Technische Universität Chemnitz

Sonderforschungsbereich 393

Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern

Marcel Springmann Meinhard Kuna

Identifikation schädigungsmechanischer Materialparameter mit Hilfe nichtlinearer Optimierungsverfahren am Beispiel des Rousselier Modells

Preprint SFB393/02-08

Zusammenfassung

Der vorliegende Beitrag befasst sich mit der Identifikation von Parametern schädigungsmechanischer Materialgesetze. In diesem Zusammenhang wird für die Lösung des nichtlinearen Rand- und Anfangswertproblems das finite Element System **SPC-PMHP** verwendet. Die duktile Schädigung wird durch das Modell von *Rousselier* beschrieben. Neben den Materialgleichungen wird der Algorithmus zur numerischen Integration des Materialgesetzes vorgestellt.
Die zur Materialparameteridentifikation erforderliche Lösung der inversen Aufgabenstellung wird mit einem nichtlinearen Optimierungsverfahren realisiert. Die quadratische Abweichung zwischen gemessenen und simulierten Verschiebungsfeldern wird als Zielfunktion gewählt, deren Minimierung auf die gesuchten Parameter führt. Im Rahmen der deterministischen Optimierungsprozeduren wird zur Bestimmung des Gradienten der Zielfunktion ein impliziter Algorithmus – die sogenannte semianalytische Sensitivitätsanalyse – angewandt. Synthetisch erzeugte inhomogene Verschiebungsfelder dienen als Messwerte und werden den berechneten Verschiebungen gegenübergestellt. Mit verschiedenen numerischen Experimenten wird am Beispiel einer Scheibe mit Loch die Anwendbarkeit des Verfahrens getestet.

Stichworte: Schädigungsmechanik, *Rousselier* Modell, Parameteridentifikation, Optimierung, Sensitivitätsanalyse

Preprint-Reihe des Chemnitzer SFB 393

ISSN 1619-7178 (Print) **ISSN 1619-7186** (Internet)

SFB393/02-08 **Mai 2002**

Inhaltsverzeichnis

Adresse der Autoren:

Marcel Springmann
Meinhard Kuna
TU Bergakademie Freiberg
Institut für Mechanik und Fluiddynamik
Lampadiusstraße 4
D-09596 Freiberg

`e-mail: Marcel.Springmann@imfd.tu-freiberg.de`
`e-mail: Meinhard.Kuna@imfd.tu-freiberg.de`

`http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/`
`http://www.imfd.tu-freiberg.de/`

1 Einleitung

Die Schädigungsmechanik etabliert sich zunehmend als Materialmodell zur realistischen Beschreibung von Verformung und Versagen duktiler Materialien. Verschiedene mikrostrukturelle Mechanismen wie Bildung, Wachstum und Vereinigung mikroskopischer Hohlräume führen zum Versagen duktiler Metalle. Die Formulierung dieser Mechanismen in Schädigungsgesetzen beruht entweder auf mikromechanischen Modellbetrachtungen oder auf einer phänomenologischen Beschreibung auf der Basis thermodynamischer Prinzipien. In den letzten Jahren fanden die Schädigungsmodelle von *Rice* und *Tracey* [15], *Gurson* [7], *Tvergaard* und *Needleman* [17] sowie von *Rousselier* [16] die meiste Beachtung.
Die Vielzahl an mikromechanischen Mechanismen bei der Schädigung in duktilen Metallen führt zu immer komplexeren Modellen und der Einführung immer neuer Materialparameter. Neben der wirklichkeitsnahen mathematischen Beschreibung dieser Effekte ist es unbedingt erforderlich, die zugehörigen Parameter ausreichend genau zu bestimmen. Dies erfolgt hauptsächlich durch Verformungsexperimente, die alle modellierten Effekte miteinschließen. Bei der Anwendung des Schädigungsmodells von *Rousselier* ist es nicht möglich, durch eine direkte Auswertung der Versuchsdaten die Materialparameter zu bestimmen. Das direkte Problem, also die Lösung der nichtlinearen Rand- und Anfangswertaufgabe, kann dabei nur mit vorgegebenen Materialparametern erfolgen. Die Lösung der inversen Aufgabenstellung, also die Ermittlung der Materialparameter, stellt eine Optimierungsaufgabe dar. Dabei wird durch eine Fehlerquadrat–Minimierungsmethode eine Annäherung der Simulationsdaten an die experimentellen Daten erzielt. Die experimentellen Daten können auf der Oberfläche einer Probe gemessene oder synthetisch erzeugte Verschiebungsfelder einer FE–Analyse sein. Die Materialparameter haben ihren optimalen Wert erreicht, wenn die Verschiebungen aus der numerischen Simulation mit denen des Experiments übereinstimmen. Im allgemeinen wird es keine exakte Identität geben, so dass die Lösung des Problems in der Ermittlung des globalen Minimums der Zielfunktion (Summe über alle Fehlerquadrate) liegt. Für das Auffinden des globalen Minimums verwendet man gradientenfreie und (oder) gradientenbasierte Verfahren. Gradientenfreie Verfahren sind einfach und vielfältig anwendbar, haben jedoch den Nachteil eines relativ großen Rechenaufwandes. Gradientenverfahren benötigen, wie der Name schon impliziert, den Gradienten der Zielfunktion und damit einen zusätzlichen Aufwand an Überlegungen. Sie haben jedoch den Vorteil der gerichteten Suche nach einem Minimum, können dabei aber nicht zwischen globalem und lokalem Minimum unterscheiden. Deshalb benutzt man hybride Verfahren, die eine Kopplung von gradientenfreien und gradientenbasierten Verfahren darstellen, um lokale Minima wieder verlassen zu können.
Im ersten Teil dieser Arbeit werden die wesentlichen Gleichungen zur numerischen Behandlung des *Rousselier* Modells vorgestellt. Der zweite Teil befasst sich mit der Re-Identifikation von Materialparametern auf der Grundlage synthetisch erzeugter Messwerte. Die Implementierung erfolgte im Finite–Element–Entwicklungssystem **SPC-PMHP** für Parallelrechner, dass im Rahmen des SFB393 entwickelt wurde. Die theoretischen Grundlagen, die finite Element Formulierung sowie numerische Simulationen zu diesem Programm sind in [5, 13, 14] ausführlich behandelt.

2 Behandlung elastisch–plastischer Deformationsvorgänge

Die Beschreibung elastisch–plastischer Deformationsvorgänge erfolgt im weiteren auf der Basis einer spezifischen freien Energie (die Darstellung ist links in *Lagrange*'scher und rechts in *Euler*'scher Betrachtungsweise angegeben)

$$\Psi = \Psi_e(\boldsymbol{C}^\flat - \overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^\flat) + \Psi_d(\boldsymbol{\mathcal{A}}); \qquad \psi = \psi_e(\boldsymbol{g}^\flat - \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat) + \psi_d(\boldsymbol{\alpha}) \tag{2.1}$$

wobei $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ und $\boldsymbol{\alpha}$ für einen Satz interner Variabler stehen, die die Verfestigung bzw. Entfestigung beschreiben und ein assoziiertes Fließgesetz mit der Fließfunktion

$$Y = Y(\boldsymbol{T}^\sharp, \boldsymbol{A}); \;\; Y \leq 0; \qquad y = y(\boldsymbol{\tau}^\sharp, \boldsymbol{a}); \;\; y \leq 0 \tag{2.2}$$

angenommen wird. Der 2. *Piola–Kirchhoff*'sche Spannungstensor und der *Kirchhoff*'sche Spannungstensor können wie folgt geschrieben werden

$$\boldsymbol{T}^\sharp = \boldsymbol{\Phi}^* \boldsymbol{\tau}^\sharp; \qquad \boldsymbol{\tau}^\sharp = J \boldsymbol{\sigma}^\sharp \tag{2.3}$$

mit $J = \sqrt{\dfrac{\det\left(\boldsymbol{g}^\flat\right)}{\det\left(\boldsymbol{G}^\flat\right)}} \det(\boldsymbol{F})$ und $\boldsymbol{\sigma}^\sharp$ als *Cauchy*'scher Spannungstensor. Der Operator $\boldsymbol{\Phi}^*$ bezeichnet eine Abbildung auf die Ausgangskonfiguration. $\boldsymbol{G}^\flat$, $\boldsymbol{g}^\flat$ kennzeichnen die Raummetrik und $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{a}$ sind arbeitskonjugierte Größen zu $\boldsymbol{\mathcal{A}}$, $\boldsymbol{\alpha}$, d.h.

$$\boldsymbol{A} = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\mathcal{A}}}; \qquad \boldsymbol{a} = \rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \tag{2.4}$$

wobei $\rho_0 = \rho J$ die Dichte in der Ausgangskonfiguration ist. Bei irreversiblen Prozessen ist nach der *Clausius–Duhem* Dissipationsungleichung die durch die Änderung der internen Variablen dissipierte freie Energie $\mathcal{D}$ stets größer Null

$$\mathcal{D}_l = \frac{1}{2}\boldsymbol{T}^\sharp : \frac{D}{Dt}\overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^\flat - \boldsymbol{A}\frac{D}{Dt}\boldsymbol{\mathcal{A}} \geq 0; \qquad \frac{\mathcal{D}_e}{J} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\tau}^\sharp : \mathcal{L}_v \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat - \boldsymbol{a}\mathcal{L}_v \boldsymbol{\alpha} \geq 0 \tag{2.5}$$

($\dfrac{D}{Dt}$ – materielle Zeitableitung; $\mathcal{L}_v$ – *Lie*–Ableitung; $\overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^\flat$ – rechter plastischer *Cauchy–Green* Deformationstensor; $\overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat$ – inverser linker elastischer *Cauchy–Green* Deformationstensor). Nach dem Postulat der maximalen Dissipation (*Drucker*–Postulat) stellen sich bei Erreichen und Überschreiten der Fließgrenze

$$Y = 0; \qquad y = 0 \tag{2.6}$$

die Spannungen und die internen Variablen für jeden Deformationszustand so ein, dass die Dissipation maximal wird. Das zum *Drucker*–Postulat äquivalente Extremwertproblem folgt aus der Dissipationsungleichung (2.5) und der Nebenbedingung (2.6)

$$
\begin{aligned}
\mathcal{D}_l\Big|_{Y=0} &= \frac{1}{2}\boldsymbol{T}^\sharp : \frac{D}{Dt}\overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^\flat - \boldsymbol{A}\frac{D}{Dt}\boldsymbol{\mathcal{A}} - \dot{\Lambda} Y(\boldsymbol{T}^\sharp, \boldsymbol{A}) \rightsquigarrow \max. \\
\mathcal{D}_e\Big|_{y=0} &= \frac{1}{2}\boldsymbol{\tau}^\sharp : \mathcal{L}_v \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat - \boldsymbol{a}\mathcal{L}_v\boldsymbol{\alpha} - \dot{\lambda} y(\boldsymbol{\tau}^\sharp, \boldsymbol{a}) \rightsquigarrow \max.
\end{aligned} \tag{2.7}
$$

$\dot{\Lambda}$, $\dot{\lambda}$ kennzeichnen die *Lagrange*'schen Multiplikatoren. Das Extremwertproblem wird gelöst, indem man die partiellen Ableitungen nach den gesuchten Größen bildet. Die Evolutionsgleichungen für die internen Variablen der finiten Elasto–Plastizität, wie sie in **SPC-PMHP** implementiert sind, werden durch die folgenden Beziehungen ausgedrückt

$$
\begin{aligned}
&\frac{D}{Dt}\overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^\flat - 2\dot{\Lambda}\frac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp} = 0; && \mathcal{L}_v \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat - 2\dot{\lambda}\frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp} = 0 \\
&\frac{D}{Dt}\boldsymbol{\mathcal{A}} + \dot{\Lambda}\frac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{A}} = 0; && \mathcal{L}_v\boldsymbol{\alpha} + \dot{\lambda}\frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{a}} = 0 \\
&\dot{\Lambda} \geq 0;\ \ \dot{\Lambda} Y = 0;\ \ Y-\text{konvex}; && \dot{\lambda} \geq 0;\ \ \dot{\lambda} y = 0;\ \ y-\text{konvex}\,.
\end{aligned} \tag{2.8}
$$

Auch die dazu äquivalenten Formulierungen

$$
\begin{aligned}
&\frac{D}{Dt}\boldsymbol{T}^\sharp - \frac{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}{\partial \boldsymbol{C}^\flat} : \left(\frac{D}{Dt}\boldsymbol{C}^\flat - 2\dot{\Lambda}\frac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}\right) = 0; && \mathcal{L}_v\boldsymbol{\tau}^\sharp - \frac{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp}{\partial \boldsymbol{g}^\flat} : \left(\mathcal{L}_v\boldsymbol{g}^\flat - 2\dot{\lambda}\frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp}\right) = 0 \\
&\frac{D}{Dt}\boldsymbol{\mathcal{A}} + \dot{\Lambda}\frac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{A}} = 0; && \mathcal{L}_v\boldsymbol{\alpha} + \dot{\lambda}\frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{a}} = 0 \\
&\dot{\Lambda} \geq 0;\ \ \dot{\Lambda} Y = 0;\ \ Y-\text{konvex}; && \dot{\lambda} \geq 0;\ \ \dot{\lambda} y = 0;\ \ y-\text{konvex}
\end{aligned} \tag{2.9}
$$

sind ihrer Struktur nach Differential–Algebraische Gleichungen (DAE's) vom Index 1. Die DAE's (2.8) und (2.9) werden mit einem Mehrschritt–Rückwärts–Differenzenverfahren behandelt. Bezüglich Detailfragen wird auf [12] verwiesen.

3 Rousselier Modell

Ein häufig verwendetes Materialmodell zur Beschreibung duktiler Schädigung ist das *Rousselier* Modell. Es basiert auf einem thermodynamisch konsistenten Ansatz und ist in der Lage Porenwachstum zu beschreiben. Im Gegensatz zum *Gurson–Tvergaard–Needleman* Modell [17] kann es aber die Entstehung und Vereinigung von Poren nicht berücksichtigen. Die Herleitung und die entsprechenden Annahmen sind in [16] zu finden.
Die Fließbedingung für das *Rousselier* Modell wird in *Lagrange*'scher und *Euler*'scher Betrachtungsweise folgendermaßen angegeben

$$
\begin{aligned}
Y &= \sqrt{-3II_{\boldsymbol{DEV}(\boldsymbol{T}^\sharp)}} - R(\mathcal{E}_{pM}) + B(\mathcal{B})D\exp\left(\frac{1}{3\sigma_1}I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right) \\
y &= \sqrt{-3II_{\boldsymbol{dev}(\boldsymbol{\tau}^\sharp)}} - R(\varepsilon_{pM}) + B(\beta)D\exp\left(\frac{1}{3\sigma_1}I_{\boldsymbol{\tau}^\sharp}\right)\,.
\end{aligned} \tag{3.10}
$$

Die Fließbedingung ist von der ersten (I) und der zweiten (II) Invariante des Spannungstensors bzw. Spannungsdeviators abhängig. Der erste Term von Gleichung (3.10), in den nur die zweite Invariante einfließt, ist die *von Mises* Vergleichsspannung. Die Verfestigungskurve R wird nach [1] als Potenzgesetz angenommen mit

$$R(\mathcal{E}_{pM}) = \sigma_0 \left(\frac{\mathcal{E}_{pM}}{\varepsilon_0} + 1 \right)^n; \qquad R(\varepsilon_{pM}) = \sigma_0 \left(\frac{\varepsilon_{pM}}{\varepsilon_0} + 1 \right)^n. \tag{3.11}$$

Die plastische Vergleichsdehnung des Matrixmaterials $\mathcal{E}_{pM}, \varepsilon_{pM}$ und die Vergleichsspannung nach *von Mises* sind Skalare, so dass eine isotrope Verfestigung vorausgesetzt wird. Der dritte Term von Gleichung (3.10) repräsentiert den entfestigenden Anteil in der Fließbedingung. Ist die Schädigung Null, d.h. die Porenkonzentration verschwindet, so reduziert sich (3.10) auf die *von Mises* Fließbedingung. Die Schädigung wird durch die Funktion B beschrieben und ist die konjugierte Kraft zu der jeweiligen skalaren Schädigungsvariable $\mathcal{B}$ bzw. β

$$B(\mathcal{B}) = \frac{\sigma_1 f_0 \exp(\mathcal{B})}{1 - f_0 + f_0 \exp(\mathcal{B})}; \qquad B(\beta) = \frac{\sigma_1 f_0 \exp(\beta)}{1 - f_0 + f_0 \exp(\beta)}. \tag{3.12}$$

Die aktuelle Porenkonzentration f kann aus der Schädigungsvariable $\mathcal{B}$, β und der Anfangsporenkonzentration f_0 wie folgt berechnet werden

$$f = \frac{f_0 \exp(\mathcal{B})}{1 - f_0 + f_0 \exp(\mathcal{B})}; \qquad f = \frac{f_0 \exp(\beta)}{1 - f_0 + f_0 \exp(\beta)}. \tag{3.13}$$

Für die skalaren internen Variablen $\mathcal{E}_{pM}$, ε_{pM} und $\mathcal{B}$, β ergeben sich nach (2.8) mit (3.10) die Evolutionsgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt}\mathcal{E}_{pM} &= \dot{\Lambda}; & \mathcal{L}_v \varepsilon_{pM} &= \dot{\lambda} \\ \frac{D}{Dt}\mathcal{B} &= \dot{\Lambda} D \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp} \right); & \mathcal{L}_v \beta &= \dot{\lambda} D \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{\tau}^\sharp} \right). \end{aligned} \tag{3.14}$$

Das Materialverhalten wird durch den Satz

$$\boldsymbol{p} = (\sigma_0 \quad \varepsilon_0 \quad n \quad f_0 \quad \sigma_1 \quad D)^T \tag{3.15}$$

(σ_0 – Anfangsfließspannung; ε_0, n – Verfestigungsparameter; f_0 – Anfangsporenkonzentration; σ_1, D – Parameter des *Rousselier* Modells) von sechs Materialparametern vervollständigt. Darüber hinaus gelten die Prinzipien der assoziierten Fließtheorie (2.8) und (2.9). Unter Beachtung, dass für skalare Tensorfunktionen α die Indentität

$$\mathcal{L}_v \alpha \equiv \frac{D}{Dt}\alpha \tag{3.16}$$

gilt, gehen die betrachteten Materialgleichungen in

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{E}}_{pM} &= -1; & \dot{\varepsilon}_{pM} &= -1 \\ \dot{\mathcal{B}} &= -D \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp} \right); & \dot{\beta} &= -D \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{\tau}^\sharp} \right) \end{aligned} \tag{3.17}$$

über, wobei $\dot{\boldsymbol{\mathcal{E}}}_{pM}, \dot{\varepsilon}_{pM}, \dot{\boldsymbol{\mathcal{B}}}, \dot{\beta}$ als Symbole und nicht als Zeitableitungen zu verstehen sind. Für den Anteil Ψ_e, ψ_e in der spezifischen freien Energie Ψ, ψ

$$
\begin{aligned}
\rho_0 \Psi &= \Psi_e(\boldsymbol{G}^\flat + \boldsymbol{C}^\flat - \overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^\flat) + \Psi_d(\bar{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \bar{\boldsymbol{\mathcal{B}}}) \\
\rho_0 \psi &= \psi_e(\overset{-1}{\boldsymbol{b}}{}^\flat + \boldsymbol{g}^\flat - \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat) + \psi_d(\bar{\varepsilon}, \bar{\beta})
\end{aligned}
\tag{3.18}
$$

($\bar{\boldsymbol{\mathcal{E}}}$, $\bar{\boldsymbol{\mathcal{B}}}$, $\bar{\varepsilon}$, $\bar{\beta}$ – arbeitskonjugierte Größen zu $\boldsymbol{\mathcal{E}}_{pM}$, $\boldsymbol{\mathcal{B}}$, ε_{pM}, β) wird hyperelastisches Materialverhalten angenommen. In Gleichung (3.18) wurde vorausgesetzt, dass sich die spezifische freie Energie Ψ, ψ additiv aus einem 'elastischen' Ψ_e, ψ_e und einem 'dissipativen' Anteil Ψ_d, ψ_d zusammensetzt, wie es auch analog in [16] vorgegeben wird.

Zur numerischen Behandlung des *Rousselier* Modells sind in der jeweiligen Konfiguration die folgenden Differential–Algebraischen Gleichungen (DAE's) zu lösen

$$
\begin{array}{l|l}
\text{Lagrange} & \text{Euler} \\
\hline
\rho_0 \Psi = \Psi_e(\boldsymbol{G}^\flat + \boldsymbol{C}^\flat - \overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^\flat) + \Psi_d(\bar{\mathcal{E}}, \bar{\mathcal{B}}) & \rho_0 \psi = \psi_e(\overset{-1}{\boldsymbol{b}}{}^\flat + \boldsymbol{g}^\flat - \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat) + \psi_d(\bar{\varepsilon}, \bar{\beta}) \\
\mathcal{E}_{pM} = \rho_0 \dfrac{\partial \Psi}{\partial \bar{\mathcal{E}}}; \quad \mathcal{B} = \rho_0 \dfrac{\partial \Psi}{\partial \bar{\mathcal{B}}} & \varepsilon_{pM} = \rho_0 \dfrac{\partial \psi}{\partial \bar{\varepsilon}}; \quad \beta = \rho_0 \dfrac{\partial \psi}{\partial \bar{\beta}} \\
\hline
Y(\boldsymbol{T}^\sharp, \mathcal{E}_{pM}, \mathcal{B}) \le 0 & y(\boldsymbol{\tau}^\sharp, \varepsilon_{pM}, \beta) \le 0 \\
\boldsymbol{T}^\sharp = 2\rho_0 \dfrac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{C}^\flat} & \boldsymbol{\tau}^\sharp = 2\rho_0 \dfrac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{g}^\flat} \\
\dfrac{D}{Dt} \overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^\flat = 2\dot{\Lambda} \dfrac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp} & \mathcal{L}_v \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat = 2\dot{\lambda} \dfrac{\partial y}{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp} \\
\dfrac{D}{Dt} \mathcal{E}_{pM} = -\dot{\Lambda} \dot{\mathcal{E}}_{pM} & \dfrac{D}{Dt} \varepsilon_{pM} = -\dot{\lambda} \dot{\varepsilon}_{pM} \\
\dfrac{D}{Dt} \mathcal{B} = -\dot{\Lambda} \dot{\mathcal{B}} & \dfrac{D}{Dt} \beta = -\dot{\lambda} \dot{\beta} \\
\dot{\Lambda} \ge 0; \quad \dot{\Lambda} Y = 0 & \dot{\lambda} \ge 0; \quad \dot{\lambda} y = 0 \ .
\end{array}
\tag{3.19}
$$

Ein möglicher Zugang besteht darin, diese DAE's vom Index 1 mit Standardmethoden zu behandeln, wie im weiteren dargestellt werden soll.

4 Ein numerisches Verfahren zur Behandlung der Evolutionsgleichungen

Bei Anwendung eines impliziten Mehrschrittdifferenzenverfahrens gehen die Evolutionsgleichungen (3.19) in das System nichtlinearer algebraischer Gleichungen

Lagrange	Euler
$\overset{p}{\boldsymbol{C}}^{\flat}{}_{n} - h\hat{\beta}_0\dot{\Lambda}_n 2\dfrac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{T}^{\sharp}{}_{n}} + \sum\limits_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j \overset{p}{\boldsymbol{C}}^{\flat}{}_{n-j} = 0$	$\overset{-e}{\boldsymbol{b}}^{\flat}{}_{n} - h\hat{\beta}_0\dot{\lambda}_n 2\dfrac{\partial y}{\partial \boldsymbol{\tau}^{\sharp}{}_{n}} + \boldsymbol{\Phi}_{*n}\sum\limits_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j \boldsymbol{\Phi}^{*}{}_{n-j}\overset{-e}{\boldsymbol{b}}^{\flat}{}_{n-j} = 0$
$\mathcal{E}_{pM_n} + h\hat{\beta}_0\dot{\Lambda}_n\dot{\mathcal{E}}_{pM_n} + \sum\limits_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j\mathcal{E}_{pM_{n-j}} = 0$	$\varepsilon_{pM_n} + h\hat{\beta}_0\dot{\lambda}_n\dot{\varepsilon}_{pM_n} + \sum\limits_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j\varepsilon_{pM_{n-j}} = 0$
$\mathcal{B}_n + h\hat{\beta}_0\dot{\Lambda}_n\dot{\mathcal{B}}_n + \sum\limits_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j\mathcal{B}_{n-j} = 0$	$\beta_n + h\hat{\beta}_0\dot{\lambda}_n\dot{\beta}_n + \sum\limits_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j\beta_{n-j} = 0$
$h\hat{\beta}_0\dot{\Lambda}_n Y(\boldsymbol{T}^{\sharp}{}_{n}, \mathcal{E}_{pM_n}, \mathcal{B}_n) = 0$	$h\hat{\beta}_0\dot{\lambda}_n y(\boldsymbol{\tau}^{\sharp}{}_{n}, \varepsilon_{pM_n}, \beta_n) = 0$

(4.20)

(h – Schrittweite; $\hat{\beta}_0$, $\hat{\alpha}_j$ – Gewichte für das k–Schritt–BDF–Verfahren) über. Zusätzlich gelten die Beziehungen

Lagrange	Euler
$\boldsymbol{T}^{\sharp}{}_{n} = 2\dfrac{\partial\Psi_e(\boldsymbol{G}^{\flat} + \boldsymbol{C}^{\flat}{}_{n} - \overset{p}{\boldsymbol{C}}^{\flat}{}_{n})}{\partial \boldsymbol{C}^{\flat}}$	$\boldsymbol{\tau}^{\sharp}{}_{n} = 2\dfrac{\partial\psi_e(\overset{-1}{\boldsymbol{b}}^{\flat}{}_{n} + \boldsymbol{g}^{\flat} - \overset{-e}{\boldsymbol{b}}^{\flat}{}_{n})}{\partial \boldsymbol{g}^{\flat}}\,.$

Es wird außerdem ein Operator $\boldsymbol{G}$ eingeführt, der das Gleichungssystem (4.20) repräsentiert

$$\boldsymbol{G}^{\boldsymbol{L}}(\boldsymbol{z}^{\boldsymbol{L}}) = 0 \qquad \text{bzw.} \qquad \boldsymbol{G}^{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{z}^{\boldsymbol{E}}) = 0 \tag{4.21}$$

mit

$$\boldsymbol{z}^{\boldsymbol{L}} = \left(\overset{p}{\boldsymbol{C}}^{\flat}, \mathcal{E}_{pM}, \mathcal{B}, \dot{\Lambda}\right) \qquad \text{bzw.} \qquad \boldsymbol{z}^{\boldsymbol{E}} = \left(\overset{-e}{\boldsymbol{b}}^{\flat}, \varepsilon_{pM}, \beta, \dot{\lambda}\right)\,. \tag{4.22}$$

Eine zu (4.20) äquivalente Formulierung lautet

Lagrange	Euler
${\boldsymbol T^\sharp}_n + h\hat\beta_0\dot\Lambda_n 2 \frac{\partial \boldsymbol T^\sharp}{\partial \boldsymbol C^\flat}_n : \frac{\partial Y}{\partial \boldsymbol T^\sharp}_n + \sum_{j=1}^k \hat\alpha_j {\boldsymbol T^\sharp}_{n-j} - \frac{\partial \boldsymbol T^\sharp}{\partial \boldsymbol C^\flat}_n : \sum_{j=0}^k \hat\alpha_j {\boldsymbol C^\flat}_{n-j} = 0$	${\boldsymbol\tau^\sharp}_n + h\hat\beta_0\dot\lambda_n 2\frac{\partial\boldsymbol\tau^\sharp}{\partial \boldsymbol g^\flat}_n : \frac{\partial y}{\partial\boldsymbol\tau^\sharp}_n + \boldsymbol\Phi_{*n}\sum_{j=1}^k\hat\alpha_j {\boldsymbol\Phi^*}_{n-j}{\boldsymbol\tau^\sharp}_{n-j} - \frac{\partial\boldsymbol\tau^\sharp}{\partial\boldsymbol g^\flat}_n : \boldsymbol\Phi_{*n}\sum_{j=1}^k\hat\alpha_j{\boldsymbol\Phi^*}_{n-j}\boldsymbol g^\flat = 0$
$\mathcal{E}_{pM_n} + h\hat\beta_0\dot\Lambda_n\dot{\mathcal{E}}_{pM_n} + \sum_{j=1}^k\hat\alpha_j\mathcal{E}_{pM_{n-j}} = 0$	$\varepsilon_{pM_n} + h\hat\beta_0\dot\lambda_n\dot\varepsilon_{pM_n} + \sum_{j=1}^k\hat\alpha_j\varepsilon_{pM_{n-j}} = 0$
$\mathcal{B}_n + h\hat\beta_0\dot\Lambda_n\dot{\mathcal{B}}_n + \sum_{j=1}^k\hat\alpha_j\mathcal{B}_{n-j} = 0$	$\beta_n + h\hat\beta_0\dot\lambda_n\dot\beta_n + \sum_{j=1}^k\hat\alpha_j\beta_{n-j} = 0$
$h\hat\beta_0\dot\Lambda_n Y({\boldsymbol T^\sharp}_n, \mathcal{E}_{pM_n}, \mathcal{B}_n) = 0$	$h\hat\beta_0\dot\lambda_n y({\boldsymbol\tau^\sharp}_n, \varepsilon_{pM_n}, \beta_n) = 0\,.$

(4.23)

∞

Zusätzlich gelten die algebraischen Beziehungen

Lagrange	Euler
$\overset{p}{\boldsymbol C}{}^\flat_n = h\hat\beta_0\dot\Lambda_n 2\frac{\partial Y}{\partial\boldsymbol T^\sharp}_n - \sum_{j=1}^k\hat\alpha_j\overset{p}{\boldsymbol C}{}^\flat_{n-j}$	$\overset{-e}{\boldsymbol b}{}^\flat_n = h\hat\beta_0\dot\lambda_n 2\frac{\partial y}{\partial\boldsymbol\tau^\sharp}_n - \boldsymbol\Phi_{*n}\sum_{j=1}^k\hat\alpha_j{\boldsymbol\Phi^*}_{n-j}\overset{-e}{\boldsymbol b}{}^\flat_{n-j}\,.$

Desweiteren wird auch hier ein Operator $\boldsymbol G$ eingeführt, der in diesem Fall das Gleichungssystem (4.23) repräsentiert

$$\boldsymbol G^{\boldsymbol L}(\boldsymbol z^{\boldsymbol L}) = 0 \qquad \text{bzw.} \qquad \boldsymbol G^{\boldsymbol E}(\boldsymbol z^{\boldsymbol E}) = 0 \tag{4.24}$$

mit

$$\boldsymbol z^{\boldsymbol L} = \left(\boldsymbol T^\sharp, \mathcal{E}_{pM}, \mathcal{B}, \dot\Lambda\right) \qquad \text{bzw.} \qquad \boldsymbol z^{\boldsymbol E} = \left(\boldsymbol\tau^\sharp, \varepsilon_{pM}, \beta, \dot\lambda\right)\,. \tag{4.25}$$

Zur Lösung des Systems (4.20) nichtlinearer algebraischer Gleichungen bietet sich ein *Newton*–Verfahren an

in der Ausgangskonfiguration

$$\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{L}}\}\begin{pmatrix} \delta\overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat} \\ \\ \delta\mathcal{E}_{pM} \\ \\ \delta\mathcal{B} \\ \\ \delta\Lambda \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat\,\xi} - \Lambda^{\xi} 2\dfrac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{T}^{\sharp}}^{\xi} + \sum\limits_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j \overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat}{}_{n-j} \\ \mathcal{E}_{pM}^{\xi} + \Lambda^{\xi}\dot{\mathcal{E}}_{pM}^{\xi} + \sum\limits_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j \mathcal{E}_{pM_{n-j}} \\ \mathcal{B}^{\xi} + \Lambda^{\xi}\dot{\mathcal{B}}^{\xi} + \sum\limits_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j \mathcal{B}_{n-j} \\ \Lambda^{\xi}Y^{\xi} \end{pmatrix}$$

mit

$$\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{L}}\} =$$

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}^{(4)} + \Lambda^{\xi}2\dfrac{\partial^2 Y}{\partial\boldsymbol{T}^{\sharp}\partial\boldsymbol{T}^{\sharp}}^{\xi} : \dfrac{\partial \boldsymbol{T}^{\sharp}}{\partial \boldsymbol{C}^{\flat}}^{\xi} & -\Lambda^{\xi}2\dfrac{\partial^2 Y}{\partial\boldsymbol{T}^{\sharp}\partial\mathcal{E}_{pM}}^{\xi} & -\Lambda^{\xi}2\dfrac{\partial^2 Y}{\partial\boldsymbol{T}^{\sharp}\partial\mathcal{B}}^{\xi} & -2\dfrac{\partial Y}{\partial\boldsymbol{T}^{\sharp}}^{\xi} \\ -\Lambda^{\xi}2\dfrac{\partial\dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial\boldsymbol{T}^{\sharp}}^{\xi} : \dfrac{\partial \boldsymbol{T}^{\sharp}}{\partial \boldsymbol{C}^{\flat}}^{\xi} & 1+\Lambda^{\xi}\dfrac{\partial\dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial\mathcal{E}_{pM}}^{\xi} & \Lambda^{\xi}\dfrac{\partial\dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial\mathcal{B}}^{\xi} & \dot{\mathcal{E}}_{pM}^{\xi} \\ -\Lambda^{\xi}2\dfrac{\partial\dot{\mathcal{B}}}{\partial\boldsymbol{T}^{\sharp}}^{\xi} : \dfrac{\partial \boldsymbol{T}^{\sharp}}{\partial \boldsymbol{C}^{\flat}}^{\xi} & \Lambda^{\xi}\dfrac{\partial\dot{\mathcal{B}}}{\partial\mathcal{E}_{pM}}^{\xi} & 1+\Lambda^{\xi}\dfrac{\partial\dot{\mathcal{B}}}{\partial\mathcal{B}}^{\xi} & \dot{\mathcal{B}}^{\xi} \\ -\Lambda^{\xi}\dfrac{\partial Y}{\partial\boldsymbol{T}^{\sharp}}^{\xi} : \dfrac{\partial \boldsymbol{T}^{\sharp}}{\partial \boldsymbol{C}^{\flat}}^{\xi} & \Lambda^{\xi}\dfrac{\partial Y}{\partial\mathcal{E}_{pM}}^{\xi} & \Lambda^{\xi}\dfrac{\partial Y}{\partial\mathcal{B}}^{\xi} & Y^{\xi} \end{pmatrix} \tag{4.26}$$

und den Startwerten

$$\overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat\,0} = -\sum_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j\overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat}{}_{n-j};\ \mathcal{E}_{pM}^{0} = -\sum_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j\mathcal{E}_{pM_{n-j}};\ \mathcal{B}^{0} = -\sum_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j\mathcal{B}_{n-j}$$

wobei hier und im weiteren Λ für $h\hat{\beta}_0\dot{\Lambda}$ steht. $\boldsymbol{I}^{(4)}$ bezeichnet den Einheitstensor 4. Stufe und ξ kennzeichnet den aktuellen Variablenvektor während der Iteration.

in der Momentankonfiguration

$$\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{E}}\}\begin{pmatrix}\delta\bar{\boldsymbol{b}}^{e\flat}\\ \\ \delta\varepsilon_{pM}\\ \\ \delta\beta\\ \\ \delta\lambda\end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \bar{\boldsymbol{b}}^{e\flat\,\xi} - \lambda^\xi 2\dfrac{\partial y}{\partial\boldsymbol{\tau}^\sharp}^\xi + \boldsymbol{\Phi}_{*n}\sum\limits_{j=1}^k \hat\alpha_j \boldsymbol{\Phi}^*{}_{n-j}\bar{\boldsymbol{b}}^{e\flat}{}_{n-j} \\ \varepsilon_{pM}^\xi + \lambda^\xi\dot\varepsilon_{pM}^\xi + \sum\limits_{j=1}^k\hat\alpha_j\varepsilon_{pM_{n-j}} \\ \beta^\xi+\lambda^\xi\dot\beta^\xi+\sum\limits_{j=1}^k\hat\alpha_j\beta_{n-j}\\ \lambda^\xi y^\xi\end{pmatrix}$$

mit

$$\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{E}}\}=$$

$$\begin{pmatrix}
\boldsymbol{I}^{(4)}+\lambda^\xi 2\dfrac{\partial^2 y}{\partial\boldsymbol{\tau}^\sharp\partial\boldsymbol{\tau}^\sharp}^\xi:\dfrac{\partial\boldsymbol{\tau}^\sharp}{\partial\boldsymbol{g}^\flat}^\xi & -\lambda^\xi 2\dfrac{\partial^2 y}{\partial\boldsymbol{\tau}^\sharp\partial\varepsilon_{pM}}^\xi & -\lambda^\xi 2\dfrac{\partial^2 y}{\partial\boldsymbol{\tau}^\sharp\partial\beta}^\xi & -2\dfrac{\partial y}{\partial\boldsymbol{\tau}^\sharp}^\xi \\
-\lambda^\xi\dfrac{\partial\dot\varepsilon_{pM}}{\partial\boldsymbol{\tau}^\sharp}^\xi:\dfrac{\partial\boldsymbol{\tau}^\sharp}{\partial\boldsymbol{g}^\flat}^\xi & 1+\lambda^\xi\dfrac{\partial\dot\varepsilon_{pM}}{\partial\varepsilon_{pM}}^\xi & \lambda^\xi\dfrac{\partial\dot\varepsilon_{pM}}{\partial\beta}^\xi & \dot\varepsilon_{pM}^\xi \\
-\lambda^\xi\dfrac{\partial\dot\beta}{\partial\boldsymbol{\tau}^\sharp}^\xi:\dfrac{\partial\boldsymbol{\tau}^\sharp}{\partial\boldsymbol{g}^\flat}^\xi & \lambda^\xi\dfrac{\partial\dot\beta}{\partial\varepsilon_{pM}}^\xi & 1+\lambda^\xi\dfrac{\partial\dot\beta}{\partial\beta}^\xi & \dot\beta^\xi \\
-\lambda^\xi\dfrac{\partial y}{\partial\boldsymbol{\tau}^\sharp}^\xi:\dfrac{\partial\boldsymbol{\tau}^\sharp}{\partial\boldsymbol{g}^\flat}^\xi & \lambda^\xi\dfrac{\partial y}{\partial\varepsilon_{pM}}^\xi & \lambda^\xi\dfrac{\partial y}{\partial\beta}^\xi & y^\xi
\end{pmatrix} \tag{4.27}$$

und den Startwerten

$$\bar{\boldsymbol{b}}^{e\flat\,0}=-\boldsymbol{\Phi}_{*n}\sum_{j=1}^k\hat\alpha_j\boldsymbol{\Phi}^*{}_{n-j}\bar{\boldsymbol{b}}^{e\flat}{}_{n-j};\;\; \varepsilon_{pM}^0=-\sum_{j=1}^k\hat\alpha_j\varepsilon_{pM_{n-j}};\;\; \beta^0=-\sum_{j=1}^k\hat\alpha_j\beta_{n-j};\;\; \lambda^0=\lambda_{n-1}$$

wobei hier und im weitern λ für $h\hat\beta_0\dot\lambda$ steht. $\boldsymbol{\Phi}^*$ bezeichnet eine Abbildung auf die Ausgangskonfiguration und $\boldsymbol{\Phi}_*$ eine Abbildung auf die Momentankonfiguration. Die Matrixformulierung der jeweiligen Untermatrizen $\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{L}}\}$ und $\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{E}}\}$ kann äquivalent für das *Rousselier* Modell aus [14] entnommen werden.

Zur Lösung des Systems (4.23) nichtlinearer algebraischer Gleichungen bietet sich ein Pseudo–*Newton*–Verfahren an

in der Ausgangskonfiguration

$$\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{L}}\}\begin{pmatrix}\delta\boldsymbol{T}^\sharp\\ \delta\mathcal{E}_{pM}\\ \delta\mathcal{B}\\ \delta\Lambda\end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \boldsymbol{T}^{\sharp\xi} - \dfrac{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}{\partial\boldsymbol{C}^\flat}^{\xi} : \left(\sum\limits_{j=0}^{k} \hat\alpha_j \boldsymbol{C}^\flat{}_{n-j} - \Lambda^\xi 2 \dfrac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}^{\xi}\right) + \sum\limits_{j=1}^{k} \hat\alpha_j \boldsymbol{T}^\sharp{}_{n-j} \\ \mathcal{E}_{pM}^\xi + \Lambda^\xi \dot{\mathcal{E}}_{pM}^\xi + \sum\limits_{j=1}^{k} \hat\alpha_j \mathcal{E}_{pM_{n-j}} \\ \mathcal{B}^\xi + \Lambda^\xi \dot{\mathcal{B}}^\xi + \sum\limits_{j=1}^{k} \hat\alpha_j \mathcal{B}_{n-j} \\ \Lambda^\xi Y^\xi \end{pmatrix}$$

mit

$$\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{L}}\} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}^{(4)} + \Lambda^\xi \dfrac{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}{\partial \boldsymbol{C}^\flat}^{\xi} : 2 \dfrac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp \partial \boldsymbol{T}^\sharp}^{\xi} & \Lambda^\xi \dfrac{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}{\partial \boldsymbol{C}^\flat}^{\xi} : 2 \dfrac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp \partial \mathcal{E}_{pM}}^{\xi} & \Lambda^\xi \dfrac{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}{\partial \boldsymbol{C}^\flat}^{\xi} : 2 \dfrac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp \partial \mathcal{B}}^{\xi} & \dfrac{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}{\partial \boldsymbol{C}^\flat}^{\xi} : 2 \dfrac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}^{\xi} \\ \Lambda^\xi \dfrac{\partial \dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}^{\xi} & 1 + \Lambda^\xi \dfrac{\partial \dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial \mathcal{E}_{pM}}^{\xi} & \Lambda^\xi \dfrac{\partial \dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial \mathcal{B}}^{\xi} & \dot{\mathcal{E}}_{pM}^{\xi} \\ \Lambda^\xi \dfrac{\partial \dot{\mathcal{B}}}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}^{\xi} & \Lambda^\xi \dfrac{\partial \dot{\mathcal{B}}}{\partial \mathcal{E}_{pM}}^{\xi} & 1 + \Lambda^\xi \dfrac{\partial \dot{\mathcal{B}}}{\partial \mathcal{B}}^{\xi} & \dot{\mathcal{B}}^\xi \\ \Lambda^\xi \dfrac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}^{\xi} & \Lambda^\xi \dfrac{\partial Y}{\partial \mathcal{E}_{pM}}^{\xi} & \Lambda^\xi \dfrac{\partial Y}{\partial \mathcal{B}}^{\xi} & Y^\xi \end{pmatrix}. \tag{4.28}$$

Für $\dfrac{\partial^2 \boldsymbol{T}^\sharp}{\partial \boldsymbol{C}^\flat \partial \boldsymbol{C}^\flat} \approx \boldsymbol{0}$ geht das obige Verfahren in ein *Newton*–Verfahren über.

in der Momentankonfiguration

$$
\begin{aligned}
&\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{E}}\}\begin{pmatrix} \delta\boldsymbol{\tau}^{\sharp} \\[2ex] \delta\varepsilon_{pM} \\[2ex] \delta\beta \\[2ex] \delta\lambda \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \boldsymbol{\tau}^{\sharp\xi} - \dfrac{\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}}{\partial\boldsymbol{g}^{\flat}}^{\xi} : \left(\boldsymbol{\Phi}_{*}{}^{\xi}\sum\limits_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j\boldsymbol{\Phi}^{*}{}_{n-j}\boldsymbol{g}^{\flat} - \lambda^{\xi}2\dfrac{\partial y}{\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}}^{\xi}\right) + \boldsymbol{\Phi}_{*}{}^{\xi}\sum\limits_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j\boldsymbol{\Phi}^{*}{}_{n-j}\boldsymbol{\tau}^{\sharp}{}_{n-j} \\ \varepsilon_{pM}^{\xi} + \lambda^{\xi}\dot{\varepsilon}_{pM}^{\xi} + \sum\limits_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j\varepsilon_{pM_{n-j}} \\ \beta^{\xi} + \lambda^{\xi}\dot{\beta}^{\xi} + \sum\limits_{j=1}^{k}\hat{\alpha}_j\beta_{n-j} \\ \lambda^{\xi}y^{\xi} \end{pmatrix} \\
&\text{mit} \\
&\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{E}}\} = \\
&\begin{pmatrix}
\boldsymbol{I}^{(4)} + \lambda^{\xi}\dfrac{\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}}{\partial\boldsymbol{g}^{\flat}}^{\xi} : 2\dfrac{\partial^2 y}{\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}}^{\xi} & \lambda^{\xi}\dfrac{\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}}{\partial\boldsymbol{g}^{\flat}}^{\xi} : 2\dfrac{\partial^2 y}{\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}\partial\varepsilon_{pM}}^{\xi} & \lambda^{\xi}\dfrac{\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}}{\partial\boldsymbol{g}^{\flat}}^{\xi} : 2\dfrac{\partial^2 y}{\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}\partial\beta}^{\xi} & \dfrac{\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}}{\partial\boldsymbol{g}^{\flat}}^{\xi} : 2\dfrac{\partial y}{\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}}^{\xi} \\
\lambda^{\xi}\dfrac{\partial\dot{\varepsilon}_{pM}}{\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}}^{\xi} & 1 + \lambda^{\xi}\dfrac{\partial\dot{\varepsilon}_{pM}}{\partial\varepsilon_{pM}}^{\xi} & \lambda^{\xi}\dfrac{\partial\dot{\varepsilon}_{pM}}{\partial\beta}^{\xi} & \dot{\varepsilon}_{pM}^{\xi} \\
\lambda^{\xi}\dfrac{\partial\dot{\beta}}{\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}}^{\xi} & \lambda^{\xi}\dfrac{\partial\dot{\beta}}{\partial\varepsilon_{pM}}^{\xi} & 1 + \lambda^{\xi}\dfrac{\partial\dot{\beta}}{\partial\beta}^{\xi} & \dot{\beta}^{\xi} \\
\lambda^{\xi}\dfrac{\partial y}{\partial\boldsymbol{\tau}^{\sharp}}^{\xi} & \lambda^{\xi}\dfrac{\partial y}{\partial\varepsilon_{pM}}^{\xi} & \lambda^{\xi}\dfrac{\partial y}{\partial\beta}^{\xi} & y^{\xi}
\end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{4.29}
$$

Für $\dfrac{\partial^2\boldsymbol{\tau}^{\sharp}}{\partial\boldsymbol{g}^{\flat}\partial\boldsymbol{g}^{\flat}} \approx \mathbf{0}$ geht das obige Verfahren in ein *Newton*–Verfahren über.

4.1 Berechnung der konsistenten materiellen Steifigkeit

Um eine quadratische Konvergenz zu erzielen, ist zur iterativen Lösung des globalen Gleichgewichtes in der nichtlinearen FEM die Kenntnis der konsistenten algorithmischen Materialtangente $d\boldsymbol{T}^\sharp / d\boldsymbol{C}^\flat$ von Vorteil. Durch implizite Differentiation der algebraischen Gleichungen (4.23) nach $\boldsymbol{C}^\flat$ bzw. $\boldsymbol{g}^\flat$

$$
\begin{aligned}
\frac{d\boldsymbol{G}^{\boldsymbol{L}}}{d\boldsymbol{C}^\flat{}_n} &= \frac{\partial \boldsymbol{G}^{\boldsymbol{L}}}{\partial \boldsymbol{z}^{\boldsymbol{L}}{}_n} : \frac{d\boldsymbol{z}^{\boldsymbol{L}}{}_n}{d\boldsymbol{C}^\flat{}_n} + \frac{\partial \boldsymbol{G}^{\boldsymbol{L}}}{\partial \boldsymbol{C}^\flat{}_n} = 0 \\
\frac{d\boldsymbol{G}^{\boldsymbol{E}}}{d\boldsymbol{g}^\flat{}_n} &= \frac{\partial \boldsymbol{G}^{\boldsymbol{E}}}{\partial \boldsymbol{z}^{\boldsymbol{E}}{}_n} : \frac{d\boldsymbol{z}^{\boldsymbol{E}}{}_n}{d\boldsymbol{g}^\flat{}_n} + \frac{\partial \boldsymbol{G}^{\boldsymbol{E}}}{\partial \boldsymbol{g}^\flat{}_n} = 0
\end{aligned}
\tag{4.30}
$$

erhält man die Beziehungen

Lagrange	Euler
$\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{L}}\} \begin{pmatrix} \frac{dT^{XX}}{dC_{AB}} \\ \frac{dT^{YY}}{dC_{AB}} \\ \frac{dT^{ZZ}}{dC_{AB}} \\ \frac{dT^{XY}}{dC_{AB}} \\ \frac{dT^{YZ}}{dC_{AB}} \\ \frac{dT^{ZX}}{dC_{AB}} \\ \frac{d\mathcal{E}_{pM}}{dC_{AB}} \\ \frac{d\mathcal{B}}{dC_{AB}} \\ \frac{d\dot{\Lambda}}{dC_{AB}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial T^{XX}}{\partial C_{AB}} \\ \frac{\partial T^{YY}}{\partial C_{AB}} \\ \frac{\partial T^{ZZ}}{\partial C_{AB}} \\ \frac{\partial T^{XY}}{\partial C_{AB}} \\ \frac{\partial T^{YZ}}{\partial C_{AB}} \\ \frac{\partial T^{ZX}}{\partial C_{AB}} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad A;B = X,Y,Z$	$\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{E}}\} \begin{pmatrix} \frac{d\tau^{xx}}{dg_{ab}} \\ \frac{d\tau^{yy}}{dg_{ab}} \\ \frac{d\tau^{zz}}{dg_{ab}} \\ \frac{d\tau^{xy}}{dg_{ab}} \\ \frac{d\tau^{yz}}{dg_{ab}} \\ \frac{d\tau^{zx}}{dg_{ab}} \\ \frac{d\varepsilon_{pM}}{dg_{ab}} \\ \frac{d\beta}{dg_{ab}} \\ \frac{d\dot{\lambda}}{dg_{ab}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \tau^{xx}}{\partial g_{ab}} \\ \frac{\partial \tau^{yy}}{\partial g_{ab}} \\ \frac{\partial \tau^{zz}}{\partial g_{ab}} \\ \frac{\partial \tau^{xy}}{\partial g_{ab}} \\ \frac{\partial \tau^{yz}}{\partial g_{ab}} \\ \frac{\partial \tau^{zx}}{\partial g_{ab}} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad a;b = x,y,z$

mit den bekannten *Jacobi* Matrizen $\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{L}}\} = \partial \boldsymbol{G}^{\boldsymbol{L}} / \partial \boldsymbol{z}^{\boldsymbol{L}}{}_n$ bzw. $\{\boldsymbol{\mathcal{J}}^{\boldsymbol{E}}\} = \partial \boldsymbol{G}^{\boldsymbol{E}} / \partial \boldsymbol{z}^{\boldsymbol{E}}{}_n$ aus (4.28) bzw. (4.29) in der *Lagrange*'schen und *Euler*'schen Betrachtungsweise. Die Ausdrücke dT^{CD}/dC_{AB} bzw. $d\tau^{cd}/dg_{ab}$ sind als komponentenweise Ableitungen unter Anwendung der Kettenregel zu verstehen. Durch Lösung dieser linearen Gleichungssysteme $\forall A, B$ bzw. $\forall a, b$ können die konsistenten algorithmischen Tangenten bei der Integration des Materialgesetzes mit der gleichen Genauigkeit wie die Spannungen und die internen Variablen aufgebaut werden.

4.2 Hyperelastisches Potential

Eine Erweiterung des *Hooke*'schen Materialgesetzes auf geometrisch nichtlineare Probleme (Neo–*Hooke* Material) kann z.B. mit den folgenden elastischen Potentialen

$$
\begin{aligned}
&a)\quad \psi_e(I_{\boldsymbol{b}^\sharp}, J) = \tfrac{1}{2}\mu(I_{\boldsymbol{b}^\sharp} - 2\ln J - 3) \quad + \tfrac{1}{2}\lambda\,(\ln J)^2\,; \quad I_{\boldsymbol{b}^\sharp} = b^{ab}(\overset{-1}{b}_{ab} \ + g_{ab} - \overset{-e}{b}_{ab}\,) \equiv G^{AB}(G_{AB} + C_{AB} - \overset{p}{C}_{AB}) = I_{\boldsymbol{C}^\flat} \\
&b)\quad \psi_e(I_{\boldsymbol{b}^\sharp}, J) = \tfrac{1}{2}\mu(I_{\boldsymbol{b}^\sharp} - 2\ln J - 3) \quad + \tfrac{1}{2}\lambda\,(J-1)^2 \\
&c)\quad \psi_e(I_{\boldsymbol{b}^\sharp}, J) = \tfrac{1}{2}\mu(I_{\boldsymbol{b}^\sharp} - J^2 - 2) \qquad + \tfrac{1}{2}\lambda\,(\ln J)^2\,; \quad J = \sqrt{\left|b^{ab}(\overset{-1}{b}_{bc} \ + g_{bc} - \overset{-e}{b}_{bc}\,)\right|} \equiv \sqrt{\left|G^{AB}(G_{BC} + C_{BC} - \overset{p}{C}_{BC})\right|}
\end{aligned}
\tag{4.31}
$$

formuliert werden (μ, λ – *Lame*–Konstanten). Hieraus ergeben sich die Spannungs–Dehnungsbeziehungen (vgl. (3.19))

Lagrange	Euler
$a)\ \boldsymbol{T}^\sharp = \mu(\boldsymbol{G}^\sharp - \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp) + \lambda \ln J \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp$	$\boldsymbol{\tau}^\sharp = \mu(\boldsymbol{b}^\sharp - \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp) + \lambda \ln J \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp$
$b)\ \boldsymbol{T}^\sharp = \mu(\boldsymbol{G}^\sharp - \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp) + \lambda J(J-1) \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp;\ \ \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp = \left(\boldsymbol{G}^\flat + \boldsymbol{C}^\flat - \overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^\flat\right)^{-1}$	$\boldsymbol{\tau}^\sharp = \mu(\boldsymbol{b}^\sharp - \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp) + \lambda J(J-1) \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp; \qquad \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp = \left(\overset{-1}{\boldsymbol{b}}{}^\flat + \boldsymbol{g}^\flat - \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat\right)^{-1}$
$c)\ \boldsymbol{T}^\sharp = \mu(\boldsymbol{G}^\sharp - J^2 \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp) + \lambda \ln J \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp$	$\boldsymbol{\tau}^\sharp = \mu(\boldsymbol{b}^\sharp - J^2 \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp) + \lambda \ln J \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp$

und ein hyperelastischer Materialtensor

Lagrange	Euler
$a)\ \dfrac{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}{\partial \boldsymbol{C}^\flat} = (\mu - \lambda \ln J) \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp \cdot \boldsymbol{I} \cdot \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp + \dfrac{\lambda}{2} \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp \otimes \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp$	$\dfrac{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp}{\partial \boldsymbol{g}^\flat} = (\mu - \lambda \ln J) \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp \cdot \boldsymbol{I} \cdot \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp + \dfrac{\lambda}{2} \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp \otimes \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp$
$b)\ \dfrac{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}{\partial \boldsymbol{C}^\flat} = [\mu - \lambda J(J-1)]\, \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp \cdot \boldsymbol{I} \cdot \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp + \dfrac{\lambda}{2} J(2J-1) \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp \otimes \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp$	$\dfrac{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp}{\partial \boldsymbol{g}^\flat} = [\mu - \lambda J(J-1)]\, \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp \cdot \boldsymbol{I} \cdot \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp + \dfrac{\lambda}{2} J(2J-1) \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp \otimes \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp$
$c)\ \dfrac{\partial \boldsymbol{T}^\sharp}{\partial \boldsymbol{C}^\flat} = (\mu J^2 - \lambda \ln J) \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp \cdot \boldsymbol{I} \cdot \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp + \left(\dfrac{\lambda}{2} - \mu J^2\right) \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp \otimes \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^\sharp$	$\dfrac{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp}{\partial \boldsymbol{g}^\flat} = (\mu J^2 - \lambda \ln J) \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp \cdot \boldsymbol{I} \cdot \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp + \left(\dfrac{\lambda}{2} - \mu J^2\right) \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp \otimes \widehat{\boldsymbol{\gamma}}^\sharp\ .$

4.3 Plastischer Anteil des Deformationsgesetzes

Es wird die Fließbedingung des *Rousselier* Modells vorausgesetzt. Die Verfestigung verläuft isotrop und die Entfestigung geschieht durch Wachstum der Schädigungsvariable, die mit der Porenvolumenkonzentration gekoppelt ist.

Lagrange	Euler
$Y = \sqrt{-3II_{\boldsymbol{DEV(T^\sharp)}}} - \sigma_0 \left(\frac{\mathcal{E}_{pM}}{\varepsilon_0} + 1\right)^n + B(\mathcal{B}) D \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right)$	$y = \sqrt{-3II_{\boldsymbol{dev(\tau^\sharp)}}} - \sigma_0 \left(\frac{\varepsilon_{pM}}{\varepsilon_0} + 1\right)^n + B(\beta) D \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{\tau}^\sharp}\right)$
$\dot{\mathcal{E}}_{pM} = -1$	$\dot{\varepsilon}_{pM} = -1$
$\dot{\mathcal{B}} = -D \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right)$	$\dot{\beta} = -D \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{\tau}^\sharp}\right)$

Die für den Algorithmus relevanten Ableitungen ergeben sich folglich zu

Lagrange	Euler
$\frac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp} = \frac{3\boldsymbol{C}^\flat \cdot \boldsymbol{DEV(T^\sharp)} \cdot \boldsymbol{C}^\flat}{2\sqrt{-3II_{\boldsymbol{DEV(T^\sharp)}}}} + \frac{B(\mathcal{B})D}{\sigma_1} \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right) \boldsymbol{C}^\flat$	$\frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp} = \frac{3\boldsymbol{g}^\flat \cdot \boldsymbol{dev(\tau^\sharp)} \cdot \boldsymbol{g}^\flat}{2\sqrt{-3II_{\boldsymbol{dev(\tau^\sharp)}}}} + \frac{B(\beta)D}{\sigma_1} \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{\tau}^\sharp}\right) \boldsymbol{g}^\flat$
$\frac{\partial Y}{\partial \mathcal{E}_{pM}} = \sigma_0 \frac{n}{\varepsilon_0} \left(\frac{\mathcal{E}_{pM}}{\varepsilon_0} + 1\right)^{n-1}$	$\frac{\partial y}{\partial \varepsilon_{pM}} = \sigma_0 \frac{n}{\varepsilon_0} \left(\frac{\varepsilon_{pM}}{\varepsilon_0} + 1\right)^{n-1}$
$\frac{\partial Y}{\partial \mathcal{B}} = B(\mathcal{B}) \frac{1 - f_0}{1 - f_0 + f_0 \exp(\mathcal{B})} D \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right)$	$\frac{\partial y}{\partial \beta} = B(\beta) \frac{1 - f_0}{1 - f_0 + f_0 \exp(\beta)} D \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{\tau}^\sharp}\right)$
$\frac{\partial \dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp} = 0$	$\frac{\partial \dot{\varepsilon}_{pM}}{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp} = 0$

Lagrange	Euler
$\frac{\partial \dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial \mathcal{E}_{pM}} = 0$	$\frac{\partial \dot{\varepsilon}_{pM}}{\partial \varepsilon_{pM}} = 0$
$\frac{\partial \dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial \mathcal{B}} = 0$	$\frac{\partial \dot{\varepsilon}_{pM}}{\partial \beta} = 0$
$\frac{\partial \dot{\mathcal{B}}}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp} = -\frac{D}{\sigma_1} \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right) \boldsymbol{C}^\flat$	$\frac{\partial \dot{\beta}}{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp} = -\frac{D}{\sigma_1} \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{\tau}^\sharp}\right) \boldsymbol{g}^\flat$
$\frac{\partial \dot{\mathcal{B}}}{\partial \mathcal{E}_{pM}} = 0$	$\frac{\partial \dot{\beta}}{\partial \varepsilon_{pM}} = 0$
$\frac{\partial \dot{\mathcal{B}}}{\partial \mathcal{B}} = 0$	$\frac{\partial \dot{\beta}}{\partial \beta} = 0$
$\frac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp \partial \boldsymbol{T}^\sharp} = \frac{3\boldsymbol{C}^\flat \cdot \boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{C}^\flat - \boldsymbol{C}^\flat \otimes \boldsymbol{C}^\flat}{2\sqrt{-3II_{\boldsymbol{DEV}(\boldsymbol{T}^\sharp)}}} - \frac{9\boldsymbol{DEV}(\boldsymbol{T}^\sharp) \otimes \boldsymbol{DEV}(\boldsymbol{T}^\sharp)}{4\left(\sqrt{-3II_{\boldsymbol{DEV}(\boldsymbol{T}^\sharp)}}\right)^3} + \frac{B(\mathcal{B})D}{\sigma_1^2} \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right) \boldsymbol{C}^\flat \otimes \boldsymbol{C}^\flat$	$\frac{\partial^2 y}{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp \partial \boldsymbol{\tau}^\sharp} = \frac{3\boldsymbol{g}^\flat \cdot \boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{g}^\flat - \boldsymbol{g}^\flat \otimes \boldsymbol{g}^\flat}{2\sqrt{-3II_{\boldsymbol{dev}(\boldsymbol{\tau}^\sharp)}}} - \frac{9\boldsymbol{dev}(\boldsymbol{\tau}^\sharp) \otimes \boldsymbol{dev}(\boldsymbol{\tau}^\sharp)}{4\left(\sqrt{-3II_{\boldsymbol{dev}(\boldsymbol{\tau}^\sharp)}}\right)^3} + \frac{B(\beta)D}{\sigma_1^2} \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{\tau}^\sharp}\right) \boldsymbol{g}^\flat \otimes \boldsymbol{g}^\flat$
$\frac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp \partial \mathcal{E}_{pM}} = 0$	$\frac{\partial^2 y}{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp \partial \varepsilon_{pM}} = 0$
$\frac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp \partial \mathcal{B}} = B(\mathcal{B}) \frac{1 - f_0}{1 - f_0 + f_0 \exp(\mathcal{B})} \frac{D}{\sigma_1} \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right) \boldsymbol{C}^\flat$	$\frac{\partial^2 y}{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp \partial \beta} = B(\beta) \frac{1 - f_0}{1 - f_0 + f_0 \exp(\beta)} \frac{D}{\sigma_1} \exp\left(\frac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{\tau}^\sharp}\right) \boldsymbol{g}^\flat \quad .$

Die ausführliche Darstellung in Komponentenschreibweise ist analog hierzu in [14] für das *Gurson–Tvergaard–Needleman* Modell zu finden.

5 Vergleich mit FEAP

In [14] sind Vergleichsrechnungen zwischen **ABAQUS** und **SPC-PMHP** für das *Gurson–Tvergaard–Needleman* Modell vorgenommen worden. Die relativ großen Abweichungen wurden auf die Verwendung unterschiedlicher objektiver Spannungsgeschwindigkeiten zurückgeführt. Im folgenden wird ein Vergleich zwischen dem finite Element Programm **FEAP** mit der Implementierung des *Rousselier* Modells aus [2] und **SPC-PMHP** anhand einer CT–Probe (Abb. 1) aufgeführt. In beiden Programmen sind die gleichen objektiven Spannungsgeschwindigkeiten (*Lie*–Ableitung) und die gleichen Materialmodelle verwendet worden (vgl. [2]).

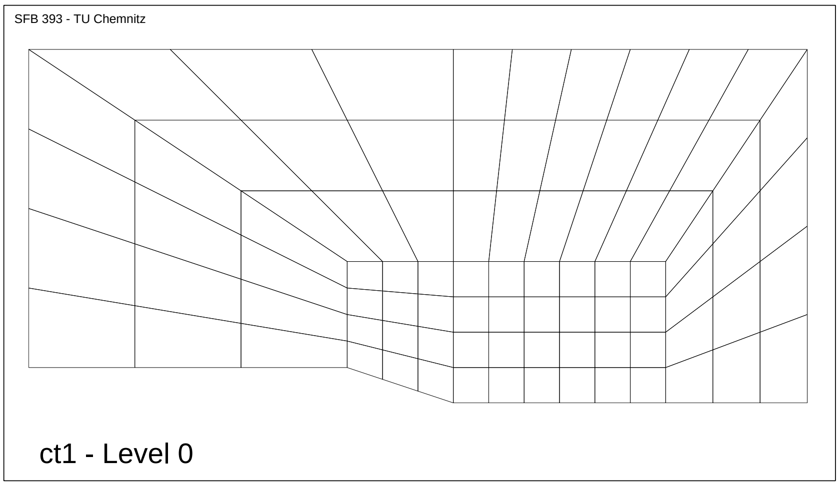

Abbildung 1: CT–Probe, Diskretisierung der oberen Hälfte

Neben einer sehr guten Übereinstimmung der globalen Kraft–Verschiebungskurven (siehe Abb. 2) betrugen auch die Unterschiede lokaler Größen wie Spannungen, Verzerrungen und interne Variable vor der Rissspitze nur wenige Promille.

6 Materialparameteridentifikation

Die Entwicklung immer komplexerer Materialmodelle führt zu einer immer größeren Anzahl unbekannter Parameter, die durch geeignete Experimente bestimmt werden müssen. Das hier verwendete *Rousselier* Modell enthält sechs Materialparameter, mit denen die Verfestigung und die Schädigung charakterisiert werden, welche in der Spaltenmatrix $\boldsymbol{p}$ zusammengefasst sind

$$\boldsymbol{p} = p_i = (\sigma_0 \quad \varepsilon_0 \quad n \quad f_0 \quad \sigma_1 \quad D)^T \ . \tag{6.32}$$

Für viele Materialparameter ist es aber nicht möglich, ihre Werte durch eine direkte Auswertung der experimentellen Ergebnisse zu bestimmen. Da die Materialparameter nicht direkt messbar sind, sondern nur über ihre Wirkung identifiziert werden können, stellt die

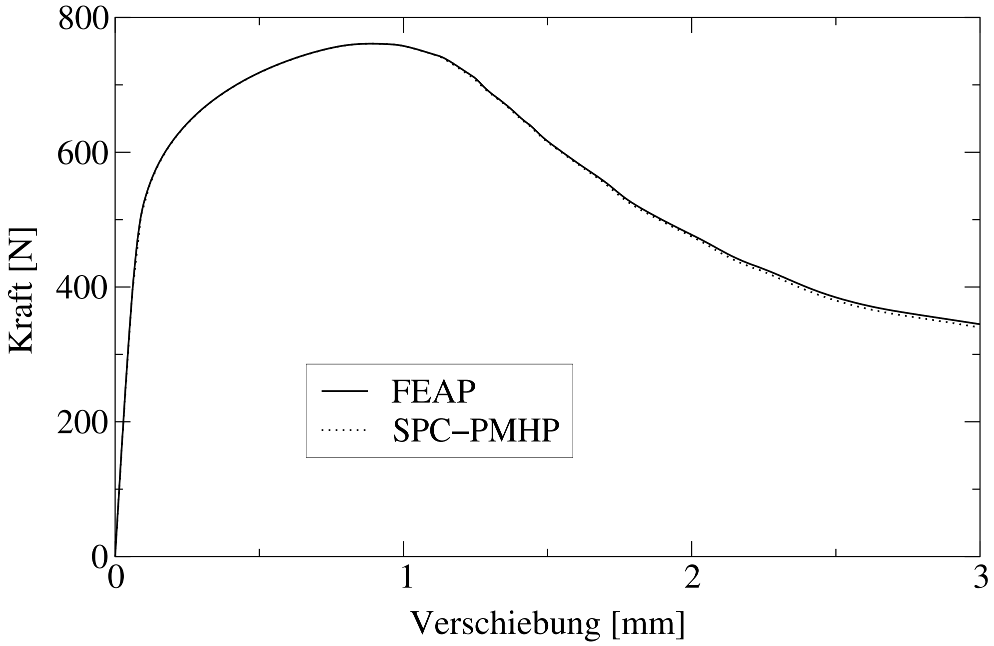

Abbildung 2: Vergleich Kraft–Verschiebungskurven (**FEAP** und **SPC-PMHP**)

Identifikation ein inverses Problem dar. Die Beziehung zwischen den Materialparametern $\boldsymbol{p}$ und den Verschiebungen $\boldsymbol{u}$ kann allgemein in der Form

$$\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{p} = \boldsymbol{u} \tag{6.33}$$

angegeben werden (vgl. [4]). Der Operator $\boldsymbol{A}$ repräsentiert dabei die Lösung des gesamten nichtlinearen Rand- und Anfangswertproblems. Im allgemeinen ist die Invertierung von $\boldsymbol{A}$ nicht explizit möglich.
Eine ausführliche Darstellung dieser Problematik ist in [4, 6, 9] gegeben. Die Parameteridentifikation erfolgt im weiteren auf der Ausgangskonfiguration, also in *Lagrange*'scher Betrachtungsweise.

6.1 Nichtlineare Optimierung

Eine Möglichkeit, das inverse Problem der Materialparameteridentifikation zu lösen, besteht in der Anwendung nichtlinearer Optimierungsalgorithmen. Mit der Formulierung einer Zielfunktion

$$\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{p}) = \sum \left(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{p}) - \bar{\boldsymbol{u}}\right)^2 \rightsquigarrow \text{min.} \tag{6.34}$$

kann die Annäherung der berechneten Verschiebungen $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{p})$ an die gemessenen Verschiebungen $\bar{\boldsymbol{u}}$ erfasst werden. Für dieses Gütemaß ist das globale Minimum im Raum der Materialparameter $\boldsymbol{p}$ zu finden. Diese Optimierungsaufgabe ist im allgemeinen ein schlecht gestelltes Problem, d.h. kleine Änderungen in den Anfangsbedingungen können zu sehr unterschiedlichen Resultaten in der Identifikation der Parameter führen [3, 9]. Die wesentlichen Gründe hierfür liegen in der meist unzureichenden Beschreibung der physikalischen Zusammenhänge, in der räumlichen und zeitlichen Approximation des direkten Problems sowie in dem unzureichenden Gehalt an Informationen bei der Auswertung von Versuchen, in denen zusätzlich noch mehr oder weniger bedeutsame Messfehler enthalten sein können. Der Informationsgehalt eines homogenen Zugversuches, bei dem lediglich die Kraft–Verformungskurve sowie die Einschnührung aufgenommen werden, ist sehr gering [6]. Daher werden im weiteren die Verschiebungsfelder an Proben mit inhomogenen Spannungs- und Verzerrungszuständen aufgenommen und als Eingangsdaten für die Identifikation genutzt. Inwieweit das *Rousselier* Modell geeignet ist, den Vorgang der duktilen Schädigung sinnvoll und ausreichend zu beschreiben, kann nur im Rahmen der Materialparameteridentifikation anhand von realen Experimenten geklärt werden. Aus rechenzeittechnischen Gründen wird vorerst ein relativ grobes FE–Netz verwendet, siehe Abb. 3. Eine Untersuchung des Diskretisierungsfehlers wird demzufolge nicht durchgeführt.

6.2 Optimierungsverfahren

Zur Lösung von Problemen nach (6.34) lassen sich Optimierungsverfahren in gradientenfreie und gradientenbasierte Verfahren klassifizieren. Die Vor- und Nachteile beider Verfahren sind in [4] erläutert. Im weiteren wird ein Gradientenverfahren verwendet, bei dem die Startwerte variiert werden. Die Berechnung eines neuen Parametersatzes $\boldsymbol{p}_{l+1}$ folgt aus einer deterministischen iterativen Methode zur Lösung des nichtlinearen Optimierungsproblems mit der Lösung des vorhergehenden Schrittes $\boldsymbol{p}_l$

$$\boldsymbol{p}_{l+1} = \boldsymbol{p}_l + w\boldsymbol{s}_l \tag{6.35}$$

wobei w die Schrittweite und $\boldsymbol{s}$ die Suchrichtung charakterisiert. Die Suchrichtung wird mit der Methode von *Levenberg* und *Marquardt* berechnet [4, 6, 8]

$$\boldsymbol{s}_l = -\left(\nabla^2\boldsymbol{\Phi}_l + \mu\mathbf{E}\right)^{-1} \cdot \nabla\boldsymbol{\Phi}_l \; . \tag{6.36}$$

Der Faktor μ gibt das Verhältnis zwischen der Methode des steilsten Abstiegs $(-\mathbf{E}\cdot\nabla\boldsymbol{\Phi}_l)$ und des *Gauß–Newton* Verfahrens $(-(\nabla^2\boldsymbol{\Phi}_l)^{-1}\cdot\nabla\boldsymbol{\Phi}_l)$ an [4], wobei $\mathbf{E}$ die Einheitsmatrix kennzeichnet. Die Ermittlung von $\boldsymbol{s}_l$ erfordert sowohl die Kenntnis des Gradienten $\nabla\boldsymbol{\Phi}$ der Zielfunktion $\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{p})$

$$\nabla\boldsymbol{\Phi} = \Phi_{,m} = \sum_{i=1}^{n_L}\sum_{j=1}^{n_M}\sum_{k=1}^{2}\left(\{u_k(\boldsymbol{p})\}_{ij} - \{\bar{u}_k\}_{ij}\right)\frac{d\,\{u_k\}_{ij}}{dp_m} \tag{6.37}$$

(n_L bezeichnet die Anzahl der Lastschritte und n_M die Anzahl der Messpunkte) als auch ihrer zweiten Ableitung $\nabla^2\boldsymbol{\Phi}$

$$\nabla^2\boldsymbol{\Phi} = \Phi_{,mn} = \sum_{i=1}^{n_L}\sum_{j=1}^{n_M}\sum_{k=1}^{2}\left[\frac{d\,\{u_k\}_{ij}}{dp_m}\frac{d\,\{u_k\}_{ij}}{dp_n} + \left(\{u_k(\boldsymbol{p})\}_{ij} - \{\bar{u}_k\}_{ij}\right)\frac{d^2\,\{u_k\}_{ij}}{dp_m dp_n}\right] \; . \tag{6.38}$$

Im weiteren wird der zweite Term in Gleichung (6.38) vernachlässigt, so dass nur die ersten Ableitungen der Verschiebungen nach den Materialparametern gebildet werden müssen.

6.3 Sensitivitätsanalyse

Die Ermittlung des Gradienten der Zielfunktion erfordert die Berechnung der ersten Ableitungen der Verschiebungen nach den Materialparametern für den durch Iteration gefundenen Gleichgewichtszustand eines jeden Lastschrittes. Es existieren verschiedene Möglichkeiten diese Ableitungen zu bestimmen. Eine analytische Berechnung ist nicht möglich, da kein expliziter Zusammenhang zwischen den Verschiebungen $\boldsymbol{u}$ und den Materialparametern $\boldsymbol{p}$ besteht. Ein numerisches Verfahren zur Bestimmung der Ableitungen mit finiten Differenzen bedeutet einen sehr großen Rechenaufwand. Meist stellt auch die Genauigkeit dieses numerischen Verfahrens ein Problem dar, denn ein größerer Fehler im Gradienten der Zielfunktion beeinflusst maßgeblich die Suchrichtung. Eine ungenaue Suchrichtung kann die Konvergenzgeschwindigkeit der Optimierung stark vermindern oder sogar zur Divergenz führen [9].

Die im weiteren verwendete semianalytische Sensitivitätsanalyse wurde von *Mahnken* vorgeschlagen. Dieses Verfahren basiert auf der impliziten Differentiation des Gleichgewichts und des ausiterierten Deformationsgesetzes, wobei analoge numerische Strukturen benutzt werden, wie sie bei der Lösung des direkten Problems verwendet wurden. Die Herleitung und einige Anwendungen sind in [9, 10, 11] zu finden.

Die Ableitung der Verschiebungen nach den Materialparametern $d\boldsymbol{u}/d\boldsymbol{p}$ erhält man zunächst formal durch Differentiation des globalen FEM–Gleichgewichtszustandes

$$\boldsymbol{K} \cdot \frac{d\boldsymbol{u}}{d\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{P}_p \tag{6.39}$$

wobei die Gesamtsteifigkeitsmatrix $\boldsymbol{K}$ aus der Lösung des direkten Problems übernommen werden kann. Gleichung (6.39) kann dann für jedes Element geschrieben werden (Index ^{el})

$$\boldsymbol{K}^{el} \cdot \frac{d\boldsymbol{u}^{el}}{d\boldsymbol{p}} = - \int\limits_{V_0^{el}} \boldsymbol{B}^T \cdot \left(\frac{d\boldsymbol{T}^\sharp}{d\boldsymbol{p}} \right) dV_0^{el} = \boldsymbol{P}_p^{el} \ . \tag{6.40}$$

Die rechte Seite von Gleichung (6.40) beinhaltet neben der Matrix der Verzerrungs–Verschiebungs–Beziehung $\boldsymbol{B}$ das Materialgesetz. Die Ableitungen der Spannungen nach den Materialparametern $d\boldsymbol{T}^\sharp/d\boldsymbol{p}$ erhält man, indem man das ausiterierte, zeitdiskretisierte Materialgesetz $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{z})$ (vgl. 4.23) implizit nach den Materialparametern ableitet. Aus der Abhängigkeit des Zustandvektors $\boldsymbol{z}_n$ des aktuellen und der k vorhergehenden Schritte $\boldsymbol{z}_{n-k}$ sowie des Materialgesetzes von den Materialparametern folgt

$$\boldsymbol{G}\left(\boldsymbol{z}_{n-k}(\boldsymbol{p}), \ldots, \boldsymbol{z}_{n-j}(\boldsymbol{p}), \ldots, \boldsymbol{z}_{n-1}(\boldsymbol{p}), \boldsymbol{z}_n(\boldsymbol{p}), \boldsymbol{p}\right) = 0 \ . \tag{6.41}$$

Die vollständige Ableitung des diskretisierten Materialgesetzes führt zu

$$\frac{d\boldsymbol{G}}{d\boldsymbol{p}} = \sum_{j=1}^{k} \frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial \boldsymbol{z}_{n-j}} : \frac{d\boldsymbol{z}_{n-j}}{d\boldsymbol{p}} + \frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial \boldsymbol{z}_n} : \frac{d\boldsymbol{z}_n}{d\boldsymbol{p}} + \frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial \boldsymbol{p}} = 0 \ . \tag{6.42}$$

Während die partiellen Ableitungen $\partial \boldsymbol{G}/\partial \boldsymbol{z}$ und $\partial \boldsymbol{G}/\partial \boldsymbol{p}$ analytisch berechnet werden, kann man die totalen Ableitungen $d\boldsymbol{z}/d\boldsymbol{p}$ nur auf der Basis einer numerischen Berechnung ermitteln

$$\frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial \boldsymbol{z}_n} : \frac{d\boldsymbol{z}_n}{d\boldsymbol{p}} = -\sum_{j=1}^{k} \frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial \boldsymbol{z}_{n-j}} : \frac{d\boldsymbol{z}_{n-j}}{d\boldsymbol{p}} - \frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial \boldsymbol{p}} \,. \tag{6.43}$$

Die totalen Ableitungen des Zustandsvektors $d\boldsymbol{z}_{n-1}/d\boldsymbol{p}$ erhält man aus den vorhergehenden Schritten. Die im letzten ausiterierten Schritt verwendete *Jacobi* Matrix $(\partial \boldsymbol{G}/\partial \boldsymbol{z}_n)$ kann aus der Lösung des direkten Problems übernommen werden. Die rechte Seite von Gleichung (6.43) ergibt sich dann für (4.23) zu

$$\sum_{j=1}^{k} \frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial \boldsymbol{z}_{n-j}} : \frac{d\boldsymbol{z}_{n-j}}{d\boldsymbol{p}} = \begin{pmatrix} \displaystyle\sum_{j=1}^{k} \hat{\alpha}_j \boldsymbol{I}^{(4)} : \frac{d\boldsymbol{T}^{\sharp}{}_{n-j}}{d\boldsymbol{p}} \\ \displaystyle\sum_{j=1}^{k} \hat{\alpha}_j \frac{d\mathcal{E}_{n-j}}{d\boldsymbol{p}} \\ \displaystyle\sum_{j=1}^{k} \hat{\alpha}_j \frac{d\mathcal{B}_{n-j}}{d\boldsymbol{p}} \\ 0 \end{pmatrix} ; \quad \frac{\partial \boldsymbol{G}_n}{\partial \boldsymbol{p}} = \begin{pmatrix} h\dot{\Lambda} 2 \dfrac{\partial \boldsymbol{T}^{\sharp}}{\partial \boldsymbol{C}^{\flat}} : \dfrac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^{\sharp} \partial \boldsymbol{p}} \\ h\dot{\Lambda} \dfrac{\partial \dot{\mathcal{E}}_n}{\partial \boldsymbol{p}} \\ h\dot{\Lambda} \dfrac{\partial \dot{\mathcal{B}}_n}{\partial \boldsymbol{p}} \\ h\dot{\Lambda} \dfrac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{p}} \end{pmatrix} . \tag{6.44}$$

Führt man die implizite Differentiation von (4.20) zur semianalytischen Sensitivitätsanalyse durch, so erhält man ebenfalls das lineare Gleichungssystem (6.43). Im Lösungsvektor $d\boldsymbol{z}/d\boldsymbol{p}$ tritt jetzt allerdings anstelle von $d\boldsymbol{T}^{\sharp}/d\boldsymbol{p}$ die Ableitung der plastischen Deformationen nach den Materialparametern $d\overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat}/d\boldsymbol{p}$ auf

$$\sum_{j=1}^{k} \frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial \boldsymbol{z}_{n-j}} : \frac{d\boldsymbol{z}_{n-j}}{d\boldsymbol{p}} = \begin{pmatrix} \displaystyle\sum_{j=1}^{k} \hat{\alpha}_j \boldsymbol{I}^{(4)} : \frac{d\overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat}{}_{n-j}}{d\boldsymbol{p}} \\ \displaystyle\sum_{j=1}^{k} \hat{\alpha}_j \frac{d\mathcal{E}_{n-j}}{d\boldsymbol{p}} \\ \displaystyle\sum_{j=1}^{k} \hat{\alpha}_j \frac{d\mathcal{B}_{n-j}}{d\boldsymbol{p}} \\ 0 \end{pmatrix} ; \quad \frac{\partial \boldsymbol{G}_n}{\partial \boldsymbol{p}} = \begin{pmatrix} -h\dot{\Lambda} 2 \dfrac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^{\sharp} \partial \boldsymbol{p}} \\ h\dot{\Lambda} \dfrac{\partial \dot{\mathcal{E}}_n}{\partial \boldsymbol{p}} \\ h\dot{\Lambda} \dfrac{\partial \dot{\mathcal{B}}_n}{\partial \boldsymbol{p}} \\ h\dot{\Lambda} \dfrac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{p}} \end{pmatrix} . \tag{6.45}$$

Für die Assemblierung der rechten Seite (6.40) sind jedoch die Ableitungen $\mathrm{d}\boldsymbol{T}^{\sharp}/\mathrm{d}\boldsymbol{p}$ erforderlich. Anhand der Beziehung

$$\frac{d\boldsymbol{T}^{\sharp}}{d\boldsymbol{p}} = \frac{\partial \boldsymbol{T}^{\sharp}}{\partial \overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat}} : \frac{d\overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat}}{d\boldsymbol{p}} \tag{6.46}$$

können die Sensitivitäten $\mathrm{d}\overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat}/\mathrm{d}\boldsymbol{p}$ in $\mathrm{d}\boldsymbol{T}^{\sharp}/\mathrm{d}\boldsymbol{p}$ mit Hilfe der Definition der Spannungen aus Abschnitt 4.2 umgerechnet werden

$$
\begin{aligned}
a)\ \frac{\partial \boldsymbol{T}^{\sharp}}{\partial \overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat}} &= (-\mu + \lambda \ln J)\widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^{\sharp}\cdot \boldsymbol{I}\cdot \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^{\sharp} - \frac{\lambda}{2}\widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^{\sharp}\otimes\widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^{\sharp} \\
b)\ \frac{\partial \boldsymbol{T}^{\sharp}}{\partial \overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat}} &= [-\mu + \lambda J(J-1)]\, \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^{\sharp}\cdot \boldsymbol{I}\cdot \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^{\sharp} - \frac{\lambda}{2}J(2J-1)\widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^{\sharp}\otimes\widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^{\sharp} \\
c)\ \frac{\partial \boldsymbol{T}^{\sharp}}{\partial \overset{p}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat}} &= (-\mu J^2 + \lambda \ln J)\widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^{\sharp}\cdot \boldsymbol{I}\cdot \widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^{\sharp} - \left(\frac{\lambda}{2} - \mu J^2\right)\widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^{\sharp}\otimes\widehat{\boldsymbol{\mathcal{B}}}^{\sharp}\ .
\end{aligned} \tag{6.47}
$$

Die partiellen Ableitungen $\partial \boldsymbol{G}/\partial \boldsymbol{p}$ für das in Abschnitt 3 vorgestellte *Rousselier* Modell sind im folgenden dargestellt. Die ersten und zweiten Ableitungen der Fließfunktion nach den Materialparametern ergeben sich zu

$$
\frac{\partial Y}{\partial \boldsymbol{p}} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial Y}{\partial \sigma_0} \\ \dfrac{\partial Y}{\partial \varepsilon_0} \\ \dfrac{\partial Y}{\partial n} \\ \dfrac{\partial Y}{\partial f_0} \\ \dfrac{\partial Y}{\partial \sigma_1} \\ \dfrac{\partial Y}{\partial D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\left(\dfrac{\mathcal{E}_{pM}}{\varepsilon_0} + 1\right)^n \\ -\mathcal{E}_{pM}\dfrac{n\sigma_0}{-\varepsilon_0^2}\left(\dfrac{\mathcal{E}_{pM}}{\varepsilon_0} + 1\right)^{n-1} \\ -\sigma_0\left(\dfrac{\mathcal{E}_{pM}}{\varepsilon_0} + 1\right)^n \ln\left(\dfrac{\mathcal{E}_{pM}}{\varepsilon_0} + 1\right);\ \left(\dfrac{\mathcal{E}_{pM}}{\varepsilon_0} + 1\right) > 0 \\ \dfrac{\sigma_1 \exp(\mathcal{B})}{(1 - f_0 + f_0\exp(\mathcal{B}))^2} D\exp\left(\dfrac{1}{3\sigma_1}I_{\boldsymbol{T}^{\sharp}}\right) \\ \dfrac{f_0\exp(\mathcal{B})}{1 - f_0 + f_0\exp(\mathcal{B})} D\exp\left(\dfrac{1}{3\sigma_1}I_{\boldsymbol{T}^{\sharp}}\right)\left(1 + \dfrac{1}{3\sigma_1}I_{\boldsymbol{T}^{\sharp}}\right) \\ \dfrac{\sigma_1 f_0\exp(\mathcal{B})}{1 - f_0 + f_0\exp(\mathcal{B})}\exp\left(\dfrac{1}{3\sigma_1}I_{\boldsymbol{T}^{\sharp}}\right) \end{pmatrix} \tag{6.48}
$$

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp \partial \boldsymbol{p}} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp \partial \sigma_0} \\ \dfrac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp \partial \varepsilon_0} \\ \dfrac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp \partial n} \\ \dfrac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp \partial f_0} \\ \dfrac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp \partial \sigma_1} \\ \dfrac{\partial^2 Y}{\partial \boldsymbol{T}^\sharp \partial D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dfrac{\exp(\mathcal{B})}{(1 - f_0 + f_0 \exp(\mathcal{B}))^2} D \exp\left(\dfrac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right) \boldsymbol{C}^\flat \\ -\dfrac{f_0 \exp(\mathcal{B})}{1 - f_0 + f_0 \exp(\mathcal{B})} D \exp\left(\dfrac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right) \left(\dfrac{1}{3\sigma_1^2} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right) \boldsymbol{C}^\flat \\ \dfrac{f_0 \exp(\mathcal{B})}{1 - f_0 + f_0 \exp(\mathcal{B})} \exp\left(\dfrac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right) \boldsymbol{C}^\flat \end{pmatrix} . \quad (6.49)$$

Für die Ableitungen der Evolutionsfunktionen nach den Materialparametern erhält man

$$\frac{\partial \dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial \boldsymbol{p}} = \left(\frac{\partial \dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial \sigma_0} \quad \frac{\partial \dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial \varepsilon_0} \quad \frac{\partial \dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial n} \quad \frac{\partial \dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial f_0} \quad \frac{\partial \dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial \sigma_1} \quad \frac{\partial \dot{\mathcal{E}}_{pM}}{\partial D} \right)^T = \{\boldsymbol{0}\} \quad (6.50)$$

$$\frac{\partial \dot{\mathcal{B}}}{\partial \boldsymbol{p}} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \dot{\mathcal{B}}}{\partial \sigma_0} \\ \dfrac{\partial \dot{\mathcal{B}}}{\partial \varepsilon_0} \\ \dfrac{\partial \dot{\mathcal{B}}}{\partial n} \\ \dfrac{\partial \dot{\mathcal{B}}}{\partial f_0} \\ \dfrac{\partial \dot{\mathcal{B}}}{\partial \sigma_1} \\ \dfrac{\partial \dot{\mathcal{B}}}{\partial D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ D \exp\left(\dfrac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right) \left(\dfrac{1}{3\sigma_1^2} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right) \\ -\exp\left(\dfrac{1}{3\sigma_1} I_{\boldsymbol{T}^\sharp}\right) \end{pmatrix} . \quad (6.51)$$

6.4 Numerische Simulationen

Die folgenden Untersuchungen sollen zeigen, inwiefern das vorgestellte Verfahren zur Parameteridentifikation geeignet ist. Zu diesem Zweck wurden künstliche Messwerte (Verschiebungen an jedem Knoten) anhand einer Vorwärtsrechnung mit einem vorgegebenen Parametersatz und zu jedem Lastschritt erzeugt. Die verwendeten Materialparameter sind in Tab. 1 zusammengefasst und sollen re-identifiziert werden.

E [MPa]	ν	σ_0 [MPa]	ε_0	n	f_0	σ_1 [MPa]	D
210000	0.3	451.4	2.1495E-03	0.14286	0.001	400.0	2.0

Tabelle 1: Materialparameter, *Rousselier* Modell

Durch die Wahl der Probengeometrie und der entsprechenden Randbedingungen muss sichergestellt werden, dass alle zu identifizierenden Parameter auch angesprochen werden. Um die Anfangsfließspannung σ_0 sicher zu identifizieren, müssen möglichst viele Übergänge zwischen den elastischen und plastischen Zuständen während der Belastung im Probekörper enthalten sein. Wäre der Probekörper bereits nach dem ersten Lastschritt durchplastifiziert, so ist das Verfahren kaum in der Lage die Anfangsfließspannung zu identifizieren, da dieser Parameter nur indirekt angesprochen wird. Die sichere Identifikation der Ver- und Entfestigungsparameter erfordert einen großen räumlichen Bereich der Plastifizierung und der Schädigung im Probekörper. Von Vorteil sind viele Lastschritte in denen möglichst viele Zustände von kleiner plastischer Verformung bis hin zu großer Schädigung durchlaufen werden.
Um unterschiedliche Spannungszustände in einem Probekörper zu realisieren, wird eine Scheibe mit Loch betrachtet, bei der infolge Zugbeanspruchung inhomogene Deformationszustände auftreten. Unter Ausnutzung der Symmetrie wird nur ein Viertel der Scheibe mit Loch im ebenen Verzerrungszustand betrachtet (Abb. 3). Die äußeren Abmessungen des modellierten Probekörpers betragen in Scheibenebene 2.0×2.0 mm und in Dickenrichtung 1.0 mm. Das Loch hat einen Durchmesser von 1.0 mm. Die Lasteinleitung erfolgt verschiebungsgesteuert an der oberen Kante des Probekörpers mit 0.1 mm, aufgebracht in 100 Schritten. Es wurden isoparametrische 8-Knotenelemente mit 9 Integrationspunkten verwendet.
In den ersten Untersuchungen wurde jeweils ein Materialparameter variiert und die restlichen Parameter mit den Werten von Tab. 1 belegt. Die relative Startabweichung des entsprechenden Parameters ist zum einen mit +20% und zum anderen mit −20% festgelegt worden. Die Identifikation wird abgebrochen, wenn entweder die maximale Anzahl der zulässigen Optimierungsschritte von 20 erreicht wird, oder wenn der Wert der Zielfunktion ein lokales bzw. globales Minimum erreicht hat. In Abb. 4 ist die relative Abweichung für jeden zu optimierenden Parameter über der Anzahl der Optimierungsschritte aufgetragen. Jeder Parameter wurde nach wenigen Schritten gefunden. Die Identifikation einzelner Parameter ist in diesem Fall problemlos, da die restlichen Parameter ihre exakten Werte aus der Lösung der direkten Aufgabe erhielten und somit die Suchrichtung nicht negativ beein-

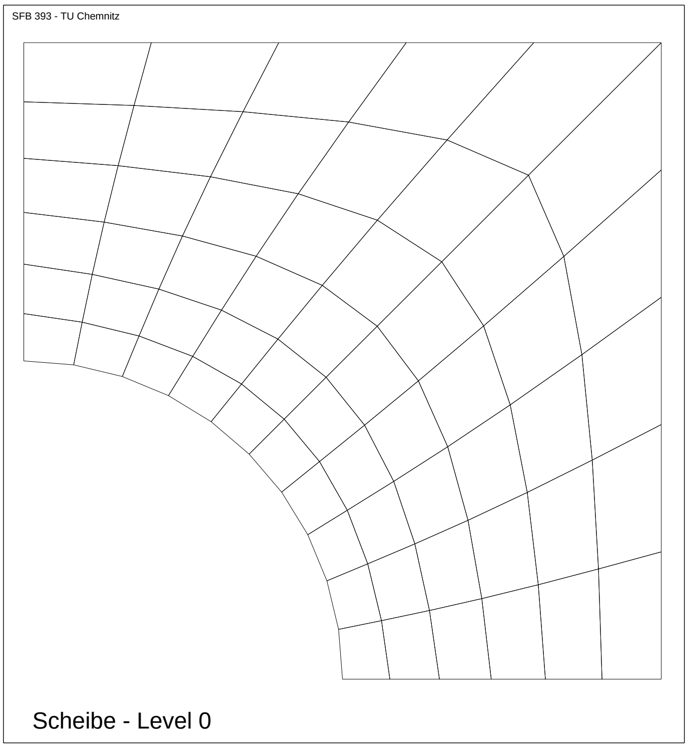

Abbildung 3: Scheibe mit Loch, Diskretisierung eines Viertels

flussten. In der Praxis sind jedoch im allgemeinen mehrere Materialparameter unbekannt und es treten zusätzlich Messfehler auf.

Zur Berücksichtigung von Messfehlern wurde den künstlichen Messwerten, also den Verschiebungen an den Knoten, ein 'Rauschen' überlagert. Dazu wurde jedem Messwert ein zufälliger prozentualer Fehler von -2 bis $+2\%$ bzw. -5 bis $+5\%$ seines aktuellen Wertes aufaddiert. Die Fehler wurden in diesem Bereich als gleichverteilt angenommen.

stochast. Messfehler	**Materialparameter**											
	σ_0		ε_0		n		f_0		σ_1		D	
	Abw. [%]		Abw. [%]		Abw. [%]		Abw. [%]		Abw. [%]		Abw. [%]	
	$+20$	-20	$+20$	-20	$+20$	-20	$+20$	-20	$+20$	-20	$+20$	-20
$\pm 0.0\%$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Opt. schritte	8	8	14	13	20	20	20	20	20	20	20	20
$\pm 2.0\%$	0.22	0.02	-0.14	-0.18	0.01	0.01	-0.03	-1.44	0.19	0.20	-0.23	-0.23
Opt. schritte	5	10	7	7	20	20	8	8	15	20	17	18
$\pm 5.0\%$	0.15	0.08	-0.23	-0.42	0.03	0.03	-1.09	-1.27	0.42	0.42	-0.46	-0.46
Opt. schritte	5	4	6	7	20	20	8	10	13	16	12	14

Tabelle 2: Relative Fehler der identifizierten Materialparameter in [%]

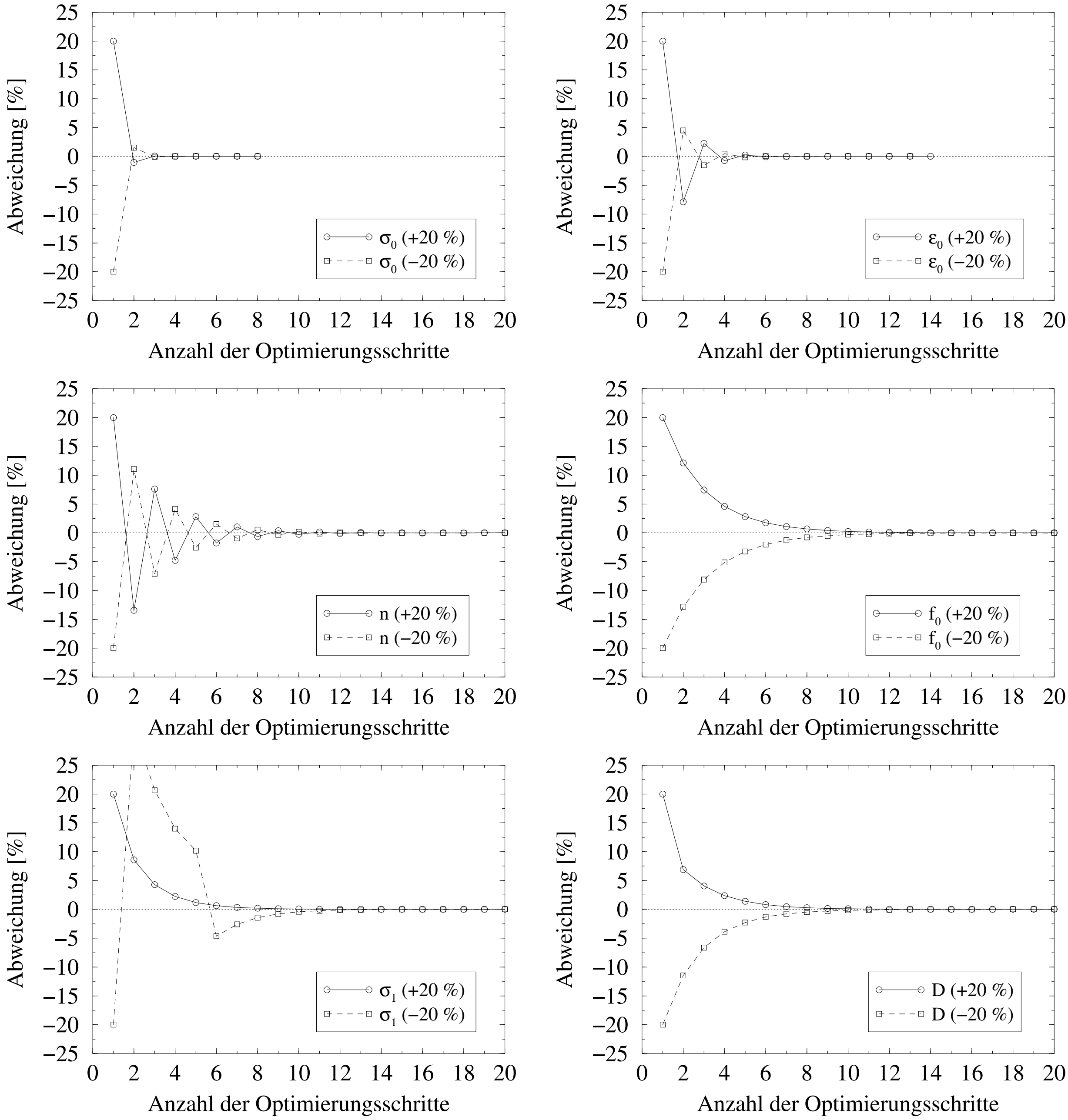

Abbildung 4: Identifikation von jeweils einem Parameter

In Tab. 2 sind die relativen Fehler der Parameter und die Anzahl der notwendigen Optimierungsschritte für die verschiedenen Messfehler gegenübergestellt. Mit 'Abw.' sind die relativen Abweichungen der Startwerte gekennzeichnet. Die Fehler bei den identifizierten Parametern sind relativ gering und gegenüber den Messfehlern in einigen Fällen um Größenordnungen kleiner. Geringe zufällige Fehler scheinen somit bei der gestellten Auf-

gabe keinen sehr großen Einfluss auf das Ergebnis zu haben, obwohl man dies bei der Schlechtgestelltheit des Problems hätte erwarten können.
Im folgenden wird die simultane Identifikation von drei 'unbekannten' Parametern untersucht. Zum einen werden die Parameter σ_0, ε_0 und n, die im wesentlichen die Verfestigungseigenschaften des Materials beschreiben, identifiziert und zum anderen die Parameter f_0, σ_1 und D, die die Entfestigung bzw. Schädigung im Material charakterisieren. Die Startabweichung beträgt wiederum $+20\%$ bzw. -20%. Die restlichen Parameter erhalten die Werte aus Tab. 1. Weil jetzt mehrere Parameter identifiziert werden sollen, ist zu erwarten, dass das Verfahren entsprechend langsamer konvergiert, da sich die gesuchten Parameter gegenseitig beeinflussen. Ausserdem besteht verstärkt die Möglichkeit, dass der Wert der Zielfunktion in ein lokales Minimum läuft. In Abb. 5 ist deutlich die gegenseitige Beein-

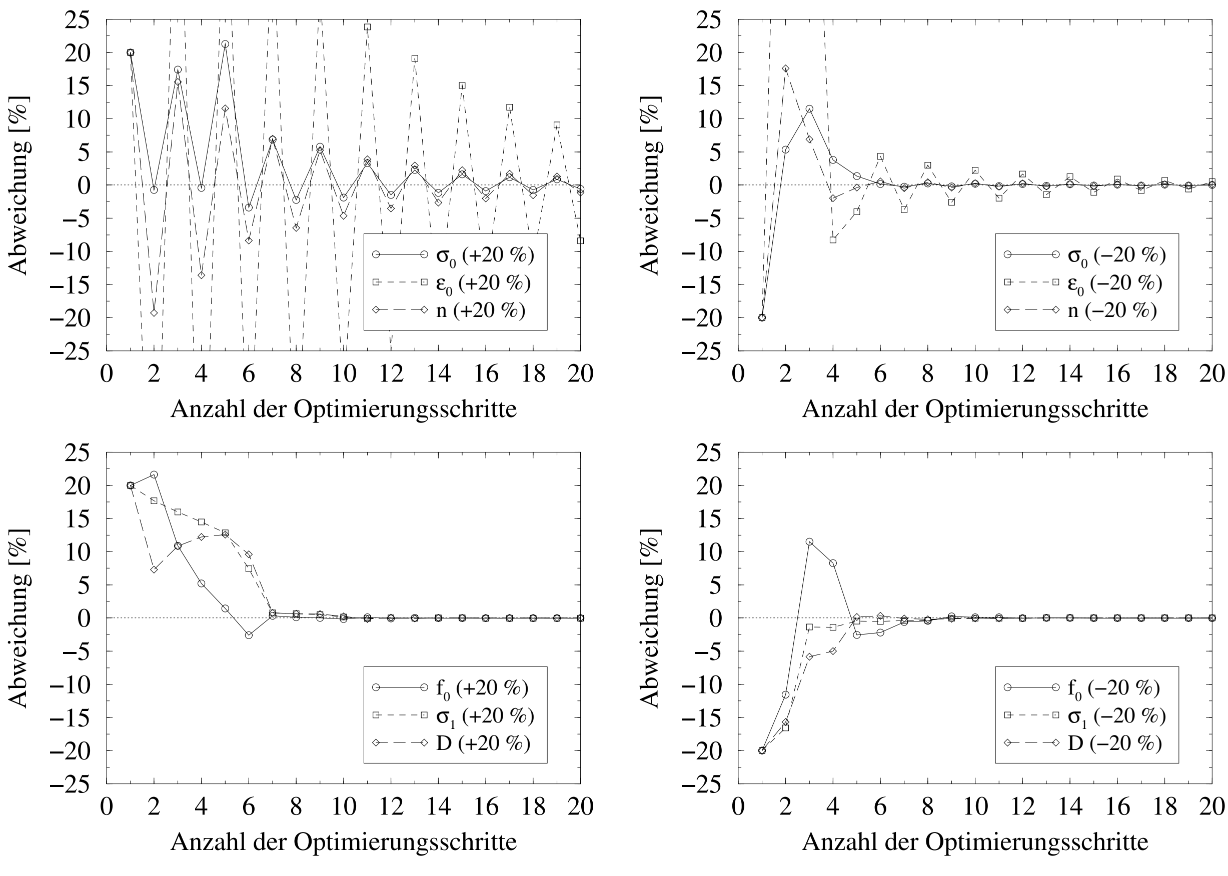

Abbildung 5: Identifikation von drei Parametern

flussung der Parameter sowie die Abhängigkeit von der Wahl der Startwerte zu erkennen. Dessen ungeachtet konnten alle Parameter identifiziert werden.
In der Praxis müssen jedoch die Ver- und Entfestigungsparameter gemeinsam bestimmt werden, da es kein geeignetes Experiment gibt, bei dem man im Material separat einen Verfestigungszustand oder einen Entfestigungszustand erzeugen kann. Nachdem jeweils drei

Parameter sicher identifiziert werden konnten, stellt sich jetzt die Frage, ob dies auch mit allen sechs Materialparametern des *Rousselier* Modells in einem Identifikationszyklus mit mehreren Optimierungsschritten möglich wäre. Es zeigte sich, dass die gleichzeitige Identifikation in diesem Fall nicht realisierbar war. Die Variation der Startwerte brachte auch keinen Erfolg, wobei natürlich beachtet wurde, dass die Startwerte nicht zu nahe an den Werten aus Tab. 1 lagen (mind. ±20% relative Abweichung der Startwerte). Die Optimierung lief entweder in ein lokales Minimum, bei dem die Parameter sehr weit von ihrem Wert aus der direkten Lösung abwichen, oder es wurde keine eindeutige Suchrichtung gefunden, so dass die Identifikation abgebrochen wurde. Einige Parameter hatten am Ende der Optimierung einen Fehler von mehr als ±20% von ihrem zu erwartenden Wert. Um nicht alle Parameter in einem Identifikationszyklus bestimmen zu müssen, wurde im folgenden jeder Parameter mit einer Startabweichung von +20% belegt und nacheinander jeweils drei Parameter optimiert und die restlichen Parameter mit ihren Werten aus der vorhergehenden Optimierung festgesetzt.

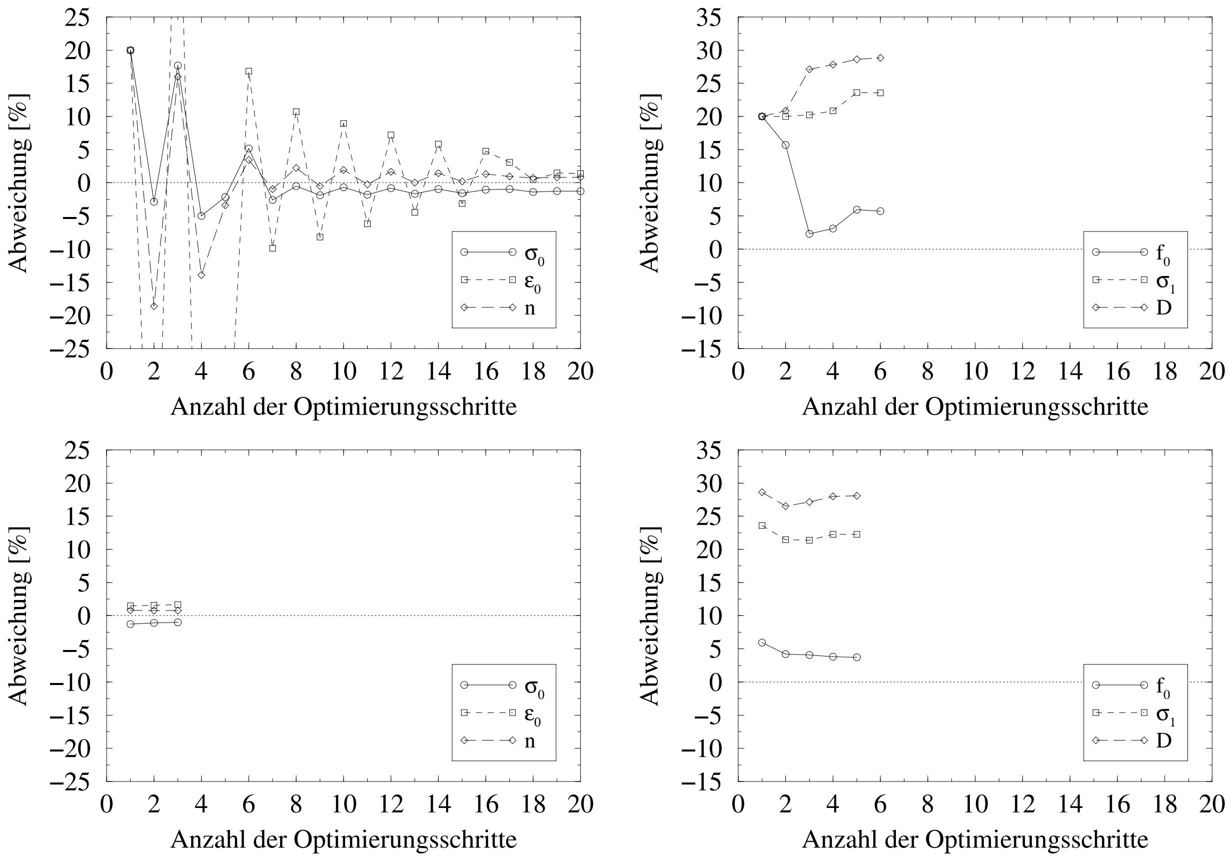

Abbildung 6: Identifikation von sechs Parametern (drei separat)

In Abb. 6 zeigt das linke obere Bild den ersten Identifikationszyklus, bei dem die Verfestigungsparameter optimiert wurden. Im oberen rechten Bild ist der zweite Zyklus aufge-

tragen, bei dem die Verfestigungsparameter mit ihren optimierten Werten aus dem ersten Zyklus festgesetzt wurden und die Entfestigungsparameter optimiert werden. Der dritte Identifikationszyklus wird im unteren linken Bild dargestellt. Die Optimierung erreicht ein lokales Minimum und bricht nach drei Schritten ab. Im vierten Zyklus konnten die Entfestigungsparameter nicht zufriedenstellend gefunden werden. Nach dem fünften Optimierungsschritt brach die Rechnung ab, da keine eindeutige Suchrichtung festgelegt werden konnte. Die Parameter für die Verfestigung konnten relativ gut gefunden werden. Die erfolglose Optimierung der Entfestigungsparameter kann als Ursache Abhängigkeiten der Parameter untereinander haben, oder es wurden einzelne Parameter durch das Experiment nur unzureichend angesprochen.
Abb. 6 zeigt, dass die Parameter σ_1 und D nicht annähernd identifiziert werden konnten. Im folgenden wird der Parameter D mit $D = 2.0$ als gegeben angenommen. Die restlichen fünf Materialparameter werden in einem Identifikationszyklus mit den Anfangsabweichungen $+20\%$ (Abb. 7, oben) bzw. -20% (Abb. 7, unten) identifiziert.

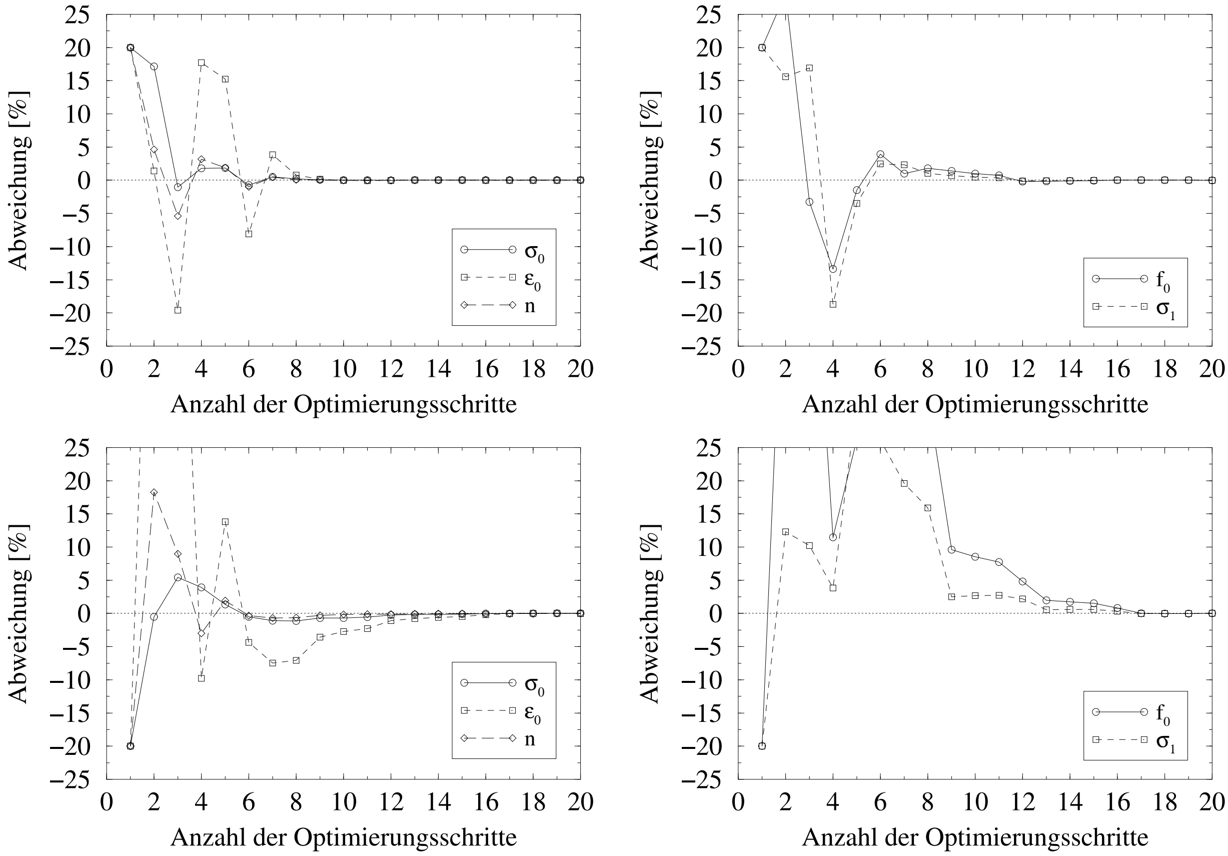

Abbildung 7: Identifikation von fünf Parametern ($\pm 20\%$ Startabweichung)

Alle fünf Materialparameter konnten exakt gefunden werden. Durch die gegenseitige Beeinflussung der Parameter hatte die Suchrichtung in einigen wenigen Fällen das falsche

Vorzeichen. Die Konvergenz des Verfahrens wurde dadurch aber nicht wesentlich beeinflusst. Durch die Reduzierung der Parameteranzahl ist die Identifikation für dieses Beispiel in einem Identifikationszyklus möglich.
Auch in diesem Fall sollen die Messwerte mit einem zufälligen Fehler, wie zuvor beschrieben, beaufschlagt werden. In Tab. 3 sind die relativen Fehler der Materialparameter von ihren Werten aus der Lösung des direkten Problems zur Erzeugung der künstlichen Messwerte aufgezeigt.

	Materialparameter										Opt. schritte	
	σ_0		ε_0		n		f_0		σ_1			
stochast.	Abw. [%]		Abw. [%]		Abw. [%]		Abw. [%]		Abw. [%]		Abw. [%]	
Messfehler	+20	−20	+20	−20	+20	−20	+20	−20	+20	−20	+20	−20
±0.0%	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	20	20
±2.0%	0.14	-0.06	0.30	-0.70	0.01	-0.08	-3.30	0.55	-0.90	0.77	20	18
±5.0%	0.47	0.37	0.93	0.74	-0.01	0.01	-9.29	-8.10	-2.36	-2.15	11	14

Tabelle 3: Relative Fehler der identifizierten Materialparameter in [%]

Wesentliche Unterschiede treten bei der Berücksichtigung von Messfehlern nur in den Entfestigungsparametern f_0 und σ_1 auf. Des weiteren ist im Ergebnis eine Abhängigkeit von der Wahl der Startwerte zu erkennen. Es existieren also mehrere lokale Minima um den Bereich der optimalen Werte.
In der nächsten Untersuchung sollte festgestellt werden, ob auch bei sehr großer Startabweichung die Parameter sicher identifiziert werden können. Abb. 8 zeigt die Identifikation von fünf Parametern, die mit einer relativen Abweichung der Startwerte von +50% bzw. −50% belegt wurden. Die maximale Anzahl an Optimierungsschritten wurde auf 30 erhöht. Trotz der großen Startabweichung wurden alle Parameter relativ schnell, d. h. mit wenigen Optimierungsschritten, identifiziert.
In den vorhergehenden numerischen Untersuchungen wurde der Parameter D mit $D = 2.0$ als konstant angenommen. Im folgenden soll analysiert werden, ob der Parameter D durch die anderen Materialparameter abgebildet werden kann. Wenn dies der Fall sein sollte, könnte man D in gewissen Grenzen variieren und verschiedene Materialparametersätze finden, die die gleiche Lösung des Randwertproblems als Ergebnis haben. Da es eine Vielzahl an Spannungszuständen gibt, genau genommen unendlich viele, und das *Rousselier* Modell mit sehr wenigen Parametern auskommt, scheint es auf den ersten Blick nicht möglich, den Parameter D als gegeben hinzunehmen. In dem verwendeten numerischen Experiment wird nur ein Teil der möglichen Spannungszustände realisiert. Es kann daher durchaus mehrere Parametersätze geben, die die Lösung des Randwertproblems ausreichend genau wiedergeben. Um diesen Sachverhalt zu analysieren, wurde der Parameter D mit $D = 1.6$ und $D = 2.4$ festgesetzt und die restliche Parameter optimiert. In Tab. 4 sind die ermittelten Parametersätze aufgeführt.
Während die Verfestigungsparameter kaum von dem Wert aus Tab. 1 abweichen, unterscheiden sich die Entfestigungsparameter um mehrere Prozent. Man könnte annehmen, dass

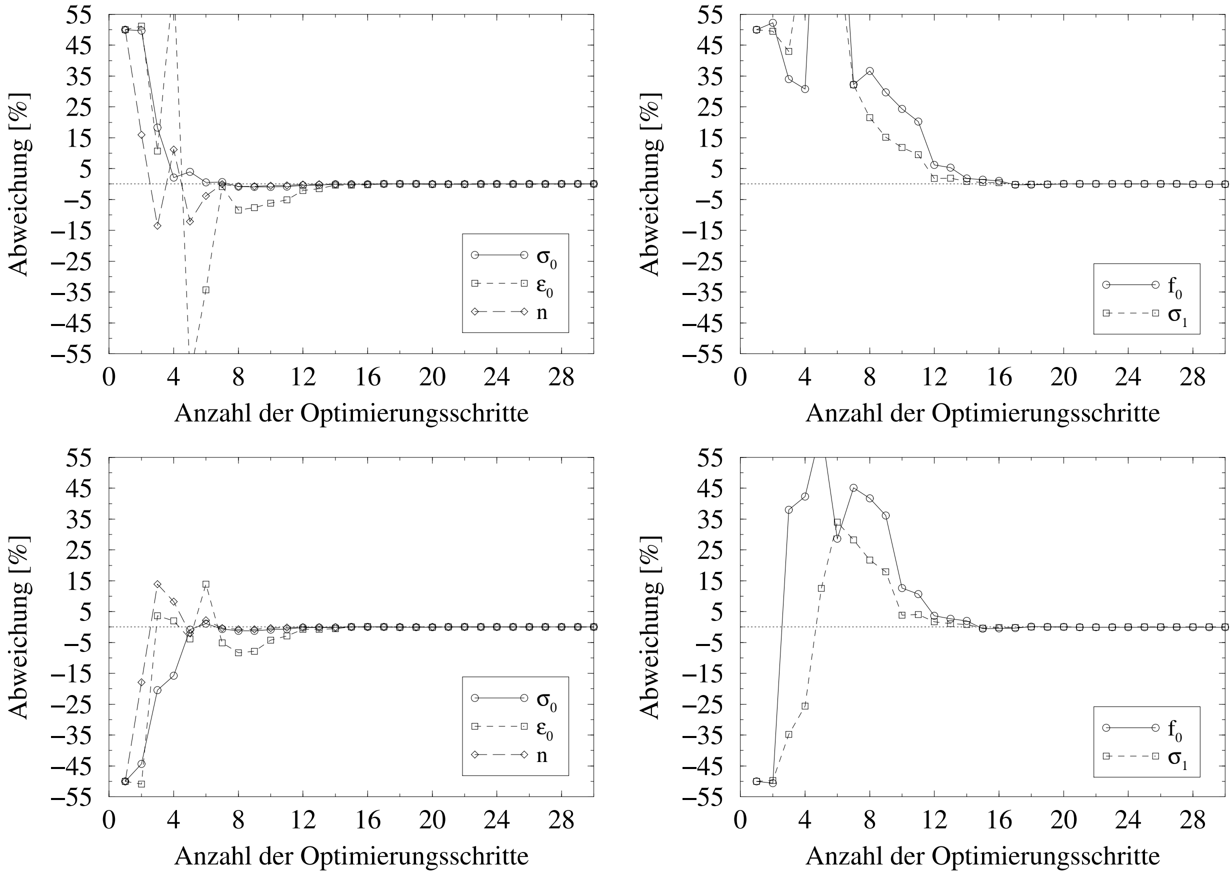

Abbildung 8: Identifikation von fünf Parametern (±50% Startabweichung)

	Materialparameter						Opt.
Abw.	σ_0	ε_0	n	f_0	σ_1	D	schritte
+20%	450.82	2.1076E-03	0.14240	1.0751E-03	347.93	1.6	20
−20%	450.79	2.1076E-03	0.14240	1.0752E-03	347.84	1.6	18
+20%	451.40	2.1495E-03	0.14286	0.9999E-03	399.99	2.0	20
−20%	451.40	2.1494E-03	0.14286	1.0000E-03	400.03	2.0	20
+20%	452.03	2.1896E-03	0.14330	0.9534E-03	460.23	2.4	20
−20%	452.26	2.1936E-03	0.14330	0.9515E-03	460.36	2.4	19

Tabelle 4: Materialparametersätze

ein kleiner Wert für D auch einen kleinen Wert für σ_1 zur Folge hat. Für dieses spezielle Randwertproblem besteht sicherlich diese Korrelation. Es ist jedoch zu prüfen, ob sich diese Parametersätze auch auf andere Randwertaufgaben übertragen lassen. Dazu wurde als erstes das direkte Problem mit den unterschiedlichen Parametersätzen aus Tab. 4 berechnet. Die Unterschiede im Spannungszustand und Dehnungszustand bei einer aufgebrachten Verschiebung von 0.1 mm liegen für die maximalen Werte im Promillebereich. Lediglich die Schädigungsvariable β weicht um rund 2 bis 4% ab. Die Kraft-Verformungskurve ist in Abb. 9 dargestellt. Bis zu einer Verschiebung von 0.1 mm sind die Kurven identisch. Für das betrachtete Randwertproblem bedeutet dies, dass mehrere Materialparametersätze existieren, die eine annähernd gleiche Lösung der Aufgabenstellung ergeben. Man kann jetzt aber nicht schlussfolgern, dass generell mehrere Parametersätze des *Rousselier* Modells den gleichen Spannungs- bzw. Deformationzustand in einem beliebigen Probekörper hervorrufen. Um dies zu prüfen, wurde mit den verschiedenen Sätzen an Parametern das Experiment wiederholt, jedoch eine doppelt so große Verschiebung (0.2 mm) aufgebracht. In Abb. 9 ist zu erkennen, dass die Kurven ungefähr ab 0.13 mm auseinander laufen. D.h. bei einer anderen Randwertaufgabe erzeugen die untersuchten Parametersätze unterschiedliche Zustände im Probekörper und können deshalb nicht als gleichwertig angesehen werden.

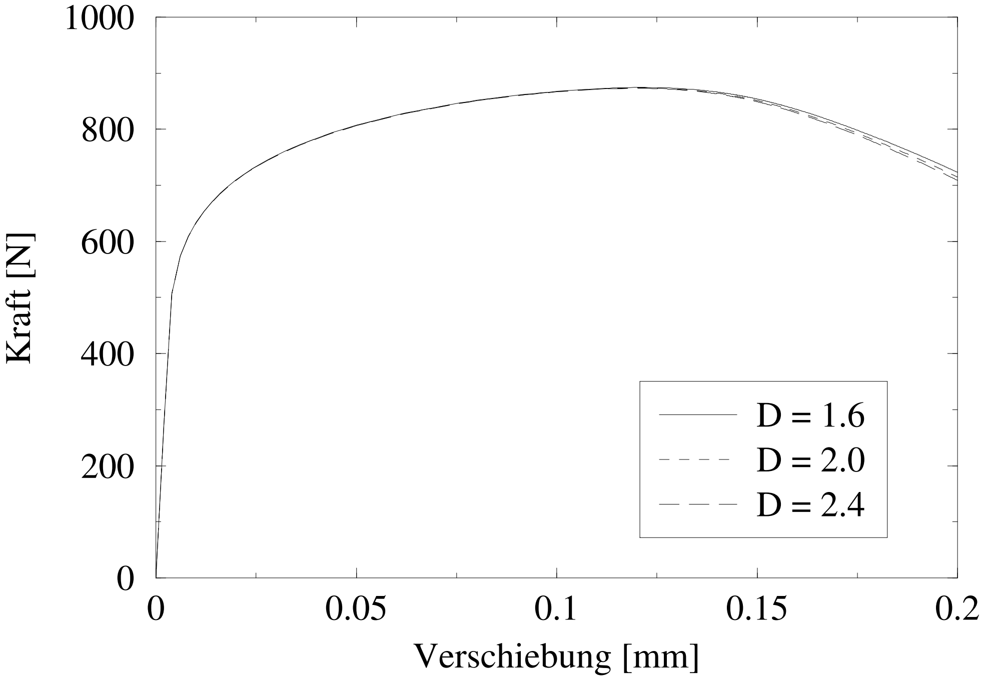

Abbildung 9: Kraft-Verschiebungskurve

Um dies noch zu verdeutlichen, wurde die Randwertaufgabe dahingehend verändert, dass die rechte Seite des Probekörpers (Abb. 3) noch zusätzlich in horizontaler Richtung festgehalten wurde. Die maximal aufgebrachte Verschiebung am oberen Rand wurde mit 0.2 mm festgelegt. Nach der Lösung des direkten Problems mit den unterschiedlichen Parametersätzen aus Tab. 4 betragen die Unterschiede der maximalen Spannungen rund 4%. Anhand der Kraft-Verformungskurven (Abb. 10) ist der Unterschied deutlich zu erkennen. Das führt zu der Schlussfolgerung, dass der Parameter D eine wesentliche unabhängige Kenngröße des *Rousselier* Modells ist und ebenfalls identifiziert werden muss.

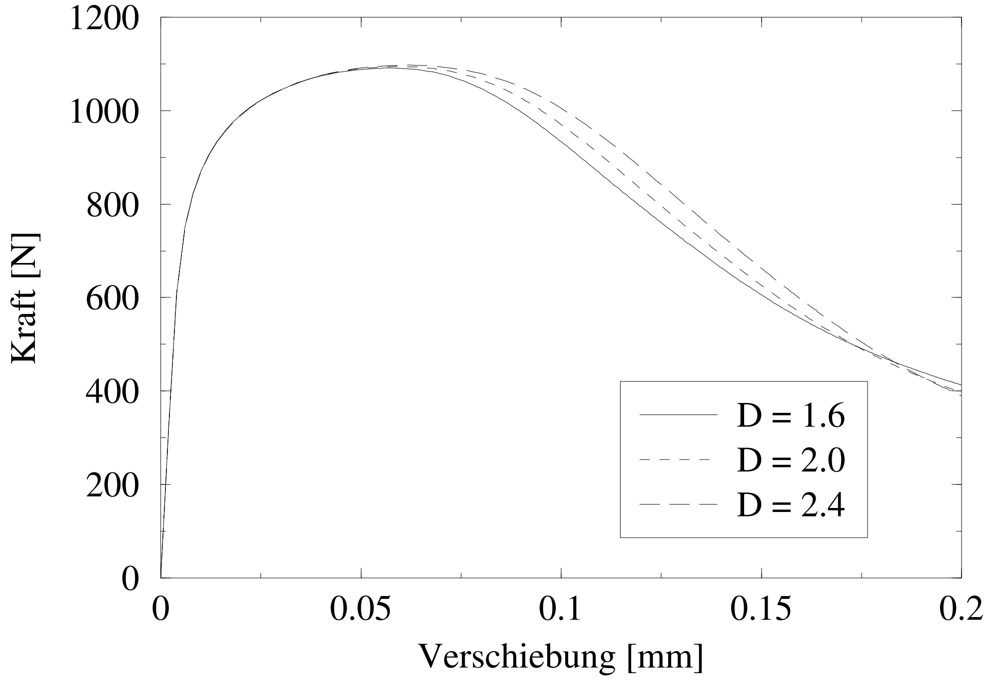

Abbildung 10: Kraft-Verschiebungskurve

7 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein Verfahren zur Materialparameteridentifikation für das Schädigungsmodell von *Rousselier* vorgestellt. Die ersten Kapitel befassten sich mit der Implementierung des Schädigungsgesetzes. Zur Lösung der Differential–Algebraischen Gleichungen (DAE's) wurde ein implizites Mehrschrittdifferenzenverfahren verwendet. Die kontinuumsmechanische Beschreibung und die numerische Behandlung der DAE's erfolgten für die Ausgangs- sowie für die Momentankonfiguration. Es wurden weiterhin die konsistente Tangente, das hyperelastische Teilstoffgesetz sowie die Ableitungen der Fließbedingung und der Evolutionsgleichungen nach den Spannungen und internen Variablen zur Linearisierung des Materialgesetzes angegeben.

Zur Identifikation der Materialparameter wurde das inverse Problem mit der Anwendung nichtlinearer Optimierungsalgorithmen gelöst, die die Minimierung einer Zielfunktion zur Aufgabe hatten. Dazu wurde ein Gradientenverfahren verwendet, dass die ersten Ableitungen der Zielfunktion nach den Materialparametern benötigt. Der neue Parametersatz wurde mit einer deterministisch iterativen Methode bestimmt, der sich aus dem alten Parametersatz plus einem Inkrement in Suchrichtung ergibt. Die Suchrichtung wurde nach der Methode von *Levenberg* und *Marquardt* berechnet und hängt im wesentlichen vom Gradienten der Zielfunktion ab. Die Ableitungen der Verschiebungen nach den Materialparametern, die in diesen Gradienten eingehen, wurden mit der semianalytischen Sensitivitätsanalyse bestimmt. Die Sensitivitätsanalyse wurde in der Ausgangskonfiguration für ein Mehrschrittverfahren angegeben. Des weiteren wurden die partiellen Ableitungen und die numerische Berechnung der totalen Ableitungen des Materialgesetzes nach den Materialparametern aufgeführt.

Es wurden numerische Untersuchungen durchgeführt, um die Eignung des verwendeten Verfahrens zur Identifikation von Materialparametern des *Rousselier* Modells zu überprüfen. Die zu identifizierenden Parameter wurden dabei vorgegeben und Verschiebungen an allen Knoten zu allen Lastschritten berechnet. Diese Verschiebungsfelder dienten als künstliche Messwerte, mit denen die vorgegebenen Parameter re-identifiziert werden sollten. Als Modell wurde eine Scheibe mit Loch im ebenen Verzerrungszustand gewählt. Die Untersuchungen zeigten, dass die Identifikation eines einzelnen Parameters keine Schwierigkeiten bereitet, wenn dabei alle anderen festgehalten werden. Es wurde in jedem Fall das globale Minimum gefunden. Unter Berücksichtigung von stochastischen Messfehlern auf dem vorgegebenen Verschiebungsfeld traten in den zu identifizierenden Parametern nur geringe Fehler auf. Lokale Minima wurden in der Nähe des globalen Minimums gefunden. Die simultane Identifikation von drei Parametern verlief ebenfalls erfolgreich. Im weiteren war es jedoch nicht möglich, alle sechs Parameter gleichzeitig zufriedenstellend zu identifizieren. Der Parameter D wurde daraufhin als bekannt angenommen und die restlichen fünf Materialparameter konnten in diesem Fall identifiziert werden. Unter Hinzunahme von Messfehlern traten wiederum nur geringe Fehler in den identifizierten Parametern auf.

Im letzten Teil dieses Beitrages wurde untersucht, ob man mit verschiedenen Parametersätzen die gleiche Lösung des Randwertproblems erzeugen kann. Es zeigte sich, dass für das gestellte Randwertproblem mehrere Parametersätze existieren, mit denen man, bis auf geringe Abweichungen, die gleiche Lösung der Aufgabenstellung erhielt. Wenn man allerdings diese Parametersätze auf andere Randwertprobleme anwandte, so traten größere, nicht mehr zu vernachlässigende Unterschiede in der Lösung auf.

Um einen möglichst eindeutigen Parametersatz zu erhalten, sollte das reale Experiment möglichst viele unterschiedliche Beanspruchungszustände im verformten Probekörper enthalten. Außerdem ist es in diesem Zusammenhang von Vorteil, verschiedene Experimente mit verschiedenen Probegeometrien und Belastungen durchzuführen. Im Rahmen einer Identifikation sollte dann ein einheitlicher Parametersatz gefunden werden, der die Forderung nach der Minimierung der Zielfunktion für die verschiedenen Experimente insgesamt erfüllt.

8 Danksagung

Die Autoren danken Herrn Dr. Görke für die Bereitstellung der *Levenberg–Marquardt* Routinen und Herrn Dr. Michael für die Unterstützung zu Fragen bzgl. des Programms **SPC-PMHP**. Des weiteren bedanken sich die Autoren bei Herrn Dr. Baaser von der TU Darmstadt, der einen mehrmaligen Gastaufenthalt in Freiberg im Rahmen des SFB 393 verbrachte, für die Unterstützung bei der Implementierung des *Rousselier* Modells.

Literatur

[1] H. Baaser: *Dreidimensionale Simulation duktiler Schädigungsentwicklung und Rißausbreitung.* Dissertation, Technische Universität Darmstadt 1999.

[2] H. Baaser and V. Tvergaard: *A new algorithmic approach treating nonlocal effects at finite rate-independent deformation using the Rousselier damage model.* Danish Center for Applied Mathematics and Mechanics 647, 2000.

[3] E. Bohnsack: *Zur Identifikation von Verfestigungsparametern elastisch-plastischer Stoffgesetze an inhomogen verformten Proben.* Dissertation, TU Chemnitz-Zwickau 1997.

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

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

[6] U.-J. Görke and R. Kreißig: *Einflußfaktoren bei der Identifikation von Materialparametern elastisch-plastischer Deformationsgesetze aus inhomogenen Verschiebungsfeldern.* Preprint SFB393 97(04), 1997.

[7] A. L. Gurson: *Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth. I. Yield criteria and flow rules for porous ductile media.* Journal of Engineering Materials and Technology 99(1), pp. 2–15, 1977.

[8] R. Kreißig, U. Benedix and U.-J. Görke: *Statistical aspects of the identification of material parameters for elasto-plastic models.* Archive of Applied Mechanics 71, pp. 123–134, 2001.

[9] R. Mahnken: *Theoretische und numerische Aspekte zur Parameteridentifikation und Modellierung bei metallischen Werkstoffen.* Habilitation, Universität Hannover 1997.

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

[11] R. Mahnken and E. Stein: *A Unified Approach for Parameter Identification of Inelastic Material Models in the Frame of the Finite Element Method.* Comp. Meths. Appl. Mech. 136, pp. 225–258, 1996.

[12] D. Michael: *Kontinuumstheoretische Grundlagen und algorithmische Behandlung von ausgewählten Problemen der assoziierten Fließtheorie.* Preprint SFB393 01(06), 2001.

[13] D. Michael and M. Meisel: *Some remarks to large deformation elasto-plasticity (continuum formulation).* Preprint SFB393 98(28), 1998.

[14] D. Michael and M. Springmann: *Zur numerischen Simulation des Versagens duktiler metallischer Werkstoffe.* Preprint SFB393 01(09), 2001.

[15] J. R. Rice and D. M. Tracey: *On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields.* Journal of the Mechanics and Physics of Solids 17, pp. 201–217, 1969.

[16] G. Rousselier: *Ductile fracture models and their potential in local approach of fracture.* Nuclear engineering and design 105, pp. 97–111, 1987.

[17] V. Tvergaard and A. Needleman: *Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar.* Acta Metallurgica 32(1), pp. 157–169, 1984.

01-08 S. Beuchler, A. Meyer. SPC-PM3AdH v 1.0 - Programmer's Manual. March 2001.

01-09 D. Michael, M. Springmann. Zur numerischen Simulation des Versagens duktiler metallischer Werkstoffe (Algorithmische Behandlung und Vergleichsrechnungen). März 2001.

01-10 B. Heinrich, S. Nicaise. Nitsche mortar finite element method for transmission problems with singularities. March 2001.

01-11 T. Apel, S. Grosman, P. K. Jimack, A. Meyer. A New Methodology for Anisotropic Mesh Refinement Based Upon Error Gradients. March 2001.

01-12 F. Seifert, W. Rehm. (Eds.) Selected Aspects of Cluster Computing. March 2001.

01-13 A. Meyer, T. Steidten. Improvements and Experiments on the Bramble–Pasciak Type CG for mixed Problems in Elasticity. April 2001.

01-14 K. Ragab, W. Rehm. CHEMPI: Efficient MPI for VIA/SCI. April 2001.

01-15 D. Balkanski, F. Seifert, W. Rehm. Proposing a System Software for an SCI-based VIA Hardware. April 2001.

01-16 S. Beuchler. The MTS-BPX-preconditioner for the p-version of the FEM. May 2001.

01-17 S. Beuchler. Preconditioning for the p-version of the FEM by bilinear elements. May 2001.

01-18 A. Meyer. Programmer's Manual for Adaptive Finite Element Code SPC-PM 2Ad. May 2001.

01-19 P. Cain, M.L. Ndawana, R.A. Römer, M. Schreiber. The critical exponent of the localization length at the Anderson transition in 3D disordered systems is larger than 1. June 2001

01-20 G. Kunert, S. Nicaise. Zienkiewicz-Zhu error estimators on anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes. July 2001.

01-21 G. Kunert. A posteriori H^1 error estimation for a singularly perturbed reaction diffusion problem on anisotropic meshes. August 2001.

01-22 A. Eilmes, Rudolf A. Römer, M. Schreiber. Localization properties of two interacting particles in a quasi-periodic potential with a metal-insulator transition. September 2001.

01-23 M. Randrianarivony. Strengthened Cauchy inequality in anisotropic meshes and application to an a-posteriori error estimator for the Stokes problem. September 2001.

01-24 Th. Apel, H. M. Randrianarivony. Stability of discretizations of the Stokes problem on anisotropic meshes. September 2001.

01-25 Th. Apel, V. Mehrmann, D. Watkins. Structured eigenvalue methods for the computation of corner singularities in 3D anisotropic elastic structures. October 2001.

01-26 P. Cain, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber. Use of cluster computing for the Anderson model of localization. October 2001. Conf. on Comp. Physics, Aachen (2001).

01-27 P. Cain, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber. Applications of cluster computing for the Anderson model of localization. October 2001. Transworld Research Network for a review compilation entitled "Recent Research Developments in Physics", (2001).

01-28 X. W. Guan, A. Foerster, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber. A supersymmetric Uq[(osp)(2—2)]-extended Hubbard model with boundary fields. October 2001.

01-29 K. Eppler, H. Harbrecht. Numerical studies of shape optimization problems in elasticity using wavelet-based BEM. November 2001.

01-30 A. Meyer. The adaptive finite element method - Can we solve arbitrarily accurate? November 2001.

01-31 H. Harbrecht, S. Pereverzev, R. Schneider. An adaptive regularization by projection for noisy pseudodifferential equations of negative order. November 2001.

01-32 G. N. Gatica, H. Harbrecht, R. Schneider. Least squares methods for the coupling of FEM and BEM. November 2001.

01-33 Th. Apel, A.-M. Sändig, S. I. Solov'ev. Computation of 3D vertex singularities for linear elasticity: Error estimates for a finite element method on graded meshes. December 2001.

02-01 M. Pester. Bibliotheken zur Entwicklung paralleler Algorithmen - Basisroutinen für Kommunikation und Grafik. Januar 2002.

02-02 M. Pester. Visualization Tools for 2D and 3D Finite Element Programs - User's Manual. January 2002.

02-03 H. Harbrecht, M. Konik, R. Schneider. Fully Discrete Wavelet Galerkin Schemes. January 2002.

02-04 G. Kunert. A posteriori error estimation for convection dominated problems on anisotropic meshes. March 2002.

02-05 H. Harbrecht, R. Schneider. Wavelet Galerkin Schemes for 3D-BEM. February 2002.

02-06 W. Dahmen, H. Harbrecht, R. Schneider. Compression Techniques for Boundary Integral Equations - Optimal Complexity Estimates. April 2002.

02-07 S. Grosman. Robust local problem error estimation for a singularly perturbed reaction-diffusion problem on anisotropic finite element meshes. May 2002.

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