

U.-J. Görke

A. Bucher

R. Kreißig

Ein Beitrag zur Materialparameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder mit Hilfe der FEM

Preprint SFB393/01-03

Zusammenfassung

The identification of material parameters for elasto-plastic deformation laws analyzing inhomogeneous displacement fields in the case of finite deformations has been carried out using a nonlinear deterministic optimization approach (Levenberg-Marquardt method) for a least squares type objective function. The numerical values for the nodal displacements are obtained by the Finite Element Method.

Based on the multiplicative split of the deformation gradient into an elastic and a plastic part as well as some physically and mathematically useful assumptions, a thermodynamically consistent deformation law for finite elasto-plastic deformations is formulated. The deformation law represents a system of differential and algebraic equations which is numerically solved using a generalized one-step time integration method.

A semianalytical method has been developed to obtain the gradient of the objective function. This method is based on the discretization of the principle of virtual work with respect to the material parameters. The required derivatives of integration point based quantities with respect to the material parameters are determined solving a system of nonlinear algebraic equations which is given as the result of an implicit differentiation of the discretized deformation law. The presented integration method for the deformation law allows a simple and efficient computation of the consistent material matrix as well as a reliable sensitivity analysis.

The presented algorithms are implemented into the experimental FE-code PMHP running on parallel computers.

Key words: Finite Plasticity; Constitutive Equations; Finite Element Method; Principle of Virtual Work; Implicit Integration; Optimization; Sensitivity Analysis

MSC codes: 73B05; 75E05; 73G20; 73V05

Preprint-Reihe des Chemnitzer SFB 393

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Kinematik finiter elastisch-plastischer Verzerrungen	1
3	Ein thermodynamisch konsistentes Deformationsgesetz	2
4	Numerische Simulation	6
5	Verfahren zur Materialparameteridentifikation	9
6	Optimierungsmodell	13
7	Semianalytische Sensitivitätsanalyse	16
8	Zusammenfassung und Ausblick	24

Author's addresses:

Uwe-Jens Görke

Anke Bucher

Reiner Kreißig

TU Chemnitz

Institut für Mechanik

D-09107 Chemnitz

e-mail: uj.goerke@mb1.tu-chemnitz.de

e-mail: anke.bucher@mb1.tu-chemnitz.de

e-mail: r.kreissig@mb1.tu-chemnitz.de

<http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/>

1 Einleitung

In der vorliegenden Arbeit werden die theoretischen Grundlagen für die Materialparameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen, basierend auf der numerischen Analyse experimentell ermittelter inhomogener Verschiebungsfelder, dargelegt. Für die Lösung des Feldproblems in den Optimierungsschritten wird die Finite-Elemente-Methode (FEM) genutzt.

Es erfolgt ein Überblick über die Herleitung eines thermodynamisch konsistenten Deformationsgesetzes der Elasto-Plastizität finiter Verzerrungen, das zur Lösung des eingebetteten Anfangswertproblems numerisch integriert wird. Anschließend werden die grundlegenden Beziehungen zur semianalytischen Sensitivitätsanalyse bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen vorgestellt, die auf den globalen Gleichgewichtsbedingungen (Prinzip der virtuellen Arbeit) und dem lokal ausiterierten Deformationsgesetz beruhen. Die Sensitivitätsanalyse bildet die Grundlage zur Berechnung der für die Anwendung deterministischer Optimierungsverfahren erforderlichen Gradienten (Ableitung der Verschiebungskomponenten nach den Materialparametern).

2 Kinematik finiter elastisch-plastischer Verzerrungen

Den Ausgangspunkt der kinematischen Betrachtungen zur Herleitung eines allgemeinen Stoffgesetzes für große elastisch-plastische Verformungen stellt der Deformationsgradient \mathbf{F} mit

$$\mathbf{F} = F_I^i \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{G}^i = \frac{\partial x^i}{\partial X^I} \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{G}^i \quad (1)$$

dar [16]. Er bildet ein materielles, infinitesimales Linienelement $d\mathbf{X}$ von der Ausgangskonfiguration in die Momentankonfiguration ab und beschreibt damit die Streckungen und Drehungen, die dieses Linienelement während der Bewegung erfährt.

Bei elastisch-plastischer Deformation kann eine sogenannte Zwischenkonfiguration definiert werden, indem lokal eine fiktive elastische Entlastung der materiellen Teilchen vorgenommen wird [7]. Mit Hilfe dieser Konfiguration ist es möglich, eine konsequente Trennung von elastischen und plastischen Größen im Deformationsgesetz zu erreichen.

Dazu wird die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten in einen elastischen Anteil \mathbf{F}^e und in einen plastischen Anteil \mathbf{F}^p genutzt. Aus der angegebenen Definition der Zwischenkonfiguration wird deutlich, dass sie in der Regel nicht kompatibel ist.

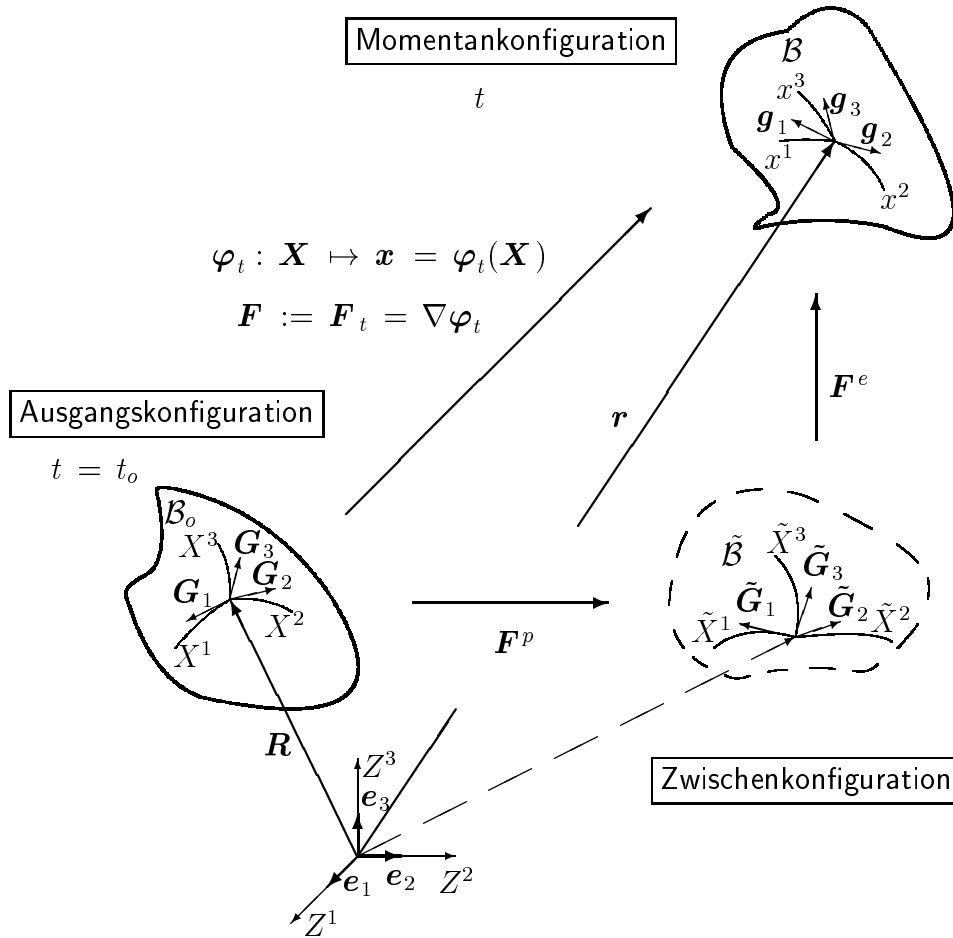


Abbildung 1: Ausgangs-, Zwischen- und Momentankonfiguration

3 Ein thermodynamisch konsistentes Deformationsgesetz

Den Ausgangspunkt zur Herleitung des Deformationsgesetzes für finite elastisch-plastische Verzerrungen bildet die Clausius-Duhem-Ungleichung für den isothermen Fall in der Ausgangskonfiguration:

$$-\varrho_0 \dot{\psi} + \frac{1}{2} \mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{C}} \geq 0. \quad (2)$$

Mit dem Rechts-Cauchy-Green-Tensor \mathbf{C} , dem kovarianten, zweistufigen Tensor \mathbf{C}^p zur Charakterisierung der plastischen Verzerrungen in der Ausgangskonfiguration und einer internen Variablen \mathbf{A}_1 vom Verzerrungstyp soll für die freie Energiedichte ψ deren additive

Aufspaltung in einen elastischen und einen plastischen Anteil gelten:

$$\psi = \bar{\psi}_e \left(\frac{1}{2} [\mathbf{C} - \mathbf{C}^p] \right) + \psi_p(\mathbf{A}_1) = \bar{\psi}_e(\mathbf{E}^e) + \psi_p(\mathbf{A}_1). \quad (3)$$

Dabei ist zu beachten, dass der elastische Anteil der Energiedichtefunktion originär als isotrope Tensorfunktion der Invarianten des elastischen Verzerrungstensors $\tilde{\mathbf{E}}^e = \mathbf{F}^{p-\text{T}} \mathbf{E}^e \mathbf{F}^{p-1}$ in der Zwischenkonfiguration zu definieren ist

$$\bar{\psi}_e = \bar{\psi}_e \left(J_1(\tilde{\mathbf{E}}^e), J_2(\tilde{\mathbf{E}}^e), J_3(\tilde{\mathbf{E}}^e) \right). \quad (4)$$

Das plastische “pull-back” führt am Beispiel der ersten Grundinvariante $J_1(\tilde{\mathbf{E}}^e)$ zu folgenden äquivalenten Darstellungen:

$$\begin{aligned} J_1(\tilde{\mathbf{E}}^e) &= \tilde{\mathbf{E}}^e \cdot \tilde{\mathbf{G}} = \mathbf{F}^{p-\text{T}} \mathbf{E}^e \mathbf{F}^{p-1} \cdot \mathbf{F}^p \mathbf{B}^p \mathbf{F}^{p\text{T}} = \mathbf{E}^e \cdot \mathbf{B}^p = \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{C} \cdot \mathbf{B}^p - \frac{3}{2} = J_{R1}(\mathbf{C}) - \frac{3}{2} = \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{C} \mathbf{B}^p \cdot \mathbf{I} - \frac{3}{2} = J_1(\mathbf{C} \mathbf{B}^p) - \frac{3}{2} \end{aligned} \quad (5)$$

mit $\mathbf{B}^p = \mathbf{C}^{p-1}$. Da analoge Beziehungen auch für die Grundinvarianten $J_2(\tilde{\mathbf{E}}^e)$ und $J_3(\tilde{\mathbf{E}}^e)$ gezeigt werden können und einfache mathematische Zusammenhänge zwischen den Grund- und Hauptinvarianten bestehen, folgt aus (4)

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_e &= \bar{\psi}_e \left(I(\tilde{\mathbf{E}}^e), II(\tilde{\mathbf{E}}^e), III(\tilde{\mathbf{E}}^e) \right) = \psi_e \left(I_R(\mathbf{C}), II_R(\mathbf{C}), III_R(\mathbf{C}) \right) = \\ &= \psi_e \left(I(\mathbf{C} \mathbf{B}^p), II(\mathbf{C} \mathbf{B}^p), III(\mathbf{C} \mathbf{B}^p) \right), \end{aligned} \quad (6)$$

womit die Energiedichtefunktion (3) auch in der nachstehenden Form geschrieben werden kann:

$$\psi = \psi_e(\mathbf{C} \mathbf{B}^p) + \psi_p(\mathbf{A}_1). \quad (7)$$

Beim Einsetzen der Zeitableitung von (7) in (2) wird folgender Ausdruck erhalten:

$$-\varrho_0 \left\{ \frac{\partial \psi_e}{\partial (\mathbf{C} \mathbf{B}^p)} \cdot \dot{\mathbf{B}}^p \mathbf{C} + \frac{\partial \psi_e}{\partial (\mathbf{C} \mathbf{B}^p)} \cdot \mathbf{B}^p \dot{\mathbf{C}} + \frac{\partial \psi_p}{\partial \mathbf{A}_1} \cdot \dot{\mathbf{A}}_1 \right\} + \frac{1}{2} \mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{C}} \geq 0. \quad (8)$$

Es ist möglich, aus der Ungleichung (8) ein hyperelastisches Teildeformationsgesetz zur Berechnung des 2. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors \mathbf{T} abzuspalten, für das gezeigt werden kann, dass gilt:

$$\mathbf{T} = 2 \varrho_0 \frac{\partial \psi_e}{\partial (\mathbf{C} \mathbf{B}^p)} \mathbf{B}^p = 2 \varrho_0 \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{C}} = \varrho_0 \frac{\partial \psi_e}{\partial \mathbf{E}^e} \quad (9)$$

Die verbleibenden Terme bilden die plastische Dissipationsungleichung:

$$\mathcal{D}^p = -\varrho_0 \left\{ \frac{\partial \psi_e}{\partial (\mathbf{C} \mathbf{B}^p)} \cdot \dot{\mathbf{B}}^p \mathbf{C} + \frac{\partial \psi_p}{\partial \mathbf{A}_1} \cdot \dot{\mathbf{A}}_1 \right\} \geq 0. \quad (10)$$

Mit (9), dem konkreten Ansatz für den plastischen Anteil der freien Energiedichte

$$\psi_p = c J_2(\mathbf{A}_1) \quad (11)$$

und der folgenden konstitutiven Annahme

$$\boldsymbol{\alpha} = \varrho_0 \frac{\partial \psi_p}{\partial \mathbf{A}_1} = \frac{\partial (c J_2(\mathbf{A}_1))}{\partial \mathbf{A}_1} = c \mathbf{G} \mathbf{A}_1 \mathbf{G} \quad (12)$$

(\mathbf{G} stellt den kontravarianten Metriktensor der Ausgangskonfiguration dar) kann die Dissipationsungleichung auch geschrieben werden als

$$\mathcal{D}^p = -\boldsymbol{\alpha} \cdot \dot{\mathbf{A}}_1 - \frac{1}{2} \mathbf{T} \cdot \mathbf{C}^p \dot{\mathbf{B}}^p \mathbf{C} \geq 0. \quad (13)$$

$\boldsymbol{\alpha}$ sei die zu \mathbf{A}_1 arbeitskonjugierte Variable in der Ausgangskonfiguration und soll den Rückspannungstensor darstellen.

Entsprechend dem Prinzip vom Maximum der plastischen Dissipation wird verlangt, dass die unbekanntenen Tensorvariablen so bestimmt werden müssen, dass \mathcal{D} gemäß (10) einen maximalen Wert annimmt. Vorausgesetzt wird dabei die Erfüllung der Fließbedingung.

Damit ergibt sich ein Extremwertproblem mit Nebenbedingung in der folgenden Art:

$$\mathcal{D}^p(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{T}) \rightarrow \max_{\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{T}} \quad (14)$$

$$F(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{T}) \leq 0. \quad (15)$$

Die notwendigen Voraussetzungen für die Existenz eines lokalen Maximums des Optimierungsproblems (14), (15), die sogenannten Kuhn-Tucker Bedingungen, können mit Hilfe der Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren ermittelt werden. Dazu wird folgende Lagrange-Funktion mit einer skalaren Schlupfvariable y zur Umwandlung der Nebenbedingung (15) in die Gleichheitsbedingung $F(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{T}) + y^2 = 0$ definiert:

$$\mathcal{L} = -\mathcal{D}^p(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{T}) + \lambda [F(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{T}) + y^2] \rightarrow \min \quad (16)$$

Als Fließbedingung wird ein für große Deformationen modifizierter Ansatz nach Baltov-Sawczuk [1] verwendet, mit dem es möglich ist, sowohl isotrope und kinematische als auch Distorsionsverfestigung zu berücksichtigen. Die Fließbedingung wird in der Momentankonfiguration formuliert und anschließend in die Ausgangskonfiguration zurückgezogen. Der vierstufige Tensor \mathbf{K}_4 dient der Beschreibung von Anfangsanisotropien bzw. einer Distorsionsverfestigung.

$$F = (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \cdot \cdot \mathbf{K}_4 \cdot \cdot (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) - \frac{2}{3} T_F^2 = 0 \quad (17)$$

$$\text{mit } \dot{\mathbf{T}} = \mathbf{T} - \frac{1}{3} (\mathbf{T} \cdot \cdot \mathbf{C}) \mathbf{B} \quad \text{und} \quad \mathbf{B} = (\mathbf{C})^{-1}. \quad (18)$$

Entsprechend den Kuhn-Tucker Bedingungen für das Extremwertproblem (14), (15) werden die Ableitungen von (16) nach den unbekanntem Tensorvariablen \mathbf{T} , $\boldsymbol{\alpha}$ und dem Lagrangeschen Multiplikator λ gleich Null gesetzt. Diese Vorgehensweise in Verbindung mit der Geschwindigkeitsformulierung des hyperelastischen Deformationsgesetzes liefert ein nicht-lineares Algebro-Differentialgleichungssystem, dessen Lösung u.a. die (16) maximierenden Spannungen und Rückspannungen sind.

$$\dot{\mathbf{T}} = 2 \frac{\partial^2 \psi_e}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}} \cdot \cdot (\dot{\mathbf{C}} + \mathbf{C}^p \dot{\mathbf{B}}^p \mathbf{C}) - \lambda \mathbf{T} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \mathbf{B} - \lambda \mathbf{B} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \mathbf{T} \quad (19)$$

$$\dot{\mathbf{B}}^p = -2 \lambda \mathbf{B} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \mathbf{B}^p \quad (20)$$

$$\dot{\mathbf{A}}_1 = -\lambda \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \Rightarrow \dot{\boldsymbol{\alpha}} = c \mathbf{G} \left(-\lambda \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right) \mathbf{G} \quad (21)$$

$$\dot{E}_v^p = \lambda \sqrt{\frac{2}{3} \mathbf{B} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \cdot \cdot \mathbf{B} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}}} \quad (22)$$

$$F = (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \cdot \cdot \mathbf{K}_4 \cdot \cdot (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) - \frac{2}{3} T_F^2 = 0 \quad (23)$$

Die Gleichung (22)¹ für die plastische Bogenlänge wird dem System hinzugefügt, da z.B. die isotrope Verfestigung, charakterisiert durch die Entwicklung der Fließspannung, von E_v^p abhängt. Deshalb ist eine Entwicklungsgleichung für E_v^p notwendig.

Nach einigen Umstellungen kann das Algebro-Differentialgleichungssystem (19-23) wie folgt

$$\dot{\mathbf{T}} + \lambda \mathbf{D}_4 \cdot \cdot \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} - \frac{1}{2} \mathbf{D}_4 \cdot \cdot \dot{\mathbf{C}} + \lambda \left(\mathbf{T} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \mathbf{B} + \mathbf{B} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \mathbf{T} \right) = \mathbf{0} \quad (24)$$

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} + \lambda c \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\alpha}} = \mathbf{0} \quad (25)$$

$$\dot{E}_v^p - \lambda \sqrt{\frac{2}{3} \mathbf{B} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \cdot \cdot \mathbf{B} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}}} = 0 \quad (26)$$

$$F = (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \cdot \cdot \mathbf{K}_4 \cdot \cdot (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) - \frac{2}{3} T_F^2(E_v^p) = 0 \quad (27)$$

¹(22) entsteht aus $\dot{E}_v^p = \sqrt{\frac{2}{3} \mathbf{B}^p \dot{\mathbf{E}}^p \cdot \cdot \mathbf{B}^p \dot{\mathbf{E}}^p}$ unter Berücksichtigung von (20).

bzw. in der verallgemeinerten Form

$$\dot{\mathbf{T}} + \lambda \mathbf{D}_4 \cdot \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} - \frac{1}{2} \mathbf{D}_4 \cdot \dot{\mathbf{C}} + \lambda \left(\mathbf{T} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \mathbf{B} + \mathbf{B} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \mathbf{T} \right) = \mathbf{0} \quad (28)$$

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} + \mathbf{Q}_1(\mathbf{T}, \boldsymbol{\alpha}, \lambda) = \mathbf{0} \quad (29)$$

$$\dot{E}_v^p + Q_3(\mathbf{T}, \boldsymbol{\alpha}, \lambda) = 0 \quad (30)$$

$$F(\mathbf{T}, \boldsymbol{\alpha}, E_v^p) = 0 \quad (31)$$

dargestellt werden.

4 Numerische Simulation

Einleitend soll erwähnt werden, dass bei der numerischen Umsetzung des Deformationsgesetzes die Koordinaten zweistufiger Tensoren als Vektoren und vierstufiger Tensoren als Matrizen verarbeitet werden.

Das Algebra-Differentialgleichungssystem (28)-(31) kann nur mit numerischen Verfahren gelöst werden. Zuerst erfolgt die Diskretisierung der Gleichungen (28)-(31) nach der Zeit unter Nutzung des folgenden numerischen Integrationsalgorithmus für eine gewöhnliche Differentialgleichung:

$$\frac{dy}{dt} = \dot{y} = f(t, y) \quad (32)$$

$$y_{n+1} = y_n + (\alpha f_{n+1} + (1 - \alpha) f_n) \Delta t \quad (33)$$

mit

$$\Delta t = t_{n+1} - t_n \quad (34)$$

und

$$\alpha \in [0, 1], \quad \alpha = \begin{cases} 0,0 & : \text{Euler vorwärts} \\ 1,0 & : \text{Euler rückwärts} \\ 0,5 & : \text{Crank-Nicolson (Trapezregel)} \end{cases} \quad (35)$$

Zunächst wird $\dot{\mathbf{C}}_{n+1}$ nach Anwendung der Zeitdiskretisierung (33) durch

$$\dot{\mathbf{C}}_{n+1} = \frac{1}{\alpha \Delta t} \left[\Delta \mathbf{C}_{n+1} - (1 - \alpha) \dot{\mathbf{C}}_n \Delta t \right] \quad (36)$$

ersetzt. Während α in den folgenden Iterationen beliebig ist, gilt für den 1. Schritt stets $\alpha = 1$.

Mit (32)-(34) folgt dann aus den Beziehungen (28)-(31) das nachstehende System nichtlinearer algebraischer Gleichungen:

$$\begin{aligned}
\mathbf{T}_{n+1} - \mathbf{T}_n + & \left[\alpha \lambda_{n+1} \mathbf{D}_{4n+1} \cdots \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \Big|_{n+1} + (1 - \alpha) \lambda_n \mathbf{D}_{4n} \cdots \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \Big|_n \right] \Delta t - \\
& - \left[\frac{1}{2} (1 - \alpha) \left(\mathbf{D}_{4n} - \mathbf{D}_{4n+1} \right) \cdots \dot{\mathbf{C}}_n \right] \Delta t - \frac{1}{2} \mathbf{D}_{4n+1} \cdots \Delta \mathbf{C}_{n+1} + \\
& + \alpha \lambda_{n+1} \left(\mathbf{T}_{n+1} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \Big|_{n+1} \mathbf{B}_{n+1} + \mathbf{B}_{n+1} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \Big|_{n+1} \mathbf{T}_{n+1} \right) \Delta t + \\
& + (1 - \alpha) \lambda_n \left(\mathbf{T}_n \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \Big|_n \mathbf{B}_n + \mathbf{B}_n \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \Big|_n \mathbf{T}_n \right) \Delta t = \mathbf{0} \quad (37)
\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{\alpha}_{n+1} - \boldsymbol{\alpha}_n + \left[\alpha \mathbf{Q}_{1n+1} + (1 - \alpha) \mathbf{Q}_{1n} \right] \Delta t = \mathbf{0} \quad (38)$$

$$E_{v_{n+1}}^p - E_{v_n}^p + \left[\alpha Q_{3n+1} + (1 - \alpha) Q_{3n} \right] \Delta t = 0 \quad (39)$$

$$F(\mathbf{T}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}, E_{v_{n+1}}^p) = 0. \quad (40)$$

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

$$\mathbf{z} = (\mathbf{T}, \boldsymbol{\alpha}, E_v^p, \lambda)^T \quad (41)$$

Ebenso wird ein Operator \mathbf{G} definiert, der die linke Seite des Gleichungssystems (37)-(40) repräsentiert.

$$\mathbf{G}(\mathbf{z}_n, \mathbf{z}_{n+1}, \Delta \mathbf{C}_{n+1}, \dot{\mathbf{C}}_n) \quad (42)$$

Gesucht wird letztendlich der Variablen-Vektor

$$\mathbf{z}_{n+1} = \left(\mathbf{T}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}, E_{v_{n+1}}^p, \lambda_{n+1} \right)^T \quad (43)$$

für den Lastschritt $n + 1$ als Lösung von

$$\mathbf{G}_{n+1} = \mathbf{G}(\mathbf{z}_{n+1}) = \mathbf{0}. \quad (44)$$

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

$$\mathbf{z}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{z}_{n+1}^i - \left(\nabla_{\mathbf{z}_{n+1}^i} \mathbf{G} \right)^{-1} \mathbf{G}_{n+1}^i, \quad (45)$$

wobei die Jakobi-Matrix $(\nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{G})$ die Form

$$(\nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{G}) = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{\mathbf{4}TT} & \mathbf{M}_{\mathbf{4}T\alpha} & \mathbf{0} & \mathbf{M}_{T\lambda} \\ \alpha \frac{\partial \mathbf{Q}_1}{\partial \mathbf{T}} \Delta t & \left(\mathbf{I}_{\mathbf{4}} + \alpha \frac{\partial \mathbf{Q}_1}{\partial \alpha} \Delta t \right) & \mathbf{0} & \alpha \frac{\partial \mathbf{Q}_1}{\partial \lambda} \Delta t \\ \alpha \frac{\partial \mathbf{Q}_3}{\partial \mathbf{T}} \Delta t & \alpha \frac{\partial \mathbf{Q}_3}{\partial \alpha} \Delta t & 1 & \alpha \frac{\partial \mathbf{Q}_3}{\partial \lambda} \Delta t \\ \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} & \frac{\partial F}{\partial \alpha} & \frac{\partial F}{\partial E_v^p} & 0 \end{pmatrix} \quad (46)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\mathbf{4}TT} &= \mathbf{I}_{\mathbf{4}} + \alpha \lambda \mathbf{D}_{\mathbf{4}} \cdot \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial \mathbf{T}} \Delta t + \alpha \lambda \left(\mathbf{I}_{\mathbf{4}} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \mathbf{B} + \mathbf{B} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \mathbf{I}_{\mathbf{4}} \right) \Delta t + \\ &+ \alpha \lambda_{n+1} \left(\mathbf{T} \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial \mathbf{T}} \mathbf{B} + \mathbf{B} \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial \mathbf{T}} \mathbf{T} \right) \Delta t \end{aligned} \quad (47)$$

$$\mathbf{M}_{\mathbf{4}T\alpha} = \alpha \lambda \mathbf{D}_{\mathbf{4}} \cdot \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial \alpha} \Delta t + \alpha \lambda \left(\mathbf{T} \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial \alpha} \mathbf{B} + \mathbf{B} \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial \alpha} \mathbf{T} \right) \Delta t \quad (48)$$

$$\mathbf{M}_{T\lambda} = \alpha \mathbf{D}_{\mathbf{4}} \cdot \cdot \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \Delta t + \alpha \left(\mathbf{T} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \mathbf{B} + \mathbf{B} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \mathbf{T} \right) \Delta t \quad (49)$$

annimmt. Das Newtonverfahren (45) führt mit $\Delta \mathbf{z}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{z}_{n+1}^{i+1} - \mathbf{z}_{n+1}^i$ auf das lineare Gleichungssystem

$$\left(\nabla_{\mathbf{z}_{n+1}^i} \mathbf{G} \right) \Delta \mathbf{z}_{n+1}^{i+1} = -\mathbf{G}_{n+1}^i, \quad (50)$$

das mittels eines direkten Verfahrens nach Gauß gelöst wird.

5 Verfahren zur Materialparameteridentifikation

Materialparameter sind in der Regel nicht direkt messbar, sondern können nur über ihre Wirkungen identifiziert werden. Sie verbinden Spannungen, Verzerrungen und interne Variable miteinander, die ihrerseits ebenfalls nicht direkt messbar sind, sondern sich in Veränderungen der Verschiebungen und globaler Größen wie Kräfte und Momente darstellen.

Die Materialparameter sind somit unter definierten Belastungen “Ursache” für die unterschiedliche Entwicklung von Verschiebungsfeldern. Das direkte Problem kann mathematisch als Abbildung von Elementen aus dem Wertebereich P der Materialparameter \mathbf{p} auf Elemente aus dem Definitionsbereich U der Verschiebungen \mathbf{U} durch den Operator \mathbf{A} definiert werden:

$$\mathbf{A}\mathbf{p} = \mathbf{U}, \quad \mathbf{p} \in P \subset R^{n_p}, \quad \mathbf{U} \in U \subset R^m \text{ (i. a. } m \gg n_p\text{)}. \quad (51)$$

Aufgabe der Materialparameteridentifikation ist die Inversion der Gleichung (51), d. h., aus der “Wirkung” bekannter Verschiebungen $\bar{\mathbf{U}}$ soll die “Ursache”, der Parametersatz \mathbf{p} , ermittelt werden. Diese Aufgabenstellung wird als inverses Problem erster Art bezeichnet [3].

Für nichtlineares Werkstoffverhalten ist die Materialparameteridentifikation in der Regel ein schlecht gestelltes Problem. Der Operator \mathbf{A} charakterisiert neben den allgemein gültigen Bilanzgleichungen das spezielle Deformationsgesetz für materielle Punkte mit verschiedenen Belastungswegen (inhomogene Felder) und die Verschiebungs-Verzerrungs-Beziehungen. Er kann nicht explizit angegeben und damit auch nicht eindeutig invertiert werden. Sein mathematischer Ausdruck und seine Eigenschaften sind im Detail nicht bekannt. Das inverse Problem der Materialparameteridentifikation kann folglich nur im Rahmen eines Optimierungsmodells gelöst werden. An der TU Chemnitz wurde für kleine elastisch-plastische Verzerrungen ein entsprechendes Verfahren zur Analyse inhomogener Verschiebungsfelder entwickelt und erfolgreich eingesetzt [3, 5]. Ziel der vorliegenden Arbeit sind die Herleitung und Darstellung der theoretischen Grundlagen für die Anwendung dieser Methodik auf die Materialparameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen.

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

$$\Phi(\mathbf{p}) = \sum (\mathbf{U}(\mathbf{p}) - \bar{\mathbf{U}})^2 \longrightarrow \min_{\mathbf{p} \in P}. \quad (52)$$

Die Optimierungsaufgabe (52) 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 Schlechtgestellttheit 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).

Da die Materialparameter elastisch-plastischer Deformationsgesetze nicht direkt messbar sind, besteht die Aufgabe, möglichst einfache und robuste Verfahren zur Lösung des inversen Problems zu entwickeln, deren Ergebnisse eine akzeptable Näherung des realen Werkstoffverhaltens darstellen. Eine in der Ingenieurpraxis weit verbreitete Methode zur Materialparameteridentifikation ist die Anwendung der Deformationsgesetze auf homogene Spannungs- und Deformationszustände, die durch spezielle Belastungswege generiert werden können. Entsprechende Verfahren sind in der Praxis anerkannt und z. T. in Industrienormen standardisiert (Zugversuch, Druckversuch, Torsionsversuch u. a.). Die Probekörper werden so gestaltet, dass die äußere Belastung in jedem materiellen Punkt eines bestimmten Messbereiches gleiche Spannungs- und Deformationswerte erzeugt. Globale Belastungsgrößen (Verschiebung, Kraft, Moment) können über die geometrischen Verhältnisse im Messbereich der Probe in Spannungen und Dehnungen umgerechnet werden. Somit steht der direkte Zusammenhang zwischen den Variablen in den Deformationsgesetzen für die Parameteroptimierung zur Verfügung. Das inverse Problem wird in der Regel durch Minimierung einer Fehlerquadratsumme gelöst. Die dabei entstehenden linearen oder nichtlinearen Gleichungssysteme sind mit einem relativ geringen numerischen Aufwand lösbar. Das implizit im Optimierungsverfahren enthaltene direkte Problem besteht in der analytischen oder numerischen Integration des Deformationsgesetzes für den konkreten Belastungsweg.

Die Verwendung von Proben mit homogenen Deformationen zur Materialparameteridentifikation hat einige *Vorteile*:

- Viele Deformationsgesetze liegen für die speziellen Belastungswege in linearer oder linearisierbarer Form in bezug auf den Parametervektor \mathbf{p} vor. Das führt in der Auswertung der Fehlerquadratsumme zur Lösung linearer Gleichungssysteme.
⇒ in der Regel gut gestellte Probleme, geringer numerischer Aufwand
- Nichtlineare Deformationsgesetze können mit einfachen und zuverlässigen Verfahren numerisch integriert werden. Der Gesamtaufwand zur Versuchsauswertung und Parameterbestimmung ist vergleichsweise gering.

Die Auswertung homogener Spannungs- und Deformationszustände, bis vor wenigen Jahren noch einzige Möglichkeit der Materialparameteridentifikation, birgt in sich entscheidende

Nachteile, die diese Methodik an natürliche Grenzen stoßen lassen:

- Die Erzeugung homogener Spannungs- und Deformationszustände ist experimentell oft sehr anspruchsvoll und vielfach nur in Näherung zu erreichen. Als Beispiel sei der Druckversuch mit einer zylinderförmigen Probe genannt, der nur bei völliger Reibungsfreiheit zu einem homogenen Zustand führt.
- Die an Proben mit homogenen Deformationen gewonnenen Ergebnisse sind vielfach ungenügend zur Modellierung komplexer Spannungs- und Deformationszustände geeignet. Homogene Zustände sind nur mit einer stark eingeschränkten Anzahl spezieller Belastungswege zu erzeugen und zu vermessen. Das Informationsangebot zur Identifikation der Materialparameter ist gering. Spezielle Werkstoffeigenschaften wie Anfangsanisotropie, kinematische oder formative Verfestigungsvorgänge bei elastisch-plastischem Materialverhalten u. a. sind durch homogene Deformationen nur eingeschränkt zu erfassen.
- Unterschiedliche Belastungswege werden häufig an unterschiedlich gestalteten Probekörpern aufgebracht (z. B. Zug – Schulterstab, Druck – Zylinder), die möglicherweise Materialinhomogenitäten aufweisen und mit verschiedenen Fertigungsverfahren hergestellt wurden. Fertigungsverfahren wirken sich jedoch nachweislich auf die Materialeigenschaften aus. Unterschiedliche homogene Deformationszustände können somit zu unterschiedlichen Materialparametern führen. In kommerziellen FEM-Programmen wird oftmals die Durchführung verschiedener Experimente mit homogenen Zuständen und deren gleichzeitige Berücksichtigung in einer gewichteten Zielfunktion empfohlen. Das führt zu Materialparametern, die jedes dieser Experimente im Mittel gleich gut (bzw. gleich schlecht) approximieren. Die Kritik der eingeschränkten Übertragbarkeit auf komplexe Zustände bleibt erhalten.

Diese Nachteile überwiegen die Vorteile bereits häufig im Bereich kleiner inelastischer, aber auch finiter elastischer Verzerrungen und lassen eine Anwendung dieser Verfahren zur Materialparameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen als nicht sinnvoll erscheinen.

Mit der weiteren Entwicklung der Rechentechnik, insbesondere mit dem Einsatz von Parallelrechnern, ist die Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder praktikabel geworden. Gemessene und berechnete Verschiebungswerte des gesamten inhomogenen Feldes werden in der Zielfunktion (52) berücksichtigt, die mit numerischen Optimierungsverfahren im Raum der Materialparameter minimiert wird. Dabei ist in jedem Optimierungsschritt das direkte Problem der Berechnung des Verschiebungsfeldes mit dem aktuellen Materialparametersatz als nichtlineares Anfangs-Randwert-Problem zur Simulation des Experiments zu lösen. Die Finite-Element-Methode (FEM) bietet dazu sehr gute Voraussetzungen.

Gegenüber herkömmlichen Methoden weist die Analyse inhomogener Feldprobleme zur Materialparameteridentifikation einige *Vorteile* auf:

- Die Probenherstellung und Versuchsdurchführung sind vergleichsweise einfach. Höhere Anforderungen sind an die Messdatenerfassung und -auswertung zu stellen. Das Problem der Messwertaufbereitung liegt besonders in der Bereitstellung der Daten in den materiellen Punkten, in denen die numerischen Vergleichswerte ermittelt werden (z. B. in den Knoten des FE-Netzes).
- Durch geeignete Auswahl der Experimente (Probenform, Belastung) können verschiedene lokale Lastgeschichten in einzelnen materiellen Punkten der Probe berücksichtigt werden. Die Materialparameter bilden das Ergebnis einer Mittelung über verschiedene (in der Regel mehrdimensionale) Belastungswege. Das Informationsangebot für die Lösung des inversen Problems ist sehr groß und in seiner Quantität leicht beeinflussbar.

Die Verwendung von Proben mit inhomogenen Deformationen zur Ermittlung der Materialparameter ist naturgemäß auch mit spezifischen *Nachteilen* verbunden:

- So erfordern die Lösung eines vollständigen Anfangs-Randwert-Problems mit der FEM und die halbanalytische Sensitivitätsanalyse zur Ermittlung der Verschiebungsgradienten bezüglich der Materialparameter in jedem Optimierungsschritt große Ressourcen an Speicherplatz und Rechenzeit. Dieses Problem verliert mit der permanenten Weiterentwicklung der Rechentechnik zunehmend an Bedeutung.
- Durch die zeitliche und räumliche Diskretisierung des FE-Problems und die Schachtelung mehrerer Iterationsverfahren (nichtlineare Optimierung, Inkrementalisierung der Lastgeschichte, Gleichgewichtsiterationen im Lastinkrement, numerische Integration des Deformationsgesetzes) ist das Verfahren anfällig für numerische Fehler. Diese können durch den Einsatz zuverlässiger und effizienter numerischer Verfahren in ihrer Wirkung beschränkt werden.
- Die Schlechtgestelltheit des Operators, der die zu identifizierenden Materialparameter bei vorgegebenem Belastungsweg der Probe auf die Folge der Verschiebungsfelder abbildet, hat ihre Ursache in fehlenden oder modellinadäquaten (z. B. grobe Messfehler) Informationen. Sind die Quantität und/oder Qualität der Informationen nicht ausreichend, kann die Lösung des inversen Problems mehrdeutig oder instabil sein, in Einzelfällen sogar nicht existent. Da die Informationen immer als endliche, diskrete Datenmenge vorliegen, ist besonders auf Qualität der Daten zu achten (zutreffendes Materialmodell, vollständige Messdaten mit geringen Messfehlern).
- Schließlich ist die Existenz von Lösungen für das nichtlineare Optimierungsproblem als formal mathematische Aufgabenstellung an bestimmte Voraussetzungen, z. B. für die mathematische Struktur des Abbildungsoperators, gebunden. Da der Abbildungsoperator für das inverse Problem der Materialparameteridentifikation nicht explizit vorliegt, ist es nicht möglich, die Äquivalenz der Eigenschaften des physikalischen Modells mit den geforderten mathematischen Eigenschaften des Operators nachzuweisen.

Trotz der genannten Nachteile werden die Forschungen zur Materialparameteridentifikation auf der Grundlage der Analyse inhomogener Feldprobleme weltweit intensiviert. Insbesondere der Vorteil eines mit relativ geringem Aufwand erfassbaren großen Informationsangebotes für das inverse Problem lässt diese Methodik gegenwärtig ohne Alternative erscheinen, um den hohen Praxisanforderungen nach verbesserten Strukturanalysen gerecht zu werden, die hauptsächlich durch realitätsnähere Materialmodelle erreicht werden können. Zudem werden durch die Weiterentwicklung der Deformationsgesetze und modifizierte experimentelle Methoden die Quantität und Qualität der Ausgangsinformationen verbessert, was die Stabilität des Optimierungsverfahrens erhöht. Demgegenüber sind die Nachteile der weit verbreiteten Auswertung homogener Zustände eher prinzipieller Natur und mit vertretbarem Aufwand kaum zu mildern.

6 Optimierungsmodell

Zur Lösung nichtlinearer Optimierungsaufgaben, wie z. B. der Minimierung der Zielfunktion zur Materialparameteridentifikation (52), sind zwei prinzipiell verschiedene Verfahrensklassen bekannt – *gradientenfreie Methoden* und *Gradientenverfahren*.

Bei den gradientenfreien Methoden wird zur Ermittlung des Optimums lediglich der Wert der Zielfunktion benutzt, an die mathematische Struktur des Abbildungsoperators \mathbf{A} in (51) werden somit keine besonderen Anforderungen (Differenzierbarkeit u. a.) gestellt. Neben den rein stochastischen Verfahren, wie der Monte-Carlo-Methode, bei der neue Parametersätze zufällig ausgewählt werden, zählen zu den gradientenfreien Optimierungsverfahren auch Evolutionsstrategien. Diese Methoden nutzen dem Verhalten biologischer Systeme ähnelnde Techniken wie Kombination, Selektion und zufällige Mutation, um aus existierenden Parametersätzen neue zu generieren, die zu kleineren Werten der Zielfunktion führen.

Gradientenfreie Verfahren haben den Vorteil, dass sie den Weg zu einem lokalen Minimum wieder verlassen können, wenn bessere Minima existieren. Ihr entscheidender Nachteil liegt darin, dass eine Vielzahl von Parametersätzen erzeugt werden muss, ehe der geeignetste ermittelt werden kann. Größenordnungen von $10^5 \dots 10^6$ Versuchen sind keine Seltenheit. Zudem existieren keine aus der mathematischen Struktur der Verfahren ableitbaren Abbruchkriterien. So wird zumeist die Anzahl der Optimierungsversuche eingeschränkt und der Parametersatz als optimal angesehen, der bis zu diesem Zeitpunkt den kleinsten Wert der Zielfunktion erzeugt hat.

Für die Materialparameteridentifikation aus inhomogenen Verschiebungsfeldern sind gradientenfreie Verfahren wegen ihres großen zeitlichen Aufwandes nicht geeignet, da in jedem Optimierungsversuch ein vollständiges Anfangs-Randwert-Problem gelöst werden muss. Es ist auch nicht akzeptabel, dafür gröbere FE-Modelle mit weniger Freiheitsgraden zu nut-

zen, da in diesem Falle die berechneten Verschiebungen mit unzulässig großen numerischen Fehlern behaftet sind.

Die Gradientenverfahren benötigen Ableitungen der Zielfunktion, so dass der Operator \mathbf{A} entsprechend mehrfach stetig differenzierbar sein muss. Trotz dieser Anforderungen und des zusätzlichen numerischen Aufwandes zur Ermittlung der Ableitungen der Zielfunktion sind diese Verfahren 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 die Zielfunktion immer in das nächste lokale Minimum, vorausgesetzt, das Verfahren konvergiert und strebt keinem Sattelpunkt zu. Die Zielfunktion (52) 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:

$$\Phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_L} \sum_{j=1}^{n_T} \sum_{K=1}^3 \left(\{U_K(\mathbf{p})\}_{ij} - \{\bar{U}_K\}_{ij} \right)^2 \quad (53)$$

mit

$$\begin{aligned} U_1, U_2, U_3 & - \text{berechnete Verschiebungsfelder} \\ \bar{U}_1, \bar{U}_2, \bar{U}_3 & - \text{gemessene Verschiebungsfelder} \end{aligned}$$

und

$$\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_{n_p})^T \quad - \quad \text{Materialparameter}$$

$$n_L \quad - \quad \text{Anzahl der Lastschritte}$$

$$n_T \quad - \quad \text{Anzahl der Messpunkte .}$$

Parameter \mathbf{p} , welche die Funktion (53) 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 \mathbf{p}_{l+1} aus der vorhergehenden Lösung \mathbf{p}_l :

$$\mathbf{p}_{l+1} = \mathbf{p}_l + \omega \mathbf{s}_l \quad (54)$$

mit der Suchrichtung \mathbf{s}_l

$$\mathbf{s}_l = -\mathbf{Q}_l^{-1} \nabla \Phi_l \quad (55)$$

und der Schrittweite ω . Der Gradient der Zielfunktion (53) hat folgendes Aussehen:

$$\nabla \Phi_l = \sum_{i=1}^{n_L} \sum_{j=1}^{n_T} \sum_{K=1}^3 \left(\{U_K(\mathbf{p}_l)\}_{ij} - \{\bar{U}_K\}_{ij} \right) \frac{d\{U_K\}_{ij}}{d\mathbf{p}_l}. \quad (56)$$

Er ist laut (56) durch die Struktur der Zielfunktion vorgegeben, die Suchrichtung wird somit maßgeblich durch die Wahl der Matrix \mathbf{Q}_l beeinflusst. Ihre konkrete Definition führt zu unterschiedlichen Gradientenverfahren. Im Falle kleiner Verzerrungen hat sich besonders das Verfahren nach Levenberg-Marquardt bewährt ([2, 3, 5]). Für $\omega = 1$ wird die Suchrichtung \mathbf{s}_l so ermittelt, dass das Minimum (52) in einem gewissen Vertrauensbereich (trust-region)

$$\|\mathbf{s}_l\| \leq \delta \quad (57)$$

mit einem vorgegebenen Radius δ gesucht wird ([8, 13]). Die Matrix \mathbf{Q}_l ergibt sich aus

$$\mathbf{Q}_l = \mathbf{H}_{GN} + \mu \mathbf{I}. \quad (58)$$

Hierbei stellt \mathbf{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 (53) wie folgt ergeben:

$$(H_{GN})_{mn} = \sum_{i=1}^{n_L} \sum_{j=1}^{n_T} \sum_{K=1}^3 \frac{\partial \{U_K(\mathbf{p})\}_{ij}}{\partial p_m} \frac{\partial \{U_K(\mathbf{p})\}_{ij}}{\partial p_n}. \quad (59)$$

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

$$\mathcal{G}(\mu) = \mathbf{s}_l^T \mathbf{s}_l - \delta^2 \quad \Rightarrow \quad \mu^{k+1} = \mu^k - \frac{(\mathcal{G}(\mu^k) + \delta^2) \mathcal{G}(\mu^k)}{\mathcal{G}_{,\mu} |^k \delta^2} \quad (60)$$

mit

$$\mathcal{G}_{,\mu} = -2\mathbf{s}_l^T \mathbf{Q}_l^{-1} \mathbf{s}_l \quad \text{und} \quad \mu^o = 0. \quad (61)$$

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 Kapitel soll ein Verfahren zur semianalytischen Sensitivitätsanalyse vorgestellt werden, 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.

7 Semianalytische Sensitivitätsanalyse

Zur Ermittlung der Ableitungen der Verschiebungskomponenten nach den Materialparametern stehen verschiedene Methoden zur Verfügung:

- Die analytische Ermittlung dieser Ableitungen ist im vorliegenden Fall nicht möglich, da kein explizit-analytischer funktioneller Zusammenhang zwischen den Verschiebungen und den Materialparametern existiert ($\mathbf{U} = \mathbf{U}[\mathbf{T}(\mathbf{p}), \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{p}), E_v^p(\mathbf{p}), \lambda(\mathbf{p})]$).
- Numerische Verfahren, bei denen die Ableitungen der Verschiebungen nach den Materialparametern durch Differenzenquotienten ersetzt werden, erfordern einen großen Rechenaufwand und erzielen häufig keine zufriedenstellende Genauigkeit.
- Das Verfahren der semianalytischen Sensitivitätsanalyse, das auf der impliziten Differentiation des Gleichgewichts und des ausiterierten Deformationsgesetzes basiert, wird im Folgenden ausführlicher vorgestellt. 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).

Die Herleitung der Beziehungen für die semianalytische Sensitivitätsanalyse bei finiten inelastischen Verzerrungen basiert auf einem Vorschlag von *Mahnken* ([9, 10, 11]). Wird die Erfüllung des Gleichgewichts zu einem Zeitpunkt t vorausgesetzt, gilt die Darstellung des Prinzips der virtuellen Arbeit in Koordinatenschreibweise:

$$\int_{V_o} T^{IJ} (U^K|_J + \delta_J^K) (\delta U_K)|_I dV_o = \int_{A_o} R^K \delta U_K dA_o + \int_{V_o} \varrho_o K^K \delta U_K dV_o, \quad (62)$$

wobei \mathbf{K} die im materiellen Punkt angreifenden Volumenkräfte und \mathbf{R} die Randkräfte auf der Teiloberfläche δV_{o1} des Körpers repräsentieren. Die Herleitung und numerische Realisierung dieser Gleichgewichtsbedingungen im Rahmen der FEM sind in [6] im Detail erläutert.

Die Geschwindigkeitsformulierung des Prinzips der virtuellen Arbeit ist durch die Beziehung

$$\begin{aligned} \int_{V_o} [\dot{T}^{IJ} (U^K|_J + \delta_J^K) + T^{IJ} \dot{U}^K|_J] (\delta \dot{U}_K)|_I dV_o &= \int_{A_o} \dot{R}^K \delta \dot{U}_K dA_o + \\ &+ \int_{V_o} \varrho_o \dot{K}^K \delta \dot{U}_K dV_o \end{aligned} \quad (63)$$

gegeben. Analog dazu soll eine implizite Differentiation der Gleichgewichtsbedingung nach einem Materialparameter durchgeführt werden. Da die Oberflächen- und Volumenkräfte weder explizit noch implizit von den Materialparametern abhängen, für den 2. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor $\mathbf{T}(\mathbf{E}(\mathbf{p}), \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{p}), E_v^p(\mathbf{p}), \lambda(\mathbf{p}), \mathbf{p})$ jedoch keine Einschränkungen gelten, folgt mit

$$\frac{dT^{IJ}}{dp} = \frac{\partial T^{IJ}}{\partial E_{MN}} \frac{dE_{MN}}{dp} + \frac{d^p T^{IJ}}{dp} \quad (64)$$

aus (62) die zur materiellen Zeitableitung analoge Parameterableitung des Prinzips der virtuellen Arbeit:

$$\int_{V_o} \left[\frac{dT^{IJ}}{dp} (U^K|_J + \delta_J^K) + T^{IJ} \frac{dU^K}{dp} \Big|_J \right] \left(\delta \frac{dU_K}{dp} \right) \Big|_I dV_o = 0. \quad (65)$$

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

$$\frac{d^p T^{IJ}}{dp} \quad (66)$$

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. Diese Konstruktion soll hier nicht detaillierter untersucht werden, da später gezeigt wird, dass sie in ihrer allgemeinen Struktur aus der impliziten Differentiation des ausiteierten Deformationsgesetzes nach den Materialparametern ermittelt werden kann.

Analog zur Variation der materiellen Zeitableitung des Verzerrungstensors

$$2 \delta \dot{E}_{IJ} = (\delta \dot{U}_I)|_J + (\delta \dot{U}_J)|_I + (\delta \dot{U}^M)|_I U_{M|J} + U^M|_I (\delta \dot{U}_M)|_J. \quad (67)$$

sei auch seine Variation der Ableitung nach einem Materialparameter definiert:

$$\begin{aligned} 2 \delta \left(\frac{dE_{IJ}}{dp} \right) &= \left(\delta \left(\frac{dU_I}{dp} \right) \right)|_J + \left(\delta \left(\frac{dU_J}{dp} \right) \right)|_I + \\ &+ \left(\delta \left(\frac{dU^M}{dp} \right) \right)|_I U_{M|J} + U^M|_I \left(\delta \left(\frac{dU_M}{dp} \right) \right)|_J. \end{aligned} \quad (68)$$

Mit (68) sowie unter Berücksichtigung von (64) wird aus (65) nach einigen Umformungen folgende Parameterableitung des Prinzips der virtuellen Arbeit in Koordinatenschreibweise

$$\begin{aligned} \int_{V_o} \left[\frac{\partial T^{IJ}}{\partial E_{MN}} \frac{dE_{MN}}{dp} \delta \left(\frac{dE_{IJ}}{dp} \right) + T^{IJ} \frac{dU^K}{dp} \Big|_J \left(\delta \left(\frac{dU_K}{dp} \right) \right) \Big|_I \right] dV_o = \\ = - \int_{V_o} \frac{d^p T^{IJ}}{dp} \delta \left(\frac{dE_{IJ}}{dp} \right) dV_o \end{aligned} \quad (69)$$

bzw. in symbolischer Darstellung

$$\begin{aligned} \int_{V_o} \left\{ \left(\frac{d\mathbf{T}}{d\mathbf{E}} \cdot \frac{d\mathbf{E}}{dp} \right) \cdot \delta \left(\frac{d\mathbf{E}}{dp} \right) + \mathbf{T} \cdot \left[\left(\mathbf{GRAD} \left(\frac{d\mathbf{U}}{dp} \right) \right)^T \cdot \mathbf{GRAD} \left(\delta \left(\frac{d\mathbf{U}}{dp} \right) \right) \right] \right\} dV_o = \\ = - \int_{V_o} \frac{d^p \mathbf{T}}{dp} \cdot \delta \left(\frac{d\mathbf{E}}{dp} \right) dV_o \end{aligned} \quad (70)$$

definiert, die eine ähnliche Struktur wie die Geschwindigkeitsformulierung des Prinzips der virtuellen Arbeit (63) aufweist. Gleichung (70) 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.

Nach dem Übergang von der Tensor- in die Matrixdarstellung des FEM-Steifigkeitssystems nimmt die Beziehung (70) folgende Form für jedes Element des FE-Netzes an:

$$\begin{aligned} \int_{V_o^e} \left[\left(\delta \left(\frac{d\mathbf{E}}{dp} \right) \right)^T \left(\frac{d\mathbf{T}}{d\mathbf{E}} \right) \left(\frac{d\mathbf{E}}{dp} \right) + \left(\delta \left(\frac{d\mathbf{U}}{dp} \right), \mathbf{X} \right)^T \mathbf{T}^* \left(\frac{d\mathbf{U}}{dp} \right), \mathbf{X} \right] dV_o^e = \\ = - \int_{V_o^e} \left(\delta \left(\frac{d\mathbf{E}}{dp} \right) \right)^T \left(\frac{d^p \mathbf{T}}{dp} \right) dV_o^e. \end{aligned} \quad (71)$$

Dabei repräsentieren $d\mathbf{T}/d\mathbf{E}$ die konsistente Materialmatrix, $(\cdot), \mathbf{X}$ Ableitungen nach den globalen Ortskoordinaten und \mathbf{T}^* die Koordinaten des 2. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors in spezieller Matrixform. Zum Verständnis weiterer Einzelheiten der hier verwendeten und aller folgenden FEM-Beziehungen wird wiederum auf [6] verwiesen.

Für die ortsdiskretisierte Darstellung von (71) werden unter Berücksichtigung der Unabhängigkeit der Formfunktionen von den Materialparametern folgende Beziehungen zwischen den Ableitungen der Verschiebungen nach den Materialparametern in jedem Punkt des Elementes und den FE-Knoten hergeleitet, die wiederum Analogien zu entsprechenden Zeitableitungen bzw. inkrementellen Formulierungen aufweisen:

$$\frac{d\mathbf{U}}{dp} = \mathbf{G} \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dp} \quad (72)$$

$$\frac{d\mathbf{E}}{dp} = \mathbf{B}_v \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dp} \quad (73)$$

$$\left(\frac{d\mathbf{U}}{dp} \right), \mathbf{X} = \bar{\mathbf{G}} \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dp} \quad (74)$$

$$\delta \left(\frac{d\mathbf{U}}{dp} \right), \mathbf{X} = \bar{\mathbf{G}} \delta \left(\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dp} \right) \quad (75)$$

$$\delta \left(\frac{d\mathbf{E}}{dp} \right) = \mathbf{B}_v \delta \left(\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dp} \right). \quad (76)$$

Hier werden in Anlehnung an die Darstellung in [6] mit \mathbf{G} die Matrix der Formfunktionen, $\bar{\mathbf{G}}$ deren Ortsableitungen nach den globalen Koordinaten, \mathbf{B}_v die Matrix der Verzerrungs-Verschiebungs-Beziehungen und $\hat{\mathbf{U}}$ die Knotenverschiebungen bezeichnet.

Unter Berücksichtigung von (72)-(76) ergibt sich aus (71)

$$\begin{aligned} \int_{V_o^e} \left[\left(\delta \left(\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dp} \right) \right)^T \mathbf{B}_v^T \left(\frac{d\mathbf{T}}{d\mathbf{E}} \right) \mathbf{B}_v \left(\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dp} \right) + \left(\delta \left(\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dp} \right) \right)^T \bar{\mathbf{G}} \mathbf{T}^* \bar{\mathbf{G}} \left(\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dp} \right) \right] dV_o^e = \\ = - \int_{V_o^e} \left(\delta \left(\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dp} \right) \right)^T \mathbf{B}_v^T \left(\frac{d^p \mathbf{T}}{dp} \right) dV_o^e \quad (77) \end{aligned}$$

bzw. nach einigen Umformungen bei Beachtung der Unabhängigkeit knotenbezogener Größen von den Elementkoordinaten

$$\begin{aligned} \left(\delta \left(\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dp} \right) \right)^T \left\{ \left[\int_{V_o^e} \left(\mathbf{B}_v^T \left(\frac{d\mathbf{T}}{d\mathbf{E}} \right) \mathbf{B}_v + \bar{\mathbf{G}} \mathbf{T}^* \bar{\mathbf{G}} \right) dV_o^e \right] \left(\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dp} \right) \right\} = \\ = - \left(\delta \left(\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dp} \right) \right)^T \left\{ \int_{V_o^e} \mathbf{B}_v^T \left(\frac{d^p \mathbf{T}}{dp} \right) dV_o^e \right\}. \quad (78) \end{aligned}$$

Die Beziehung (78) gilt für beliebige Werte der virtuellen Ableitungen der Knotenverschiebungen nach den Materialparametern. Damit folgen aus (78) Elementsteifigkeitsbeziehungen der Form

$$\mathbf{K}^e \frac{d\tilde{\mathbf{U}}}{dp} = - \int_{V_o^e} \mathbf{B}_v^T \left(\frac{d^p \mathbf{T}}{dp} \right) dV_o^e = \mathbf{P}_p^e \quad (79)$$

mit der aus der Lösung des direkten Problems bekannten Elementsteifigkeitsmatrix

$$\mathbf{K}^e = \int_{V_o^e} \left[\mathbf{B}_v^T \left(\frac{d\mathbf{T}}{d\mathbf{E}} \right) \mathbf{B}_v + \bar{\mathbf{G}} \mathbf{T}^* \bar{\mathbf{G}} \right] dV_o^e \quad (80)$$

und der rechten Seite

$$\mathbf{P}_p^e = - \int_{V_o^e} \mathbf{B}_v^T \left(\frac{d^p \mathbf{T}}{dp} \right) dV_o^e. \quad (81)$$

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

$$\mathbf{K} \frac{d\mathbf{U}}{dp} = \mathbf{P}_p, \quad (82)$$

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 ([3, 5]). Dabei kann nach der Lösung des direkten Problems in jedem Lastschritt dessen Gesamtsteifigkeitsmatrix erneut verwendet

werden. Die Randbedingungen für das System (82) werden in den Knoten mit vorgegebenen Verschiebungen durch die Beziehungen

$$\frac{d\mathbf{U}}{dp} = \mathbf{0} \quad (83)$$

charakterisiert.

Für den Aufbau der rechten Seite des Systems (82) sind die Ableitungen (66) der Spannungen nach den Materialparametern zu bilden. Dazu wird das ausiterierte, zeitdiskretisierte Deformationsgesetz (37)-(40) implizit nach den Materialparametern abgeleitet. Aus der symbolischen Darstellung des Deformationsgesetzes

$$\mathbf{G}(\mathbf{z}_n(\mathbf{p}), \mathbf{z}_{n+1}(\mathbf{p}), \mathbf{p}) = \mathbf{0} \quad (84)$$

folgt

$$\frac{d^p \mathbf{G}_{n+1}}{dp} = \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}}{\partial \mathbf{z}_n} \frac{d^p \mathbf{z}_n}{dp} + \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}}{\partial \mathbf{z}_{n+1}} \frac{d^p \mathbf{z}_{n+1}}{dp} + \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}}{\partial p} = \mathbf{0}. \quad (85)$$

Auch diese Gleichung weist eine direkte Analogie zu den Beziehungen bei kleinen Verzerrungen auf ([3, 5]), wodurch die Verwendung der dort entwickelten Methoden auch für finite inelastische Verzerrungen möglich wird. Mit der Kennzeichnung $d^p(\cdot)/dp$ für die vollständige Ableitung des Deformationsgesetzes nach den Materialparametern wird die Annahme aus der impliziten Differentiation 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 Verzerrungszinkrement $\Delta \mathbf{C}_{n+1}$ als Lösung des Randwertproblems quasi die Belastung für das Anfangswertproblem und somit keine unabhängige Variable darstellt.

Nach einer geeigneten Umformung von (85)

$$\frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}}{\partial \mathbf{z}_{n+1}} \frac{d^p \mathbf{z}_{n+1}}{dp} = (\nabla_{\mathbf{z}_{n+1}} \mathbf{G}) \frac{d^p \mathbf{z}_{n+1}}{dp} = -\frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}}{\partial \mathbf{z}_n} \frac{d^p \mathbf{z}_n}{dp} - \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}}{\partial p} \quad (86)$$

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 (46). Dabei ist die Jakobi-Matrix des letzten, zur Konvergenz von (45) führenden Iterationsschrittes zu verwenden.

In seiner ausführlichen Darstellung erhält die Beziehung (86) unter Berücksichtigung des

zeitdiskretisierten Deformationsgesetzes folgende Form:

$$(\nabla_{z_{n+1}} \mathbf{G}) \begin{pmatrix} \left. \frac{d^p \mathbf{T}}{dp} \right|_{n+1} \\ \left. \frac{d^p \boldsymbol{\alpha}}{dp} \right|_{n+1} \\ \left. \frac{d^p E_v^p}{dp} \right|_{n+1} \\ \left. \frac{d^p \lambda}{dp} \right|_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_T - \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}^T}{\partial p} \\ \mathbf{R}_\alpha - \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}^\alpha}{\partial p} \\ R_{E_v^p} - \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}^{E_v^p}}{\partial p} \\ - \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}^\lambda}{\partial p} \end{pmatrix} \quad (87)$$

mit

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}^T}{\partial p} \\ \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}^\alpha}{\partial p} \\ \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}^{E_v^p}}{\partial p} \\ \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}^\lambda}{\partial p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left[\alpha \lambda_{n+1} \mathbf{D}_4^{n+1} \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial p} \Big|_{n+1} + (1-\alpha) \lambda_n \mathbf{D}_4^n \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial p} \Big|_n \right] \Delta t + \\ + \alpha \lambda_{n+1} \left(\mathbf{T}_{n+1} \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial p} \Big|_{n+1} \mathbf{B}_{n+1} + \mathbf{B}_{n+1} \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial p} \Big|_{n+1} \mathbf{T}_{n+1} \right) \Delta t + \\ + (1-\alpha) \lambda_n \left(\mathbf{T}_n \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial p} \Big|_n \mathbf{B}_n + \mathbf{B}_n \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial p} \Big|_n \mathbf{T}_n \right) \Delta t \\ \left[\alpha \frac{\partial Q_1}{\partial p} \Big|_{n+1} + (1-\alpha) \frac{\partial Q_1}{\partial p} \Big|_n \right] \Delta t \\ \left[\alpha \frac{\partial Q_3}{\partial p} \Big|_{n+1} + (1-\alpha) \frac{\partial Q_3}{\partial p} \Big|_n \right] \Delta t \\ \frac{\partial F}{\partial p} \Big|_{n+1} \end{pmatrix} \quad (88)$$

sowie

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_T &= \left\{ \mathbf{I}_4 - (1-\alpha) \lambda_n \Delta t \left[\mathbf{D}_4^n \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial \mathbf{T}} \Big|_n + \left(\mathbf{I}_4 \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \Big|_n \mathbf{B}_n + \mathbf{B}_n \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \Big|_n \mathbf{I}_4 \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\mathbf{T}_n \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial \mathbf{T}} \Big|_n \mathbf{B}_n + \mathbf{B}_n \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial \mathbf{T}} \Big|_n \mathbf{T}_n \right) \right\} \cdot \frac{d^p \mathbf{T}}{dp} \Big|_n - \\ &- (1-\alpha) \lambda_n \Delta t \left\{ \mathbf{D}_4^n \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial \boldsymbol{\alpha}} \Big|_n + \left(\mathbf{T}_n \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial \boldsymbol{\alpha}} \Big|_n \mathbf{B}_n + \mathbf{B}_n \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial \boldsymbol{\alpha}} \Big|_n \mathbf{T}_n \right) \right\} \cdot \frac{d^p \boldsymbol{\alpha}}{dp} \Big|_n - \\ &- (1-\alpha) \Delta t \left\{ \mathbf{D}_4^n \cdot \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \Big|_n + \left(\mathbf{T}_n \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \Big|_n \mathbf{B}_n + \mathbf{B}_n \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \Big|_n \mathbf{T}_n \right) \right\} \frac{d^p \lambda}{dp} \Big|_n \end{aligned} \quad (89)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{R}\boldsymbol{\alpha} &= -(1-\alpha)\Delta t \left. \frac{\partial Q_1}{\partial \mathbf{T}} \right|_n \cdot \cdot \left. \frac{d^p \mathbf{T}}{dp} \right|_n + \left\{ \mathbf{I}_4 - (1-\alpha)\Delta t \left. \frac{\partial Q_1}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right|_n \right\} \cdot \cdot \left. \frac{d^p \boldsymbol{\alpha}}{dp} \right|_n - \\
&- (1-\alpha)\Delta t \left. \frac{\partial Q_1}{\partial \lambda} \right|_n \left. \frac{d^p \lambda}{dp} \right|_n
\end{aligned} \tag{90}$$

$$\begin{aligned}
R_{E_v^p} &= -(1-\alpha)\Delta t \left. \frac{\partial Q_3}{\partial \mathbf{T}} \right|_n \cdot \cdot \left. \frac{d^p \mathbf{T}}{dp} \right|_n - (1-\alpha)\Delta t \left. \frac{\partial Q_3}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right|_n \cdot \cdot \left. \frac{d^p \boldsymbol{\alpha}}{dp} \right|_n + \\
&+ \left. \frac{d^p E_v^p}{dp} \right|_n - (1-\alpha)\Delta t \left. \frac{\partial Q_3}{\partial \lambda} \right|_n \left. \frac{d^p \lambda}{dp} \right|_n.
\end{aligned} \tag{91}$$

Sind mehrere Materialparameter zu identifizieren, dann ist in den vorgestellten Beziehungen überall p durch p_i mit $i = 1, \dots, nparam$ zu ersetzen.

Für ein konkretes Deformationsgesetz ohne Berücksichtigung der Substruktur mit einer modifizierten quadratischen Fließbedingung nach Baltov-Sawczuk seien die wichtigsten Beziehungen zur Ermittlung der erforderlichen partiellen Ableitungen nach den Materialparametern nochmals zusammengefasst:

$$F = (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \cdot \cdot \mathbf{K}_4 \cdot \cdot (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) - \frac{2}{3} T_F^2 = 0 \tag{92}$$

$$\mathbf{Q}_1 = -c \lambda \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\alpha}} = -2c \lambda \mathbf{K}_4 \cdot \cdot (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \tag{93}$$

$$Q_3 = -\lambda \sqrt{\frac{2}{3} \mathbf{B} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} \cdot \cdot \mathbf{B}^\sharp \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}}} \tag{94}$$

$$T_F = T_{F_0} + a [(E_v^p + \beta)^n - \beta^n] \tag{95}$$

$$\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3, p_4)^T = (T_{F_0}, a, n, c)^T. \tag{96}$$

Diese Ableitungen ergeben sich damit zu:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}_1}{\partial \mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ -2\lambda \mathbf{K}_4 \cdot \cdot (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \end{pmatrix} \tag{97}$$

$$\frac{\partial Q_3}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{T} \partial \mathbf{p}} = \mathbf{0}_3 \tag{98}$$

$$\frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} = \begin{pmatrix} -\frac{4}{3} T_F \frac{\partial T_F}{\partial T_{Fo}} \\ -\frac{4}{3} T_F \frac{\partial T_F}{\partial a} \\ -\frac{4}{3} T_F \frac{\partial T_F}{\partial n} \\ -\frac{4}{3} T_F \frac{\partial T_F}{\partial c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{4}{3} T_F \\ -\frac{4}{3} T_F [(E_v^p + \beta)^n - \beta^n] \\ -\frac{4}{3} T_F a [(E_v^p + \beta)^n \ln(E_v^p + \beta) - \beta^n \ln \beta] \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (99)$$

8 Zusammenfassung und Ausblick

Entsprechend der Aufgabenstellung im Teilprojekt D1 des SFB393 der TU Chemnitz wurde die Entwicklung der theoretischen Grundlagen der Parameteridentifikation für elastisch-plastische Deformationsgesetze bei großen Verzerrungen auf der Basis der Analyse inhomogener Verschiebungsfelder dargestellt. Die Identifikation der Materialparameter wurde mit Hilfe eines deterministischen nichtlinearen Optimierungsverfahrens (Levenberg-Marquardt-Methode) für eine Zielfunktion vom least-squares-Typ realisiert. Kernstück ist dabei die Berechnung der numerischen Vergleichswerte (Knotenverschiebungskoordinaten) mit Hilfe der FEM in jedem Optimierungsschritt.

Dazu wurde für das experimentelle parallele FEM-Programm PMHP eine Materialchnittstelle entwickelt, welche die Berücksichtigung von Deformationsgesetzen für große elastisch-plastische Verzerrungen in einer verallgemeinerten Formulierung ermöglicht. Bei der Herleitung spezieller Materialmodelle wurde eine thermodynamisch konsistente Formulierung angestrebt. Im plastischen Teildeformationsgesetz können neben isotroper und kinematischer Verfestigung auch Anfangsanisotropien berücksichtigt werden. Der elastische Anteil beschreibt nichtlinear-hyperelastisches Materialverhalten.

Das Deformationsgesetz wurde als Algebro-Differentialgleichungssystem formuliert, dessen zeitdiskretisierte Form erfolgreich numerisch umgesetzt wurde. Diese Herangehensweise ermöglicht zugleich die effektive Ermittlung der konsistenten Materialmatrix.

Essentiell für eine erfolgreiche Nutzung deterministischer Optimierungsverfahren ist die zuverlässige Berechnung des Gradienten der Zielfunktion – die Sensitivitätsanalyse. Es wurde ein Verfahren der semianalytischen Sensitivitätsanalyse beschrieben, dessen Grundbeziehungen aus dem Prinzip der virtuellen Arbeit abgeleitet wurden. Die Ableitungen von stützstellenbezogenen Variablen nach den Materialparametern folgen aus der Lösung eines Systems nichtlinearer algebraischer Gleichungen, das sich aus einer impliziten Differentiation des Deformationsgesetzes ergibt. Auch hierbei können die analogen Strukturen des zeitdiskretisierten Materialmodells effektiv genutzt werden.

Zukünftige Aufgaben sind die Untersuchung verschiedener Einflussfaktoren auf Ergebnis und Konvergenzverhalten des Optimierungsprozesses und die Einbeziehung einer unterliegenden Substruktur [4, 12] in das Deformationsgesetz.

Literatur

- [1] BALTOV, A., SAWCZUK, A.; A rule of anisotropic hardening, *Acta Mechanica* **1**, 1965, 81-92.
- [2] BENEDIX, U.; *Parameterschätzung für elastisch-plastische Deformationsgesetze bei Berücksichtigung lokaler und globaler Vergleichsgrößen*, Dissertation, TU Chemnitz, 2000.
- [3] BOHNSACK, E.; *Zur Identifikation von Verfestigungsparametern elastisch-plastischer Stoffgesetze an inhomogen verformten Proben*, Dissertation, TU Chemnitz-Zwickau, 1997.
- [4] DAFALIAS, Y.F.; Issues on the constitutive formulation at large elastoplastic deformations, Part1: Kinematics, *Acta Mechanica* **69**, 1987, 119-138.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] LEE, E.H.; Elastic-plastic deformation at finite strains, *Journal of applied mechanics* **36**, 1969, 1-6.
- [8] LEVENBERG, K.; A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares, *Quart. Applied Mathematics* **2**, 1944, 164-168.
- [9] MAHNKEN, R., STEIN, E.; Parameter identification for finite deformation elastoplasticity in principal directions, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* bf 147, 1997, 17-39.
- [10] MAHNKEN, R., KUHL, E.; Parameter identification of gradient enhanced damage models with the finite element method, *Eur. J. Mech. A/Solids* bf 18, 1999, 819-835.
- [11] MAHNKEN, R.; Aspects on the Finite-Element Implementation of the Gurson Model including Parameter Identification, *Int. J. Plast.* **15(11)**, 1999, 1111-1137.
- [12] MANDEL, J.; Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques, *Int. J. Solids and Structures* **9**, 1973, 725.
- [13] MARQUARDT, D.W.; An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters, *SIAM J. Applied Mathematics* **11**, 1963, 431-441.

- [14] D. Michael, M. Meisel, *Some remarks to large deformation elasto-plasticity (continuum formulation)*, TU Chemnitz-Zwickau, Preprint SFB393/98-28, 1998.
- [15] NARASIMHAN, M.N.L.; *Principles of Continuum Mechanics*, John Wiley and Sons, New York, 1993.
- [16] TRUESDELL, C., NOLL, W.; *The non-linear field theories of mechanics*, second ed., Springer Verlag, Berlin, New York, Heidelberg, 1992.

Other titles in the SFB393 series:

- 99-01 P. Kunkel, V. Mehrmann, W. Rath. Analysis and numerical solution of control problems in descriptor form. January 1999.
- 99-02 A. Meyer. Hierarchical preconditioners for higher order elements and applications in computational mechanics. January 1999.
- 99-03 T. Apel. Anisotropic finite elements: local estimates and applications (Habilitationsschrift). January 1999.
- 99-04 C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber. Thermoelectric transport properties in disordered systems near the Anderson transition. February 1999.
- 99-05 D. Michael. Notizen zu einer geometrisch motivierten Plastizitätstheorie. Februar 1999.
- 99-06 T. Apel, U. Reichel. SPC-PM Po 3D V 3.3, User's Manual. February 1999.
- 99-07 F. Tröltzsch, A. Unger. Fast solution of optimal control problems in the selective cooling of steel. March 1999.
- 99-08 W. Rehm, T. Ungerer (Eds.). Ausgewählte Beiträge zum 2. Workshop Cluster-Computing 25./26. März 1999, Universität Karlsruhe. März 1999.
- 99-09 M. Arav, D. Hershkowitz, V. Mehrmann, H. Schneider. The recursive inverse eigenvalue problem. March 1999.
- 99-10 T. Apel, S. Nicaise, J. Schöberl. Crouzeix-Raviart type finite elements on anisotropic meshes. May 1999.
- 99-11 M. Jung. Einige Klassen iterativer Auflösungsverfahren (Habilitationsschrift). Mai 1999.
- 99-12 V. Mehrmann, H. Xu. Numerical methods in control, from pole assignment via linear quadratic to H_∞ control. June 1999.
- 99-13 K. Bernert, A. Eppler. Two-stage testing of advanced dynamic subgrid-scale models for Large-Eddy Simulation on parallel computers. June 1999.
- 99-14 R. A. Römer, M. E. Raikh. The Aharonov-Bohm effect for an exciton. June 1999.
- 99-15 P. Benner, R. Byers, V. Mehrmann, H. Xu. Numerical computation of deflating subspaces of embedded Hamiltonian pencils. June 1999.
- 99-16 S. V. Nepomnyaschikh. Domain decomposition for isotropic and anisotropic elliptic problems. July 1999.
- 99-17 T. Stykel. On a criterion for asymptotic stability of differential-algebraic equations. August 1999.
- 99-18 U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, J. X. Zhong. Universal level-spacing statistics in quasiperiodic tight-binding models. August 1999.
- 99-19 R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber. Numerical results for two interacting particles in a random environment. August 1999.
- 99-20 C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber. Transport Properties near the Anderson Transition. August 1999.
- 99-21 P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber. Phase diagram of the three-dimensional Anderson model of localization with random hopping. August 1999.

- 99-22 M. Bollhöfer, V. Mehrmann. A new approach to algebraic multilevel methods based on sparse approximate inverses. August 1999.
- 99-23 D. S. Watkins. Infinite eigenvalues and the QZ algorithm. September 1999.
- 99-24 V. Uski, R. A. Römer, B. Mehlig, M. Schreiber. Incipient localization in the Anderson model. August 1999.
- 99-25 A. Meyer. Projected PCGM for handling hanging in adaptive finite element procedures. September 1999.
- 99-26 F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber. Energy-level statistics at the metal-insulator transition in anisotropic system. September 1999.
- 99-27 F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, V. Uski. Critical properties of the metal-insulator transition in anisotropic systems. October 1999.
- 99-28 M. Theß. Parallel multilevel preconditioners for thin shell problems. November 1999.
- 99-29 P. Biswas, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber. Off-diagonal disorder in the Anderson model of localization. November 1999.
- 99-30 C. Mehl. Anti-triangular and anti-m-Hessenberg forms for Hermitian matrices and pencils. November 1999.
- 99-31 A. Barinka, T. Barsch, S. Dahlke, M. Konik. Some remarks for quadrature formulas for refinable functions and wavelets. November 1999.
- 99-32 H. Harbrecht, C. Perez, R. Schneider. Biorthogonal wavelet approximation for the coupling of FEM-BEM. November 1999.
- 99-33 C. Perez, R. Schneider. Wavelet Galerkin methods for boundary integral equations and the coupling with finite element methods. November 1999.
- 99-34 W. Dahmen, A. Kunoth, R. Schneider. Wavelet least squares methods for boundary value problems. November 1999.
- 99-35 S. I. Solov'ev. Convergence of the modified subspace iteration method for nonlinear eigenvalue problems. November 1999.
- 99-36 B. Heinrich, B. Nkemzi. The Fourier-finite-element method for the Lamé equations in axisymmetric domains. December 1999.
- 99-37 T. Apel, F. Milde, U. Reichel. SPC-PM Po 3D v 4.0 - Programmers Manual II. December 1999.
- 99-38 B. Nkemzi. Singularities in elasticity and their treatment with Fourier series. December 1999.
- 99-39 T. Penzl. Eigenvalue decay bounds for solutions of Lyapunov equations: The symmetric case. December 1999.
- 99-40 T. Penzl. Algorithms for model reduction of large dynamical systems. December 1999.
- 00-01 G. Kunert. Anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method. January 2000.
- 00-02 V. Mehrmann, D. Watkins. Structure-preserving methods for computing eigenpairs of large sparse skew-Hamiltonian/Hamiltonian pencils. January 2000.

- 00-03 X. W. Guan, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber. Integrable impurities for an open fermion chain. January 2000.
- 00-04 R. A. Römer, M. Schreiber, T. Vojta. Disorder and two-particle interaction in low-dimensional quantum systems. January 2000.
- 00-05 P. Benner, R. Byers, V. Mehrmann, H. Xu. A unified deflating subspace approach for classes of polynomial and rational matrix equations. January 2000.
- 00-06 M. Jung, S. Nicaise, J. Tabka. Some multilevel methods on graded meshes. February 2000.
- 00-07 H. Harbrecht, F. Paiva, C. Perez, R. Schneider. Multiscale Preconditioning for the Coupling of FEM-BEM. February 2000.
- 00-08 P. Kunkel, V. Mehrmann. Analysis of over- and underdetermined nonlinear differential-algebraic systems with application to nonlinear control problems. February 2000.
- 00-09 U.-J. Görke, A. Bucher, R. Kreißig, D. Michael. Ein Beitrag zur Lösung von Anfangs-Randwert-Problemen einschließlich der Materialmodellierung bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen mit Hilfe der FEM. März 2000.
- 00-10 M. J. Martins, X.-W. Guan. Integrability of the D_n^2 vertex models with open boundary. March 2000.
- 00-11 T. Apel, S. Nicaise, J. Schöberl. A non-conforming finite element method with anisotropic mesh grading for the Stokes problem in domains with edges. March 2000.
- 00-12 B. Lins, P. Meade, C. Mehl, L. Rodman. Normal Matrices and Polar Decompositions in Indefinite Inner Products. March 2000.
- 00-13 C. Bourgeois. Two boundary element methods for the clamped plate. March 2000.
- 00-14 C. Bourgeois, R. Schneider. Biorthogonal wavelets for the direct integral formulation of the heat equation. March 2000.
- 00-15 A. Rathsfeld, R. Schneider. On a quadrature algorithm for the piecewise linear collocation applied to boundary integral equations. March 2000.
- 00-16 S. Meinel. Untersuchungen zu Druckiterationsverfahren für dichteänderliche Strömungen mit niedriger Machzahl. März 2000.
- 00-17 M. Konstantinov, V. Mehrmann, P. Petkov. On Fractional Exponents in Perturbed Matrix Spectra of Defective Matrices. April 2000.
- 00-18 J. Xue. On the blockwise perturbation of nearly uncoupled Markov chains. April 2000.
- 00-19 N. Arada, J.-P. Raymond, F. Tröltzsch. On an Augmented Lagrangian SQP Method for a Class of Optimal Control Problems in Banach Spaces. April 2000.
- 00-20 H. Harbrecht, R. Schneider. Wavelet Galerkin Schemes for 2D-BEM. April 2000.
- 00-21 V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, M. Schreiber. An exact-diagonalization study of rare events in disordered conductors. April 2000.
- 00-22 V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, M. Schreiber. Numerical study of eigenvector statistics for random banded matrices. May 2000.
- 00-23 R. A. Römer, M. Raikh. Aharonov-Bohm oscillations in the exciton luminescence from a semiconductor nanoring. May 2000.

- 00-24 R. A. Römer, P. Ziesche. Hellmann-Feynman theorem and fluctuation-correlation analysis of i the Calogero-Sutherland model. May 2000.
- 00-25 S. Beuchler. A preconditioner for solving the inner problem of the p-version of the FEM. May 2000.
- 00-26 C. Villagonzalo, R.A. Römer, M. Schreiber, A. MacKinnon. Behavior of the thermopower in amorphous materials at the metal-insulator transition. June 2000.
- 00-27 C. Mehl, V. Mehrmann, H. Xu. Canonical forms for doubly structured matrices and pencils. June 2000. S. I. Solov'ev. Preconditioned gradient iterative methods for nonlinear eigenvalue problems. June 2000.
- 00-29 A. Eilmes, R. A. Römer, M. Schreiber. Exponents of the localization lengths in the bipartite Anderson model with off-diagonal disorder. June 2000.
- 00-30 T. Grund, A. Rösch. Optimal control of a linear elliptic equation with a supremum-norm functional. July 2000.
- 00-31 M. Bollhöfer. A Robust ILU Based on Monitoring the Growth of the Inverse Factors. July 2000.
- 00-32 N. Arada, E. Casas, F. Tröltzsch. Error estimates for a semilinear elliptic control problem. July 2000.
- 00-33 T. Penzl. LYAPACK Users Guide. August 2000.
- 00-34 B. Heinrich, K. Pietsch. Nitsche type mortaring for some elliptic problem with corner singularities. September 2000.
- 00-35 P. Benner, R. Byers, H. Faßbender, V. Mehrmann, D. Watkins. Cholesky-like Factorizations of Skew-Symmetric Matrices. September 2000.
- 00-36 C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, A. MacKinnon. Critical Behavior of the Thermoelectric Transport Properties in Amorphous Systems near the Metal-Insulator Transition. September 2000.
- 00-37 F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber. Metal-insulator transition in anisotropic systems. October 2000.
- 00-38 T. Stykel. Generalized Lyapunov Equations for Descriptor Systems: Stability and Inertia Theorems. October 2000.

The complete list of current and former preprints is available via
<http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/preprints.html>.