachtung von Stabilitätsproblemen*, J. Schröder, Habilitation, 2000.
- I-8(2002) *Theorie und Numerik von Materialstabilitäten elastoplastischer Festkörper auf der Grundlage inkrementeller Variationsformulierungen*, M. Lambrrecht, Dissertation, 2002.
- I-9(2002) *Mikromechanisch motivierte Modelle zur Beschreibung finiter Deformationen gummiartiger Polymere: physikalische Modellbildung und numerische Simulation*, F. Lulei, Dissertation, 2002.
- I-10(2002) *Adaptive Finite-Elemente-Berechnungen der nichtlinearen Festkörpermechanik bei kleinen und großen Verzerrungen*, A. Koch, Dissertation, 2002.
- I-11(2003) *Theorie und Numerik der Parameteridentifikation von Materialmodellen der finiten Elastizität und Inelastizität auf der Grundlage optischer Feldmeßmethoden*, G. Scheday, Dissertation, 2003.
- I-12(2004) *Approaches to the Description of Anisotropic Material Behaviour at Finite Elastic and Plastic Deformations, Theory and Numerics*, N. Apel, Dissertation, 2004.
- I-13(2004) *Temperaturabhängige Beschreibung visko-elasto-plastischer Deformationen kurzglasfaserverstärkter Thermoplaste: Modellbildung, Numerik und Experimente*, S. Rieger, Dissertation, 2004.
- I-14(2005) *Zur Parameteridentifikation komplexer Materialmodelle auf der Basis realer und virtueller Testdaten*, A. Rieger, Dissertation, 2005.