Teilprojekt D1

2.1 Teilprojekt D1

Effiziente parallele Algorithmen zur Simulation des Deformationsverhaltens von Bauteilen aus elastisch-plastischen Materialien

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. R. Kreißig
Professur Festkörpermechanik
Institut für Mechanik
Fakultät für Maschinenbau und Verfahrenstechnik
TU Chemnitz

Prof. Dr. A. Meyer
Professur Numerische Analysis
Fakultät für Mathematik
TU Chemnitz

Prof. Dr. M. Kuna
Institut für Mechanik und Maschinenelemente
Fakultät für Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik
TU Bergakademie Freiberg

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. U. Benedix
Professur Festkörpermechanik
Institut für Mechanik
Fakultät für Maschinenbau und Verfahrenstechnik
TU Chemnitz

Dr. M. Scherzer
Institut für Mechanik und Maschinenelemente
Fakultät für Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik
TU Bergakademie Freiberg

Dr. U.-J. Görke
Professur Festkörpermechanik
Institut für Mechanik
Fakultät für Maschinenbau und Verfahrenstechnik
TU Chemnitz

Dr. D. Michael
Institut für Mechanik und Maschinenelemente
Fakultät für Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik
TU Bergakademie Freiberg

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Die Anwendung numerischer Verfahren zur Berechnung des mechanischen Verhaltens von Bauteilen und Konstruktionen hat eine wesentliche Effizienzsteigerung der Entwicklungs- und Konstruktionsprozesse bewirkt. Insbesondere der Ersatz aufwendiger Versuchsreihen durch anwenderfreundliche kommerzielle computergestützte Simulationstechniken führt seit mehreren Jahren zum verstärkten Einsatz der Finite-Element Methode (FEM) in nahezu allen Industriebranchen. Bei der Entscheidung für eine spezielle Software stehen in der Praxis zwei Kriterien besonders im Vordergrund – Effektivität (Zeitersparnis) und Genauigkeit. Die Untersuchungen im Rahmen des SFB dienen vordergründig der Effektivitätssteigerung numerischer Simulationen, wobei die Zeiteinsparung eine Approximation des realen Bauteilverhaltens durch komplexere Modelle ermöglicht, und damit auch die Genauigkeit der Berechnungen vergrößert wird.

Teilprozesse einer FE-Simulation, die in den Integrationsstützstellen der Elemente abgearbeitet werden, benötigen in der Regel keine Informationen von anderen Gebieten der vernetzten Geometrie. So finden beispielsweise die Integration des Deformationsgesetzes und die dazu konsistente Berechnung der lokalen Steifigkeitsmatrix separat in jedem materiellen Punkt statt. Einen umfangreichen Informationsaustausch erfordern hingegen die Ein- und Ausgabe modellrelevanter Daten sowie die Lösung des globalen Steifigkeitssystems. Der hohe Anteil rechenintensiver Prozesse, die unabhängig voneinander an unterschiedlichen Orten der Geometrie, quasi "gleichzeitig", bearbeitet werden können, bewirkt die natürliche Effizienzsteigerung einer FE-Berechnung bei deren Parallelisierung. Besonders deutlich wird dieser Vorteil gegenüber der herkömmlichen, sequentiellen Vorgehensweise bei der Simulation geometrisch und physikalisch nichtlinearer Modelle mittels inkrementell-iterativer Algorithmen und der Lösung von Optimierungsproblemen, beispielsweise bei der Materialparameteridentifikation durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder, mit der Notwendigkeit der mehrfachen Wiederholung vollständiger Vorwärtsrechnungen. Eine Bearbeitung von Optimierungsaufgaben auf der Basis nichtlinearer mechanischer Probleme erscheint überhaupt erst durch Anwendung der Parallelrechentechnik sinnvoll möglich.

An der TU Chemnitz werden seit mehreren Jahren in den Bereichen Informatik und Mathematik Untersuchungen zum Aufbau und Transport effizienter Datenstrukturen sowie zur effektiven Lösung großdimensionierter linearer algebraischer Gleichungssysteme durchgeführt. Unter Nutzung dieser Erfahrungen war es ein Ziel, im Rahmen des SFB ein FEM-Programm zur Simulation inelastischen Materialverhaltens für massiv parallele Rechner zu erstellen und für Praxisanwendungen vorzubereiten. Hauptaugenmerk sollte dabei auf die Entwicklung effizienter Zeitdiskretisierungsverfahren und Gleichungslöser gerichtet werden.

Während schnelle Löser bei 2D und 3D–Elastizitätsproblemen mit hierarchischen oder BPX–Techniken seit längerer Zeit bekannt und in den Programmrealisierungen SPC–PMEl2D (2D–Elastizität) und SPC–PMAd3T (eine erste Experimentalrealisierung für 3D– Potential– und Elastizitätsprobleme [vgl. Teilprojekt A3]) integriert sind, konnte die Eignung hierarchischer Techniken für Probleme der ebenen Elasto–Plastizität erstmals im Rahmen von Arbeiten der DFG–Forschergruppe „SPC“ gezeigt und mit dem Programm SPC–PMEP verfügbar gemacht werden. Weiterhin erfolgten die Implementierung und Testung der BPX–Vorkonditionierung. Die Programmentwicklung für die Bearbeitung geometrisch linearer (kleine Verzerrungen), aber physikalisch nichtlinearer Probleme (elastisch-plastisches Materialverhalten mit isotroper, kinematischer und formativer Verfestigung) konnte im vorausgegangenen Berichtszeitraum abgeschlossen und erfolgreich für die Materialparameteridentifikation genutzt werden.

Reale Problemstellungen der Festkörpermechanik, insbesondere im Bereich der Elasto-Plastizität (z. B. Simulation von Umformvorgängen), lassen sich in der Regel nicht hinreichend zuverlässig mit geometrisch linearen Modellen beschreiben. Im laufenden Berichtszeitraum erfolgte somit konsequenterweise die Entwicklung eines FE-Programmes zur Berechnung großer elastisch-plastischer Verzerrungen – des Programmes SPC–PMHP. Mit diesem Programm können neben ebenen nun auch räumliche Probleme behandelt werden.

Eine allgemeine Theorie der Elasto–Plastizität bei Annahme großer Verzerrungen ist derzeit noch Gegenstand einer breiten, teilweise kontroversen Diskussion. Neben Modellen, die auf ausschließlich phänomenologischen Annahmen basieren[1], finden auch Formulierungen, die durch ein mikromechanisches Bild der Einkristallplastizität motiviert sind breite Anwendung. Essentiell für diesen Zugang ist die Berücksichtigung der Tatsache, daß ein plastischer Deformationsprozess auf submikroskopischem Niveau durch das Verhalten von Fremdatomen, Versetzungen und Disklinationen charakterisiert ist. Diesem Problem näherungsweise Rechnung tragend, wurde aufbauend auf einer geometrischen Interpretation von Elementarmechanismen der Plastizität ein Materialmodell der finiten Elasto–Plastizität entwickelt. Unter Voraussetzung der Anwendbarkeit der *rationalen Thermodynamik* ergibt sich daraus ein Satz von Evolutionsgleichungen, der bei Annahme kleiner Verzerrungen in die Gleichungen der klassischen Elasto–Plastizität übergeht.

Zur Vorbereitung der Erweiterung des Anwendungsspektrums der für SPC–PMEP entwickelten Algorithmen und deren Programmrealisierungen auf geometrisch nichtlineare Probleme konnte zunächst ein einfaches Modell zur Beschreibung großer elastisch–plastischer Verzerrungen entwickelt werden, das es erlaubt, bei den zur Identifikation von Materialparametern herangezogenen Stoffen auch den Einfluss geometrischer Nichtlinearitäten zu berücksichtigen. Dieses sich aus kontinuumsthermodynamischen Betrachtungen ergebende Modell wurde im Berichtszeitraum wesentlich erweitert und ist offen für zukünftige Modifikationen.

Bei Berücksichtigung geometrischer Nichtlinearitäten kommt es bekanntlich bei sehr großen Deformationen zur sogenannten „geometrischen Entfestigung“, d. h., das linearisierte Problem wird indefinit. Diese zusätzliche Schwierigkeit verschiebt sich bei der Behandlung von Problemen der duktilen Schädigungsmechanik hin zu

[1] Dieser Zugang findet in vielen kommerziell verfügbaren Finite Element Programmen ausschließlich Anwendung.

kleineren Deformationen, wobei man hier üblicherweise von „materieller Entfestigung“ spricht. Wenngleich es auch nicht Anliegen des vorliegenden Projektes war, indefinite Aufgabenstellungen zu behandeln, erschien es doch erforderlich, diesem Problem Rechnung zu tragen.

Von ihrer Struktur her sind die Evolutionsgleichungen der assoziierten Fließtheorie diffenzialalgebraische Gleichungen. In Abhängigkeit davon, ob als algebraischer Anteil die Fließbedingung oder die Kuhn–Tucker–Bedingung herangezogen wird, sind diese DAE's vom Typ Index 2 bzw. Index 1. Die Index–2–DAE's zur Beschreibung des elastisch–plastischen Materialverhaltens bei großen Deformationen sind von vergleichbarer Struktur wie die entsprechenden Beziehungen im geometrisch linearen Fall. Daher konnte bei der Entwicklung von SPC–PMHP auf den algorithmischen Grundstrukturen von SPC–PMEP aufgebaut werden. Zur Lösung des globalen Steifigkeitssystems wurden die aktuellen, effizienten Solver-Entwicklungen aus dem Teilprojekt A3 implementiert. Die Linearisierungstechniken zur Behandlung der DAE's beruhen wie bei kleinen Verzerrungen auf der Verwendung einer verallgemeinerten Trapezregel. Zur Verbesserung des globalen und lokalen Konvergenzverhaltens erwies sich die Entwicklung und Implementierung geeigneter Dämpfungsalgorithmen für die Linearisierungsverfahren als sinnvoll. Adams–Moulton–Verfahren, zu denen auch die hier angesprochene verallgemeinerte Trapezregel gehört, sind bekanntlich für steife Systeme nicht stabil. Deshalb ist zusätzlich ein implizites Mehrschritt–Rückwärtsdifferenzenverfahren (BDF) für Index–1–DAE's realisiert worden. Dieses Verfahren ist auch für steife Systeme bis zur Schrittzahl 6 stabil. Allerdings ist der numerische Aufwand größer, da, um die quadratische Konvergenzordnung der Trapezregel erreichen zu können, hier ein 2–Schrittverfahren verwendet werden muss. Die Schnittstelle zu den das Materialverhalten charakterisierenden Routinen ist wie bei SPC–PMEP so allgemein und umfassend gestaltet, dass Neuentwicklungen im Bereich der Deformationsgesetze ohne massive Eingriffe in die Programmstruktur implementiert werden können. Dieser Umstand wurde bereits für die Einbeziehung von Materialmodellen der finiten Elasto-Plastizität unter Berücksichtigung einer Substruktur und alternativ der duktilen Schädigungsmechanik erfolgreich genutzt.

Eine FE-Modellierung besteht im Wesentlichen aus drei großen Komplexen – der Geometriebeschreibung einschließlich Vernetzung, der Definition von Rand- und Anfangsbedingungen sowie der Approximation des realen Werkstoffverhaltens durch Deformationsgesetze. In der Praxis zeigt sich, dass gerade die Auswahl geeigneter Materialmodelle und die Identifikation darin enthaltener Parameter problematisch sind, und in ungünstigen Fällen zu erheblichen Fehlern im Simulationsergebnis führen können. Ein weiteres Ziel der Untersuchungen im Teilprojekt bestand deshalb darin, das parallelisierte FE-Programm SPC–PMHP für die jeweiligen Vorwärtsrechnungen zu nutzen und durch seine Einbettung in einen Optimierungsalgorithmus die Anpassung von Materialmodellen an gemessene inhomogene Verschiebungsfelder und somit eine verbesserte Materialparameteridentifikation zu erreichen.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe FEM–Entwicklung/Parameteridentifikation

Die Identifikation von Materialparametern ist ein inverses Problem, da die noch unbekannten Parameter auf der Ebene der Beschreibung des realen Materialverhaltens die *Ursache* für die konkrete Form von Spannungs- und Verzerrungsfeldern sind. Lediglich diese *Wirkungen* können (zudem in der Regel auch nur indirekt z. B. in Form von Verschiebungsfeldern) gemessen werden. In der Praxis wird die inverse Aufgabe durch ein Optimierungsproblem approximiert, das die bestmögliche Anpassung von gemessenen sowie berechneten lokalen und/oder globalen mechanischen Größen ermöglicht. Dabei zeigt sich, dass die Materialparameteridentifikation ein schlecht gestelltes Problem verkörpert. Deshalb sind zu seiner akzeptablen Lösung ein großes Informationsangebot und Sorgfalt bei der Auswahl geeigneter Experimente, Materialmodelle sowie Optimierungsverfahren erforderlich.

Die Materialmodelle sollten die jeweils relevanten Eigenschaften des Werkstoffverhaltens adäquat widerspiegeln. Das wachsende Verständnis physikalischer Zusammenhänge und deren mathematische Approximation führen zu immer komplexeren Modellen für die Beschreibung des thermomechanischen Verhaltens von Metallen. In diesem Prozess zeigt sich eine wachsende Diskrepanz zwischen den Möglichkeiten der physikalisch-mathematischen Modellbildung und den praktischen Erfordernissen der Identifikation aller notwendigen Modellparameter aus experimentellen Ergebnissen ([stec85, besd91, dahl93]).

Sehr häufig werden Materialparameter durch Auswertung homogener Spannungs- und Verzerrungszustände bestimmt ([dudd93, pei93a, pei93b]). Auch an der TU Chemnitz wurden entsprechende Verfahren lange Zeit zur Parameteridentifikation für elastisch-plastische Materialmodelle entwickelt und genutzt ([krei86, sall88, gerl89, berg92]). Die Analyse homogener Zustände hat den Vorteil, dass aus gemessenen globalen Größen wie z. B. Kraft, Moment, Verschiebung unmittelbar innere Beanspruchungen in Form von Spannungen und Verzerrungen berechnet werden können. Das führt dazu, dass das Deformationsgesetz mit einem Teil der Messwerte als Belastung integriert werden kann, während die restlichen Messwerte die experimentellen Vergleichsgrößen bilden. Allerdings hat diese Vorgehensweise auch entscheidende Nachteile. Insbesondere bei komplexen Deformationsgesetzen mit vielen Materialparametern ist eine anschließende Simulation von Spannungs- und Verzerrungszuständen, die von den zur Identifikation genutzten abweichen (insbesondere von inhomogenen Verteilungen), nicht immer gegeben. Zudem lassen sich homogene Zustände teilweise experimentell nur schwierig realisieren. So erfordert z. B. die Erfassung von Anisotropien im zweiachsigen Versuch an Kreuzproben umfangreiche Vorarbeiten und einen erheblichen experimentellen Aufwand [dem93].

Ein breiteres und realistischeres Informationsangebot zur Parameteroptimierung bietet die Auswertung inhomogener Spannungs- und Verzerrungszustände. Da sich diese nur in Ausnahmefällen unmittelbar messtechnisch erfassen lassen, werden die Messung und Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder angestrebt. Das Verfahren ist schematisch im Bild 1 dargestellt.

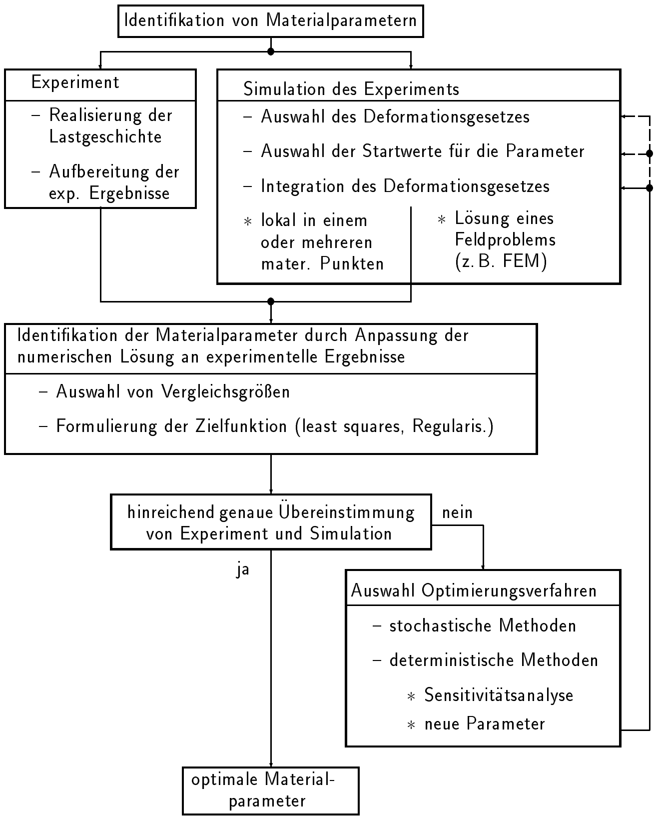


Bild 1: Schematische Darstellung des Prozesses der Materialparameteridentifikation durch Analyse inhomogener Spannungs- und Verzerrungszustände.

Ein zentraler Punkt dieser Methodik ist die Bereitstellung der numerischen Vergleichswerte in der Zielfunktion. Da diese und deren Gradienten (bei deterministischen Methoden) im Verlaufe des Optimierungsprozesses vielfach aufgebaut werden müssen, sind für die jeweilige Lösung des direkten Problems effektive Verfahren notwendig. Zunächst wurde dabei das Konzept der lokalen Integration des Deformationsgesetzes in mehreren ausgewählten materiellen Punkten mit einem Teil der Messwerte als Belastung verfolgt [kre93a, kre93b]. Durch die Erfassung inhomogener Verteilungen mechanischer Feldgrößen konnten bessere Identifikationsergebnisse bei geringen Optimierungszeiten erzielt werden [krei97]. Das Informationsangebot für den Identifikationsprozess ist jedoch durch die Beschränkung auf einige materielle Punkte weiterhin stark begrenzt.

Die verbesserten Möglichkeiten der Messung kompletter Verschiebungsfelder an Probekörpern und realen Bauteilen sowie die Leistungssteigerung auf dem Gebiet der Computerhardware erlaubten die Entwicklung und den Einsatz von Verfahren zur Materialparameteridentifikation, bei denen das direkte Problem nunmehr in jedem Optimierungsschritt mit Hilfe eines FEM-Programmes gelöst werden muss [bisc93, mahn93, stei94]. Damit kann ein Maximum an messbaren Informationen für die Konstruktion sinnvoller Zielfunktionen genutzt werden. Durch die Verfügbarkeit eines Parallelrechners und eines effektiven parallelisierten FEM-Programmes wurde es auch an der TU Chemnitz ermöglicht, diese modernen Verfahren zur Materialparameteridentifikation zu nutzen und eigene Entwicklungen auf diesem Gebiet zu betreiben. In Abgrenzung zu anderen Forschergruppen standen dabei von Beginn an Entwicklungsarbeiten zu verallgemeinerten Deformationsgesetzen für elastisch-plastisches Materialverhalten unter Berücksichtigung isotroper, kinematischer und formativer Verfestigung mit möglicher Anfangsanisotropie und zur effizienten Lösung des Optimierungsproblems im Mittelpunkt. Dabei wurde insbesondere die sehr effektive und genaue semianalytische Methode der Sensitivitätsanalyse weiterentwickelt und implementiert [bohn94].

Die Ergebnisse der Untersuchungen zur Identifikation von Materialparametern für elastisch-plastisches Materialverhalten bei kleinen Verzerrungen durch Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder, die im ersten Antragszeitraum erzielt wurden, sind im Arbeitsbericht für diese Periode ausführlich dargestellt ([kre98b]). An dieser Stelle sollen die wichtigsten Punkte noch einmal zusammengefasst werden.

- Für die Lösung des nach der Zeitdiskretisierung nichtlinearen FEM-Randwertproblems wurde ein Newton-Verfahren verwendet, in dessen Rahmen eine konsistente Linearisierung des Deformationsgesetzes für die Integrationsstützstellen erfolgte ([mich95], [mey97]). Zur Diskretisierung des Index–2–Algebro-Differenzialgleichungssystems für das Deformationsgesetz wurde eine verallgemeinerte Trapezregel als Einschritt-Differenzenschema implementiert.

- Im ersten Antragszeitraum wurden die Entwicklungsarbeiten zu verallgemeinerten Deformationsgesetzen für elastisch-plastisches Materialverhalten bei kleinen Verzerrungen unter Berücksichtigung isotroper, kinematischer und formativer Verfestigung mit möglicher Anfangsanisotropie abgeschlossen ([grew98, kret98]). Teilweise sind diese Modelle bereits unter Nutzung der standardisierten Materialschnittstelle in das FE-Programm PMEP implementiert worden.

- Die Identifikation von Verfestigungsparametern erfolgte durch Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder an gekerbten Vier-Punkt-Biege-Proben mit Hilfe des in-plane Moiré-Verfahrens. Für den Vergleich mit der FEM wurden die gemessenen Verschiebungsfelder in den notwendigen materiellen Punkten approximiert und auf den undeformierten Ausgangszustand transformiert ([boh97a, boh97b]).

- Eine effiziente Vorgehensweise im Rahmen der Materialparameteroptimierung kann wegen der mehrmaligen Lösung des direkten Feldproblems sinnvoll nur durch den Einsatz von Gradientenverfahren gewährleistet werden. Für die dabei notwendige Sensitivitätsanalyse wurde das effektive und genaue semianalytische Verfahren weiterentwickelt und implementiert ([boh97b]).

- Durch Approximation synthetischer Messwerte ließen sich zunächst die Effizienz und Genauigkeit der gewählten Optimierungsverfahren in Abhängigkeit verschiedener Einflussfaktoren untersuchen ([goe97a]).
- Das vorgestellte Verfahren zur Materialparameteridentifikation wurde erfolgreich zur Analyse realer Messwerte mit verschiedenen Verfestigungsansätzen angewandt ([kret98]).

Wie Effektivitätsuntersuchungen deutlich belegen, konnten diese Ergebnisse nur auf einem Parallelrechner mit akzeptablem Aufwand erzielt werden ([kret98], [kre98b]). Im Rahmen des Sonderforschungsbereiches war für D1 insbesondere die Zusammenarbeit mit den Teilprojekten A1, A3, A4, B1, B5 und D4 von großer Bedeutung.

Bei der Materialparameteridentifikation ist eine Zielfunktion, z. B. im Sinne einer ungewichteten Fehlerquadratsumme, so zu minimieren, dass numerisch ermittelte Verschiebungswerte $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{p})$ den Messwerten $\bar{\boldsymbol{U}}$ möglichst weit angenähert werden:

$$\Phi(\boldsymbol{p}) = \sum \left(\boldsymbol{U}(\boldsymbol{p}) - \bar{\boldsymbol{U}}\right)^2 \longrightarrow \min_{\boldsymbol{p} \in P} . \tag{3.1}$$

Die Optimierungsaufgabe (3.1) erweist sich nicht notwendig als gut gestelltes Problem. So ist die Zielfunktion nicht a priori konvex und deren Hesse-Matrix in einigen Fällen schlecht konditioniert. Beides erschwert eine eindeutige, stabile Lösung der Aufgabe. Die Ursache für die Schlechtgestelltheit ist in der ungenauen Beschreibung der physikalischen Grundlagen und einem Mangel an Informationen für die Problemlösung enthalten. Durch die konkrete Formulierung des Deformationsgesetzes und die begrenzte Anzahl von Messpunkten stellt die Zielfunktion ein deterministisches Modell dar, das die Realität in einem idealisierten Sinn anhand ausgewählter Informationen beschreibt. Das physikalisch-mathematische Materialmodell kann inakkurat sein (Vernachlässigung wichtiger Effekte, gegenseitige Abhängigkeiten der Materialparameter). Die Messdaten sind mit Fehlern (Rauschen, Streuen) behaftet und möglicherweise unvollständig (nicht alle Anwendungsbereiche des Materialmodells werden erfasst).

Durch Auswertung zusätzlicher experimenteller Informationen und die Kopplung verschiedener Identifikationsstrategien konnte die Zuverlässigkeit des Optimierungsergebnisses wesentlich verbessert werden. So wurde beispielsweise zur Bearbeitung des Problems der deutlichen Abhängigkeit der Optimierungslösung von den Startwerten der Materialparameter ein Verfahren erfolgreich untersucht, das eine Ermittlung dieser Anfangswerte mit dem oben erwähnten Algorithmus der lokalen Integration des Deformationsgesetzes in ausgewählten Materialpunkten mit einem Teil der Messwerte als Belastung beinhaltet. Mit dieser Startlösung wurde eine Konvergenzverbesserung für das zuverlässigere Verfahren der Parameteridentifikation aus der Lösung eines Feldproblems erreicht.

Die Berücksichtigung von geometrischen und physikalischen Nichtlinearitäten für elastisch-plastisches Materialverhalten ist von großer Praxisrelevanz (z. B. Umformtechnik) und bildet gleichzeitig die Grundlagen für eine methodische Übertragbarkeit auf andere Materialklassen (Kunststoffe, Gummi) und spezielle festigkeitsrelevante Phänomene (z. B. Schädigung). Hauptaufgabe für die Fortführung der Untersuchungen im aktuellen Berichtszeitraum war daher die Entwicklung und rechentechnische Realisierung analoger Verfahren zur numerischen Simulation elastisch-plastischen Materialverhaltens und der Parameteridentifikation bei Berücksichtigung großer Verzerrungen.

Dabei ergaben sich neue Anforderungen an die Methoden zur Materialparameteridentifikation (insbesondere im Zusammenhang mit der semianalytischen Sensitivitätsanalyse), deren Untersuchung auch international erst von wenigen Forschergruppen begonnen wurde (siehe z. B. ([mahn97],[mahn99],[mahn00]) und dort oftmals auf Spezialfälle beschränkt ist. Im Rahmen der Arbeiten am Teilprojekt wurde eine allgemeine Methodik für verschiedene Materialmodelle und unbeschränkt experimentell erfassbare Messdaten angestrebt.

Im Rahmen der Materialtheorie wurde eine Neubewertung der Materialmodelle und geeigneter Diskretisierungsverfahren im Zusammenhang mit der multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten vorgenommen und rechentechnisch realisiert. Die Lösung des nichtlinearen Randwertproblems erfolgt analog der Vorgehensweise bei kleinen Verzerrungen. Linearisierungstechniken für das lokale Anfangswertproblem konnten aus den bisherigen Integrationsstrategien für kleine Verzerrungen abgeleitet werden. In der Folge wurden phänomenologische Deformationsgesetze entwickelt und über eine universelle Materialschnittstelle in das Programmsystem implementiert. Schwerpunkte stellten dabei insbesondere die Ermittlung der konsistenten Materialtangente und der Beziehungen für die semianalytische Sensitivitätsanalyse bei Berücksichtigung geometrischer Nichtlinearitäten dar. Der universelle Materialteil gestattet die Implementierung verschiedener Zugänge zur Beschreibung spezieller Materialphänomene (z. B. additive Zerlegung des Lagrangeschen Verzerrungstensors, multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten und zusätzliche Substrukturtechnik zur Erfassung plastischer Anisotropien).

2.3.2 Teilaufgabe Schädigungsmechanik

Der erfolgreiche Einsatz der Schädigungsmechanik erfordert die Beherrschung der folgenden Problemkreise:

- die zahlreichen Parameter des Schädigungsmodells müssen aus Verformungs- und Bruchexperimenten ermittelt werden,
- für das extrem nichtlineare und lokal instabile Verhalten müssen geeignete und zuverlässige Algorithmen entwickelt werden.

Systematische Untersuchungen zu numerischen Lösungsalgorithmen in der Schädigungsmechanik wurden bisher kaum durchgeführt. Ein Vergleich von Ergebnissen zur Beschreibung duktiler Schädigungsprozesse unter Nutzung der vorgestellten Modelle ist bisher aus der Literatur nicht bekannt. Lediglich im Rahmen der European Structural Integrity Society wurden numerische Vergleichsberechnungen (sog. *Round Robins*) durchgeführt, die hauptsächlich die Verifikation von verschiedenen FE-Codes an einfachen Zugproben bei gegebenen Modellparametern zum Ziel hatten (RT in [mudr93], GTN in [bro95a]). Insbesondere fehlen weiterführende Analysen zur Simulation des duktilen Risswachstums.

Mit der Erweiterung des Programmsystems SPC-PMEP auf dreidimensionale Aufgaben mit endlichen elastisch-plastischen Verzerrungen war es sinnvoll, auch die unterschiedlichen Versagensmechanismen in die konstitutiven Beziehungen einzuschließen. Im Berichtszeitraum wurden zunächst Schädigungsmodelle für duktile Werkstoffe programmtechnisch realisiert. Daraus ergaben sich Fragen nach konstitutiven Beziehungen, die in der Lage sind, die makroskopische Entfestigung infolge mikrostruktureller Schädigungsprozesse wiederzugeben, sowie nach dem zu verwendenden Versagenskriterium. Die Weiterentwicklungen des mikromechanischen Modells von Gurson haben sich in der Literatur als die Ansätze mit der höchsten praktischen Relevanz durchgesetzt, so dass sich die Autoren zunächst für die Implementierung des **G**urson-**T**vergaard-**N**eedleman-Modells entschieden haben.
Die numerische Integration des Materialmodells ist außerordentlich schwierig und weiterhin Gegenstand wissenschaftlicher Arbeiten, da infolge überkritisch geschädigter und somit eliminierter Elemente die Effizienz, Genauigkeit und insbesondere die Stabilität des Lösungsverfahrens gefährdet sind. Relativ häufig werden explizite Algorithmen (z.B. Euler-Vorwärts-Algorithmus) angewendet, deren Genauigkeit und Stabilität allerdings nur bei extrem kleinen Inkrementen gewährleistet sind. Im Programmsystem SPC-PMHP werden die Materialgleichungen effektiv mit impliziten Verfahren integriert, so dass dieses Verfahren auch für die Integration der schädigungsmechanischen Beziehungen angewandt wird.
Da sich das Materialmodell zur Beschreibung des Einflusses von Schädigungsprozessen auf den elastisch–plastischen Deformationsvorgang im Rahmen einer assoziierten Fliesstheorie behandeln lässt, besitzt es konsequenterweise auch die gleiche Struktur, wie sie bisher zur Definition der Materialschnittstelle vorausgesetzt wurde. So ist gewährleistet, dass sich die an dieser Stelle erforderlichen algorithmischen Entwicklungen und deren programmtechnische Realisierung auch in den Untersuchungen zur Parameteridentifikation niederschlagen.

2.3.3 Teilaufgabe Netzadaption

Bei Anwendung adaptiver Algorithmen wird mit Hilfe von Informationen, die aus einer vorhergehenden Näherungslösung abgeleitet werden, ein neues Finite–Element–Netz konstruiert. Aus der Literatur sind dazu im wesentlichen drei Strategien bekannt: Neuvernetzung unter Ausnutzung der gewonnenen lokalen Informationen ([simp94]), Teilung der Elemente des vorhandenen Netzes ([korn90]) und Knotenverschiebung (r–Version der FEM).

Die Verfahren zur Bestimmung des Fehlers lassen sich grundsätzlich unterteilen in

1. residuale Verfahren

   Residuale Fehlerschätzer sind inzwischen für kleine elastoplastische Verzerrungen unter Voraussetzung der Gültigkeit der Deformationstheorie ([john92]) bzw. der Fließtheorie ([rann97, rann98, stei97]) unter Beschränkung auf einfache Materialmodelle und für große elastische Verzerrungen [brin98] bekannt.

2. heuristische Verfahren

   Unter den heuristischen Methoden findet die „Superconvergent Patch Recovery Method“ ([zien87, zien92]) besondere Beachtung. Wenngleich es sich hier auch nicht um einen wirklichen Fehlerschätzer handelt, besticht diese Methode durch ihre relativ einfache Implementierbarkeit.

Im Rahmen der Teilprojekte A1/A3 wurden in den vergangenen Berichtszeiträumen programmtechnische Realisierungen für H^1 Residuenschätzer und L_2 Residuenfehlerschätzer für die 3D–Poisson–Gleichung implementiert. Innerhalb des gegenwärtigen Berichtszeitraumes konnten diese Techniken durch das Teilprojekt A3 in ihrer Anwendung auf Probleme der ebenen linearen Elastizität erweitert werden. Da im Teilprojekt D1 keine eigenständigen Entwicklungen zur Fehlerschätzung vorgesehen waren, stand in erster Linie die Frage, ob die Komplexität der Spannungs–Verzerrungs–Beziehungen einer assoziierten Fliesstheorie, wie sie in SPC–PMHP behandelt wird, eine Fehlerschätzung erlaubt, oder ob nicht letztlich doch nur heuristische Netzverfeinerungskriterien realisierbar sind. Interessanterweise hat eine genauere Analyse gezeigt, dass der in A3 verwirklichte residuale Schätzer universell für alle statischen Probleme der Festkörpermechanik ist.

Der Vorteil der mikromechanischen Modelle besteht darin, dass sich das lokale Werkstoffversagen infolge der Deformationsgeschichte als Lösung einstellt. Das erfordert bei der FE-Behandlung eine adäquate, von der Schädigungsentwicklung abhängige, sich ändernde Vernetzung. Zur Beschreibung der Schädigungsentwicklung dient das **GTN**-Modell. Es ist eine geeignete adaptive Vernetzungsstrategie notwendig, die ein hinreichend feines Netz erzeugt, das sich in Abhängigkeit vom Lösungsverhalten mit der Schädigungszone (Rissspitze) bewegt. Da Hohlraumentstehung und -wachstum die eigentlichen Ursachen der Schädigung darstellen, ist es sinnvoll, schädigungsmechanische Feldgrößen, z.B. den Hohlraumvolumenanteil, als zusätzlichen Steuerparameter für die Netzverfeinerung anzuwenden.

Literaturverzeichnis

[berg92] Bergander, H., Kreißig, R., Gerlach, J., Knauer, U., Standard formulation of elasto-plastic deformation laws, *Acta Mechanica*, **91**, 157-178 (1992)

[besd91] Besdo, D., Müller, M., The influence of texture development on the plastic behaviour of polycristals, in: *Finite Inelastic Deformations – Theory and Applications*, D. Besdo, E. Stein (Eds.), IUTAM-Symp. Hannover 1991, Springer, Berlin, 135-144 (1991)

[bisc93] Bischoff, D., Mahnken, R., Stein, E., *Identifikation von Materialparametern mit Finite-Element Methoden*, Arbeitsbericht SFB 319 für 1991-93, TU Braunschweig (1993)

[bohn94] Bohnsack, E., *Semesterbericht Graduiertenkolleg "Kontinuumsmechanik inelastischer Festkörper"*, TU Dresden und TU Chemnitz-Zwickau (1994)

[boh97a] Bohnsack, E., Continuous Field Approximation of Experimentally Given Data by Finite Elements, *Comp. & Struct.*, **63**, 1195-1204 (1997)

[boh97b] Bohnsack, E., *Zur Identifikation von Verfestigungsparametern elastisch-plastischer Stoffgesetze an inhomogen verformten Proben*, Diss., TU Chemnitz-Zwickau, Institut für Mechanik, Bericht 1/97 (1997)

[brin98] Brink, U., Stein, E., A–posteriory error estimation in large–strain elasticity using equilibrated local Neumann problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (1998), to appear

[bro95a] Brocks, W., *Numerical round robin on micromechanical models*, European Structural Integrity Society ESIS, Task Group 8, IWM-Bericht T8 (1995)

[dahl93] Dahl, W., Kopp, R., Pawelski, O., Pankert, R., *Umformtechnik: Plastomechanik und Werkstoffkunde*, Stahleisen, Düsseldorf und Springer, Berlin (1993)

[dem93] Demmerle, S., Boehler, J.P., Optimal design of biaxial tensile cruciform specimens, *J. Mech. Phys. Solids*, **41**, No. 1, 143-181 (1993)

[dudd93] Duddeck, H., Ahrens, H. et al., *Berechnung metallischer Strukturen mit zeitabhängigen Stoffgesetzen*, Arbeitsbericht SFB 319 für 1991-93, TU Braunschweig (1993)

[gerl89] Gerlach, J., *Eignung verschiedener Verfestigungsansätze zur numerischen Simulation des plastischen Verhaltens von Blechen*, Diss., TU Karl-Marx-Stadt (1989)

[goe97a] Görke, U.-J., Kretzschmar, S., Kreißig, R., Analysis of inhomogeneous displacement fields for the identification of parameters for elasto-plastic deformation laws, in: *Material Identification Using Mixed Numerical Experimental Methods*, Proceedings of the EUROMECH 357 Colloquium, H. Sol, C.W.J. Oomens (Eds.), Kluwer Academic Publishers, 61-70 (1997)

[grew98] Grewolls, G., *Numerische Untersuchungen zur anisotropen plastischen Verfestigung unter besonderer Berücksichtigung der Verhältnisse in gewalzten Blechen*, Diss., TU Chemnitz, Institut für Mechanik, Bericht 1/98 (1998)

[john92] Johnson, C., Hansbo, P., Adaptive finite element methods in computational mechanics, *Comput. Methods Appl. Mech. and Engrg*, **101**, 143–181 (1992)

[korn90] Kornhuber,R., Roitzsch, R., On adaptive grid refinement in the presence of internal and boundary layers, *IMPACT of Computing in Science and Engineering*, **2**, 40–72 (1990)

[krei86] Kreißig, R., Schindler, J., Some experimental results on yield condition in plane stress state, *Acta Mechanica*, **65**, 169-179 (1986)

[kre93a] Kreißig, R., Naumann, J., *Identifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze mit Hilfe des Moiré-Verfahrens*, Arbeitsbericht SFB 319 für 1992-93, TU Braunschweig (1993)

[kre93b] Kreißig, R., Naumann, J., *Identifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze durch Auswertung inhomogener Spannungs- und Deformationszustände*, Förderungsanträge SFB 319 für 1994-96, TU Braunschweig (1993)

[krei97] Kreißig, R., Naumann, J., Benedix, U., Bormann, P., Grewolls, G., Kretzschmar, S., *Parameter Identification of Inelastic Deformation Laws Analyzing Inhomogeneous Stress-Strain States*, Abschlußbericht SFB 319 für 1994-96, TU Braunschweig (1997)

[kre98b] Kreißig, R., Meyer, A., Michael, D., Görke, U.-J., *Effiziente parallele Algorithmen zur Simulation des Deformationsverhaltens von Bauteilen aus elastisch-plastischen Materialien*, Arbeitsbericht SFB 393 für 1996-98, TU Chemnitz (1998)

[kret98] Kretzschmar, S., *Parameteridentifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze durch Anpassung numerischer an experimentell ermittelte Verschiebungsfelder*, Diss., TU Chemnitz, Institut für Mechanik, Bericht 3/98 (1998)

[mahn93] Mahnken, R., Stein, E., *Identification of parameters for visco-plastic models via finite-element methods and gradient methods*, IBNM Bericht 93/5, Universität Hannover (1993)

[mahn97] Mahnken, R., Stein, E., Parameter identification for finite deformation elasto-plasticity in principal directions, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* bf 147, 17-39 (1997)

[mahn99] Mahnken, R., Kuhl, E., Parameter identification of gradient enhanced damage models with the finite element method, *Eur. J. Mech. A/Solids* bf 18, 819-835 (1999)

[mahn00] Mahnken, R., Aspects on the Finite-Element Implementation of the Gurson Model including Parameter Identification, *Int. J. Plast.* **15(11)**, 1111-1137 (1999)

[mey97] Meyer, A., Michael, D., A Modern Approach to the Solution of Problems of Classic Elastoplasticity on Parallel Computers, *Numerical Linear Algebra with Applications*, **4**, No. 3, 205-221 (1997)

[mich95] Michael, D., Meyer, A., *Some remarks on the simulation of elasto-plastic problems on parallel computers*, Preprint-Reihe der Chemnitzer DFG-Forschergruppe "Scientific Parallel Computing", SPC 95-13, Fakultät für Mathematik der TU Chemnitz-Zwickau (1995)

[mich97] Michael, D., *Einige Bemerkungen zum Einsatz paralleler Auflösungsstrategien für FE–Gleichungssysteme bei der numerischen Simulation geometrisch und physikalisch nichtlinearer Probleme in der Festkörpermechanik*, Chemnitzer FEM–Symposium, 1.–3. September 1997, Chemnitz (1997)

[mudr93] Mudry, F., *Round Robin on local criteria*, ESIS Task Group Elastic-Plastic Fracture, Brussels (1993)

[pei93a] Peil, U., Kuck, D., *Stahlkonstruktionen unter zyklischer Belastung*, Arbeitsbericht SFB 319 für 1991-93, TU Braunschweig (1993)

[pei93b] Peil, U., Reinighaus, M., *Baustahl unter mehrachsiger zyklischer Belastung*, Arbeitsbericht SFB 319 für 1991-93, TU Braunschweig (1993)

[rann97] Rannacher, R., Suttmeier, F.-T., *A posteriori error control in finite element methods via duality techniques: Application to perfect plasticity*, Technical report, Preprints of SFB359, Universität Heidelberg (1997)

[rann98] Rannacher, R., Suttmeier, F.-T., *A Posteriory Error Control and Mesh Adaption for FE models in Elasticity and Elasto–Plasticity*, Preprint, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Heidelberg (1998)

[sall88] Sallat, G., *Theoretische und experimentelle Untersuchungen zum Fließverhalten von Blechen im zweiachsigen Hauptspannungszustand*, Diss., TH Karl-Marx-Stadt (1988)

[simp94] Simpson, R.B., Anisotropic mesh transformation and optimal error control, *Applied Numerical Mathematics*, **14**, 183–198 (1994)

[stec85] Steck, E., A stochastic model for the high-temperature plasticity of metals, *Int. J. of Plasticity*, **1**, 243-258 (1985)

[stei94] Stein, E., *Parameteridentifikation mit Finite–Element Methoden*, Förderungsanträge SFB 319 für 1994-96, TU Braunschweig (1993)

[stei97] Stein, E., Barthold, F.–J., Ohnimus, S., Schmidt, M., Adaptive finite elements in elastoplasticity with mechanical error indicators and neumann–type estimators, In *New Advances in Adaptive FEM* (1997)

[zien87] Zienkiewicz, O.C., Zhu, J.Z., A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **24**, 337–357 (1987)

[zien92] Zienkiewicz, O.C., Zhu, J.Z., The Superconvergent Patch Recovery and Adaptive Finite Element Refinement, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, **101**, 207–224 (1992)

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe FEM–Entwicklung/Parameteridentifikation

Da Materialparameter in der Regel nicht direkt messbar sind, ist zu ihrer Identifikation die Lösung eines inversen Problems notwendig, das zweckmäßig durch eine Optimierungsaufgabe approximiert werden kann. Eine ausführliche Darstellung der Methodik und der Algorithmen zur Materialparameteridentifikation durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder auf der Basis nichtlinearer Optmierungsverfahren für kleine elastisch-plastische Verzerrungen, die an der TU Chemnitz entwickelt und numerisch realisiert wurden, erfolgte im letzten Arbeitsbericht für das Teilprojekt D1 und der dort angegebenen Literatur.

Wegen der physikalisch und mathematisch idealisierten Natur der Materialmodelle und der Unvollständigkeit realer Messwerte, die zudem noch fehlerbehaftet sind, ist das Identifikationsproblem für die Materialparameter schlecht gestellt. Das findet seinen Ausdruck in der Mehrdeutigkeit der Lösung, die u. a. in starkem Maße von der Auswahl der Startwerte abhängt. Auf weitere Einflussfaktoren wurde bereits in [goe97] detailliert eingegangen. An dieser Stelle sollen lediglich die Ergebnisse einiger Untersuchungen zur Effizienzsteigerung der Materialparameteridentifikation durch Kopplung der oben erwähnten Methode der lokalen Integration des Deformationsgesetzes in ausgewählten materiellen Punkten mit der Lösung des Feldproblems unter Nutzung der FEM im Falle kleiner elastisch-plastischer Verzerrungen ergänzt werden.

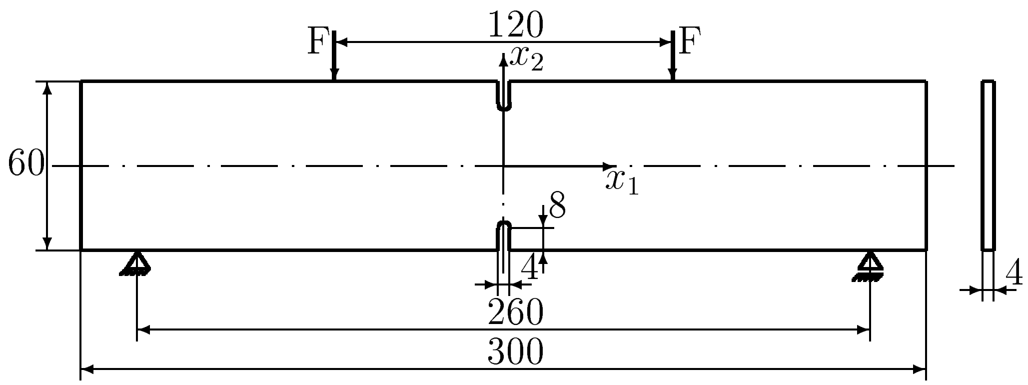


Bild 2: Vier-Punkt-Biegung. Geometrie der gekerbten Probe und Randbedingungen.

Reale Messwerte wurden am Lehrstuhl für Experimentelle Mechanik der TU Chemnitz an gekerbten Vier-Punkt-Biegeproben aus dem austenitischen Stahl X 6 Cr Ni Ti 18-10 gewonnen. Die Geometrie einer Probe ist in Bild 2 dargestellt.

Das mechanische Verhalten von Bauteilen und Konstruktionen aus elastisch-plastischem Material mit isotroper und kinematischer Verfestigung soll bei kleinen Verzerrungen durch folgendes Materialmodell charakterisiert werden:

- Beziehung zwischen den Tensoren der Spannungsgeschwindigkeit $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ und der Verzerrungsgeschwindigkeit $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ mit der Elastizitätsmatrix $\boldsymbol{C}^{el}$, dem plastischen Multiplikator λ und der Fließbedingung F

$$\left(\boldsymbol{C}^{el}\right)^{-1} \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{\sigma}} \;+\; \lambda \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \;-\; \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \;=\; \boldsymbol{0}\,. \tag{4.1}$$

- Evolutionsgleichungen für die inneren Variablen $\boldsymbol{\kappa}$ (Tensorgrößen zur Beschreibung des Verfestigungsverhaltens)

$$\dot{\boldsymbol{\kappa}} \;-\; \lambda\, \boldsymbol{q}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{p}) \;=\; \boldsymbol{0}\,. \tag{4.2}$$

- Fließbedingung

$$F(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{p}) \;=\; 0\,. \tag{4.3}$$

Im Fall großer Deformationen bedürfen die obigen Materialgleichungen jedoch einer Verallgemeinerung. Basierend auf einer geometrischen Beschreibung der Elementarmechanismen der plastischen Deformation und unter zusätzlicher Voraussetzung der Gültigkeit der rationalen Thermodynamik und des Prinzips der maximalen Dissipation konnte in [mich01] eine assoziierte Fliesstheorie defektbehafteter Kontinua entwickelt werden. Im Rahmen des gewählten Zuganges ist es so möglich, Anhaltspunkte für die Struktur der spezifischen freien Energie ψ aus der geometrischen Beschreibung der Elementarmechanismen der plastischen Deformation zu erhalten und letztlich zu zeigen, dass, formuliert in der Momentankonfiguration, die Gleichungen

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_v \bar{\boldsymbol{b}}^{e} &= \; 2\lambda \frac{\partial F}{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}}; \\
\mathcal{L}_v \boldsymbol{\kappa} &= -\lambda \boldsymbol{q}, \;\; \boldsymbol{q} := \frac{\partial \boldsymbol{\kappa}}{\partial \boldsymbol{\alpha}} : \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\kappa}}; \\
& \lambda \geq 0, \quad \lambda F(\overset{*}{\boldsymbol{\tau}}, \boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{p}) = 0, \quad F(\overset{*}{\boldsymbol{\tau}}, \boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{p}) \;\; konvex
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\tau} &:= \; 2\rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{g}} \\
\overset{*}{\boldsymbol{\tau}} &:= -2\rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \bar{\boldsymbol{b}}^{e}} \\
\boldsymbol{\kappa} &:= \; \rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\alpha}}
\end{aligned} \tag{4.4}$$

$$\psi := \psi_e(\boldsymbol{g}, \bar{\boldsymbol{b}}^{e}, \boldsymbol{p}) + \psi_h(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{p})$$

das Materialverhalten bei finiten elastisch–plastischen Deformationen beschreiben (mit dem inversen linken elastischen Cauchy–Green Tensor $\overline{\boldsymbol{b}}^{e}$, einem zu $\overline{\boldsymbol{b}}^{e}$ arbeitskonjugierten Spannungstensor $\overset{*}{\boldsymbol{\tau}}$, dem Kirchhoffschen Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$, der Dichte des undeformierten Körpers ρ_0, der Raummetrik $\mathbf{g}$ und einer zu $\boldsymbol{\kappa}$ arbeitskonjugierten internen Variablen $\boldsymbol{\alpha}$). Bezüglich detaillierterer Informationen sei auf [mich01] verwiesen. Im Programm SPC-PMHP sind ausschließlich Materialien behandelbar, deren Verhalten sich durch obigen Satz von Differenzial–Algebraischen Gleichungen beschreiben lässt.

Entsprechend den Annahmen der Theorie des skleronomen plastischen Fließens bei [krei92] wird eine quadratische Fließfunktion vom *von Mises*-Typ in den Koordinaten der Deviatorspannung $\overset{D}{\sigma}_{ij}$ und den deviatorischen Rückspannungskoordinaten α_{ij} angenommen:

$$F \;=\; \frac{3}{2}\left(\overset{D}{\sigma}_{ij} - \alpha_{ij}\right)\left(\overset{D}{\sigma}_{ij} - \alpha_{ij}\right) \;-\; \sigma_F^2 \;=\; 0\,. \tag{4.5}$$

Für die Darstellung der Fließkurve als eine Funktion der plastischen Vergleichsdehnung ε_v^{pl} fand das modifizierte Potenzgesetz

$$\sigma_F \;=\; \sigma_{Fo} \;+\; a_1\left[\left(\varepsilon_v^{pl} + a_2\right)^{a_3} \;-\; a_2^{a_3}\right] \tag{4.6}$$

mit der Fließspannung σ_F Verwendung. Die Entwicklung der Rückspannungen wurde nach dem kinematischen Verfestigungsansatz von *Prager* modelliert:

$$\dot{\alpha}_{ij} \;=\; b\,\dot{\varepsilon}_{ij}^{pl}\,. \tag{4.7}$$

Wegen der speziellen Probengestaltung und der applizierten Randbedingungen kann auf der Verbindungslinie zwischen den Kerbgründen (dem *Ligament*) der Biegeprobe nach Bild 2 ein Hauptachsenzustand ermittelt werden. Unmittelbar in den Kerbgründen wird ein einachsiger Spannungszustand angenommen. Werden die gemessenen Verzerrungen als Belastung verwendet, können die Spannungen und internen Variablen mit Hilfe der lokalen Integration des Deformationsgesetzes in den materiellen Punkten des Ligaments ohne Nutzung einer globalen Ortsdiskretisierung berechnet werden. In diesem Fall werden die Spannungen in den Kerbgründen und globale Parameter wie das Biegemoment M und die Normalkraft N als Vergleichsgrößen angenommen. Die entsprechende Zielfunktion kann wie folgt formuliert werden:

$$\Phi(\boldsymbol{p}) \;=\; \frac{1}{2}\Bigg[\gamma_1\sum_{i=1}^{n_L}(\hat{\sigma}_M(\boldsymbol{p}) - \tilde{\sigma}_M)^2 + \gamma_2\sum_{i=1}^{n_L}(\hat{\sigma}_N(\boldsymbol{p}) - \tilde{\sigma}_N)^2 \tag{4.8}$$

$$+\gamma_3\sum_{i=1}^{n_L}(\hat{\sigma}_{11}^{ln}(\boldsymbol{p}) - \tilde{\sigma}_{11}^{ln})^2 + \gamma_4\sum_{i=1}^{n_L}(\hat{\sigma}_{11}^{un}(\boldsymbol{p}) - \tilde{\sigma}_{11}^{un})^2\Bigg]\,. \tag{4.9}$$

Dabei stellen n_L die Anzahl der Lastschritte, $\gamma_1\,\ldots\,\gamma_4$ Wichtungsfaktoren und σ_{11}^{un} bzw. σ_{11}^{ln} die Spannungen im oberen und unteren Kerbgrund dar. Zur Behandlung von Größen mit analoger physikalischer Bedeutung wurden das Biegemoment und die Normalkraft durch die normierten (bezogenen) Spannungsvariablen

$\sigma_M = 4M/bh^2$ und $\sigma_N = N/bh$ ausgedrückt. Das Biegemoment und die Normalkraft wurden durch numerische Integration der Spannungen über das Ligament berechnet. Die mit einem Dach gekennzeichneten Größen stellen die berechneten Werte dar, die mit einer Tilde versehenen zugehörige Messwerte.

Da für beliebige Materialien und beliebige Lastgeschichten lediglich Verschiebungsfelder messtechnisch erfasst werden können, werden die Verschiebungskoordianten in $x-$ und $y-$Richtung als Vergleichsgrößen bei der Nutzung der FEM als Verfahren zur Lösung des gesamten Feldproblems angenommen. Die zugehörige Zielfunktion ergibt sich im Sinne einer Quadratmittelapproximation in folgender Form:

$$\begin{aligned}\Phi(\boldsymbol{p}) \;=\; \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n_L}\sum_{j=1}^{n_T}\Bigg[&\Big(\{\hat{u}_x(\boldsymbol{p})\}_{ij} - \{\tilde{u}_x\}_{ij}\Big)^2 \\ &+ \Big(\{\hat{u}_y(\boldsymbol{p})\}_{ij} - \{\tilde{u}_y\}_{ij}\Big)^2\Bigg]\,, \end{aligned} \tag{4.10}$$

mit der Anzahl der Lastschritte n_L und der Anzahl der materiellen Punkte n_T, in denen die gemessenen und berechneten Verschiebungskoordinaten verglichen werden.

Die Kombination beider auf der Analyse inhomogener Verschiebungsfelder beruhender Methoden zur Materialparameteridentifikation wurde zunächst an synthetischen Messwerten erprobt. Diese Messwerte waren das Ergebnis einer FEM-Berechnung mit einer vorgegebenen Belastungsgeschichte, bestehend aus Belastungs-, Entlastungs- und Wiederbelastungsschritten sowie den vorgegebenen Materialparametern $\sigma_{Fo} = 220\,\mathrm{MPa}$, $\mathrm{a}_1 = 600\,\mathrm{MPa}$, $\mathrm{a}_3 = 0.25$ and $\mathrm{b} = 750\,\mathrm{MPa}$. Wie bereits erwähnt, hängen Materialparameter, die mit Hilfe von Gradientenverfahren identifiziert werden, in starkem Maße von ihren Startwerten ab, was zur Ermittlung unterschiedlicher lokaler Minima führen kann. Da es in der Praxis bei der Untersuchung neuer Materialien schwierig ist, geeignete Startwerte für die Materialparameter zu definieren, wurde diese Situation im Fall der synthetischen Messwerte simuliert. Dabei zeigte es sich, dass beim Start mit einem beliebigen Parametersatz, weit entfernt von der optimalen Lösung, beide Identifikationsverfahren lediglich lokale Minima ergaben, die wegen der unterschiedlichen Topologie der Zielfunktionen ungleich waren. Die Ergebnisse sind in Tabelle 1 zusammengefasst.

Wegen der einfacheren Topologie der Zielfunktion, die weniger lokale Minima erwarten lässt, ist die Lösung aus der lokalen Integration des Deformationsgesetzes näher an der zu erwartenden optimalen mit einer kleineren mittleren Abweichung der Verschiebungen. Es zeigte sich jedoch, dass sie wegen des geringen Informationsangebotes auch von anderen Startwerten aus kaum verbessert werden kann. Werden hingegen die optimierten Werte der lokalen Integration des Deformationsgesetzes als Startwerte für die Lösung des gesamten Feldproblems genutzt, konnten die optimalen Parameter, somit das globale Minimum, ermittelt werden (siehe Tabelle 1). Die Kombination beider Identifikationsstrategien verbessert das Ergebnis des Optimierungsprozesses und ist effektiver (insgesamt geringere Rechenzeit) als die alleinige Nutzung des Feldverfahrens mit Hilfe der FEM.

Tabelle 1: Ergebnisse der Materialparameteridentifikation nach Analyse synthetischer Messwerte mit $a_2 = 10^{-6}$ und einer Anfangsorthotropie von α^o_{11} =-16 MPa, α^o_{22} =-6 MPa.

Parameter	Start-werte	Optimierte Werte	
		Lokale Integr.	Feldproblem
σ_{Fo} in MPa	300,0	241,00	295,58
b in MPa	200,0	504,00	412,89
a_1 in MPa	2000,0	714,00	1841,08
a_3	0,8	0,34	0,66
Rechenzeit	–	15 min	300 min
Mittlere Abweich. der Versch. in mm	0,0215	0,0009	0,00119
σ_{Fo} in MPa	241,00	–	219,92
b in MPa	504,00	–	750,21
a_1 in MPa	714,00	–	599,88
a_3	0,34	–	0,25
Rechenzeit	–	–	120 min
Mittlere Abweich. der Versch. in mm	0,0009	–	$8{,}74\cdot10^{-7}$

Wie aus Tabelle 2 ersichtlich wird, konnten die Erfahrungen der Untersuchung synthetischer Messwerte bei der Analyse realer Biegeexperimente mit Proben aus der X 6 Cr Ni Ti 18-10 Stahllegierung bestätigt werden.

Tabelle 2: Ergebnisse der Materialparameteridentifikation nach Analyse realer Messwerte für die X 6 Cr Ni Ti 18-10 Stahllegierung mit $a_2 = 10^{-6}$, σ_{Fo} =220 Mpa und einer Anfangsorthotropie von α^o_{11} =-8.3 MPa, α^o_{22} =-3.2 MPa.

Parameter	Start-werte	Optimierte Werte	
		Lokale Integr.	Feldproblem
b in MPa	550,0	1956,00	588,64
a_1 in MPa	440,0	372,00	429,30
a_3	0,1	0,23	0,23
Rechenzeit	–	5 min	135 min
Mittlere Abweich. der Versch. in mm	0,0447	0,0185	0,0258
b in MPa	1956,00	–	2793,31
a_1 in MPa	372,00	–	640,53
a_3	0,23	–	0,43
Rechenzeit	–	–	105 min
Mittlere Abweich. der Versch. in mm	0,0185	–	0,0139

Die Entwicklung eines allgemeinen, thermodynamisch konsistenten Deformationsgesetzes für große elastisch-plastische Verzerrungen im Rahmen der Untersuchungen zum Teilprojekt D1 ist detailliert in den Arbeiten [buch98, bu01a, go00a, go00b, goe01, mich98] dargestellt. Im Folgenden wird seine numerische Aufbereitung zur Lösung des lokalen Anfangswertproblems kurz am Beispiel des klassischen Falls ohne Berücksichtigung einer Substruktur skizziert (gegenwärtig ist die Materialparameteridentifikation bei großen Verzerrungen zunächst mit diesem Modell realisiert). Entsprechende Beziehungen mit Berücksichtigung einer Substruktur werden in [bu01b] ausführlich abgeleitet.

Als Fließbedingung wird ein für große Deformationen modifizierter Ansatz nach Baltov-Sawczuk [bal65] verwendet, mit dem es möglich ist, sowohl isotrope und kinematische als auch Distorsionsverfestigung zu berücksichtigen.

$$F = \left(\grave{\boldsymbol{T}} - \grave{\boldsymbol{\alpha}}\right) \cdot\cdot \underset{\mathbf{4}}{\boldsymbol{K}} \cdot\cdot \left(\grave{\boldsymbol{T}} - \grave{\boldsymbol{\alpha}}\right) - \frac{2}{3} T_F^2 = 0 \tag{4.11}$$

$$\text{mit} \quad \grave{\boldsymbol{T}} = \boldsymbol{T} - \frac{1}{3} (\boldsymbol{T} \cdot\cdot \boldsymbol{C}) \boldsymbol{B} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{B} = (\boldsymbol{C})^{-1} \, . \tag{4.12}$$

Dabei stellen $\boldsymbol{T}$ den kontravarianten, zweistufigen Tensor der 2. Piola-Kirchhoff-Spannungen, $\boldsymbol{\alpha}$ den Tensor der Rückspannungen und $\boldsymbol{C}$ den kovarianten, zweistufigen Rechts-Cauchy-Green Tensor dar. Auf eine spezielle Kennzeichnung ko- und kontravarianter Größen wird hier verzichtet, da eine Verwechslung nicht möglich ist. Für die Materialparameteridentifikation bei großen Verzerrungen wurde eine Total-Lagrangesche Vorgehensweise bevorzugt. Aus diesem Grunde erfolgt eine materielle (Lagrangesche) Darstellung des Deformationsgesetzes und seiner Zeitintegration. Die Fließbedingung wird in der Momentankonfiguration formuliert und anschließend in die Ausgangskonfiguration zurückgezogen. Der vierstufige Tensor $\underset{\mathbf{4}}{\boldsymbol{K}}$ dient der Beschreibung von Anfangsanisotropien bzw. einer Distorsionsverfestigung.

Die Auswertung der Kuhn-Tucker-Bedingungen für das Extremwertproblem des Prinzips vom Maximum der plastischen Dissipation liefert das elastisch-plastische Deformationsgesetz in Form eines nichtlinearen Algebro-Differenzialgleichungssystems. Es enthält die folgenden Evolutionsgleichungen für die inneren Variablen (hier die Rückspannungen $\boldsymbol{\alpha}$ und die plastische Bogenlänge E_v^p):

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} + \boldsymbol{Q}_1 (\boldsymbol{T}, \boldsymbol{\alpha}, \lambda) = \mathbf{0} \tag{4.13}$$

$$\dot{E}_v^p + Q_3 (\boldsymbol{T}, \boldsymbol{\alpha}, \lambda) = 0 \tag{4.14}$$

mit den speziellen Ansätzen

$$\boldsymbol{Q}_1 = \lambda \, c \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \tag{4.15}$$

$$Q_3 = -\lambda \sqrt{\frac{2}{3} \boldsymbol{B} \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{T}} \cdot\cdot \boldsymbol{B} \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{T}}} \, . \tag{4.16}$$

Dabei ist zu bemerken, dass die hier gewählte Lagrangesche Darstellungsweise und die oben verwendete Eulersche Formulierung identisches Materialverhalten beschreiben und somit gleichberechtigt sind.

Für die verkürzte Darstellung der weiteren Lösungsschritte wird ein Variablen-Vektor $\boldsymbol{z}$ eingeführt.

$$\boldsymbol{z} = (\boldsymbol{T}, \boldsymbol{\alpha}, E^p_v, \lambda)^T \tag{4.17}$$

Ebenso wird ein Operator $\boldsymbol{G}$ definiert, der die linke Seite des nach der Zeit diskretisierten Algebro-Differenzialgleichungssystems repräsentiert. Gesucht wird letztendlich der Variablen-Vektor

$$\boldsymbol{z}_{n+1} = \left(\boldsymbol{T}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}, E^p_{v_{n+1}}, \lambda_{n+1}\right)^T \tag{4.18}$$

für den Lastschritt $n+1$ als Lösung des nichtlinearen algebraischen Gleichungssystems

$$\boldsymbol{G}_{n+1} = \boldsymbol{G}\left(\boldsymbol{z}_{n+1}\right) = \boldsymbol{0}\ . \tag{4.19}$$

Dabei ist es unerheblich, welches konkrete Verfahren zur Zeitdiskretisierung des Deformationsgesetzes verwendet wurde. Im vorliegenden Fall wurden eine verallgemeinerte Trapezregel als Einschrittverfahren bzw. eine Rückwärtsdifferenzenmethode als Mehrschrittverfahren untersucht.

Die Berechnung von $\boldsymbol{z}_{n+1}$ erfolgt mit Hilfe des Newtonverfahrens

$$\boldsymbol{z}_{n+1}{}^{i+1} = \boldsymbol{z}_{n+1}{}^{i} - \left(\nabla_{\boldsymbol{z}_{n+1}{}^{i}} \boldsymbol{G}\right)^{-1} \boldsymbol{G}_{n+1}{}^{i}\,, \tag{4.20}$$

wobei die konkrete Form der Jakobi-Matrix $(\nabla_{\boldsymbol{z}}\, \boldsymbol{G})$ für den Fall eines Deformationsgesetzes ohne Berücksichtigung einer Substruktur in [goe01] detailliert beschrieben wurde.

Bezüglich der ausführlicheren Darstellung der dort verwendeten Verfahrensweise und der konkreten Beziehungen für das betrachtete Deformationsgesetz sei auf [goe01] und die dort angegebenen Literaturzitate verwiesen.

Deterministische Optimierungsverfahren sind trotz ihres zusätzlichen numerischen Aufwandes zur Ermittlung des Gradienten der Zielfunktion zur Materialparameteridentifikation bei Auswertung inhomogen verformter Proben zu favorisieren. Die Anzahl der Optimierungsschritte ist wesentlich geringer als bei gradientenfreien Verfahren, zudem kann die Konvergenz oder Divergenz des Optimierungsprozesses in der Regel deutlich verfolgt werden.

Gradientenverfahren führen immer in das nächste lokale Minimum der Zielfunktion, vorausgesetzt, das Verfahren konvergiert und strebt keinem Sattelpunkt zu. Die Zielfunktion (3.1) ist eine vieldimensionale Fläche, bei der nicht ausgeschlossen werden kann, dass sie über mehrere Minima verfügt. Grundsätzlich ist es das Ziel einer jeden Optimierung, das globale Minimum zu ermitteln. Mit Gradientenverfahren ist das nicht eindeutig möglich, da sie immer einer einmal gefundenen Abstiegsrichtung folgen, die in das nächstgelegene Minimum führt. Zur Ermittlung des globalen Minimums sind verschiedene Methoden denkbar:

- Verwendung stochastischer Verfahren mit einer sehr großen Anzahl von Versuchen,
- Nutzung von Gradientenverfahren mit unterschiedlichen Startvektoren zur Ermittlung verschiedener Minima,
- Verwendung hybrider Verfahren als Kombination stochastischer und Gradientenverfahren.

Mit den genannten Verfahren ist es möglich, eine diskrete Menge verschiedener Minima zu ermitteln, deren tiefstes als das globale angesehen wird.

Als Vergleichsgrößen für die Materialparameteridentifikation werden in verschiedenen Lastschritten die Verschiebungen U_1, U_2 und U_3 an ausgewählten Punkten der Oberfläche einer geeigneten Probe gemessen. Sie bilden die Grundlage für die Formulierung folgender Zielfunktion:

$$\Phi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_L} \sum_{j=1}^{n_T} \sum_{K=1}^{3} \Big(\{U_K(\boldsymbol{p})\}_{ij} - \big\{\bar{U}_K\big\}_{ij} \Big)^2 \tag{4.21}$$

mit

$U_1,\, U_2\, U_3$ – berechnete Verschiebungsfelder

$\bar{U}_1,\, \bar{U}_2\, \bar{U}_3$ – gemessene Verschiebungsfelder

und

$\boldsymbol{p} = \big(p_1, \ldots, p_{n_p}\big)^T$ – Materialparameter

n_L – Anzahl der Lastschritte
n_T – Anzahl der Messpunkte .

Parameter $\boldsymbol{p}$, welche die Funktion (4.21) minimieren, gelten als Lösung des Optimierungsproblems. Es ist darauf zu achten, dass bei Messung und FE-Berechnung materielle Punkte in den gleichen Orten, gleiche Randbedingungen und gleiche Lastschritte betrachtet werden. Die Berechnung kann aus Gründen der Konvergenz der FE-Lösung auch in kleineren Lastschritten erfolgen, ein Vergleich von Verschiebungen ist jedoch nur auf gleichen Lastniveaus gestattet.

Für die Gradientenverfahren ergibt sich folgendes Iterationsschema zur Ermittlung der Materialparameter $\boldsymbol{p}_{l+1}$ aus der vorhergehenden Lösung $\boldsymbol{p}_l$:

$$\boldsymbol{p}_{l+1} = \boldsymbol{p}_l + \omega\, \boldsymbol{s}_l \tag{4.22}$$

mit der Suchrichtung $\boldsymbol{s}_l$

$$\boldsymbol{s}_l = -\boldsymbol{Q}_l^{-1}\, \boldsymbol{\nabla}\, \Phi_l \tag{4.23}$$

und der Schrittweite ω. Der Gradient der Zielfunktion (4.21) hat folgendes Aussehen:

$$\boldsymbol{\nabla}\, \Phi_l = \sum_{i=1}^{n_L} \sum_{j=1}^{n_T} \sum_{K=1}^{3} \Big(\{U_K(\boldsymbol{p}_l)\}_{ij} - \big\{\bar{U}_K\big\}_{ij} \Big) \frac{d\,\{U_K\}_{ij}}{d\boldsymbol{p}_l}\,. \tag{4.24}$$

Er ist laut (4.24) durch die Struktur der Zielfunktion vorgegeben, die Suchrichtung wird somit maßgeblich durch die Wahl der Matrix $\boldsymbol{Q}_l$ beeinflusst. Ihre konkrete Definition führt zu unterschiedlichen Gradientenverfahren. Im Falle kleiner Verzerrungen hat sich besonders das Verfahren nach Levenberg-Marquardt bewährt ([ben98, ben00, goe97, krei00, lev44, mar63]). Für $\omega = 1$ wird die Suchrichtung $\boldsymbol{s}_l$ so ermittelt, dass das Minimum (4.21) in einem gewissen Vertrauensbereich (trust-region)

$$\|\boldsymbol{s}_l\| \leq \delta \tag{4.25}$$

mit einem vorgegebenen Radius δ gesucht wird ([ben00, boh97]). Die Matrix $\boldsymbol{Q}_l$ ergibt sich aus

$$\boldsymbol{Q}_l = \boldsymbol{H}_{GN} + \mu \boldsymbol{I} \,. \tag{4.26}$$

Hierbei stellt $\boldsymbol{H}_{GN}$ eine modifizierte Hesse-Matrix (Matrix der zweiten Ableitungen der Zielfunktion nach den Materialparametern) dar, die nur Produkte der ersten partiellen Ableitungen enthält, und deren Komponenten $(H_{GN})_{mn}$ sich für das Modell (4.21) wie folgt ergeben:

$$(H_{GN})_{mn} = \sum_{i=1}^{n_L} \sum_{j=1}^{n_T} \sum_{K=1}^{3} \frac{\partial \{U_K(\boldsymbol{p})\}_{ij}}{\partial p_m} \frac{\partial \{U_K(\boldsymbol{p})\}_{ij}}{\partial p_n} \,. \tag{4.27}$$

Der Wert μ wirkt als Dämpfungsparameter und wird so ermittelt, dass die Lösung den vorgegebenen Vertrauensbereich nicht verletzt

$$\mathcal{G}(\mu) = {\boldsymbol{s}_l}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{s}_l - \delta^2 \quad \Rightarrow \quad \mu^{k+1} = \mu^k - \frac{\left(\mathcal{G}(\mu^k) + \delta^2\right) \mathcal{G}(\mu^k)}{\mathcal{G}_{,\mu}|^k \, \delta^2} \tag{4.28}$$

mit

$$\mathcal{G}_{,\mu} = -2{\boldsymbol{s}_l}^{\mathrm{T}} {\boldsymbol{Q}_l}^{-1} \boldsymbol{s}_l \quad \text{und} \quad \mu^o = 0 \,. \tag{4.29}$$

Fern der Lösung ergeben sich große Werte für μ, so dass der Levenberg-Marquardt-Algorithmus dem Gradientenverfahren (Methode des steilsten Abstiegs) ähnelt und eine schnelle globale Konvergenz in den ersten Suchschritten gewährleistet. Im Laufe der Berechnung wird μ verkleinert, so dass der Iterationsprozess in der Nähe der Lösung in das Gauß-Newton-Verfahren mit seiner quadratischen Konvergenz übergeht.

Im Folgenden werden die Grundzüge eines Verfahrens zur semianalytischen Sensitivitätsanalyse vorgestellt, mit dessen Hilfe die für den Gradienten der Zielfunktion benötigten Ableitungen der Verschiebungskomponenten nach den Materialparametern berechnet werden können. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird dabei von der Existenz nur eines Materialparameters p ausgegangen. Das vorgestellte Verfahren ist dann nach der Lösung des direkten Problems komplett auf jeden zu identifizierenden Materialparameter anzuwenden. Es hat den Vorteil, analoge numerische Strukturen zu nutzen, die bereits bei der Lösung des direkten Problems generiert wurden. Außerdem besitzen die benötigten Ableitungen die gleiche

Genauigkeit wie die Lösung des direkten Problems (Knotenverschiebungen). Für weiterführende Darstellungen sei wiederum auf [ben00, boh97, goe01] und darin enthaltene Literaturangaben verwiesen.

Die Herleitung der Beziehungen für die semianalytische Sensitivitätsanalyse bei finiten inelastischen Verzerrungen basiert auf einem Vorschlag von *Mahnken* ([mah97, mah99, mah00]). Wird die Erfüllung des Gleichgewichts zu einem Zeitpunkt t vorausgesetzt, gilt die Darstellung des Prinzips der virtuellen Arbeit:

$$\int_{V_o} [\boldsymbol{T}\ (\boldsymbol{GRAD}\,(\boldsymbol{U}) + \boldsymbol{I})] \cdot\cdot\, \boldsymbol{GRAD}\,(\delta\boldsymbol{U})\ dV_o = \\ = \int_{A_{o1}} \boldsymbol{R}^T\,\delta\boldsymbol{U}\ dA_o + \int_{V_o} \varrho_o\,\boldsymbol{K}^T\,\delta\boldsymbol{U}\ dV_o\,, \tag{4.30}$$

wobei $\boldsymbol{K}$ die im materiellen Punkt angreifenden Volumenkräfte und $\boldsymbol{R}$ die Randkräfte auf der Teiloberfläche A_{o1} des Körpers repräsentieren. Die Herleitung und numerische Realisierung dieser Gleichgewichtsbedingungen im Rahmen der FEM sind in [go00b] im Detail erläutert.

Im folgenden Schritt wird eine implizite Differenziation der Gleichgewichtsbedingung (4.30) nach einem Materialparameter durchgeführt. Da die Oberflächen- und Volumenkräfte weder explizit noch implizit von den Materialparametern abhängen, für den 2. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor $\boldsymbol{T}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{p}), \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{p}), E_v^p(\boldsymbol{p}), \lambda(\boldsymbol{p}), \boldsymbol{p})$ jedoch keine Einschränkungen gelten, folgt mit

$$\frac{d\boldsymbol{T}}{dp} = \frac{\partial \boldsymbol{T}}{\partial \boldsymbol{E}} \cdot\cdot\, \frac{d\boldsymbol{E}}{dp} + \frac{d^p\boldsymbol{T}}{dp} \tag{4.31}$$

aus (4.30) die Parameterableitung des Prinzips der virtuellen Arbeit:

$$\int_{V_o} \left\{ \frac{d\boldsymbol{T}}{dp}\ [\boldsymbol{GRAD}(\boldsymbol{U}) + \boldsymbol{I}] \right\} \cdot\cdot\, \boldsymbol{GRAD}\left(\delta\frac{d\boldsymbol{U}}{dp}\right) dV_o + \\ + \int_{V_o} \left\{ \boldsymbol{T}\ \left[\boldsymbol{GRAD}\left(\frac{d\boldsymbol{U}}{dp}\right)\right] \right\} \cdot\cdot\, \boldsymbol{GRAD}\left(\delta\frac{d\boldsymbol{U}}{dp}\right) dV_o = 0\,. \tag{4.32}$$

Diese Formulierung hat die gleiche Struktur wie die materielle Zeitableitung des Prinzips der virtuellen Arbeit (siehe auch [go00b, goe01]). Dabei wird die Tatsache, dass bei fixierter Zeit unterschiedliche Materialparameter zu unterschiedlichen Verzerrungs- und Spannungszuständen führen, genutzt, Ableitungen, Inkremente bzw. Variationen nach den Materialparametern zu definieren, die eine mathematisch vollkommen analoge Struktur und Bedeutung besitzen wie materielle Zeitableitungen. Mit

$$\frac{d^p\boldsymbol{T}}{dp} \tag{4.33}$$

wird der Anteil der vollständigen Ableitung des Spannungstensors nach den Materialparametern bezeichnet, der mögliche explizite Abhängigkeiten der Spannungen von diesen Parametern und deren impliziten Abhängigkeiten außer jenen über die Verzerrungen berücksichtigt.

Wird analog zur Variation der materiellen Zeitableitung des Verzerrungstensors seine Variation der Ableitung nach einem Materialparameter definiert (siehe [goe01]), kann leicht gezeigt werden, dass aus (4.32) folgende Formulierung der Parameterableitung des Prinzips der virtuellen Arbeit abgeleitet werden kann:

$$\int\limits_{V_o} \left(\frac{d\boldsymbol{T}}{d\boldsymbol{E}} \cdot\cdot \frac{d\boldsymbol{E}}{dp} \right) \cdot\cdot \, \delta \left(\frac{d\boldsymbol{E}}{dp} \right) dV_o \, +$$

$$\int\limits_{V_o} \boldsymbol{T} \cdot\cdot \left[\left(\boldsymbol{GRAD} \left(\frac{d\boldsymbol{U}}{dp} \right) \right)^T \boldsymbol{GRAD} \left(\delta \left(\frac{d\boldsymbol{U}}{dp} \right) \right) \right] dV_o \, =$$

$$= - \int\limits_{V_o} \frac{d^p\boldsymbol{T}}{dp} \cdot\cdot \, \delta \left(\frac{d\boldsymbol{E}}{dp} \right) dV_o \tag{4.34}$$

Gleichung (4.34) stellt die Ableitung der globalen Gleichgewichtsbeziehung nach einem Materialparameter dar und kann durch ein Ortsdiskretisierungsverfahren (z. B. FEM) in ein System nichtlinearer algebraischer Gleichungen übergeführt werden. In diesem Zusammenhang ergeben sich Element*steifigkeitsbeziehungen* der Form

$$\boldsymbol{K}^e \, \frac{d\hat{\boldsymbol{U}}}{dp} \; = \; - \int\limits_{V_o^e} \boldsymbol{B}_v{}^T \left(\frac{d^p\boldsymbol{T}}{dp} \right) dV_o^e \; = \; \boldsymbol{P}_p{}^e \tag{4.35}$$

mit der aus der Lösung des direkten Problems bekannten Elementsteifigkeitsmatrix

$$\boldsymbol{K}^e \; = \int\limits_{V_o^e} \left[\boldsymbol{B}_v{}^T \left(\frac{d\boldsymbol{T}}{d\boldsymbol{E}} \right) \boldsymbol{B}_v \; + \; \bar{\boldsymbol{G}} \, \boldsymbol{T}^\star \, \bar{\boldsymbol{G}} \right] dV_o^e \tag{4.36}$$

und der rechten Seite

$$\boldsymbol{P}_p{}^e \; = \; - \int\limits_{V_o^e} \boldsymbol{B}_v{}^T \left(\frac{d^p\boldsymbol{T}}{dp} \right) dV_o^e \, . \tag{4.37}$$

In Anlehnung an die Darstellung in [go00b] werden mit $\boldsymbol{G}$ die Matrix der Formfunktionen, $\bar{\boldsymbol{G}}$ deren Ortsableitungen nach den globalen Koordinaten, $\boldsymbol{B}_v$ die Matrix der Verzerrungs-Verschiebungs-Beziehungen und $\hat{\boldsymbol{U}}$ die Knotenverschiebungen bezeichnet.

Nach Akkumulation aller Elementmatrizen und -vektoren folgt das FEM-Gleichungssystem

$$\boldsymbol{K} \, \frac{d\boldsymbol{U}}{dp} \; = \; \boldsymbol{P}_p \, , \tag{4.38}$$

welches als Lösung die für den Gradienten der Zielfunktion benötigten Ableitungen der Knotenverschiebungen nach den Materialparametern ergibt und mit den entsprechenden Beziehungen bei kleinen Verzerrungen identisch ist ([boh97, goe97]). Dabei kann nach der Lösung des direkten Problems in jedem Lastschritt dessen Gesamtsteifigkeitsmatrix erneut verwendet werden. Die Randbedingungen für das System (4.38) werden in den Knoten mit vorgegebenen Verschiebungen durch die Beziehungen

$$\frac{d\boldsymbol{U}}{dp} = \mathbf{0} \tag{4.39}$$

charakterisiert.

Für den Aufbau der rechten Seite des Systems (4.38) sind die Ableitungen (4.33) der Spannungen nach den Materialparametern zu bilden. Dazu wird das ausiterierte, zeitdiskretisierte Deformationsgesetz implizit nach den Materialparametern abgeleitet. Aus der symbolischen Darstellung des Deformationsgesetzes

$$\boldsymbol{G}\left(\boldsymbol{z}_n(\boldsymbol{p}), \boldsymbol{z}_{n+1}(\boldsymbol{p}), \boldsymbol{p}\right) = \mathbf{0} \tag{4.40}$$

folgt

$$\frac{d^p\boldsymbol{G}_{n+1}}{dp} = \frac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{z}_n}\frac{d^p\boldsymbol{z}_n}{dp} + \frac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{z}_{n+1}}\frac{d^p\boldsymbol{z}_{n+1}}{dp} + \frac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}}{\partial p} = \mathbf{0}\,. \tag{4.41}$$

Auch diese Gleichung weist eine direkte Analogie zu den Beziehungen bei kleinen Verzerrungen auf ([boh97, ben00]), wodurch die Verwendung der dort entwickelten Methoden auch für finite inelastische Verzerrungen möglich wird. Mit der Kennzeichnung $d^p(.)/dp$ für die vollständige Ableitung des diskretisierten Deformationsgesetzes nach den Materialparametern wird die Annahme aus der impliziten Differenziation des Gleichgewichtszustandes unterstrichen, dass in diesem Anteil implizite Abhängigkeiten von den Materialparametern über den Verzerrungszustand nicht berücksichtigt werden. Dies ist auch insofern nicht notwendig, da das Verzerrungsinkrement $\Delta\boldsymbol{C}_{n+1}$ als Lösung des Randwertproblems quasi die Belastung für das Anfangswertproblem und somit keine unabhängige Variable darstellt.

Nach einer geeigneten Umformung von (4.41)

$$\frac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{z}_{n+1}}\frac{d^p\boldsymbol{z}_{n+1}}{dp} = \left(\nabla_{\boldsymbol{z}_{n+1}}\boldsymbol{G}\right)\frac{d^p\boldsymbol{z}_{n+1}}{dp} = -\frac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{z}_n}\frac{d^p\boldsymbol{z}_n}{dp} - \frac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}}{\partial p} \tag{4.42}$$

ergeben sich die geforderten Ableitungen der Spannungen nach den Materialparametern als Teil der Lösung eines Systems linearer algebraischer Gleichungen mit der aus dem Prozess der Integration des Deformationsgesetzes bekannten Jakobi-Matrix. Dabei ist die Jakobi-Matrix des letzten, zur Konvergenz von (4.20) führenden Iterationsschrittes zu verwenden.

In seiner ausführlichen Darstellung erhält die Beziehung (4.42) unter Berücksichtigung des zeitdiskretisierten Deformationsgesetzes folgende Form:

$$\left(\nabla_{\boldsymbol{z}_{n+1}} \boldsymbol{G}\right) \begin{pmatrix} \left.\dfrac{d^p \boldsymbol{T}}{dp}\right|_{n+1} \\ \left.\dfrac{d^p \boldsymbol{\alpha}}{dp}\right|_{n+1} \\ \left.\dfrac{d^p E_v^p}{dp}\right|_{n+1} \\ \left.\dfrac{d^p \lambda}{dp}\right|_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{R_T} - \dfrac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}{}^{\boldsymbol{T}}}{\partial p} \\ \boldsymbol{R_\alpha} - \dfrac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}{}^{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial p} \\ R_{E_v^p} - \dfrac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}{}^{E_v^p}}{\partial p} \\ -\dfrac{\partial \boldsymbol{G}_{n+1}{}^{\lambda}}{\partial p} \end{pmatrix}. \tag{4.43}$$

Die konkreten Ausdrücke auf der rechte Seite von (4.43) sind für das oben vorgestellte Deformationsgesetz in [goe01] im Detail angegeben. Die Implementierung in SPC–PMHP wurde abgeschlossen und erste Identifikationsberechnungen am Beispiel eines Zugstabes mit synthetischen Messwerten waren erfolgreich. Dabei zeigte sich im Falle kleiner Verzerrungen eine sehr gute Übereinstimmung mit Optimierungsergebnissen auf der Basis des im vergangenen Berichtszeitraum entwickelten und bewährten FEM-Programmes SPC–PMEP.

2.4.2 Teilaufgabe Schädigungsmechanik

In seiner Verallgemeinerung für geometrisch nichtlineare Aufgabenstellungen wird das Gurson–Tvergaard–Needleman Modell durch die Fließbedingung

$$\begin{aligned} F &= \left(\frac{q}{\sigma_M}\right)^2 + 2q_1 f^* \cosh\left(-\frac{3}{2} q_2 \frac{p}{\sigma_M}\right) - \left(1 + q_3 f^{*^2}\right) = 0 \\ f^*(f) &:= \begin{cases} f & \forall f \leq f_c \\ f_c + \dfrac{\frac{1}{q_1} - f_c}{f_F - f_c}(f - f_c) & \text{sonst} \end{cases} \\ \sigma_M &:= \sigma_0 \left(\frac{\varepsilon_{pM}}{\varepsilon_0} + 1\right)^n; \quad p := -\frac{1}{3} I_{\boldsymbol{\tau}}; \quad q := \sqrt{-3 II_{\boldsymbol{dev(\tau)}}} \end{aligned} \tag{4.44}$$

charakterisiert, wobei $I_{\boldsymbol{\tau}}$ für die erste Invariante des Kirchhoffschen Spannungstensors und $II_{\boldsymbol{dev(\tau)}}$ für die zweite Invariante des Deviators des Kirchhoffschen Spannungstensors stehen. Für die skalaren internen Variablen ε_{pM} (plastische Vergleichsdehnung des Matrixmaterials) und f (Porenkonzentration) werden die Evolutionsgleichungen

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\varepsilon_{pM} &= \lambda \frac{1}{\sigma_M(1-f)}\boldsymbol{\tau} : \frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{\tau}} \\
\frac{d}{dt}f \quad &= \lambda \left[\frac{\mathcal{A}}{\sigma_M(1-f)}\boldsymbol{\tau} : \frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{\tau}} + (1-f) I_{\frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{\tau}}} \right]; \\
&\qquad\qquad \mathcal{A} := \frac{f_N}{s_N\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon_{pM}-\varepsilon_N}{s_N} \right)^2 \right]
\end{aligned}
\tag{4.45}
$$

angesetzt. Das Materialverhalten wird durch den Satz

$$q_1, \quad q_2, \quad q_3, \quad f_0, \quad f_c, \quad f_F, \quad \sigma_0, \quad \varepsilon_0, \quad n, \quad f_N, \quad s_N, \quad \varepsilon_N$$

(q_1, q_2, q_3 – Parameter des GTN–Modells; f_0 – Anfangsporenkonzentration; f_c – kritischer Porenvolumenanteil; f_F – Porenvolumenanteil bei Versagen; σ_0 – Anfangsfließspannung; ε_0 – Anfangsfließdehnung; n – Verfestigungsparameter; f_N – porenbildender Volumenanteil; s_N – Standardabweichung; ε_N – Mittelwert) von 11 Materialparametern vervollständigt. Darüber hinaus gelten die Prinzipien der assoziierten Fließtheorie (4.4).

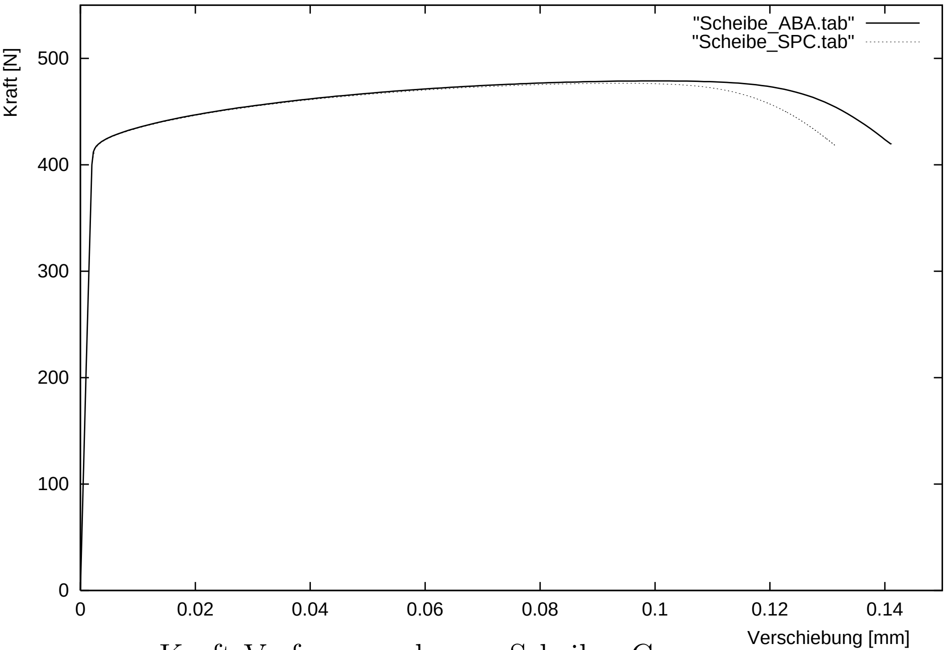
Da das GTN–Modell ohne Einschränkungen mit der in SPC-PMHP implementierten Materialklasse verträglich ist, bestand die Implementierung dieses speziellen Materialverhaltens ausschließlich in der Bedienung der universellen Materialschnittstelle von SPC-PMHP. Die im Projektantrag vorgesehene Verifikation wurde an Hand von Vergleichsrechnungen mit einem kommerziellen FEM–Programm vorgenommen [misp01].
Für die Vergleichsrechnungen wurden 8-Knotenelemente mit 9 Integrationspunkten verwendet. Die Materialparameter für das GTN–Modell sind in der folgenden Tabelle angegeben.

E	ν	q_1	q_2	q_3	f_0	f_c
210000	0.3	1.5	1.0	2.25	0.001	0.05

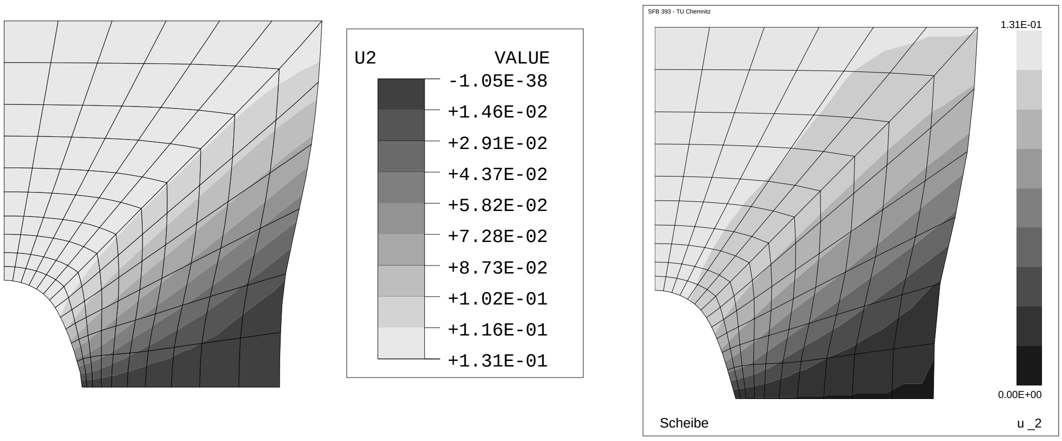
f_F	f_N	s_N	ε_N	σ_0	ε_0	n
0.3	0.01	0.1	0.3	451.4	0.3386	0.4896

Materialparameter, GTN–Modell

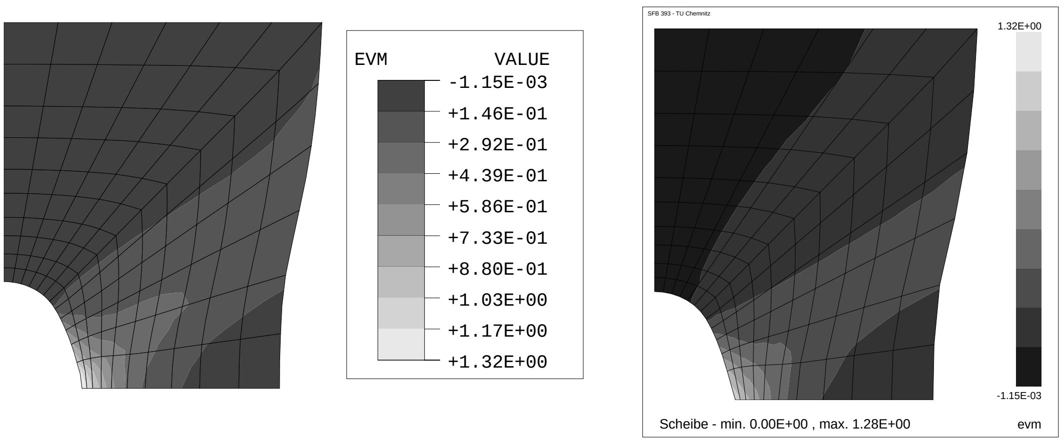
In den folgenden Darstellungen sind die Kraft–Verformungskurven, wie sie im Zugversuch gewonnen werden, sowie Konturplots der Verschiebungen ($u2$) in Belastungsrichtung für eine gelochte Scheibe aufgezeigt. Die Verfestigung kennzeichnet die plastische Vergleichsdehnung des Matrixmaterials (evm) und die Entfestigung die Porenkonzentration (f). In den Konturplots sind die Maxima und Minima von **SPC-PMHP** an denen von **ABAQUS** skaliert.



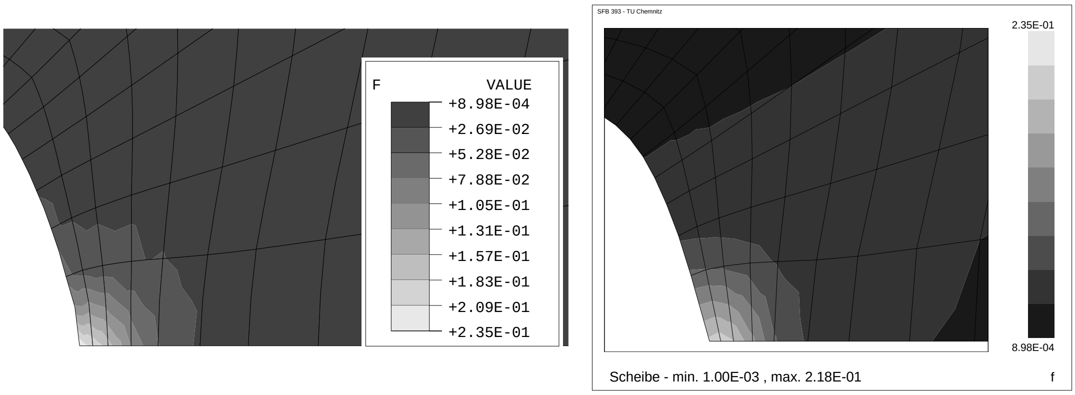
Kraft-Verformungskurve, Scheibe, Gurson



Verschiebungen $u2$, Scheibe, Gurson



Plastische Vergleichsdehnung evm, Scheibe, Gurson



Porenkonzentration f, Scheibe, Gurson

Bedingt dadurch, dass in **ABAQUS** nicht die Lie–Ableitung (vgl. (4.4)), sondern die Jaumann–Ableitung als objektive Zeitableitung verwendet wird, letztlich also in beiden Programmen ein unterschiedliches Materialverhalten realisiert ist, konnten die Ergebnisse nicht vollständig zur Deckungsgleichheit gebracht werden.

2.4.3 Teilaufgabe Netzadaption

In den letzten 15–20 Jahren sind selbstadaptive Diskretisierungsmethoden entwickelt worden, die sich bei dem nun erreichten Erkenntnisstand auch zum Einsatz für nichtlineare Aufgabenstellungen anbieten.

Am weitesten verbreitet sind a posteriori Fehlerschätzer und Indikatoren, die auf Grundlage der berechneten Lösung globale und lokale Informationen über den Fehler der numerischen Lösung liefern. Für lineare Probleme ist es möglich, eine numerische Lösung mit einem vorgegebenen Toleranzbereich und einem minimalen numerischen Aufwand zu erhalten. Bei der numerischen Simulation von quasistatischen Deformationsprozessen im Rahmen der ebenen finiten Elasto–Plastizität handelt es sich allerdings um nichtlineare Randwertprobleme

$$\begin{aligned} -\nabla\cdot\sigma(\nabla u) &= f \quad \text{in} \quad \Omega\subset R^2 \\ u &= u_0 \quad \text{auf} \quad \Gamma_D \\ n\cdot\sigma(\nabla u) &= g \quad \text{auf} \quad \Gamma_N \end{aligned} \tag{4.46}$$

mit der zusätzlichen Schwierigkeit, dass $\sigma(\nabla u)$ nicht explizit bekannt ist, sondern Differenzial–Algebraischen Gleichungen vom Index 1 genügt. Eine derartige Aufgabenstellung scheint sich auf den ersten Blick jeglicher tieferen mathematischen Analyse zu entziehen. So könnte die Idee entstehen, dass einzig heuristische Vorgehenweisen (z.B. Zienkiewicz–Zhu [zien92]) zu einem praktikablen a posteriori Fehlerindikator führen.

Eine genauere Analyse, gestützt auf die Überblicksdarstellung [verf96] von *Verfürth*, zeigt allerdings, daß eine explizite Darstellung für $\sigma(\nabla u)$ durchaus nicht erforderlich ist, um eine a posteriori Fehlerabschätzung für (4.46) bei Vorliegen finiter elastisch–plastischer Verzerrungen vornehmen zu können. So läßt sich zeigen, dass der Diskretisierungsfehler bis auf Konstanten durch die Größe η

$$\eta := \sqrt{\sum_{\Omega_T \subset \Omega} \eta_T^2} \tag{4.47}$$

nach oben und nach unten beschränkt ist. Der Beitrag der einzelnen finiten Elemente Ω_T ist unter der Voraussetzung, dass die Nährungslösung u_h des nichtlinearen Problems hinreichend nahe bei der exakten Lösung liegt, gegeben durch

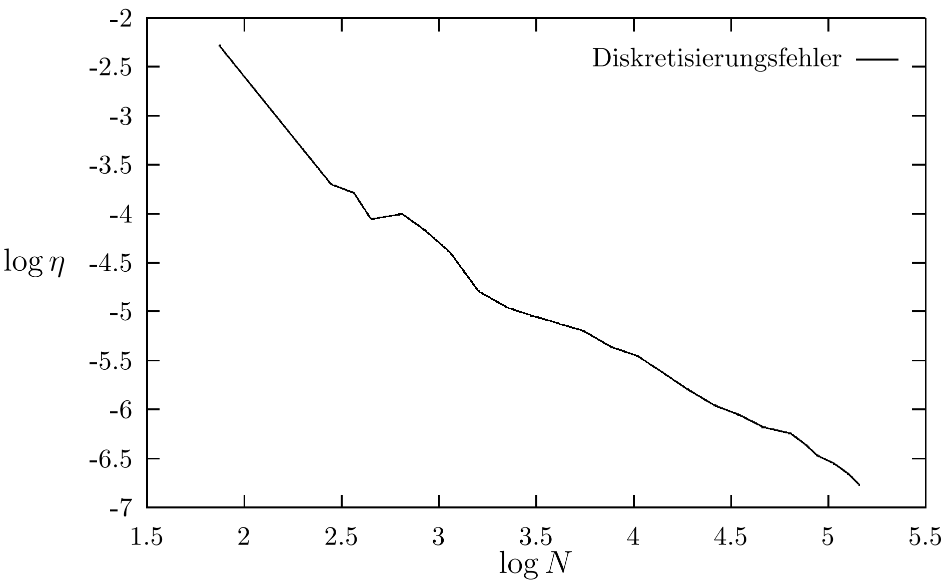
$$\begin{aligned} \eta_T^2 \approx \quad & h_T^2 \int_{\Omega_T} \langle \nabla \cdot \sigma(\nabla u_h) + f_h, \nabla \cdot \sigma(\nabla u_h) + f_h \rangle d\omega + \\ & \sum_{e \in \delta\Omega_T} h_e \int_e \langle [n_e \cdot \sigma(\nabla u_h)], [n_e \cdot \sigma(\nabla u_h)] \rangle d\gamma \end{aligned} \tag{4.48}$$

mit

$$[\phi(x)]_{x \in e} := \begin{cases} \lim\limits_{t \to 0} \phi(x - t n_e) - g_h & \forall e \in \Gamma_N \\ \lim\limits_{t \to 0} \phi(x - t n_e) - \lim\limits_{t \to 0} \phi(x + t n_e) & \text{sonst} \end{cases}$$

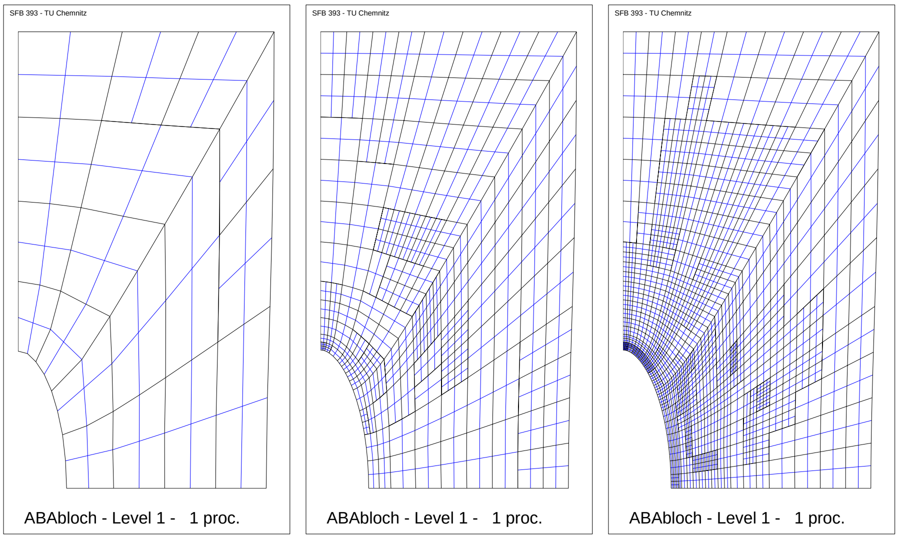
(n_e – Außennormale). Hierbei wurde vorausgesetzt, dass f und g hinreichend genau durch f_h und g_h approximiert werden. Der hier angegebene residuale Fehlerschätzer ist identisch mit dem in Tp A3 implementierten Schätzer für linear elastische Aufgabenstellungen.

Für erste Tests nichtlinearer Probleme wurde deshalb das Programm SPC–PM2Ad in seinem Anwendungsspektrum auf hyperelastisches Material erweitert. Um die Leistungsfähigkeit der modifizierten Version von SPC–PM2Ad zu illustrieren, ist examplarisch eine gelochte quadratische Scheibe unter einachsigem Zug selbstadaptiv vernetzt worden. In der doppelt logarithmischen Darstellung von η über der Knotenzahl N



ist bis ca. 3000 Knoten ein Fehler $O(h^2)$, wie er auch für die verwendeten 8–Knoten–Elemente zu erwarten ist, wiederzufinden. Vermutlich, bedingt durch die in der

Ausgangsvernetzung verwendeten verzerrten Elemente, setzt sich dieses Verhalten jedoch bei feineren Netzen nicht mehr fort.
Auch ein Blick auf die Folge automatisch verfeinerter Netze



zeigt neben einer dem Gradienten der Spannungen folgenden Verfeinerung noch zusätzliche in verzerrten Elementen.
Da, wie sich erwiesen hat, hiermit ein wirklicher Fehlerschätzer gefunden wurde, besteht kein Grund, noch zusätzliche Heuristiken zum Einsatz zu bringen. Die Berücksichtigung von plastischen Deformationen führt zu keinen zusätzlichen prinzipiellen Problemen, sondern ist eher eine softwaretechnische Aufgabe. Ein zusätzlicher Aufwand entsteht durch die Notwendigkeit der Projektion der elementbasierten Lösungsanteile (Spannungen, interne Variable) auf das feinere Netz. Vorbereitende Untersuchungen werden bis zum Abschluß des Bewilligungszeitraums durchgeführt.

Literaturverzeichnis

[bal65] Baltov, A., Sawczuk, A., A rule of anisotropic hardening, *Acta Mechanica* **1**, 81-92 (1965)

[ben98] Benedix, U., Görke, U.-J., Kreißig, R., Kretzschmar, S., *Local and global anlysis of inhomogeneous displacement fields for the identification of material parameters*, in: Computer Methods in Composite Materials VI, Proceedings of the CADCOMP 98, S.V. Hoa, W.P. De Wilde, W.R. Blain (eds.), Computational Mechanics Publications, Southampton, 159-168 (1998)

[ben00] Benedix, U., *Parameterschätzung für elastisch-plastische Deformationsgesetze bei Berücksichtigung lokaler und globaler Vergleichsgrößen*, Dissertation, TU Chemnitz, Institut für Mechanik, Bericht 4/00 (2000)

[boh97] Bohnsack, E., *Zur Identifikation von Verfestigungsparametern elastisch-plastischer Stoffgesetze an inhomogen verformten Proben*, Dissertation, TU Chemnitz-Zwickau, Institut für Mechanik, Bericht 1/97 (1997)

[buch98] Bucher, A., *Thermodynamisch konsistente konstitutive Gleichungen zur Beschreibung finiter elasto-plastischer Deformationen*, in: Modellierung und Identifikation, S. Hartmann, P. Haupt, V. Ulbricht (eds.), Tagungsband zum 2. Workshop der Graduiertenkollegs Identifikation von Material- und Systemeigenschaften (Kassel) und Kontinuumsmechanik inelastischer Festkörper (Dresden/Chemnitz), Gesamtschul-Bibliothek Kassel (1998)

[bu01a] Bucher, A., Görke, U.-J., Kreißig, R., Development of a generalized material interface for the simulation of finite elasto-plastic deformations, *Int. J. Sol. Struct.*, zur Veröffentlichung angenommen (2001)

[bu01b] Bucher, A., *Realisierung eines allgemeinen Materialteils für ein "paralleles" FEM-Programm zur Berechnung großer elastisch-plastischer Deformationen*, in: Tagungsband zum 3. Workshop der Graduiertenkollegs Identifikation von Material- und Systemeigenschaften (Kassel) und Kontinuumsmechanik inelastischer Festkörper (Dresden/Chemnitz), Gesamtschul-Bibliothek Kassel, erscheint 2001

[goe97] Görke, U.-J., Kreißig, R., *Einflußfaktoren bei der Identifikation von Materialparametern elastisch-plastischer Deformationsgesetze aus inhomogenen Verschiebungsfeldern*, TU Chemnitz-Zwickau, Preprint SFB393/97-04 (1997)

[go98a] Görke, U.-J., Benedix, U., Kreißig, R., *Einige Erfahrungen mit der Identifikation von Materialparametern als schlecht gestelltes inverses Problem*, in: Tagungsband zum 6. Workshop Numerische Methoden der Plastomechanik des Institutes für Mechanik der TU Hannover, D. Besdo (ed.), Hannover (1998)

[go00a] Görke, U.-J., Bucher, A., Kreißig, R., Michael, D., *Implicit integration of deformation laws for large elasto-plastic deformations*, in: Proceedings of the IV. IASS-IACM Colloquium, Chania-Kreta, (2000)

[go00b] Görke, U.-J., Bucher, A., Kreißig, R., Michael, D., *Ein Beitrag zur Lösung von Anfangs-Randwert-Problemen einschließlich der Materialmodellierung bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen mit Hilfe der FEM*, TU Chemnitz, Preprint SFB393/00-09 (2000)

[goe01] Görke, U.-J., Bucher, A., Kreißig, R., Michael, D., *Ein Beitrag zur Materialparameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder mit Hilfe der FEM*, TU Chemnitz, Preprint SFB393/01-03 (2001)

[krei92] Kreißig, R. *Einführung in die Plastizitätstheorie*, Fachbuchverlag, Leipzig (1992)

[krei98] Kreißig, R., Meyer, A., Michael, D., Görke, U.-J., *Effiziente parallele Algorithmen zur Simulation des Deformationsverhaltens von Bauteilen aus elastisch-plastischen Materialien*, Arbeitsbericht SFB393 für 1996-98, TU Chemnitz (1998)

[krei00] Kreißig, R., Benedix, U., Görke, U.-J., About some statistical aspects of the identification of parameters of elasto-plastic material behaviour, *Archive of Applied Mechanics*, zur Veröffentlichung angenommen (2000)

[lev44] Levenberg, K., A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares, *Quart. Applied Mathematics* **2**, 164-168 (1944)

[mah97] Mahnken, R., Stein, E., Parameter identification for finite deformation elasto-plasticity in principal directions, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* **147**, 17-39 (1997)

[mah99] Mahnken, R., Kuhl, E., Parameter identification of gradient enhanced damage models with the finite element method, *Eur. J. Mech. A/Solids* **18**, 819-835 (1999)

[mah00] Mahnken, R., Aspects on the Finite-Element Implementation of the Gurson Model including Parameter Identification, *Int. J. Plast.* **15(11)**, 1111-1137 (1999)

[mar63] Marquardt, D.W., An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters, *SIAM J. Applied Mathematics* **11**, 431-441 (1963)

[mich98] D. Michael, M. Meisel, *Some remarks to large deformation elasto-plasticity (continuum formulation)*, TU Chemnitz-Zwickau, Preprint SFB393/98-28 (1998)

[mich01] D. Michael, *Kontinuumstheoretische Grundlagen und algorithmische Behandlung von ausgewählten Problemen der assoziierten Fließtheorie*, TU Chemnitz, Preprint SFB393/01-06 (2001)

[misp01] D. Michael, M. Springmann, *Zur numerischen Simulation des Versagens duktiler metallischer Werkstoffe (Algorithmische Behandlung und Vergleichsrechnungen)*, TU Chemnitz, Preprint SFB393/01-09 (2001)

[verf96] R. Verfürth, *A Review of A Posteriori Error Estimation and Adaptive Mesh–Refinement Techniques*, John Wiley & Sons and B.G. Teubner Publishers, Chichester, New York, Brisbane, Singapore, Stuttgart, Leipzig 1996.

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Entsprechend der Aufgabenstellung im Teilprojekt D1 des SFB393 der TU Chemnitz wurden die theoretischen Grundlagen der Parameteridentifikation für elastisch-plastische Deformationsgesetze bei großen Verzerrungen auf der Basis der Analyse inhomogener Verschiebungsfelder vorgestellt. Diese beinhalten die Entwicklung geeigneter, thermodynamisch konsistenter Deformationsgesetze und deren Integration, der Beziehungen für die semianalytische Sensitivitätsanalyse und der numerischen Algorithmen. Bezüglich der numerischen Methoden und deren programmtechnischer Realisierung konnte auf den Verfahren zur Bearbeitung von Problemen kleiner elastisch-plastischer Verzerrungen aufgebaut werden. Die Implementierung der entwickelten Algorithmen zur Materialparameteridentifikation bei finiten Verzerrungen wurde exemplarisch für ein elastisch-plastisches Materialmodell ohne Substruktur durchgeführt.

Ein entscheidendes Problem für die Materialparameteridentifikation bei Berücksichtigung geometrischer Nichtlinearitäten stellt die Entwicklung geeigneter Experimente dar, die den bekannten Meßverfahren zugänglich sind (dreidimensionale Analyse großer Verzerrungen). Da gegenwärtig keine realen Messwerte aus dem Bereich großer Verzerrungen verfügbar sind, werden die Untersuchungen zunächst mit synthetischen Messwerten fortgeführt. Erste Optimierungsrechnungen mit synthetischen Messwerten am Zugstab wurden erfolgreich mit Ergebnissen bei kleinen Verzerrungen verifiziert.

Es ist zu prüfen, in welchem Umfang reale Umformprozesse zum Zweck der Materialparameteridentifikation ausgewertet werden können. Das erfordert eine effektive numerische Behandlung von Problemen zur realistischen Simulation des mechanischen Modells. Eine offene Frage ist in diesem Zusammenhang die Bearbeitung der Kontaktproblematik, die gegenwärtig in SPC–PMHP nicht implementiert ist. Sie soll in einem weiteren Antragszeitraum auf der Basis moderner mathematischer Algorithmen bei Vorliegen der erforderlichen Vorarbeiten auf dem Gebiet der Gleichungslöser und der geeigneten Definition des Randwertproblems realisiert werden.