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

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

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. D. Michael
Professur Numerische Analysis
Fakultät für Mathematik

Dr. M. Scherzer
Professur Numerische Analysis
Fakultät für Mathematik

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

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.

Die FEM ist insbesondere in den Phasen der Berechnung der lokalen Steifigkeitsmatrizen (*assembling*) sowie der Berechnung kinematischer und kinetischer Größen (*update*) natürlich parallelisierbar, da beide Prozesse jeweils separat auf den Integrationsstützstellen ablaufen, ohne Informationen von anderen Teilen des FE-Modells zu benötigen. Diese Tatsache legt die Entwicklung effektiver FE-Programme für Parallelrechner nahe. Problematische Schnittstellen des *"Mechanikteils"* zur Informatik und Mathematik sind insbesondere die Ein- und Ausgabe von FE-Daten sowie die Aufstellung und Lösung des globalen Steifigkeitssystems, da diese Prozesse notwendigerweise einen umfangreichen Datenaustausch erfordern.

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. Aufbauend auf diesen Erfahrungen war es ein Ziel, im Rahmen des SFB ein FEM-Programm zur Simulation inelastischen Materialverhaltens für massiv parallele Rechner zu entwickeln 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–PMPo3D (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. Aufbauend auf diesen Ergebnissen erfolgte die Implementierung und Austestung von BPX–Techniken in SPC–PMEP. Die Linearisierungstechniken zur Behandlung der das elastisch–plastische Materialverhalten beschreibenden Index 2 DAE's konnten verbessert werden (Verwendung der Trapezregel [Crank–Nicolson-Verfahren]). Die Schnittstelle zu den das Materialverhalten charakterisierenden Routinen war so allgemein und umfassend zu gestalten, daß Neuentwicklungen im Bereich der Deformationsgesetze ohne massive Eingriffe in die Programmstruktur implementiert werden können.

Zur Vorbereitung der Erweiterung des Anwendungsspektrums der entwickelten Algorithmen und deren Programmrealisierungen auf geometrisch nichtlineare Probleme konnte ein einfaches Modell zur Beschreibung großer elastisch–plastischer Deformationen, aufbauend auf in der Literatur gebräuchlichen Modellen, 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 ist offen für eventuell erforderliche Erweiterungen. Zur Zeit der Berichterstattung sind die Implementierungsarbeiten noch nicht abgeschlossen. Die Index 2 DAE's zur Beschreibung des elastisch–plastische Materialverhalten bei großen Deformationen sind von vergleichbarer Struktur wie die entsprechenden Beziehungen im geometrisch linearen Fall. Daher ist bei ihrer Lösung auch die gleiche Effizienz zu erwarten.

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 Materialgesetze (da für die bisherigen Untersuchungen im Rahmen der Parameteridentifikation lediglich das mechanische Verhalten relevant ist, wird im weiteren der speziellere Begriff *Deformationsgesetz* verwendet). In der Praxis zeigt sich, daß gerade die Auswahl geeigneter Deformationsgesetze und die Identifikation darin enthaltener Materialparameter problematisch sind, und in ungünstigen Fällen zu erheblichen Fehlern im Simulationsergebnis führen können. Ein weiteres Ziel der Untersuchungen im Teilprojekt bestand deshalb darin, unter Nutzung und Weiterentwicklung des parallelisierten FE-Programmes für die jeweiligen Vorwärtsrechnungen und seiner Einbettung in einen Optimierungsalgorithmus die Anpassung von Materialmodellen an gemessene inhomogene Verschiebungsfelder und somit eine verbesserte Materialparameteridentifikation zu erreichen.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

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 und berechneten lokalen und/oder globalen mechanischen Größen ermöglicht. Dabei zeigt sich, daß die Materialparameteridentifikation ein schlecht gestelltes Problem darstellt. 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.

Ein zentraler Punkt dieser Methodik ist die Bereitstellung der numerischen Vergleichswerte in der Zielfunktion. Da diese und deren Gradient (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 typischen Spannungs- und Verzerrungswerten 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 jedoch 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].

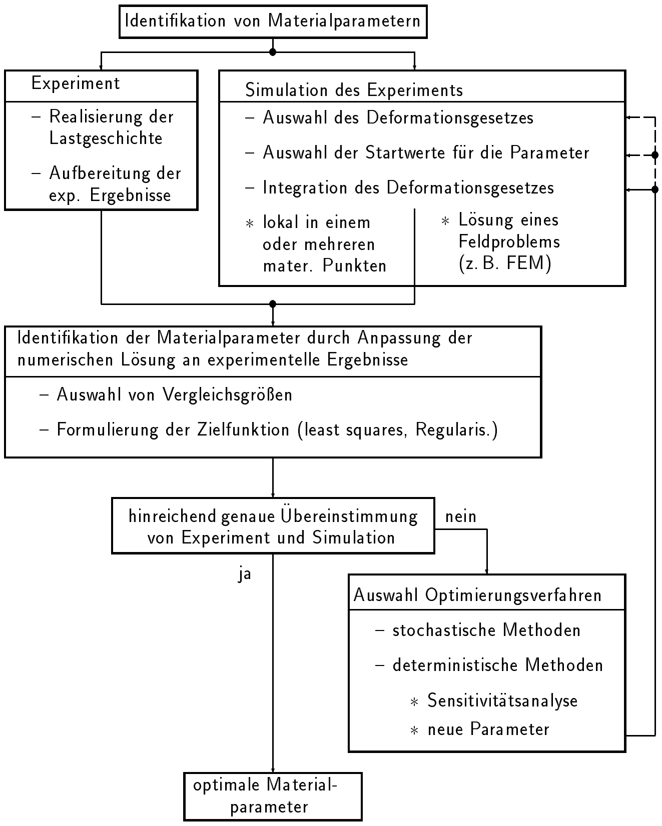


Bild 1: Schematische Darstellung des Prozesses der Materialparameteridentifikation durch Analyse inhomogener Spannungs- und Verzerrungszustände.

Bei der numerischen Behandlung von nichtlinearen Problemen der Kontinuumsmechanik hat sich die Methode der konsistenten Linearisierung als effizienter Algorithmus bewährt. Die darauf basierende Variationsformulierung ergibt sich in der Momentankonfiguration $\Phi_t(\mathcal{B})$ zu

$$\int\limits_{\Phi_t(\mathcal{B})} \mathbf{d}^\flat_\psi : \left[\frac{2}{J}\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial \mathbf{g}} \cdot \mathbf{g} + \boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{1}\right] : \mathbf{d}^\flat_\xi \, dv = \int\limits_{\Phi_t(\mathcal{B})} \left[\rho\langle \mathbf{l}, \xi\rangle - \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}^\flat_\xi\right] dv + \int\limits_{\partial\Phi_t(\mathcal{B})} \langle \mathbf{r}, \xi\rangle \, da$$

[mars83], [wri88] ($\boldsymbol{\sigma}$ – *Cauchy*scher Spannungstensor; $\boldsymbol{\tau} = J\boldsymbol{\sigma}$ – *Kirchhoff*scher Spannungstensor; $\mathbf{l}$ – Volumenkräfte; $\mathbf{r}$ – Oberflächenlasten; ξ – Testfunktion; ψ – Verschiebungsinkrement; ρ – Dichte; $J = \left(\sqrt{\det(\mathbf{g})}\big/\sqrt{\det(\mathbf{G})}\right)\det(\mathbf{F})$; $\mathbf{F}$ – Deformationsgradient; $\mathbf{g}$ bzw. $\mathbf{G}$ – Metriktensoren auf $\Phi_t(\mathcal{B})$ bzw. $\mathcal{B}$; $\mathbf{d}^\flat_\xi = \frac{1}{2}\left[grad\,\xi^\flat + (grad\,\xi^\flat)^T\right]$).

Das elastisch–plastische Materialverhalten kann beim Auftreten geometrischer Nichtlinearitäten entsprechend [sim92], [sim93] und unter der zusätzlichen Annahme bezüglich der Dichte der freien Energie $\phi = \phi(\mathbf{g} - \mathbf{b}^{e^{-1}}, \boldsymbol{\theta})$ [mic97] wie folgt beschrieben werden durch

Fließbedingung	$F(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\kappa})$	$=$	0
Fließgesetz	$\mathbf{d}^p$	$=$	$\dot{\lambda}\dfrac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}}$
Evolutionsgleichung der inneren Variablen	$L_v \boldsymbol{\kappa}$	$=$	$\dot{\lambda}\mathbf{q}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\kappa})$

mit $\boldsymbol{\sigma} = 2\rho\,(\partial\phi/\partial\mathbf{g})\,, \boldsymbol{\kappa} = -\rho\,(\partial\phi/\partial\boldsymbol{\theta})$ ($\mathbf{b}^e$ - elastischer Linker *Cauchy–Green* Tensor; $\mathbf{d}^p$ - plastischer Deformationsgeschwindigkeitstensor, $L_v\boldsymbol{\kappa}$ -Lie-Ableitung der inneren Variablen $\boldsymbol{\kappa}$, $\boldsymbol{\theta}$ - *konjugierte* innere Variable).

Diese Vorgehensweise findet in ihrer Reduzierung auf geometrisch lineare Probleme in dem zur Parameteridentifikation verwendeten FE–Code Anwendung. Die geometrisch nichtlineare Version steht kurz vor der Realisierung und wird im kommenden Bewilligungszeitraum die programmtechnische Grundlage für die weiteren Untersuchungen zur Parameteridentifikation bilden.

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)

[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)

[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)

[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)

[mars83] Marsden, J.E., Hughes, T.R.J., *Mathematical Foundations of Elasticity*, Prentice–Hall, Englewood Cliffs (1983)

[mic97] 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)

[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)

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

[sim92] Simo, J.C., Miehe, C., *Associative coupled thermoplasticity at finite strains: Formulation, numerical analysis and implementation*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **98**, 41–104, (1992)

[sim93] Simo, J.C., *Recent developments in the numerical analysis of plasticity*, in: Stein, E. (Hrsg.), *Progress in computational analysis of inelastic structures*, S.115–173, CISM Report No.321, Udine, Springer Verlag, Wien, New York (1993)

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

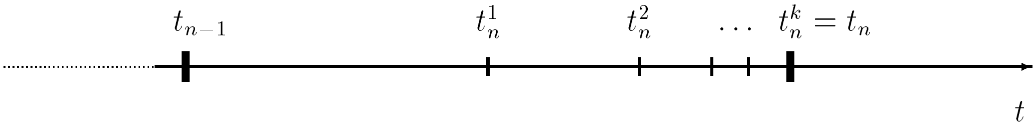
[stei94] Stein, E., *Parameteridentifikation mit Finite–Element Methoden*, Förderungsanträge SFB 319 für 1994-96, TU Braunschweig (1993)

[wri88] Wriggers, P., *Konsistente Linearisierungen in der Kontinuumsmechanik und ihre Anwendung auf die Finite–Element–Methode*, IBNM Bericht 88/4, Universität Hannover (1988)

2.4 Ergebnisse

Im Rahmen der Arbeiten des Teilprojektes erfolgt zunächst eine Beschränkung auf skleronomes elastisch-plastisches Materialverhalten mit einer allgemeinen quadratischen Fließbedingung bei kleinen Verzerrungen unter Vernachlässigung von Temperatureinflüssen. Zur Entwicklung des Deformationsgesetzes werden lediglich phänomenologische kontinuumsmechanische Betrachtungen herangezogen. Das Deformationsgesetz muß so formuliert werden, daß es für eine Implementierung in das vorliegende parallele FEM-Programm PMEP geeignet ist.

Bild 2 zeigt in schematisierter Form den in PMEP verwendeten Algorithmus zur Linearisierung und Lösung des nichtlinearen FE-Problems.



$\boldsymbol{u}_{n-1}$,
$\boldsymbol{\varepsilon}_{n-1}$,
$\boldsymbol{\sigma}_{n-1}$,
$\boldsymbol{\kappa}_{n-1}$,
$\dot{\lambda}_{n-1}$

Gleichgewichtsiteration
(*im Newton-Schritt* j)

$\boldsymbol{L}_n \;\Rightarrow\; \boldsymbol{u}_n^j \;\Rightarrow\; \boldsymbol{\varepsilon}_n^j \quad (j \in [1, k])$

$\Rightarrow$ *Integration des Deformationsgesetzes in den Integrationsstützstellen*

$\boldsymbol{\sigma}_n^j\,,\;\; \boldsymbol{\kappa}_n^j\,,\;\; \dot{\lambda}_n^j$

$\Rightarrow$ *konsistente Materialmatrix*

Bild 2: Schematische Darstellung des Prozesses der Lösung eines nichtlinearen FE-Problems im Zeit(Last-)schritt $[t_{n-1}, t_n]$.

Ausgehend von der bekannten Lösung des FE-Systems zum Beginn des aktuellen Lastschrittes (d. h. zum Zeitpunkt t_{n-1}) werden mit einem Newton-Raphson-Verfahren bei Erfüllung des globalen Gleichgewichts die Knotenverschiebungen in den einzelnen Iterationsschritten (Zeitpunkte t_n^j) ermittelt. In jedem globalen Newton-Schritt ergeben sich aus der aktuellen Verschiebungslösung über rein geometrische Beziehungen die zugehörigen Verzerrungen bzw. Verzerrungsinkremente. Damit werden in jeder Integrationsstützstelle die Integration des Deformationsgesetzes und die Ermittlung der konsistenten Materialmatrix ermöglicht. Dieser Prozess soll im folgenden kurz skizziert werden.

Die Beschreibung elastisch-plastischen Materialverhaltens erfordert im Rahmen der vorgestellten Theorie die Definition folgender Beziehungen ([krei92]):

- Fließbedingung (Festlegung der Fließgrenze),
- Fließgesetz zur Verbindung der plastischen Verzerrungsgeschwindigkeiten mit den Spannungsgeschwindigkeiten,

- Evolutionsgleichungen für die Entwicklung der inneren Variablen mit der Belastungsgeschichte (Verfestigungsregeln).

Daraus läßt sich das Deformationsgesetz für geometrisch lineare Aufgabenstellungen als System von Differentialgleichungen unter Zusatz der algebraischen Fließbedingung $F = 0$ darstellen (Index 2 DAE). Eine Verallgemeinerung für geometrisch nichtlineare Probleme ist möglich [mic97]:

$$\left(\boldsymbol{C}^{el}\right)^{-1} \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \dot{\lambda}\,\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{0} \tag{2.1}$$

$$\dot{\boldsymbol{\kappa}} - \dot{\lambda}\,\boldsymbol{q}(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\kappa},\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{0} \tag{2.2}$$

$$F(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\kappa},\boldsymbol{p}) = 0 \tag{2.3}$$

mit der Elastizitätsmatrix $\boldsymbol{C}^{el} = 2\rho\frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{g}} = \rho\frac{\partial\phi}{\partial\boldsymbol{\varepsilon}}$, den *Cauchy*-Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$, den linearisierten Verzerrungen $\boldsymbol{\varepsilon}$, den inneren Variablen $\boldsymbol{\kappa}$, dem plastischen Multiplikator $\dot{\lambda}$ und den Materialparametern $\boldsymbol{p}$.

Ausgehend von einem allgemeinen Differenzenschema

$$y_n = y_{n-1} + (\gamma\, f_n + (1-\gamma)\, f_{n-1})\,\Delta\, t \tag{2.4}$$

zur Lösung von Differentialgleichungen

$$\frac{d\,y}{d\,t} = \dot{y} = f(t,\,y) \tag{2.5}$$

mit

$$\Delta\, t = t_n - t_{n-1}\,, \quad \gamma \in [0,1] \tag{2.6}$$

erhält man die folgende diskretisierte Form des Deformationsgesetzes:

$$\left(\boldsymbol{C}^{el}\right)^{-1} \cdot\cdot\,(\boldsymbol{\sigma}_n - \boldsymbol{\sigma}_{n-1}) + \left[\gamma\dot{\lambda}_n\,\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}}\bigg|_n + (1-\gamma)\dot{\lambda}_{n-1}\,\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}}\bigg|_{n-1}\right]\Delta t - \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n = \boldsymbol{0} \tag{2.7}$$

$$\boldsymbol{\kappa}_n - \boldsymbol{\kappa}_{n-1} - \left[\gamma\dot{\lambda}_n\boldsymbol{q}_n + (1-\gamma)\dot{\lambda}_{n-1}\,\boldsymbol{q}_{n-1}\right]\Delta t = \boldsymbol{0} \tag{2.8}$$

$$F(\boldsymbol{\sigma}_n,\,\boldsymbol{\kappa}_n,\,\boldsymbol{p}) = 0 \tag{2.9}$$

wobei die Werte $\gamma = 0$ und $\gamma = 1$ zu einem expliziten bzw. impliziten Euler-Verfahren führen, $\gamma = 0,5$ die typischen Beziehungen des Crank-Nicolson-Verfahrens (Trapezregel) zur Folge hat.

Dieses nichtlineare algebraische Gleichungssystem läßt sich bei Einführung des Zustandsvektors

$$\boldsymbol{z} \;=\; (\boldsymbol{\sigma},\, \boldsymbol{\kappa},\, \dot{\lambda})^T \tag{2.10}$$

vorteilhaft in der kompakten Schreibweise

$$\boldsymbol{G}_n \;=\; \boldsymbol{G}(\boldsymbol{z}_n, \boldsymbol{z}_{n-1}, \boldsymbol{p}, \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n) \;=\; \boldsymbol{0} \tag{2.11}$$

darstellen. Seine Lösung [mey97] erfolgt mit einem Newton-Verfahren

$$\boldsymbol{z}_n^{i+1} \;=\; \boldsymbol{z}_n^i \;-\; \Bigg(\underbrace{\nabla_{\boldsymbol{z}_n^i} \boldsymbol{G}}_{Jacobian} \Bigg)^{-1} \boldsymbol{G}_n^i \tag{2.12}$$

und der Jakobi-Matrix in folgender Form.

$$\nabla_{\boldsymbol{z}_n^i} \boldsymbol{G} = \begin{pmatrix} \left(\left(\boldsymbol{C}^{el}\right)^{-1} + \gamma\dot{\lambda}_n^i \left.\dfrac{\partial^2 F}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2}\right|_n^i \Delta t\right) & \gamma\dot{\lambda}_n^i \left.\dfrac{\partial^2 F}{\partial\boldsymbol{\sigma}\partial\boldsymbol{\kappa}}\right|_n^i \Delta t & \gamma \left.\dfrac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}}\right|_n^i \Delta t \\ -\gamma\dot{\lambda}_n^i \left.\dfrac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial \boldsymbol{\sigma}}\right|_n^i \Delta t & \left(\boldsymbol{1} - \gamma\dot{\lambda}_n^i \left.\dfrac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial \boldsymbol{\kappa}}\right|_n^i \Delta t\right) & -\gamma \boldsymbol{q}_n^i \Delta t \\ \left.\dfrac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}}\right|_n^i & \left.\dfrac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\kappa}}\right|_n^i & \boldsymbol{0} \end{pmatrix} \tag{2.13}$$

Die für den nächsten globalen Iterationsschritt benötigte konsistente Materialmatrix lässt sich aus der impliziten Differentiation des diskretisierten Deformationsgesetzes (2.11) ableiten. Das führt auf die Lösung eines linaren algebraischen Gleichungssystems mit ähnlicher Struktur, wie sie das System (2.12) aufweist ([mich95, boh97a]).

Zur möglichst genauen Erfassung des elastisch-plastischen Materialverhaltens bei isotroper, kinematischer und formativer Verfestigung wurde ein verallgemeinertes Deformationsgesetz ausgewählt, erweitert und in PMEP implementiert. Die Fließbedingung wurde in Anlehnung an die Formulierung von *Baltov-Sawczuk* als quadratische Funktion des effektiven Spannungsdeviators $\overset{D}{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\alpha}$ mit dem Spannungsdeviator $\overset{D}{\boldsymbol{\sigma}}$ und den deviatorischen Rückspannungen $\boldsymbol{\alpha}$ dargestellt:

$$F \;=\; N_{ijkl} \left(\overset{D}{\sigma}_{ij} - \alpha_{ij}\right)\left(\overset{D}{\sigma}_{kl} - \alpha_{kl}\right) \;-\; \sigma_F^2(\varepsilon_v^{pl}) \;=\; 0\,. \tag{2.14}$$

Das Verfestigungsverhalten wird mit einer Fließkurve der Form

$$\sigma_F \;=\; a(\varepsilon_v^{pl}) \tag{2.15}$$

beschrieben. Akzeptable numerische Ergebnisse konnten mit einer Approximation der Funktion $a(\varepsilon_v^{pl})$ durch

- ein modifiziertes Potenzgesetz nach *Ludwik-Ulbricht*

$$\sigma_F = \sigma_{Fo} + \mathrm{a}_1 \left[\left(\varepsilon_v^{pl} + \mathrm{a}_2 \right)^{\mathrm{a}_3} - \mathrm{a}_2^{\mathrm{a}_3} \right] \tag{2.16}$$

- bzw. einem arctan-Ansatz

$$\sigma_F = \sigma_{Fo} + \mathrm{a}_1 \arctan \left(\mathrm{a}_2 \, \varepsilon_v^{pl} \right) + \mathrm{a}_3 \, \varepsilon_v^{pl} \tag{2.17}$$

erzielt werden. Für die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen wurde der Ansatz nach Backhaus zur Beschreibung der kinematischen Verfestigung

$$\dot{\alpha}_{ij} = b(\varepsilon_v^{pl}) \, \dot{\varepsilon}_{ij}^{pl} \tag{2.18}$$

mit folgenden Beziehungen zur Approximation der allgemeinen Funktion $b(\varepsilon_v^{pl})$ ausgewählt:

- Prager-Modell

$$\dot{\alpha}_{ij} = \mathrm{b}_1 \, \dot{\varepsilon}_{ij}^{pl} \tag{2.19}$$

- modifiziertes Prager-Modell

$$\dot{\alpha}_{ij} = \mathrm{b}_1 \left[\left(\varepsilon_v^{pl} + \mathrm{b}_2 \right)^{\mathrm{b}_3} - \mathrm{b}_2^{\mathrm{b}_3} \right] \dot{\varepsilon}_{ij}^{pl} \tag{2.20}$$

- Armstrong-Frederick-Modell

$$\dot{\alpha}_{ij} = \mathrm{b}_1 \, \dot{\varepsilon}_{ij}^{pl} - \mathrm{b}_2 \, \varepsilon_v^{pl} \, \alpha_{ij} \, . \tag{2.21}$$

Zur Beschreibung der formativen Verfestigung wurde die Formulierung von Danilov

$$\dot{N}_{ijkl} = \frac{c(\varepsilon_v^{pl})}{\dot{\varepsilon}_v^{pl}} \, \dot{\varepsilon}_{ij}^{pl} \, \dot{\varepsilon}_{kl}^{pl} \tag{2.22}$$

verwendet. Bei der numerischen Implementierung des Deformationsgesetzes wurden die Symmetriebedingungen

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ji} \tag{2.23}$$

$$N_{ijkl} = N_{jikl} = N_{ijlk} = N_{klij} \tag{2.24}$$

und die Bedingungen der plastischen Inkompressibilität

$$\alpha_{ii} = 0 \tag{2.25}$$

$$N_{iikl} = N_{ijkk} = 0 \tag{2.26}$$

berücksichtigt. Weitere Einzelheiten, u. a. zur Definition konkreter Ansätze für die Funktion $c(\varepsilon_v^{pl})$ zur Beschreibung der formativen Verfestigung und den erforderlichen Ableitungen des Deformationsgesetzes nach Spannungen und inneren Variablen zur Definition der Jakobi-Matrix (2.13), sind in [krt97b] enthalten. Für einige ausgewählte konkrete Formulierungen des Deformationsgesetzes wurden Vergleichsrechnungen zwischen der FE-Eigenentwicklung PMEP und dem kommerziellen FE-Programm MARC durchgeführt. Sie zeigten eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse und sind in [krei95] zusammengefaßt.

Zur Ermittlung der Materialparameter des elastischen Anteils des Deformationsgesetzes (*Hooke*sches Gesetz), der Anfangsfließortkurve (damit auch der möglichen Anfangsanisotropie) und der einachsigen Fließkurven im Zug- und Druckbereich wurden am Lehrstuhl für Experimentelle Mechanik der TU Chemnitz (Abteilung Prof. Naumann) Experimente an den im Bild 3 dargestellten geraden Vier-Punkt-Biege-Proben durchgeführt ([bene97] und [krei97] s. o.).

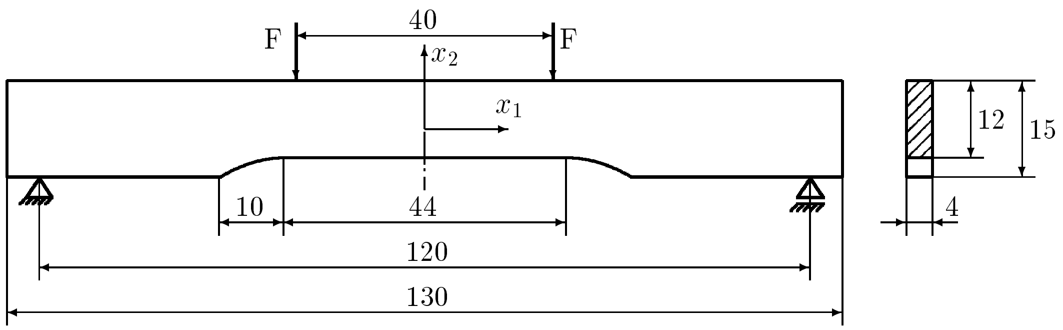


Bild 3: Geometrie und Belastung einer geraden Standard-Vier-Punkt-Biege-Probe.

Für die Identifikation der Verfestigungsparameter des elastisch-plastischen Deformationsgesetzes wurden in-plane-Verschiebungsfelder verwendet, die an der im Bild 4 dargestellten gekerbten Vier-Punkt-Biege-Proben ermittelt wurden.

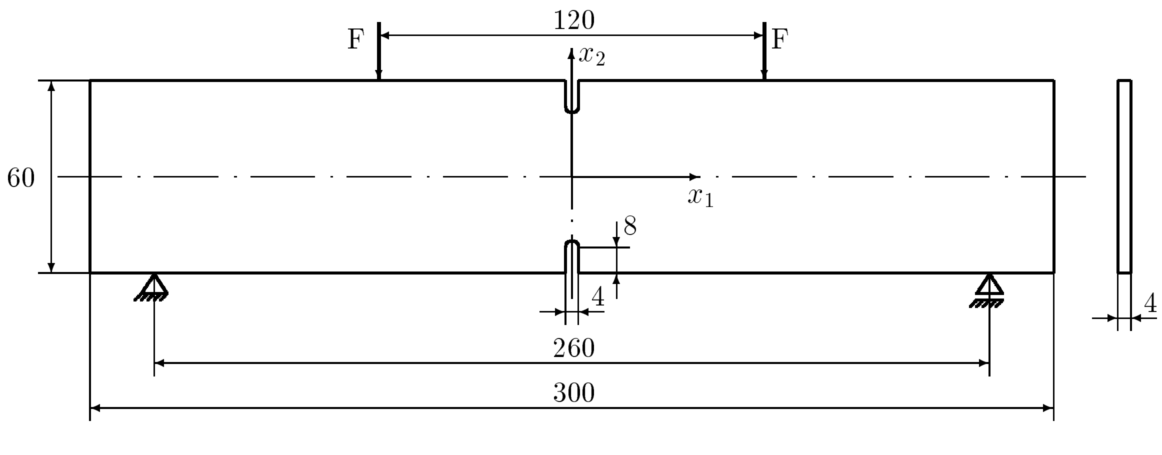


Bild 4: Geometrie und Belastung einer gekerbten Vier-Punkt-Biege-Probe.

Diese Versuche, die ebenfalls am Lehrstuhl für Experimentelle Mechanik der TU Chemnitz durchgeführt wurden, bieten für eine akzeptable Parameteridentifikation folgende Vorteile:

- Mit diesen Proben ist ein ebener Spannungszustand experimentell einfach zu realisieren.
- Lastzyklen mit Be-, Ent- und Wiederbelastung (Gegenlast), die für eine deutliche Trennung der verschiedenen Verfestigungsarten notwendig sind, können durch Umdrehen der jeweils entlasteten Probe in der Versuchsvorrichtung problemlos verwirklicht werden.
- Besonders in der Gegend der Kerbgründe weisen verschiedene materielle Punkte unterschiedliche lokale Beanspruchungsgeschichten auf. Dadurch verbessert sich das Informationsangebot für die Lösung des inversen Problems, und es findet eine Materialparameteridentifikation im Mittel über alle berücksichtigen Lastgeschichten statt.

In der folgenden Tabelle ist die Geschichte der äußeren Belastung der gekerbten Vier-Punkt-Biege-Probe angegeben.

Belastung			Entlastung			Gegenlast		
Last-schritt	Traversen-kraft N	Traversen-weg mm	Last-schritt	Traversen-kraft N	Traversen-weg mm	Last-schritt	Traversen-kraft N	Traversen-weg mm
1	13630	1,25	7	0	1,50	8	-2663	1,25
2	15791	1,50				9	-5353	1,00
3	17408	1,75				10	-7806	0,75
4	18709	2,00				11	-12300	0,25
5	19687	2,25				12	-14357	0,00
6	21028	2,50				13	-21790	-1,25
						14	-23356	-1,75

Die in-plane-Verschiebungsfelder u_x und u_y wurden in den einzelnen Lastschritten mit Hilfe des Moiré-Verfahrens vermessen. Ein typisches Moiré-Muster ist im Bild 5 dargestellt.

Ausgehend von einer definierten Referenzordnung werden die Moiré-Streifen mit einem Meßmikroskop abgetastet und mit Hilfe der Gitterkonstanten in Verschiebungen umgerechnet. Eine detailliertere Beschreibung des Verfahrens mit Hinweisen auf weiterführende Literatur ist in [boh97a] enthalten.

Wie bereits erwähnt, war es das Ziel, mit einem FE-Programm berechnete Verschiebungsfelder im Rahmen einer Optimierungsaufgabe an die gemessenen Werte anzupassen. Eine Eigenschaft des Moiré-Verfahrens besteht darin, daß die Koordinaten der Meßpunkte auf den Isotheten der Moiré-Bilder nicht notwendig mit den Koordinaten von Knoten des bei der Optimierung verwendeten FE-Netzes übereinstimmen müssen. In der Regel werden selbst die Koordinaten von Meßpunkten der Verschiebungsfelder u_x und u_y nicht zusammenfallen. Darüber hinaus sind die im Moiré-Verfahren gemessenen Verschiebungen stets auf die aktuelle deformierte Konfiguration bezogen.

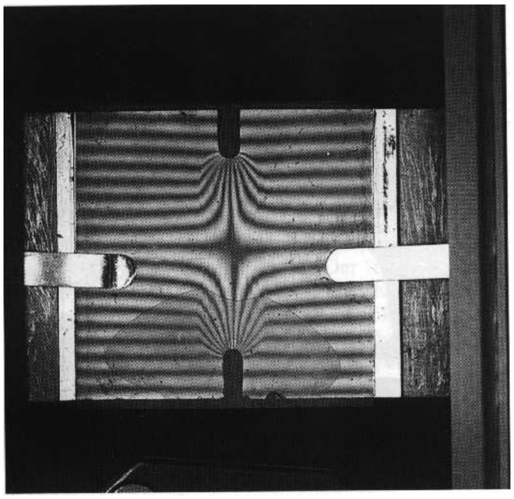


Bild 5: Meßgebiet der gekerbten Biegeprobe mit dem Moiré-Muster der Verschiebungen u_x.

Da die Parameteridentifikation eine Verfolgung materieller Teilchen bedingt, werden die Verschiebungen in der auf den Ausgangszustand bezogenen Darstellung benötigt. Dazu sind zwei Schritte notwendig. Im ersten Schritt erfolgt die Approximation unter Nutzung der Ansatzfunktionen isoparametrischer 8-Knoten-Elemente bezüglich der Momentankonfiguration. Der zweite Schritt besteht in der Transformation des FE-Netzes und der Verschiebungen in die Ausgangskonfiguration. Auf eine detailierte Beschreibung dieses Verfahrens wird hier verzichtet. Seine Grundzüge sind in [boh97a, boh97b], die Anwendung auf die realen Messungen in [krt97b] dargestellt. An dieser Stelle soll im Bild 6 lediglich die gute Übereinstimmung eines ausgewählten Moiré-Musters mit den approximierten Daten gezeigt werden.

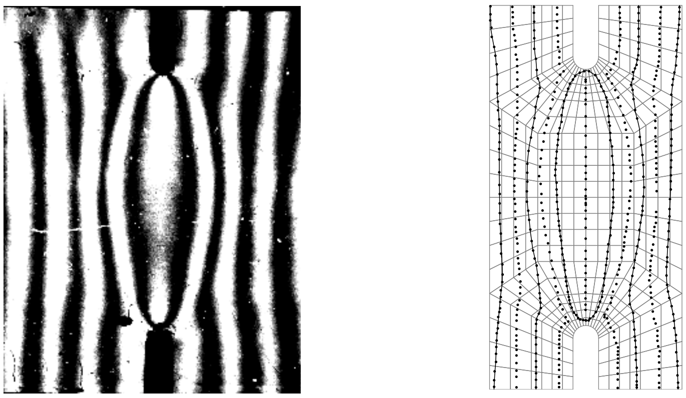


Bild 6: Vier-Punkt-Biegung von gekerbten Probekörpern. Vergleich des Moiré-Musters mit der Lösung des Approximationsproblems für die Verschiebungen u_y in einem ausgewählten Lastschritt. Die durchgezogenen Linien und die Punktreihen in der Approximationsdarstellung entsprechen den Isotheten des Moiré-Musters.

Es werden zwei große Gruppen von nichtlinearen Optimierungsverfahren unterschieden:

- gradientenlose stochastische Verfahren und Evolutionsstrategien,
- Gradientenverfahren.

Die gradientenlosen Verfahren haben den numerischen Vorteil, daß sie für ihre Suchstrategien lediglich über eine Zielfunktion verfügen müssen, die gemessene und berechnete Werte in geeigneter Weise miteinander verknüpft, deren Ableitungen aber nicht benötigt werden. Da bei diesen Verfahren jedoch die Zielfunktion in einer sehr großen Anzahl von Versuchen berechnet werden muß, und auch dann nicht garantiert ist, daß der gefundene kleinste Zielfunktionswert tatsächlich dem globalen Minimum entspricht, scheiden die gradientenlosen Optimierungsmethoden im Rahmen der Nutzung der FEM zur Auswertung der Zielfunktion aus.

Im Rahmen der Arbeiten zur Materialparameteridentifikation für elastisch-plastische Deformationsgesetze wurden im Teilprojekt inhomogene ebene Verschiebungsfelder vermessen und als Vergleichsgrößen im Optimierungsprozeß genutzt. Dabei wurde folgende ungewichtete Zielfunktion auf der Basis einer Fehlerquadrat-Formulierung verwendet:

$$\Phi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n_L}\sum_{j=1}^{n_T}\left[\Big(\{\hat{u}_x(\boldsymbol{p})\}_{ij} - \{\tilde{u}_x\}_{ij}\Big)^2 + \Big(\{\hat{u}_y(\boldsymbol{p})\}_{ij} - \{\tilde{u}_y\}_{ij}\Big)^2\right] \rightarrow \min \quad (2.27)$$

$\hat{u}_x,\, \hat{u}_y$	–	berechnete Verschiebungen	n_L	–	Lastschrittanzahl
$\tilde{u}_x,\, \tilde{u}_y$	–	gemessene Verschiebungen	n_T	–	Anzahl materieller Punkte

Gradientenverfahren zur Optimierung basieren auf der iterativen Anpassung eines Satzes von Materialparametern $\boldsymbol{p} = \Big(p_1,\, \ldots,\, p_{n_p}\Big)^T$ nach der Vorschrift

$$\boldsymbol{p}_{l+1} = \boldsymbol{p}_l + \omega\, \boldsymbol{s}_l = \boldsymbol{p}_l - \omega\, \boldsymbol{Q}_l^{-1}\, \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{p}}\Phi_l \quad (2.28)$$

ausgehend von deren Startwerten $\boldsymbol{p}_o$. Dabei stellen $\boldsymbol{s}_l$ die Suchrichtung und ω die Suchschrittweite dar. Die Suchrichtung wird durch den Gradienten der Zielfunktion $\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{p}}\Phi_l$ und eine geeignet zu wählende Matrix $\boldsymbol{Q}_l$ vorgegeben. Im Rahmen der vorgestellten Untersuchungen hat der Gradient der Zielfunktion folgende Form:

$$\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{p}}\Phi_l = \sum_{i=1}^{n_L}\sum_{j=1}^{n_T}\left[\Big(\{\hat{u}_x(\boldsymbol{p}_l)\}_{ij} - \{\tilde{u}_x\}_{ij}\Big)\,\frac{\partial\, \{\hat{u}_x(\boldsymbol{p}_l)\}_{ij}}{\partial\, \boldsymbol{p}} + \right.$$

$$\left. + \Big(\{\hat{u}_y(\boldsymbol{p}_l)\}_{ij} - \{\tilde{u}_y\}_{ij}\Big)\,\frac{\partial\, \{\hat{u}_y(\boldsymbol{p}_l)\}_{ij}}{\partial\, \boldsymbol{p}}\right]. \quad (2.29)$$

Die günstige Definition der Matrix $\boldsymbol{Q}_l$ ist insbesondere für das Konvergenzverhalten des Optimierungsverfahrens von großer Bedeutung. So bewegt sich z. B. erfahrungsgemäß die Methode des steilsten Abstiegs mit $\boldsymbol{Q}_l = \boldsymbol{I}$ (Einheitsmatrix) unmittelbar in Richtung des nächstgelegenen Minimums, konvergiert in dessen Nähe jedoch sehr schlecht. Für die vorgestellten Untersuchungen hat sich besonders das *Levenberg-Marquardt*-Verfahren mit

$$\boldsymbol{Q}_l = \left(\boldsymbol{\nabla}^2_{\boldsymbol{p}} \Phi_l\right)^{\mathrm{GN}} + \mu \boldsymbol{I}, \quad \omega = 1 \tag{2.30}$$

bewährt. Es vereint den schnellen Abstieg zu Beginn der Optimierung (große Werte von μ) des Verfahrens des steilsten Abstiegs mit der quadratischen Konvergenz der Gruppe der *Newton*-Verfahren (abnehmende Werte von μ mit wachsender Anzahl der Optimierungsschritte). Die hier verwendete *Gauß-Newton*-Matrix $\left(\boldsymbol{\nabla}^2_{\boldsymbol{p}} \Phi_l\right)^{\mathrm{GN}}$ als Modifikation der *Hesse*-Matrix enthält nur Produkte der ersten Ableitungen der Optimierungsvariablen, nicht jedoch deren zweite Ableitungen. Für die untersuchte Zielfunktion hat sie die Form:

$$\left\{\left(\boldsymbol{\nabla}^2_{\boldsymbol{p}} \Phi_l\right)^{\mathrm{GN}}\right\}_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^{n_L} \sum_{j=1}^{n_T} \left[\frac{\partial \left\{\hat{u}_x(\boldsymbol{p}_l)\right\}_{ij}}{\partial p_\alpha} \frac{\partial \left\{\hat{u}_x(\boldsymbol{p}_l)\right\}_{ij}}{\partial p_\beta} + \right.$$

$$\left. + \frac{\partial \left\{\hat{u}_y(\boldsymbol{p}_l)\right\}_{ij}}{\partial p_\alpha} \frac{\partial \left\{\hat{u}_y(\boldsymbol{p}_l)\right\}_{ij}}{\partial p_\beta}\right] \tag{2.31}$$

$$\text{mit} \quad \alpha, \beta = (1, \ldots, n_p).$$

Vorschläge für weitere Formulierungen der Matrix $\boldsymbol{Q}_l$ bei Angabe von Basisliteratur zur Optimierung mit Hilfe von Gradientenverfahren sind in [boh97a] enthalten

Ein zentraler Punkt bei der Entwicklung und Anwendung von deterministischen nichtlinearen Optimierungsverfahren ist die Sensitivitätsanalyse, d. h. die Ermittlung des Gradienten der Zielfunktion und der *Gauß-Newton*-Matrix. Beide enthalten im vorliegenden Fall die Ableitungen der Verschiebungen nach den Materialparametern. Die Auswahl geeigneter Verfahren zur Sensitivitätsanalyse, die in jedem Optimierungsschritt durchzuführen ist, beeinflußt entscheidend die Genauigkeit und die Konvergenzgeschwindigkeit des Optimierungsverfahrens.

Neben den noch in Entwicklung befindlichen modernen Methoden der automatischen Differentiation existieren im wesentlichen drei Verfahrensgruppen zur Sensitivitätsanalyse:

- Analytische Verfahren, die für den vorliegenden Fall nicht anwendbar sind, da es keine explizite Abhängigkeit der Verschiebungen von den Materialparametern gibt.

- Die numerische Sensitivitätsanalyse beruht auf der Approximation der Ableitungen durch Differenzen, z. B. in ihrer einfachsten Form

$$\left\{\boldsymbol{\nabla_p}\Phi_l\right\}_\alpha = \frac{\Phi_l(p_\alpha + \Delta p_\alpha) - \Phi_l(p_\alpha)}{\Delta p_\alpha}, \qquad \alpha = (1, \ldots, n_p). \quad (2.32)$$

  Die Auswahl geeigneter Differenzen der Materialparameter Δp_α ist schwierig, da zu kleine Werte in den Bereich der Rundungsfehler der Rechenmaschinen und große Differenzen zu erheblichen Fehlern in der Approximation der Ableitungen durch Sekanten führen.

- Ein effektives Verfahren, das vollständig konsistent mit der numerischen Struktur und den Lösungsverfahren der FEM ist, stellt die semianalytische Sensitivitätsanalyse dar. Sie beruht auf der impliziten Differentiation des globalen Gleichgewichtssystems sowie der integrierten Form des Deformationsgesetzes und erlaubt im untersuchten Fall die Ermittlung der Ableitungen der Verschiebungen nach den Materialparametern mit der gleichen Genauigkeit wie die Berechnung der Verschiebungen in der FEM-Lösung.

Da im Rahmen der Arbeiten am Teilprojekt ein FEM-Programm im Quelltext zur Verfügung stand, fiel die Entscheidung zugunsten der semianalytischen Sensitivitätsanalyse. Ihre Grundzüge sollen hier kurz erläutert werden, Details enthält die Arbeit [boh97a].

Das ausiterierte globale Gleichgewichtssystem hat zum Zeitpunkt t_n die Form

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{p}, \hat{\boldsymbol{u}}_n(\boldsymbol{p})) = \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{V^{(e)}} \boldsymbol{B}^T \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{p}, \hat{\boldsymbol{u}}_n(\boldsymbol{p}))\, dV^{(e)} - \boldsymbol{L}_n = \boldsymbol{0}. \quad (2.33)$$

Seine implizite Differentiation nach den Materialparametern ergibt:

$$\frac{d\,\boldsymbol{R}(\boldsymbol{p}, \hat{\boldsymbol{u}}_n(\boldsymbol{p}))}{d\,\boldsymbol{p}} = \frac{\partial\,\boldsymbol{R}}{\partial\,\boldsymbol{p}} + \frac{\partial\,\boldsymbol{R}}{\partial\,\hat{\boldsymbol{u}}_n}\,\frac{\partial\,\hat{\boldsymbol{u}}_n}{\partial\,\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{0}. \quad (2.34)$$

Mit der bekannten globalen Steifigkeitsmatrix

$$\boldsymbol{K}_n = \frac{\partial\,\boldsymbol{R}}{\partial\,\hat{\boldsymbol{u}}_n} \quad (2.35)$$

ergeben sich die gesuchten Ableitungen der Verschiebungen nach den Materialparametern aus der Lösung eines dem FE-Steifigkeitssystem ähnlichen, linearen Gleichungssystems

$$\boldsymbol{K}_n\,\frac{\partial\,\hat{\boldsymbol{u}}_n}{\partial\,\boldsymbol{p}} = -\frac{\partial\,\boldsymbol{R}}{\partial\,\boldsymbol{p}} = -\bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{V^{(e)}} \boldsymbol{B}^T\,\frac{\partial\,\boldsymbol{\sigma}_n(\boldsymbol{p})}{\partial\,\boldsymbol{p}}\,dV^{(e)} \quad (2.36)$$

unter Berücksichtigung der Randbedingungen

$$\frac{\partial\,\hat{\boldsymbol{u}}_n^R}{\partial\,\boldsymbol{p}} \;=\; \boldsymbol{0}\,. \tag{2.37}$$

Die Berechnung der Sensitivitätsmatrix erfordert die Ermittlung der Ableitungen der Spannungen nach den Materialparametern $\frac{\partial\,\boldsymbol{\sigma}_n(\boldsymbol{p})}{\partial\,\boldsymbol{p}}$. Dazu wird das ausiterierte Deformationsgesetz (vgl. (2.11))

$$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{z}_n(\boldsymbol{p}),\boldsymbol{z}_{n-1}(\boldsymbol{p}),\boldsymbol{p},\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n) \;=\; \boldsymbol{0} \tag{2.38}$$

implizit nach den Materialparametern abgeleitet. Diese Operation führt auf ein lineares algebraisches Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
\frac{d\,\boldsymbol{G}}{d\,\boldsymbol{p}} &= \frac{\partial\,\boldsymbol{G}}{\partial\,\boldsymbol{p}} + \frac{\partial\,\boldsymbol{G}}{\partial\,\boldsymbol{z}_{n-1}}\,\frac{\partial\,\boldsymbol{z}_{n-1}}{\partial\,\boldsymbol{p}} + \frac{\partial\,\boldsymbol{G}}{\partial\,\boldsymbol{z}_n}\,\frac{\partial\,\boldsymbol{z}_n}{\partial\,\boldsymbol{p}} = \\
&= \frac{\partial\,\boldsymbol{G}}{\partial\,\boldsymbol{p}} + \frac{\partial\,\boldsymbol{G}}{\partial\,\boldsymbol{\sigma}_{n-1}}\,\frac{\partial\,\boldsymbol{\sigma}_{n-1}}{\partial\,\boldsymbol{p}} + \frac{\partial\,\boldsymbol{G}}{\partial\,\boldsymbol{\kappa}_{n-1}}\,\frac{\partial\,\boldsymbol{\kappa}_{n-1}}{\partial\,\boldsymbol{p}} + \frac{\partial\,\boldsymbol{G}}{\partial\,\dot{\lambda}_{n-1}}\,\frac{\partial\,\dot{\lambda}_{n-1}}{\partial\,\boldsymbol{p}} + \\
&\quad + (\nabla_{\boldsymbol{z}_n}\boldsymbol{G})\,\frac{\partial\,\boldsymbol{z}_n}{\partial\,\boldsymbol{p}} \;=\; \boldsymbol{0}\,,
\end{aligned} \tag{2.39}$$

das eine ähnliche Struktur besitzt wie das linearisierte Deformationsgesetz zur Berechnung der aktuellen Spannungen und inneren Variablen

$$(\nabla_{\boldsymbol{z}_n}\boldsymbol{G})\begin{pmatrix} \frac{\partial\boldsymbol{\sigma}_n}{\partial\boldsymbol{p}} \\[2ex] \frac{\partial\boldsymbol{\kappa}_n}{\partial\boldsymbol{p}} \\[2ex] \frac{\partial\dot{\lambda}_n}{\partial\boldsymbol{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\boldsymbol{C}^{el}\right)^{-1}\cdot\cdot\frac{\partial\boldsymbol{\sigma}_{n-1}}{\partial\boldsymbol{p}} \;-\; (1-\gamma)\Delta t\,\left.\frac{\partial F}{\partial\boldsymbol{\sigma}}\right|_{n-1}\frac{\partial\dot{\lambda}_{n-1}}{\partial\boldsymbol{p}} \;-\; \frac{\partial\boldsymbol{G}_n^1}{\partial\boldsymbol{p}} \\[2ex] \frac{\partial\boldsymbol{\kappa}_{n-1}}{\partial\boldsymbol{p}} \;+\; (1-\gamma)\Delta t\boldsymbol{q}_{n-1}\frac{\partial\dot{\lambda}_{n-1}}{\partial\boldsymbol{p}} \;-\; \frac{\partial\boldsymbol{G}_n^2}{\partial\boldsymbol{p}} \\[2ex] -\frac{\partial F}{\partial\boldsymbol{p}} \end{pmatrix}$$

$$\text{mit}\quad \frac{\partial\,\boldsymbol{G}_n^1}{\partial\,\boldsymbol{p}} \;=\; \left(\gamma\dot{\lambda}_n\left.\frac{\partial^2 F}{\partial\boldsymbol{\sigma}\partial\boldsymbol{p}}\right|_n \;+\; (1-\gamma)\dot{\lambda}_{n-1}\left.\frac{\partial^2 F}{\partial\boldsymbol{\sigma}\partial\boldsymbol{p}}\right|_{n-1}\right)\Delta t$$

$$\frac{\partial\,\boldsymbol{G}_n^2}{\partial\,\boldsymbol{p}} \;=\; \left(\gamma\dot{\lambda}_n\left.\frac{\partial\boldsymbol{q}}{\partial\boldsymbol{p}}\right|_n \;+\; (1-\gamma)\dot{\lambda}_{n-1}\left.\frac{\partial\boldsymbol{q}}{\partial\boldsymbol{p}}\right|_{n-1}\right)\Delta t\,.$$

Neben der größeren Genauigkeit hat die semianalytische Sensitivitätsanalyse gegenüber der numerischen weiterhin den Vorteil der größeren Effektivität. Durch die mehrmalige Vorwärtsrechnung führt die numerische Sensitivitätsanalyse mit steigender Anzahl zu optimierender Parameter auf ein Mehrfaches an Rechenzeit gegenüber der semianalytischen, was im Bild 7 anschaulich verdeutlicht wird.

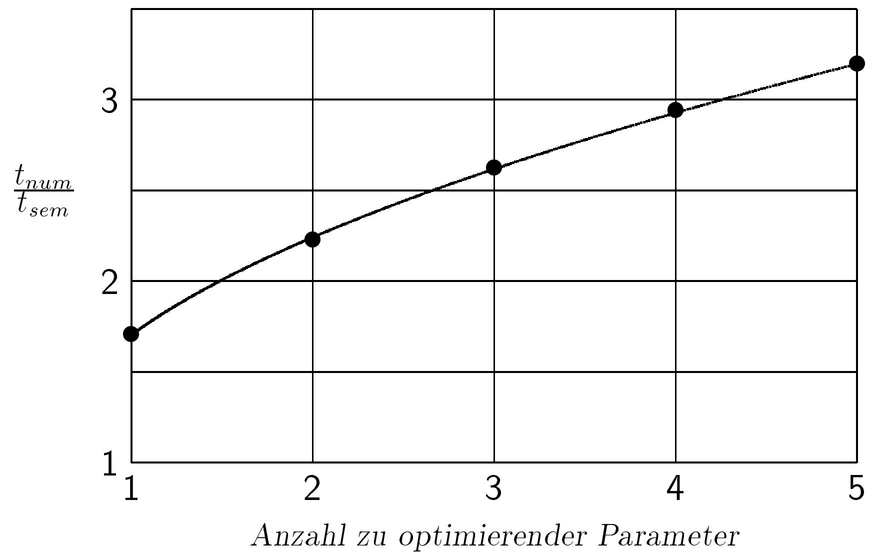


Bild 7: Abhängigkeit des Verhältnisses der Rechenzeiten für einen Optimierungsschritt unter Nutzung der numerischen t_{num} und der semianalytischen Sensitivitätsanalyse t_{sem} von der Anzahl zu optimierender Materialparameter für ein ausgwähltes Beispiel der Parameteridentifikation durch Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder.

Das entwickelte und in die vorhandene Software implementierte Optimierungsverfahren zur Identifikation von Materialparametern elastisch-plastischer Deformationsgesetze wurde zunächst bezüglich seiner Nutzbarkeit und Wirksamkeit mit "künstlichen" Meßwerten getestet. Das heißt, für einen vorgegebenen Belastungszyklus und angenommene Materialparameter wurden zunächst mit Hilfe einer FEM-Berechnung Verschiebungsfelder ermittelt. Diese wurden ihrerseits als "Meßwerte" genutzt, um unter Veränderung verschiedener Bedingungen des Optimierungsprozesses die vorgegebenen Materialparameter als optimale Lösung zu erhalten.

Zu diesem Zweck wurde zunächst unter Nutzung vorhandener Symmetrien ein FE-Modell der gekerbten Vier-Punkt-Biege-Probe entwickelt, welches später auch für die Auswertung der Messungen am realen Bauteil genutzt wurde. Bild 8 zeigt die FE-Vernetzung und Bild 9 läßt die Verschiebungsbedingungen am Symmetrierand (alle Verschiebungen wurden auf den mittleren Knoten dieses Randes bezogen) und das in Form einer linear veränderlichen Streckenlast aufgebrachte Biegemoment erkennen.

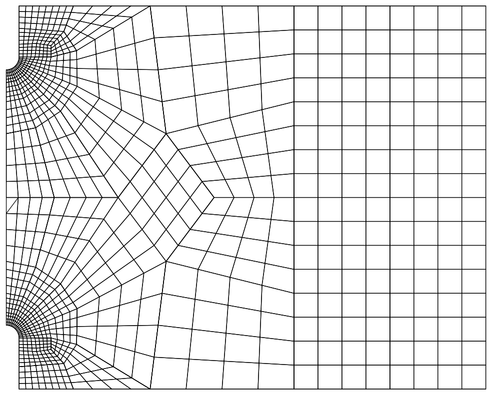


Bild 8: Finite-Element-Vernetzung einer verkürzten Hälfte der gekerbten Vier-Punkt-Biege-Probe mit zweifacher Verfeinerung des Grobgitters (1232 Elemente, 3881 Knoten, 28 Lastschritte eines vollen Lastzyklus).

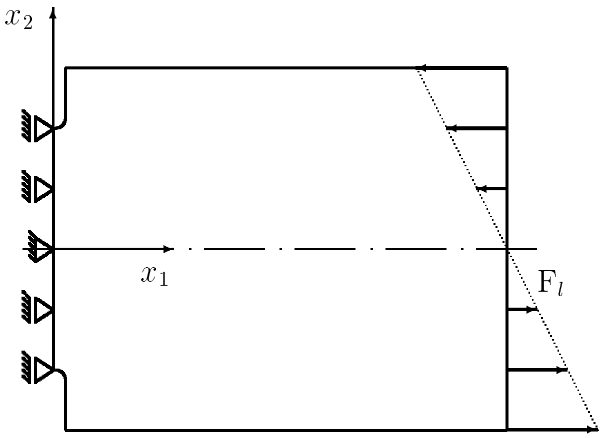


Bild 9: Randbedingungen des Finite-Element-Modells einer verkürzten Hälfte der gekerbten Vier-Punkt-Biege-Probe.

Als bestimmend für das Ergebnis und die Konvergenz des Optimierungsprozesses bei der Materialparameteridentifikation durch die Analyse inhomogener Verschiebungsfelder wurden bei der Approximation der "künstlichen" Meßwerte folgende Einflußgrößen untersucht:

- Auswahl geeigneter Experimente,
- Gestaltung des FE-Modells (Geometrie, Elementtyp, Elementgröße),
- Wahl des speziellen Gradientenverfahrens,
- Lastgeschichte (Anzahl und Größe der Lastschritte, Einfluß von Be-, Ent- und Gegenbelastung),

- Anzahl und Startwerte der zu optimierenden Materialparameter,
- Meßfehler,
- Lage der Vergleichsorte,
- Wahl des Integrationsverfahrens für das Deformationsgesetz und die Sensitivitätsanalyse.

Die Wirkung dieser Einflußgrößen auf Optimierungsergebnis und -verlauf sind in [boh97a] und [goe97a] ausführlich dargestellt. Hier soll lediglich eine Auswahl wichtiger Erkenntnisse kurz zusammengefaßt werden:

- In der Regel wurden die optimalen Parameter mit ausreichender Genauigkeit wiedergefunden. In einigen Extremfällen zeigte sich die Schlechtgestelltheit des Optimierungsproblems in der Mehrdeutigkeit bzw. Instabilität der Lösung. Besonders die Mehrdeutigkeit der Lösung, d. h. das Auffinden unterschiedlicher lokaler Minima, ist zu beachten. Dabei stellt jedes lokale Minimum eine Lösung der Optimierungsaufgabe dar, die durch die Wahl der Eingangsinformationen (Gestaltung der Zielfunktion, fehlerbehaftete Vergleichswerte, Parameter zur Steuerung des Optimierungsverlaufes u. a.) bestimmt wird.
- Erwartungsgemäß haben Meßfehler einen großen Einfluß auf Optimierungsgeschwindigkeit und -ergebnis. Nicht sorgfältig ausgewertete Messungen können zu inakzeptablen lokalen Minima oder gar zum Verharren einzelner Parameter an vorgegebenen physikalisch sinnvollen Grenzwerten und damit dem Abbruch der Optimierung führen.
- Die Berücksichtigung vollständiger Lastzyklen mit Lastumkehr ist für die eindeutige Trennung der verschiedenen Verfestigungsarten notwendig.
- Entscheidenden Einfluß auf den Optimierungsverlauf haben die Startwerte der Materialparameter. Besonders die Auswertung realer Messungen an Materialien, bei denen selbst die Größenordnung der Materialparameter schwer abzuschätzen ist, zeigte, daß große Abweichungen in den optimalen Parametern in Abhängigkeit von deren Startwerten auftreten. Verfahren zur Ermittlung akzeptabler Startwerte sind unbedingt notwendig, die oben erwähnte Methode der lokalen Integration des Deformationsgesetzes in ausgewählten materiellen Punkten bietet dazu eine sehr gute Möglichkeit.
- Obwohl der Einfluß der Lage der berücksichtigten Meßorte nicht signifikant war, sollten diese in Bereichen liegen, die das typische Materialverhalten widerspiegeln (z. B. plastifizierte Bereiche).
- Das *Levenberg-Marquardt*-Verfahren brachte die besten Optimierungsergebnisse mit der schnellsten Konvergenz.

- Die Anzahl gleichzeitig zu identifizierender Materialparameter sollte möglichst gering gehalten werden. Lassen sich einzelne Parameter aus einfacheren Versuchen ermitteln, sollte diese Möglichkeit genutzt werden (z. B. bei der Anfangsfließspannung).

Weitere Erfahrungen wurden im Laufe der Projektbearbeitung mit dem bestimmenden Einfluß der gewählten Deformationsgesetze und der Randbedingungen des FE-Modells auf die Genauigkeit und Konvergenz der Optimierungsergebnisse gewonnen. Diese Analysen werden für Veröffentlichungen vorbereitet.

Am Lehrstuhl für Experimentelle Mechanik der TU Chemnitz wurden Vier-Punkt-Biege-Versuche mit geraden und gekerbten Proben aus der Stahllegierung X 6 Cr Ni Ti 18-10 durchgeführt. Die Auswertung dieser Experimente unter Nutzung der dargestellten Vorgehensweise ist in [krt97b] ausführlich beschrieben. Dabei konnte gezeigt werden, daß diese Methodik in der Regel zu akzeptablen Ergebnissen führt, wenn die oben angegebenen Hinweise beachtet werden. Hier sollen lediglich einige ausgewählte Ergebnisse analysiert werden, welche die Schlechtgestelltheit der Optimierungsaufgabe bei realen, mit zufälligen Fehlern behafteten Meßwerten und komplexen Deformationsgesetzen verdeutlichen.

An glatten Biegeproben (vgl. Bild 3) wurden die Elastizitätskonstanten

$$E = 1,94 \cdot 10^5\,\mathrm{MPa}, \quad \nu = 0,32,$$

die Anfangsfließspannung in x_1-Richtung $\sigma_{Fo} = 215,5\,\mathrm{MPa}$ und die folgenden Anfangswerte der inneren Variablen

$$\alpha_{11}^o = -8,3\,\mathrm{MPa}, \quad \alpha_{22}^o = -3,2\,\mathrm{MPa},$$

$$N_{1111}^o = 1,50, \quad N_{1122}^o = -0,68, \quad N_{2222}^o = 1,44$$

bestimmt. Im ersten Beispiel erfolgte die Vernachlässigung der geringfügigen Abweichungen der Hauptachsenverhältnisse der gemessenen Fließortkurve von dem der *Mises*-Ellipse. Der Distorsionstensor entspricht in diesem Fall dem isotropen Tensor

$$N_{ijkl} = \frac{9}{8}(\delta_{ik}\,\delta_{jl} + \delta_{il}\,\delta_{jk}) - \frac{3}{4}\,\delta_{ij}\,\delta_{kl} = \mathrm{const}\,.$$

Ebenso belegt wurden diejenigen Koordinaten des Distorsionstensors, welche im Biegeversuch nicht gemessen werden können, aber für die Simulation des ebenen Spannungszustandes erforderlich sind.

Unter Verwendung des *Ludwik-Ulbricht*-Ansatzes für die Fließkurve (2.16) mit $\mathrm{a}_2 = 10^{-4}$ und der *Prager*schen kinematischen Verfestigungsregel (2.19) wurden die in der Tabelle angegebenen Materialparameter ermittelt:

Parameter	Startwerte	Optimierte Werte
b_1 in MPa	1000,0	178,100
a_1 in MPa	1000,0	811,900
a_3	0,3	0,336
Anzahl Optim.schritte	–	10
Zielfunktionswert	7,424	0,882
b_1 in MPa	500,0	148,100
a_1 in MPa	1000,0	773,800
a_3	0,3	0,318
Anzahl Optim.schritte	–	16
Zielfunktionswert	6,522	0,852

Dabei wurde der gesamte Lastzyklus berücksichtigt. Bereits dieses Beispiel mit einem relativ einfachen Deformationsgesetz zeigt die Abhängigkeit der Lösung der Optimierungsaufgabe von den Startwerten der zu optimierenden Materialparameter. Obwohl der Zielfunktionswert in den beiden dargestellten Optima nahezu gleich ist (die daraus berechnete mittlere Verschiebungsdifferenz beträgt bezogen auf den maximal gemessenen Verschiebungswert ca. 5 %), wird das Problem mit unterschiedlichen optimalen Parametersätzen beschrieben.

Wie aus der folgenden Tabelle zu entnehmen ist, ändert sich an diesen Aussagen nichts Wesentliches, wenn der Distorsionstensor mit den obigen Meßwerten belegt wird.

Parameter	Startwerte	Optimierte Werte
b_1 in MPa	1000,0	242,800
a_1 in MPa	1000,0	834,400
a_3	0,3	0,327
Anzahl Optim.schritte	–	19
Zielfunktionswert	6,008	0,920
b_1 in MPa	500,0	209,800
a_1 in MPa	1000,0	809,700
a_3	0,3	0,314
Anzahl Optim.schritte	–	15
Zielfunktionswert	5,043	0,892

Eine instabile Optimierungslösung ergab sich bei Beschränkung auf die rein isotrope Verfestigung und Analyse von Lastschritten ausschließlich im Belastungsbereich. Bild 10 zeigt deutlich die gravierenden Änderungen der Materialparameter bei nahezu konstanter Zielfunktion.

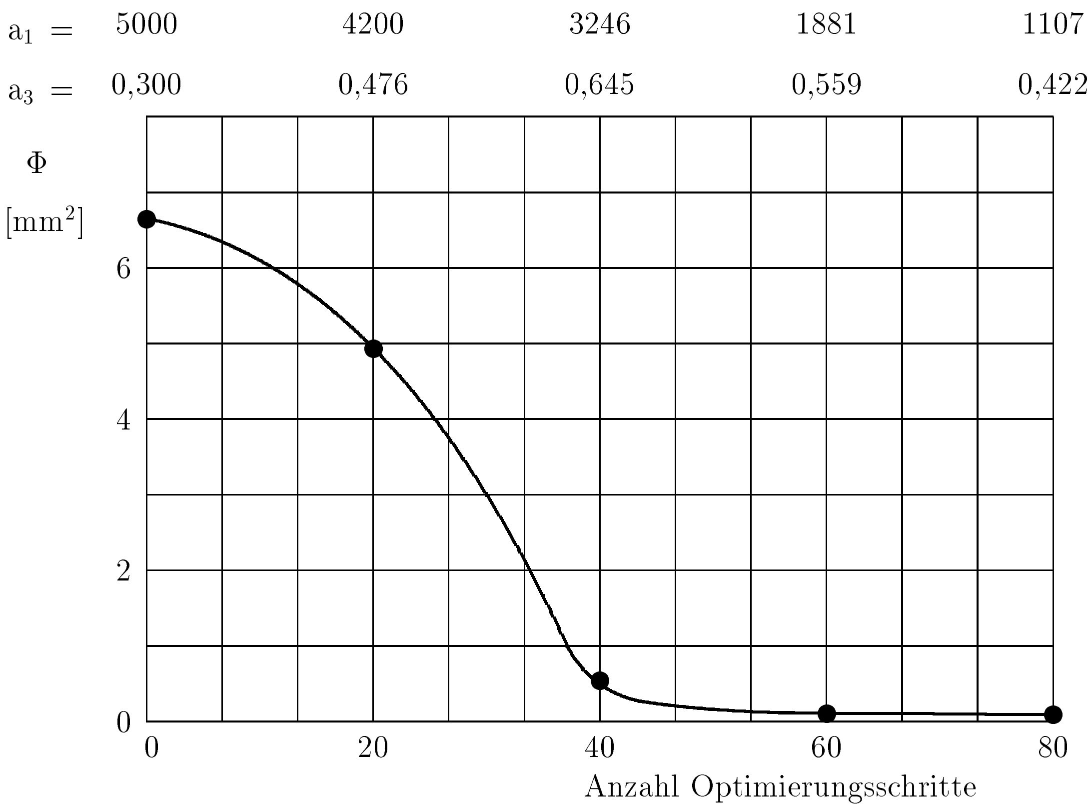


Bild 10: Entwicklung der Zielfunktion und der Ergebnisse eines Optimierungsprozesses zur Materialparameteridentifikation für ein ausgewähltes Deformationsgesetz bei Analyse eines reinen Belastungsvorganges.

Es wurde bereits erwähnt, daß das vorgestellte Verfahren zur Materialparameteridentifikation auf eine leistungsfähige Rechentechnik angewiesen ist, wie sie mit dem Parallelrechner an der TU Chemnitz vorliegt. Die Zusammenarbeit im Sonderforschungsbereich ist sehr eng, da viele Entwicklungen anderer Teilprojekte unmittelbar die Effektivität der Materialparameteridentifikation positiv beeinflussen und damit ihre Praxisrelevanz erhöhen. Insbesondere die Teilprojekte A1, A3, B1, D3 und D4 sind in diesem Zusammenhang zu nennen.

Eine Effektivitätsanalyse der Materialparameteridentifikation zeigt unmittelbar die Stellen auf, an denen weitere Untersuchungen von Seiten der numerischen Algorithmen der Parallelverarbeitung notwendig sind. So ist z. B. aus Bild 11 ersichtlich, daß die optimale Anzahl von Freiheitsgraden pro Prozessor bei den untersuchten Problemen etwa 1000 beträgt. Weniger Freiheitsgrade auf einem Prozessor bedeuten Nichtauslastung der Leistungsfähigkeit der Hard- und Software, bei mehr Freiheitsgraden pro Prozessor verlangsamt die notwendige Prozessorkommunikation den Gesamtprozeß. Verbesserung der Kommunikationsmöglichkeiten zwischen den einzelnen Prozessoren und eine gute Lastbalance sind Ansatzpunkte für eine weitere Effektivitätssteigerung.

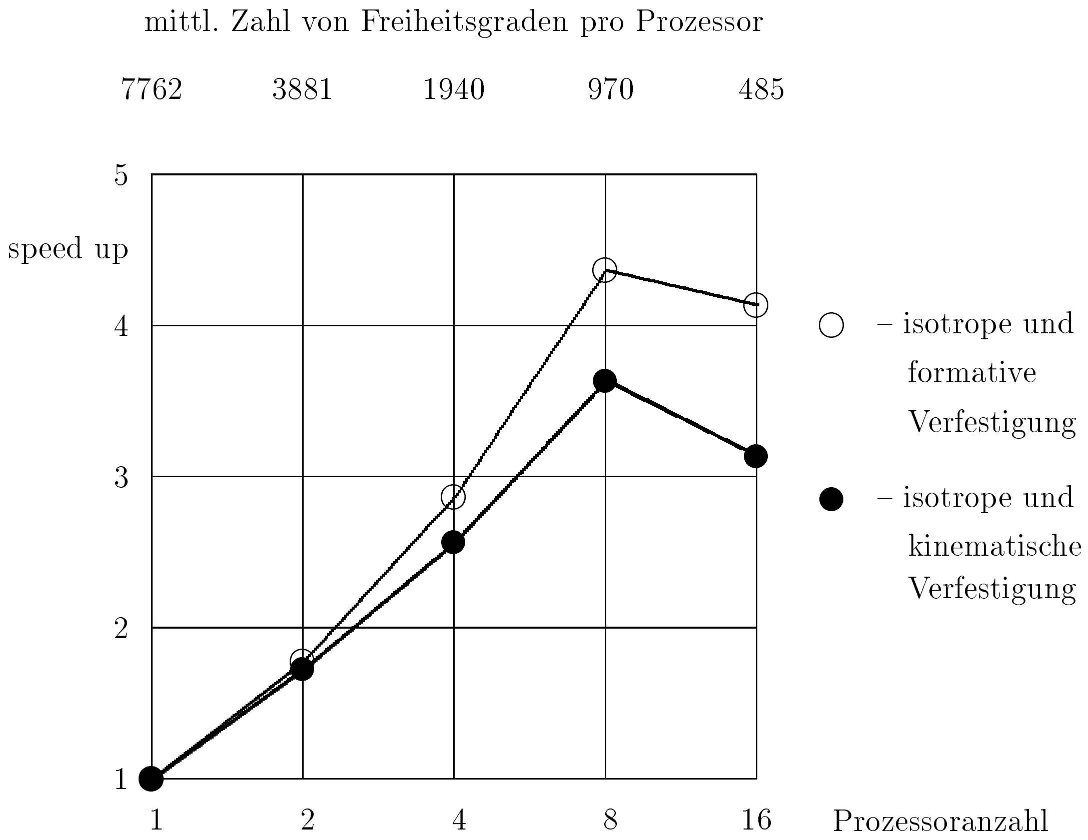


Bild 11: Speed up einer ausgewählten FEM-Berechnung des Biegevorganges einer gekerbten Probe mit optimierten Materialparametern in Abhängigkeit von der Komplexität des Deformationsgesetzes.

Es wird deutlich, daß bei Berücksichtigung komplexerer Deformationsgesetze die Effektivität der Nutzung des Parallelrechners zunimmt. Die Ursache für dieses Verhalten kann auch dem folgenden Bild 12 entnommen werden, in dem die Rechenzeit eines kompletten FE-Problems und seiner Teilprozesse untersucht wird. Beim Aufbau des Steifigkeitssystems (Steifigkeitsmatrix und rechte Seite) auf Stützstellenebene findet keine Kommunikation zwischen den einzelnen Prozessoren statt. Dieser Vorgang ist natürlich parallelisierbar und führt bei ausgeglichener Lastbalance der einzelnen Prozessoren zu einem optimalen speed up. Gleiches läßt sich auch für den Teilprozeß der Berechnung der kinematischen und kinetischen Größen (Verzerrungen, Spannungen, innere Variable) sagen, die wiederum auf Integrationsstützstellenebene ohne Informationsaustausch mit anderen Elementen stattfindet. Ein anderes Verhalten zeigt jedoch die Lösung des globalen Steifigkeitssystems mit einem vorkonditionierten CG-Verfahren. Hierbei findet ein ständiger Informationsaustausch zwischen den einzelnen Prozessoren statt, der um so intensiver wird, je mehr Koppelknoten das Problem enthält, was unmittelbar mit der Anzahl der Teilgebiete und deren Größe zusammenhängt. Ist das Verhältnis von Koppelknoten zu inneren Knoten sehr ungünstig inbezug auf letztere, kann die Kommunikationszeit die Rechenzeit weit übersteigen. Da zudem bei steigender Prozessoranzahl bzw. sinkender Anzahl der Freiheitsgrade pro Prozessor die Zeit für Assemblierung und update einen sehr geringen Anteil an der Gesamtrechenzeit hat, führt die Verschlechterung der Effektivität des Gleichungslösers zu einer Verringerung der Effektivität des gesamten FEM-Problems.

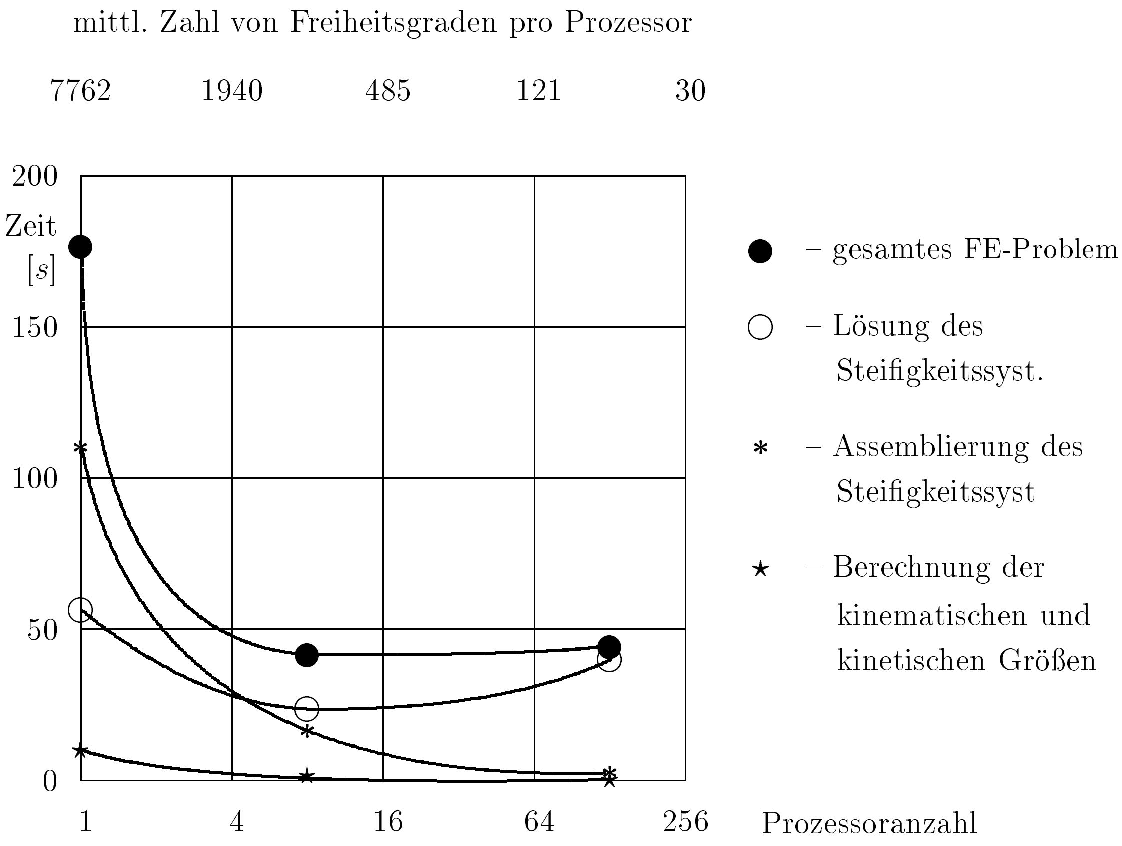


Bild 12: Rechenzeit des gesamten FE-Problems und seiner Teilprozesse bei einer ausgewählten FEM-Berechnung des Biegevorganges der gekerbten Probe mit optimierten Materialparametern bei unterschiedlicher Prozessoranzahl.

Die Ergebnisse der Arbeiten zur Materialparameteridentifikation wurden auf verschiedenen nationalen und internationalen Fachkonferenzen vorgestellt (u. a. [goe97b, kre97a, kre97b, kre97c, krt97a]). Dabei konnte insbesondere im Rahmen des EUROMECH Kolloqiums *Material Identification Using Mixed Numerical Experimental Methods* ein Vergleich mit ähnlichen Untersuchungen anderer Arbeitsgruppen durchgeführt werden. Das Problem der Materialparameteridentifikation unter Nutzung verbesserter Verfahren gegenüber der herkömmlichen Analyse homogener Spannungs- und Deformationszustände wird weltweit mit zunehmenden Aktivitäten verfolgt. Die vorgestellten Ergebnisse des SFB nehmen dabei in ihrer Komplexität eigener experimenteller und numerischer Entwicklungen sowie in vielen Details eine führende Stellung ein. Von in- und ausländischen Fachkollegen wurden besonders die Auswahl geeigneter Experimente, die Effizienzsteigerung der numerischen Optimierung durch den Einsatz massiv paralleler Rechentechnik und die Vorteile der semianalytischen Sensitivitätsanalyse mit Interesse nachgefragt.

Besonders enge methodische Anknüpfungspunkte gibt es zu den Arbeiten an der Universität Hannover (E. Stein, R. Mahnken [mahn97]), der TU Eindhoven, Niederlande (C. Oomens, M. Meuwissen [meuw98]), und der Université de Franche-Comteé Besancon, Frankreich (J.-C. Gelin, O. Ghouati [ghou97]). Mit den genannten Forschergruppen wurden Kontakte aufgebaut bzw. werden angestrebt. Besonders hervorzuheben ist dabei die Kooperation mit der TU Eindhoven. Durch gegenseitigen Datenaustausch konnte eine Approximation der Experimente des jeweils anderen Partners mit den eigenen numerischen Verfahren erreicht werden. Ziel ist dabei, erstmals vergleichende Untersuchungen analoger Probleme mit z. T. unterschiedlichen Herangehensweisen (insbesondere im Softwarebereich) durchzuführen. Erste positive Erfahrungen im Sinne vergleichbarer Ergebnisse der Materialparameteridentifikation liegen vor, zudem konnten bereits weitere Erkenntnisse über Einflußgrößen der Optimierung gewonnen werden. Eine gemeinsame Veröffentlichung ist geplant.

Die internationalen Kontakte des SFB werden durch die Beteiligung an der im Frühsommer 1997 unter Federführung der Freien Universität Brüssel, Belgien (H. Sol), und der TU Eindhoven (C. Oomens) gegründeten europäischen Forschergruppe *Mixed Methods for Material Identification* ausgebaut.

Literaturverzeichnis

[bene97] Benedix, U., Kreißig, R., Parameteridentifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze unter Einbeziehung lokaler und integraler Vergleichsgrößen, Vortrag zur GAMM-Jahrestagung 1997 in Regensburg, 24.-27. März 1997 (Vortrag erscheint als Kurzfassung in der ZAMM)

[boh97b] Bohnsack, E., Continuous Field Approximation of Experimentally Given Data by Finite Elements, *Comp. & Struct.*, **63**, 1195-1204 (1997)

[goe97b] 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)

[krei96] Kreißig, R., Parameteridentifikation inelastischer Deformationsgesetze, *Technische Mechanik*, **16**, 97-106 (1996)

[kre97a] Kreißig, R., Numerische Methoden für die Parameteridentifikation, Vortrag zur GAMM-Jahrestagung 1997 in Regensburg, 24.-27. März 1997 (Vortrag erscheint als Kurzfassung in der ZAMM)

[krt97a] Kretzschmar, S., Görke, U.-J., Kreißig, R., Identifikation von Materialparametern durch Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder, Vortrag zur GAMM-Jahrestagung 1997 in Regensburg, 24.-27. März 1997 (Vortrag erscheint als Kurzfassung in der ZAMM)

[boh97a] Bohnsack, E., *Zur Identifikation von Verfestigungsparametern elastisch-plastischer Stoffgesetze an inhomogen verformten Proben*, Diss., TU Chemnitz, Institut für Mechanik, Bericht 1/97 (1997)

[goe97a] Görke, U.-J., Kreißig, R., *Einflußfaktoren bei der Identifikation von Materialparametern elastisch-plastischer Deformationsgesetze aus inhomogenen Verschiebungsfeldern*, Preprint SFB393/97-04, Preprint-Reihe des Chemnitzer SFB 393, TU Chemnitz-Zwickau, März 1997

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

[krei95] Kreißig, R., Michael, D., Kretzschmar, S., Einsatz massiv paralleler FEM-Software bei der Parameteridentifikation inelastischer Deformationsgesetze, in: *Numerische Methoden der Plastomechanik*, D. Besdo (Ed.), 5. Workshop, Universität Hannover (1995)

[kre97b] Kreißig, R., Meyer, A., *Parameteridentifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze und Erfahrungen bei der Anwendung der Parallelrechentechnik*, Sächsische Fachtagung Umformtechnik am 05./06.11.1997 in Chemnitz, TU Chemnitz, Preprint (1997)

[kre97c] Kreißig, R., Parameteridentifikation inelastischer Deformationsgesetze durch Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder, *Tagungsband zur Tagung Werkstoffprüfung*, 04./05.12.1997 in Bad Nauheim, 63-80 (1997)

[krt97b] Kretzschmar, S., *Parameteridentifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze durch Anpassung numerischer an experimentell ermittelte Verschiebungsfelder*, Diss., TU Chemnitz, Institut für Mechanik (eingereicht am 01.10.1997)

[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)

[ghou97] Ghouati, O., Gelin, J.-C., An inverse approach for the identification of complex material behaviours, in: *Material Identification Using Mixed Numerical Experimental Methods*, Proceedings of the EUROMECH 357 Colloquium, H. Sol, C.W.J. Oomens (Eds.), Kluwer Academic Publishers, 93-102 (1997)

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

[meuw98] Meuwissen, M., *An Inverse Method for the Mechanical Characterisation of Metals*, Diss., TU Eindhoven (1998)

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Das schlecht gestellte inverse Problem der Materialparameteridentifikation durch Vergleich numerisch ermittelter und gemessener inhomogener Verschiebungsfelder führt in der Regel zu unterschiedlichen lokalen Lösungen, die zudem noch instabil sein können. Verursacht durch fehlende und fehlerbehaftete Informationen bei der Modellierung und Analyse der wahrgenommenen Realität kann diese Mehrdeutigkeit und Instabilität nicht vollständig ausgeschlossen werden. Ein verbessertes Informationsangebot für die Optimierungsaufgabe wirkt sich günstig auf die Reproduzierbarkeit und Akzeptanz von ermittelten Materialparametersätzen aus. Neben einer weiteren Verringerung von Meß- und Approximationsfehlern der berücksichtigten Vergleichsgrößen wird dazu die Untersuchung des Einflusses folgender Erweiterungen der vorgestellten Methode zur Materialparameteridentifikation vorgeschlagen:

- Die Einbeziehung weiterer Vergleichsgrößen in die Zielfunktion paßt die Materialparameter zusätzlich an neue Informationen über das Werkstoffverhalten an. Insbesondere globale Größen wie Kräfte oder Momente, die experimentell einfach zu ermitteln sind, führen zu einer realistischeren Bewertung bestimmter Anteile der Deformationsgesetze. Ihre Berücksichtigung erfordert eine Erweiterung der Zielfunktion und der Beziehungen für die semianalytische Sensitivitätsanalyse.

- Eine verbesserte Approximation der Deformationsgesetze im Mittel kann durch die gleichzeitige Berücksichtigung der Ergebnisse mehrerer Proben eines Experimentes und/oder der gemeinsamen Analyse unterschiedlicher Versuchsanordnungen in einer Zielfunktion erreicht werden. Letzteres bedingt den Aufbau der Zielfunktion und der Sensitivitätsmatrix aus mehreren sequentiell oder auch parallel abzuarbeitenden Vorwärtsrechnungen.

- In engem Zusammenhang mit den vorgenannten Aspekten steht die notwendige Untersuchung sinnvoller Wichtungs- und Normierungsmechanismen für die unterschiedlichen Anteile in der Zielfunktion.

- Eine Regularisierung, möglicherweise durch Berücksichtigung von Zielfunktionsanteilen, die auf bereits bekannte Materialparameterwerte bezogen sind, erscheint erst in praktischen Anwendungen sinnvoll, bei denen z. B. neu gefertigte Materialchargen im Sinne einer Qualitätskontrolle untersucht werden.

Für das Problem der deutlichen Abhängigkeit der Optimierungslösung von den Startwerten der Materialparameter wird eine Methode vorgeschlagen, die eine Ermittlung dieser Anfangswerte mit dem oben erwähnten Verfahren der lokalen Integration des Deformationsgesetzes in ausgewählten Materialpunkten mit einem werkstofftypischen Spannungs-Verzerrungs-Zustand beinhaltet. Diese Vorgehensweise wird gegenwärtig untersucht, erste Ergebnisse sind noch im laufenden Antragszeitraum des SFB zu erwarten. Ein interessanter Aspekt dieser Methode liegt auch darin, daß die kurzen Rechenzeiten des lokalen Integrationsverfahrens einen Vergleich von deterministischen und stochastischen bzw. Evolutionsstrategien zur

Optimierung gestatten. Dabei kann die Parallelrechentechnik erneut in sinnvoller Weise genutzt werden.

Die Berücksichtigung verschiedener Experimente zur Ermittlung und Verifikation von Materialparametern erfordert einige Erweiterungen der bisher genutzten Software. Insbesondere sollte die Modellerstellung durch ein erweitertes Preprozessing besser unterstützt werden. Außerdem sind die Möglichkeiten der numerischen Realisierung flexibler Belastungsgeschichten zu verbessern. Hier ist eine enge Zusammenarbeit mit anderen Teilprojekten unabdingbar.

Als Hauptaufgabe für die Fortführung der begonnenen Untersuchungen ist die Berücksichtigung großer Verzerrungen im Materialverhalten zu sehen. Dazu werden gegenwärtig geeignete Diskretisierungsverfahren entwickelt und implementiert. In der Folge sind realitätsnahe Deformationsgesetze abzuleiten und über Nutzerschnittstellen in das Programmsystem einzubinden. Schwerpunkte sind dabei insbesondere die Ermittlung der konsistenten Materialtangente und der Beziehungen für die semianalytische Sensitivitätsanalyse. Ein großes Problem stellt in diesem Zusammenhang die Entwicklung geeigneter Experimente dar, die den bekannten Meßverfahren zugänglich sind (dreidimensionale Analyse großer Verschiebungen und Verzerrungen). Es ist zu prüfen, in welchem Umfang reale Umformprozesse zu diesem Zweck ausgewertet können, was zugleich den Vorteil einer direkten Kontrollmöglichkeit praktischer Anwendungen hat.

Im Zusammenhang mit den Ausführungen im letzten Abschnitt steht auch eine mögliche Erweiterung der Anwendung des Optimierungsverfahrens zur Parameteridentifikation auf weitere Werkstoffklassen (z. B. nichtlinear-elastisches oder viskoelastisches Materialverhalten, Schädigung). Die entwickelte Methode läßt dies prinzipiell zu und bietet damit auch in weiteren praktischen Bereichen die Möglichkeit einer realitätsnäheren Simulation innerer mechanischer Zustände von Bauteilen, Strukturen und Geweben (z. B. Biomechanik – Medizin).

Aufbauend auf den Untersuchungen im Teilprojekt A3 werden in Zukunft auch nichtlineare 3D–Untersuchungen möglich. Erste Testrechnungen für geometrisch nichtlineare elastische Probleme zeigen kein gravierend anderes Verhalten des Lösers während der einzelnen Newton–Schritte als bei der Lösung eines 3D linear–elastischen Problems, so daß mit Sicherheit davon ausgegangen werden kann, daß sich die weiteren Entwicklungen in A3 unmittelbar auch auf die hier interessierenden nichtlinearen Fragestellungen anwenden lassen.

Adaptive Vorgehensweisen haben für bisher relevante Anwendungen keine entscheidende Rolle gespielt. Da in den weiteren Arbeiten die Simulation von Schädigungsphänomenen in räumlichen Proben und Bauteilen unter Nutzung der bei der Entwicklung von Algorithmen und Materialmodellen gewonnenen Erkenntnisse möglich wird und aus der Sicht der Anwendung sehr wünschenswert erscheint, ist vorgesehen, diese vorerst zurückgestellten Untersuchungen bei Vorliegen der erforderlichen Vorarbeiten auf dem Gebiet der Gleichungslöser und der Gewährleistung der dynamischen Lastbalance für diese Fälle zu berücksichtigen.