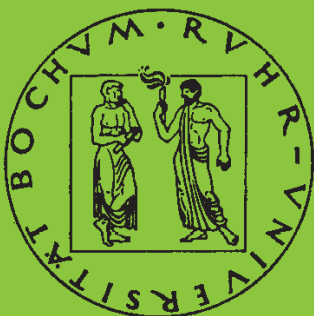


**Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik**

**Dirk Klaus Anding**

**Zur simultanen Bestimmung  
materialabhängiger Koeffizienten  
inelastischer Stoffgesetze**

Heft Nr. 109



**RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM**

INSTITUT FÜR MECHANIK  
RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM

Dirk Klaus Anding

Zur simultanen Bestimmung materialabhängiger Koeffizienten  
inelastischer Stoffgesetze

**Herausgeber: Institut für Mechanik der Ruhr-Universität Bochum**

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als Stipendiat des Graduiertenkollegs 'Computational Structural Dynamics' am Lehrstuhl für Technische Mechanik der Ruhr-Universität Bochum.

Ich danke herzlich allen, die mich bei dieser Arbeit unterstützt haben, vor allem Herrn Prof. Dr.-Ing. O. T. Bruhns für die Betreuung meiner Arbeit, Herrn Prof. Dr.-Ing. H. Waller für die Übernahme des zweiten Referates und Herrn Prof. Dr. D. Braess für die Beratung bei den numerischen Fragen und die Übernahme des dritten Referates.

Auch den Mitarbeitern des Lehrstuhls sei herzlich gedankt für die fruchtbaren Diskussionen, die zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben.

Bochum, im August 1997

Dirk Klaus Anding

Referenten: Prof. Dr.-Ing. Otto-T. Bruhns  
Prof. Dr.-Ing. Heinz Waller  
Prof. Dr. Dietrich Braess

Tag der Einreichung: 06.04.1997  
Tag der mündlichen Prüfung: 20.06.1997

©1997 Dr.-Ing. Dirk Klaus Anding  
Königsallee 155  
44799 Bochum

Alle Rechte vorbehalten. Auch die fotomechanische Vervielfältigung des Werkes (Fotokopie, Mikrokopie) oder von Teilen daraus bedarf der vorherigen Zustimmung des Autors.

## Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit ist die simultane Identifikation materialabhängiger Koeffizienten inelastischer Stoffgesetze.

Die Bestimmung der Parameter erfolgt, basierend auf den Daten experimenteller Grundlagenversuche, mit der Fehlerquadratmethode.

Zum Einsatz kommen stochastische und deterministische Optimierungsverfahren. Auf der Grundlage des master-slave Paradigmas werden die Algorithmen parallelisiert.

Die Anpassung wird vervollständigt durch die Angabe von Fehlerschätzern und Konfidenzintervallen für die Modellparameter.

Zur Integration der konstitutiven Gleichungen werden implizite Verfahren eingesetzt.

Strukturrechnungen mit der Finite-Elemente-Methode zeigen die Güte der Materialparameter zur Vorhersage des Deformationsverhaltens komplexer Bauteile.

## Summary

The object of this thesis is the simultaneous model parameter estimation in the context of constitutive laws for inelastic material behaviour.

The model parameters are estimated from experimental data with the least-squares criterion.

Stochastic and deterministic optimization methods are used. The algorithms are parallelized on the basis of the master-slave paradigm.

Since a complete parameter estimation requires error estimates and confidence regions statistical methods are implemented.

Implicit methods are used to integrate the constitutive laws.

Structural calculations based on the FE-method show that the material coefficients are suitable to predict the deformation of complex structures.



---

# Inhaltsverzeichnis

<b>Bezeichnungen</b>	<b>iv</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Das Materialverhalten metallischer Werkstoffe</b>	<b>3</b>
2.1 Plastizität . . . . .	3
2.1.1 Zugversuch . . . . .	4
2.1.2 Verformung von Ein- und Vielkristallen . . . . .	5
2.1.3 Verformungstextur . . . . .	7
2.1.4 Kriechen . . . . .	7
2.2 Thermisch aktivierte Reaktionen . . . . .	8
2.2.1 Erholung . . . . .	9
2.2.2 Spannungsrelaxation . . . . .	9
2.2.3 Rekristallisation . . . . .	9
<b>3 Modellierung des inelastischen Verhaltens metallischer Werkstoffe</b>	<b>11</b>
3.1 Phänomenologische Beschreibung des Materialverhaltens . . . . .	12
3.2 Quasistatische Theorie . . . . .	15
3.3 Viskoplastisches Materialverhalten . . . . .	26
3.3.1 Beschreibung von Kriechvorgängen . . . . .	33
3.3.2 Beschreibung von Relaxationsvorgängen . . . . .	36
3.4 Thermodynamischer Rahmen für die Formulierung von Stoffgesetzen . . . . .	39
3.4.1 Temperaturabhängiges Materialverhalten . . . . .	42
<b>4 Experimentelle Strategien zur Ermittlung der Modellparameter</b>	<b>46</b>
4.1 Auswertung von Proben mit homogener Spannungsverteilung im Meßgebiet	46
4.1.1 Werkstoff und Probenform . . . . .	47
4.1.2 Meßeinrichtung . . . . .	48
4.2 Auswertung von Proben mit inhomogener Spannungsverteilung im Meßgebiet	50

---

<b>5</b>	<b>Numerische Methoden zur Ermittlung der Modellparameter</b>	<b>54</b>
5.1	Direktes Problem . . . . .	54
5.1.1	Zeitintegration der konstitutiven Gleichungen . . . . .	54
5.2	Inverses Problem . . . . .	61
5.2.1	Fehlerquadratmethode . . . . .	62
5.2.2	Fehlerschätzer und Konfidenzintervalle für die Modellparameter . .	85
<b>6</b>	<b>Bestimmung der Parameter des INTERATOM-Modells</b>	<b>91</b>
6.1	Bestimmung der elastischen Kenngrößen . . . . .	92
6.2	Bestimmung der Parameter des quasistatischen Modells . . . . .	96
6.3	Bestimmung der Parameter des viskoplastischen Modells . . . . .	111
6.3.1	INTERATOM-Modell . . . . .	113
6.3.2	Erweitertes INTERATOM-Modell . . . . .	121
6.4	Erfassung der Temperaturabhängigkeit der Modellparameter . . . . .	133
<b>7</b>	<b>Berechnung des Bauteilverhaltens mit der Finite-Elemente-Methode</b>	<b>140</b>
7.1	Verschiebungsmethode . . . . .	140
7.1.1	Gleichgewichtsbedingungen für finite Elemente . . . . .	140
7.1.2	Inkrementelle Formulierung . . . . .	142
7.1.3	Verwendung von Materialgleichungen . . . . .	144
7.1.4	Isoparametrische Finite-Element-Matrizen . . . . .	145
7.2	Beispiele . . . . .	148
7.2.1	Isoparametrisches 8-Knoten Element unter zyklischer Belastung . .	148
7.2.2	Zugprobe in Anlehnung an DIN 50125 . . . . .	155
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>161</b>
<b>A</b>	<b>Jacobi-Matrizen</b>	<b>163</b>
A.1	Einaxiale Stoffgesetzformulierungen . . . . .	163
A.1.1	Elastisch-plastisches Dgl.-System . . . . .	163
A.1.2	Elastisch-viskoplastisches Dgl.-System . . . . .	164
A.1.3	Dgl.-System für Kriechprozesse . . . . .	170
A.1.4	Dgl.-System für Relaxationsprozesse . . . . .	172
A.2	Dreidimensionale Stoffgesetzformulierungen . . . . .	175
A.2.1	Elastisch-plastisches Dgl.-System . . . . .	175

**Literaturverzeichnis**

**178**



# Bezeichnungen

## Skalare Größen

$L_0$	Anfangsmeßlänge
$L$	aktuelle Meßlänge
$F$	Kraft
$S_W$	wahre Querschnittsfläche
$S_0$	Ausgangsquerschnitt
$E$	Elastizitätsmodul
$G$	Schubmodul
$R_e$	Streckgrenze
$R_m$	Zugfestigkeit
$E_t$	Tangentenmodul
$T$	Temperatur
$B$	aktueller Zustand eines Körpers
$B^0$	Ausgangskonfiguration
$B^*$	Zwischenkonfiguration
$F$	Fließbedingung
$LC$	Belastungsbedingung
$t$	Zeit
$w$	Formänderungsarbeit
$w_r$	reversibler Anteil der Formänderungsarbeit
$w_d$	dissipativer Anteil der Formänderungsarbeit
$s$	spezifische Entropie
$r$	spezifische Energiequellen
$c_p$	spezifische Wärmekapazität
$h$	Schrittweite
$E_A$	Abbruchfehler
$E_R$	Rundungsfehler
$S$	Streuung
$dV$	Volumenelement
$dA$	Flächenelement
$\bar{A}$	virtuelle Arbeit
$\sigma$	Spannung, Standardabweichung
$\varepsilon$	Dehnung
$\sigma_V$	Vergleichsspannung
$\varepsilon_V$	Vergleichsdehnung

---

$\varepsilon_q$	Querdehnung im einaxialen Zugversuch
$\nu$	Querkontraktionszahl
$\alpha$	Temperaturausdehnungskoeffizient, Schrittweitenparameter
$\kappa$	isotrope Verfestigungsvariable
$\xi$	kinematische Verfestigungsvariable
$\lambda$	plastischer Multiplikator, Eigenwert einer Matrix
$\sigma_F$	Fließgrenze
$\Delta$	Inkrement, Strukturgedächtnisfunktion im INTERATOM-Modell
$\Phi$	Überspannungsfunktion im INTERATOM-Modell
$\Lambda$	verallgemeinerte Überspannung
$\rho_0$	Dichte
$\psi$	spezifische freie Enthalpie
$\varphi$	Dissipationspotential
$\eta$	Fehlergrenze
$\rho$	Korrelationskoeffizient
$\delta$	Variation

## Vektoren

$d\vec{r}$	Linienelement
$d\vec{r}^0$	Linienelement im Ausgangszustand
$d\vec{r}^*$	Linienelement im Zwischenzustand
$\vec{q}$	Wärmeflußvektor
$\vec{r}$	Residuenvektor
$\vec{u}$	Verschiebungen
$\vec{F}$	Vektor der Knotenpunktkräfte
$\vec{R}$	Vektor der äußeren Knotenpunktkräfte
$\vec{U}$	Vektor der inkrementellen Knotenpunktsverschiebungen
$\vec{b}$	volumenhaft angreifenden Kräfte
$\vec{f}$	flächenhaft angreifenden Kräfte

## Tensoren 2. Stufe

$\underline{F}$	Deformationsgradient
$\underline{F}_r$	elastischer Deformationsgradient
$\underline{F}_i$	inelastischer Deformationsgradient
$\underline{Q}$	orthogonale Matrix
$\underline{L}$	Geschwindigkeitsgradient
$\underline{D}$	Tensor der Verzerrungsgeschwindigkeit
$\underline{I}$	Einheitstensor

---

<b><u>J</u></b>	Jacobi-Matrix
<b><u>G</u></b>	Gewichtungsmatrix
<b><u>T</u></b>	Transformationsmatrix
<b><u>C</u></b>	Kovarianzmatrix
<b><u>H</u></b>	Verschiebungsinterpolationsmatrix
<b><u>B</u></b>	Verzerrungs-Verschiebungsmatrix
<b><u>K</u></b>	Tangentensteifigkeitsmatrix
<b><math>\sigma</math></b>	Spannungstensor
<b><math>\underline{\epsilon}</math></b>	Dehnungstensor
<b><math>\underline{\epsilon}_r</math></b>	reversibler Anteil des Dehnungstensors
<b><math>\underline{\epsilon}_i</math></b>	irreversibler Anteil des Dehnungstensors
<b><math>\underline{\xi}</math></b>	kinematischer Verfestigungstensor
<b><math>\underline{\bar{\sigma}}</math></b>	geschwindigkeitsunabhängiger Anteil des Spannungstensors

## Tensoren 4. Stufe

<b><u>C</u></b>	Elastizitätstensor
-----------------	--------------------

## Operatoren

<i>grad</i>	Gradient
<i>div</i>	Divergenz
$\nabla$	Nabla-Operator
<i>sign</i>	Vorzeichenfunktion
<i>typ</i>	Größenordnung einer Zahl
<i>int</i>	ganzzahliger Anteil einer Zahl
$Sp(\cdot)$	Spur
$(\cdot)'$	Deviator
$(\cdot)''$	Kugeltensor
$(\dot{\cdot})$	materielle Zeitableitung
$(\cdot)^{-1}$	Inverse
$(\cdot)^T$	Transponierte
$\ \cdot\ _2$	euklidische Norm
$(\cdot) \cdot (\cdot)$	einfach verjüngendes Produkt
$(\cdot) : (\cdot)$	doppelt verjüngendes Produkt

# 1. Einleitung

Zur besseren Nutzung vorhandener Ressourcen ist eine genauere Beschreibung der mechanischen Materialeigenschaften erforderlich. Dazu sind in der jüngeren Vergangenheit eine Reihe von Modellen entwickelt worden, die es gestatten, die Eigenschaften von Werkstoffen unterschiedlicher Prägung so zu beschreiben, daß sie in herkömmlichen Berechnungsmethoden, wie etwa der Finite-Elemente-Methode, eingesetzt werden können (siehe z.B. [Bru84], [BP87], [Rot91], [BR94] und [Wes95]).

Eine genauere Beschreibung der Materialeigenschaften erfordert auf der anderen Seite jedoch die Bestimmung zusätzlicher Materialparameter. Vereinheitlichte Werkstoffmodelle<sup>1</sup> mit inneren Variablen zur Beschreibung des inelastischen Deformationsverhaltens metallischer Werkstoffe enthalten Parameter, die an spezifische Werkstoffe mit Hilfe von Experimenten angepaßt werden müssen. Die Anzahl der zu identifizierenden Parameter ist vom Modell abhängig. Die Bestimmung dieser Parameter aus den Daten von Grundlagenversuchen ist Gegenstand der vorliegenden Arbeit, wobei der Schwerpunkt auf der numerischen Realisierung liegt.

Als Identifikationsexperimente werden vorwiegend Versuche mit homogenen Deformationen und dabei meistens einaxiale Versuche herangezogen (siehe z.B. [Bru84], [BP87], [Bra92], [Bra93], [SS94], [Kun94], [Kun95], [Thi95], [Thi96] und [GT96]). Ein anderer Weg zur Identifikation von Materialparametern, nämlich durch die Erzeugung möglichst inhomogener Spannungs- und Dehnungsverteilungen im Meßgebiet, wird nur von wenigen Autoren besprochen (siehe [MS94a], [KMK95], [Kre96] und [ADF<sup>+</sup>96]). Infolge der hohen Kosten für die Identifikationsexperimente ist die Anzahl der durchzuführenden Versuche beschränkt. Über Versuchsserien, bei denen der Umfang des Datenmaterials eine statistisch abgesicherte Identifikation *aller* Modellparameter zuläßt, ist in der Literatur nichts bekannt. Auch zu der Frage, wie sich die in den Experimenten zu erwartenden Streuungen der Meßwerte auf die zu identifizierenden Parameter auswirken, gibt es nur wenige Veröffentlichungen ([Bra93], [SS94], [GT96]). Der entscheidende Aspekt ist hierbei die Prognosegenauigkeit der eingesetzten Werkstoffmodelle; nur im Falle hinreichend kleiner Streuungen der Modellparameter kann man exakte Vorhersagen des realen Materialverhaltens erwarten. Da in dieser Arbeit ein kompletter Satz monotoner und nichtmonotoner einaxialer Versuche mit und ohne Haltezeiten zur Bestimmung der Modellparameter zur Verfügung stand, ist der Einsatz statistischer Methoden ein entscheidender Aspekt zur Identifikation der Modellparameter.

Obwohl der funktionelle Zusammenhang der zur Beschreibung der Materialeigenschaften benötigten zusätzlichen Parameter im Rahmen der Prozeßbeschreibung bekannt ist, kann der Wertebereich der Parameter von vornherein nur sehr grob angegeben werden. Die

---

<sup>1</sup>Einen Überblick über vereinheitlichte Werkstoffmodelle gibt beispielsweise die Arbeit von Rott [Rot91]

Parameter müssen über ein rechenzeitintensives stochastisches Suchverfahren bestimmt werden. Zur Bestimmung der Parameter bietet sich eine Kombination von stochastischen und deterministischen Algorithmen an. Es existiert eine große Zahl von Veröffentlichungen über den Einsatz der Evolutionsstrategie zur Bestimmung von Materialparametern (siehe z.B. [MH89], [Bra92], [Ber93], [Kun95], [Las95], [Mit95] und [Thi95]). Über die Einsatzmöglichkeiten deterministischer Verfahren ist dagegen nur wenig bekannt (siehe z.B. [SS94], [MS94b], [Kun95] und [Thi95]). Aus diesem Grunde ist ein wesentliches Ziel der vorliegenden Arbeit der gezielte Einsatz moderner Optimierungsverfahren zur Bestimmung der Parameter mit einem besonderen Augenmerk auf die Verkürzung der bisher benötigten Rechenzeiten.

Weiterhin bietet sich bei der vorliegenden Problemstellung die Nutzung einer Vielzahl von Rechnerstationen als parallel arbeitende, virtuelle Großrechneranlage an, da sich zur Durchsuchung des Parameterraumes einfache parallele Konzepte eignen, welche leicht umzusetzen sind (siehe z.B. [Ber93], [Mit95], [Las95]). Der Einsatz höherer Parallelisierungskonzepte wird in [KMK95] demonstriert. Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeit liegt daher in der Parallelisierung der eingesetzten Algorithmen.

Obwohl eine Reihe von Autoren auf die numerischen Schwierigkeiten bei der Integration von konstitutiven Gleichungen hingewiesen haben und daher den Einsatz impliziter Verfahren favorisieren (siehe z.B. [CK86], [HK87], [SW89] und [Bra92]), werden häufig noch explizite Verfahren eingesetzt. Zur Klärung dieser Problematik werden in der vorliegenden Arbeit Methoden ermittelt, mit denen eine stabile und genaue Integration der Werkstoffmodelle möglich ist.

Weitere Aspekte der numerischen Realisierung des Einsatzes moderner Optimierungsverfahren zur Identifikation der Modellparameter werden in der Arbeit ausführlich diskutiert. Als Beispiel seien hier nur die Gradientenbildung und die Größenordnungsproblematik der Parameter genannt.

Die Einsatzfähigkeit der Werkstoffmodelle zur Lösung praktischer Probleme des Maschinenbaus lässt sich durch den Einbau dieser Modelle in Finite-Elemente Programme nachweisen, die in der Praxis verwendet werden. Dazu ist ein entsprechend modularer Aufbau des Stoffgesetzes vonnöten. Zur Realisation kurzer Rechenzeiten auch bei umfangreichen Problemen der Strukturmechanik, die entsprechend große Zeitschrittweiten verlangen, bieten sich wiederum implizite Verfahren zur Integration der konstitutiven Gleichungen an. Die erfolgreiche Umsetzung dieser Vorgehensweise wird anhand von Beispielrechnungen nachgewiesen.

---

## 2. Das Materialverhalten metallischer Werkstoffe

Für die Verwendung eines Werkstoffs zur Herstellung von Maschinen, Tragwerken oder Werkzeugen ist eine bestimmte *Festigkeit*, d.h. eine ausreichende Widerstandsfähigkeit gegenüber der Einwirkung äußerer Kräfte, erforderlich. Andererseits ist bei der Verarbeitung der Werkstoffe eine möglichst gute *Verformbarkeit* erwünscht. Daher gehören Festigkeit und Verformbarkeit zu den wichtigsten Werkstoffeigenschaften.

Bei der Reaktion eines Werkstoffs auf eine äußere Beanspruchung können unterschieden werden (siehe [Sch91]):

- *reversible Verformung*, bei der die Formänderungen nach Beendigung der Krafteinwirkung wieder verschwinden und der verformte Körper in seine ursprüngliche Form zurückkehrt (elastische Verformung)
- *irreversible (bleibende) Verformung*, bei der die Formänderungen auch nach Beendigung der Krafteinwirkung erhalten bleiben (plastische Verformung)
- *Schädigung und Bruch*, also die Entstehung und Ausbreitung von Rissen bis zur Trennung des Werkstoffs

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich in erster Linie mit dem zweiten Stadium, der irreversiblen Verformung. Phänomene des dritten Bereichs werden beispielsweise in der Arbeit von *Mittelbach* [Mit95] behandelt.

### 2.1 Plastizität

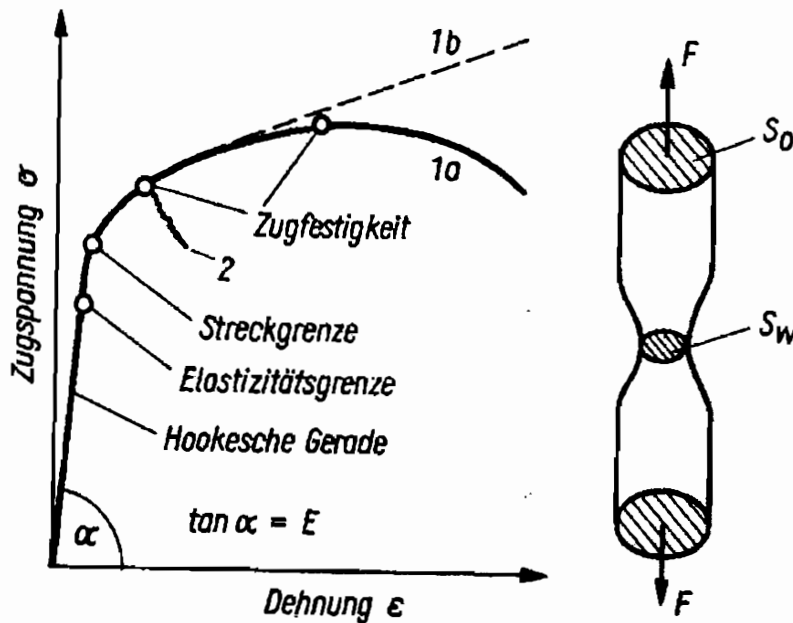
Im Anschluß an die reversible Verformung können entweder bleibende Verformungen auftreten oder aber die Bindungen zwischen den Atomen zerstört werden (Bruch). Wenn die bleibenden Verformungen erst nach dem Überschreiten eines Schwellenwertes (*Fließ- oder Streckgrenze*) erfolgen, so bezeichnet man sie als *plastische Verformungen*.

Die Plastizität ist eine außerordentlich wichtige Werkstoffeigenschaft, denn auf ihr beruhen die Fertigungsverfahren der *Umformtechnik*. Sie ist außerdem die Voraussetzung dafür, daß örtliche Spannungsspitzen an Kerben und Rissen durch plastische Verformung abgebaut werden können, was die Bruchgefahr verringert.

Die Fähigkeit zur plastischen Verformung beruht vor allem auf der Entstehung und Bewegung von *Versetzungen* (siehe Kapitel 2.1.2).

### 2.1.1 Zugversuch

Die meisten Untersuchungen über das mechanische Verhalten von Metallen beruhen auf dem *Zugversuch* (siehe z.B. [Dom87]). Ein zylindrischer Probestab mit Zugenden größeren Querschnitts, die zum Einspannen der Probe dienen, wird aus dem zu untersuchenden Material hergestellt. Die Anfangsmeßlänge  $L_0$  in dem Mittelteil der Probe hat einen konstanten Querschnitt (prismatischer Körper) und dient zur Ermittlung der auftretenden Dehnung, während die Spannung aus der aufzuwendenden Zugkraft und dem Probenquerschnitt rechnerisch ermittelt wird. Die Spannungs-Dehnungs-Kurve hat prinzipiell die in Abb. 2.1 dargestellten Merkmale:



**Abb. 2.1:** Spannungs-Dehnungs-Diagramm für duktilen (1) und spröden (2) Werkstoffverhalten (aus [Sch91])

Die relative Verlängerung oder Dehnung  $\varepsilon = \frac{L-L_0}{L_0}$  der Probe wird als Funktion der Zugspannung  $\sigma$  ermittelt. Im *physikalischen Zugversuch* wird die *wahre Querschnittsfläche*  $S_w$  (siehe Abb. 2.1), die von der *Querkontraktion* des Materials und der vor dem Bruch auftretenden *Einschnürung* der Probe beeinflusst wird, der zur Verlängerung der Probe aufzubringenden Kraft zugeordnet. Daraus wird die *wahre Spannung* (Abb. 2.1, Kurve 1b)

$$\sigma(\varepsilon) = \frac{F}{S_w} \quad (2.1)$$

ermittelt. Im genormten *technischen Zugversuch* wird stattdessen die auf den Ausgangsquerschnitt  $S_0$  (siehe Abb. 2.1) bezogene *Nennspannung* (Abb. 2.1, Kurve 1a)

$$\sigma(\varepsilon) = \frac{F}{S_0} \quad (2.2)$$

ermittelt. Die beiden daraus resultierenden Kurven unterscheiden sich mit zunehmender Dehnung  $\varepsilon$ , insbesondere nach Beginn der Einschnürung.

Der Verlauf des Probenverhaltens im Zugversuch in Abb. 2.1 weist einige charakteristische Merkmale auf; so stellt man bei einer Belastung der Probe mit einer Zugspannung unterhalb der *Elastizitätsgrenze* fest, daß die Dehnung bei Entlastung auf Null zurückgeht. In diesem Bereich gilt das *Hooke'sche Gesetz*  $\frac{\sigma}{\varepsilon} = E$ , d.h. der *Elastizitätsmodul*  $E$  kann direkt im Zugversuch ermittelt werden.

Die Obergrenze des elastischen Bereichs wird als *Streckgrenze* oder *Fließspannung* bezeichnet; bei ihr beginnt die plastische Dehnung, das Fließen. Da die praktische Bestimmung dieser Grenze schwierig ist, bestimmt man die Spannung, die zu einer kleinen, aber gut meßbaren plastischen Dehnung führt, und bezeichnet sie als *Dehngrenze*.

Den weiteren Anstieg der Spannung mit zunehmender Verformung bezeichnet man als *Verfestigung*. Sie wird durch den sogenannten *Tangentenmodul*  $E_t = \frac{d\sigma}{d\varepsilon}$  gekennzeichnet.

Am Ende dieses Bereiches, der durch die *Zugfestigkeit* gekennzeichnet ist, beginnt meist an einer zufälligen Instabilität der Probenoberfläche die *Einschnürung*. Dort wird der Zugspannungsanstieg durch Verfestigung nicht mehr vom Zugspannungsabfall durch die Querschnittsabnahme kompensiert. Dadurch ändert sich der Kurvenverlauf entscheidend.

Der Zugversuch endet mit dem Bruch der Probe.

### 2.1.2 Verformung von Ein- und Vielkristallen

Das Verformungsverhalten einer vielkristallinen Probe folgt aus dem Verformungsverhalten des Einkristalls durch geeignete Mittelung und Einhaltung von Randbedingungen wie der des Zusammenhalts der Kristallite während der Verformung (Kompatibilitätsbedingung) (siehe [HW91]). Untersuchungen von Einkristallen im Zugversuch liefern deshalb die Grundlage des Verständnisses der plastischen Verformung. Im Einkristall, an den eine Zugspannung angelegt wird, findet die Abgleitung vorwiegend in bestimmten, meist dicht mit Atomen gepackten Ebenen und Richtungen des Kristalls statt, die man als *Gleitsysteme* bezeichnet, wobei die *Gleitrichtung* in der *Gleitebene* enthalten ist (siehe Abb. 2.2).

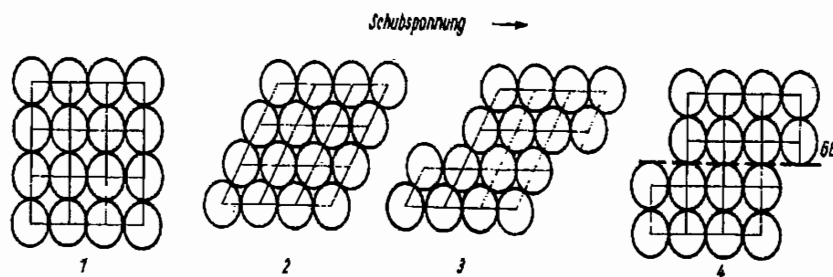


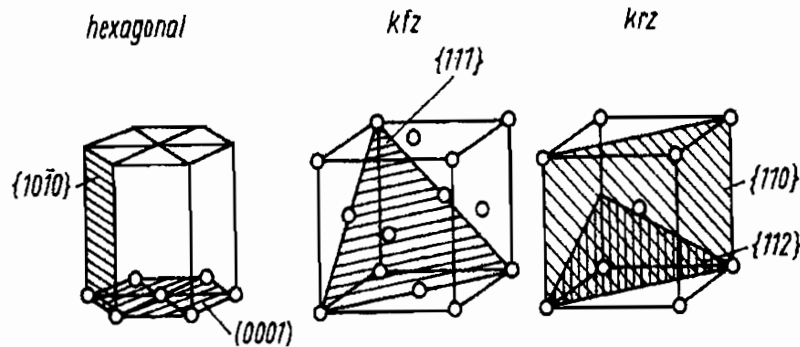
Abb. 2.2: Plastische Verformung durch Abgleiten im idealen Gitter (aus [Sch91])



Das Gleitsystem, für dessen Winkellage zu der von außen angelegten Spannung sich die höchste *Schubspannung* ergibt, wird zuerst betätigt (*Schmid'sches Schubspannungsgesetz*). Als Gleitebenen werden meist die am dichtesten mit Atomen besetzten Ebenen wirksam, während die Gleitrichtungen stets mit den Richtungen dichtester Packung in der Gleitebene übereinstimmen.

Die meisten Metalle kristallisieren in einer der folgenden Strukturen (siehe Abb. 2.3):

1. *hexagonal dichteste Kugelpackung*; sie besitzt drei Gleitebenen. Beispiele hierfür sind Mangan und Zink.
2. *kubisch-flächenzentriertes (kfz) Gitter* mit vier Gleitebenen. Beispiele sind Kupfer, Aluminium und das  $\gamma$ -Eisen.
3. *kubisch-raumzentriertes (krz) Gitter*. Die Gleitebenen sind jeweils die Raumdiagonalen. Beispiele sind Natrium und das  $\alpha$ -Eisen.



**Abb. 2.3:** Gleitebenen im hexagonalen, kubisch-flächenzentrierten und kubisch-raumzentrierten Gitter (aus [Sch91])

Die unterschiedliche Anzahl der Gleitebenen ist der Grund dafür, daß sich kubisch kristallisierte Metalle besser verformen lassen als solche mit hexagonalem Gitteraufbau.

In einem tatsächlichen Gitter liegen eine große Zahl von *Fehlstellen* vor. Von diesen kommt bei der plastischen Verformung den *Versetzungen* und deren Bewegung eine besondere Bedeutung zu. Versetzungen entstehen entweder direkt beim Kristallisationsprozeß infolge stets vorhandener Spannungs- und Temperaturgradienten oder sie werden unter der Wirkung von Schubspannungen z.B. an Korn- und Phasengrenzen gebildet. In der Umgebung einer Versetzung ist das Gitter verzerrt, wodurch sich ein *Mikroeigen Spannungsfeld* um die Versetzung aufbaut. Das Vorhandensein von Mikroeigen spannungen im Material ist für den sogenannten *Bauschinger-Effekt* verantwortlich, der sich darin äußert, daß bei einer plastischen Verformung eines Körpers das plastische Fließen bei einer Umkehr der Belastung wesentlich früher einsetzt als vor der Lastumkehr.

Unter der Wirkung einer genügend hohen Schubspannung kann sich eine Versetzung be-

wegen (siehe Abb. 2.4). Das Gleiten der Versetzungen kann nur in den entsprechenden Gleitebenen erfolgen.

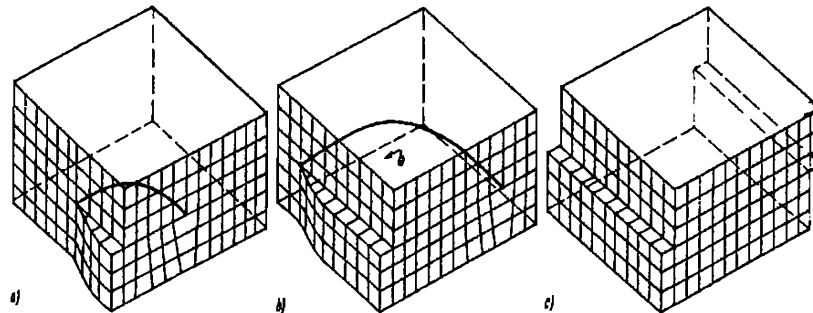


Abb. 2.4: Bewegung einer Versetzung durch das kubisch primitive Gitter (aus [Sch91])

Neben der Aktivierung bereits vorhandener Versetzungen wird bei der plastischen Verformung eine große Anzahl neuer Versetzungen gebildet. Während in geglähten Metallkristallen die Versetzungsdichte zwischen  $10^6$  und  $10^8 \text{ cm}^{-2}$  liegt, kann sie infolge einer plastischen Verformung auf  $10^{10}$  bis  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  ansteigen. Die Bildung neuer Versetzungen, also die Erhöhung der *Versetzungsdichte*, ist von einer zunehmenden gegenseitigen Behinderung der Versetzungsbewegungen begleitet. Die neugebildeten Versetzungen sind nicht mehr gleichmäßig verteilt, sondern ordnen sich in Form von *Versetzungswänden* (siehe [Ste95]) an. Damit nimmt die Zahl der Hindernisse für die Bewegung der Versetzungen zu, und es muß zur Aufrechterhaltung der plastischen Verformung eine höhere Spannung aufgebracht werden.

### 2.1.3 Verformungstextur

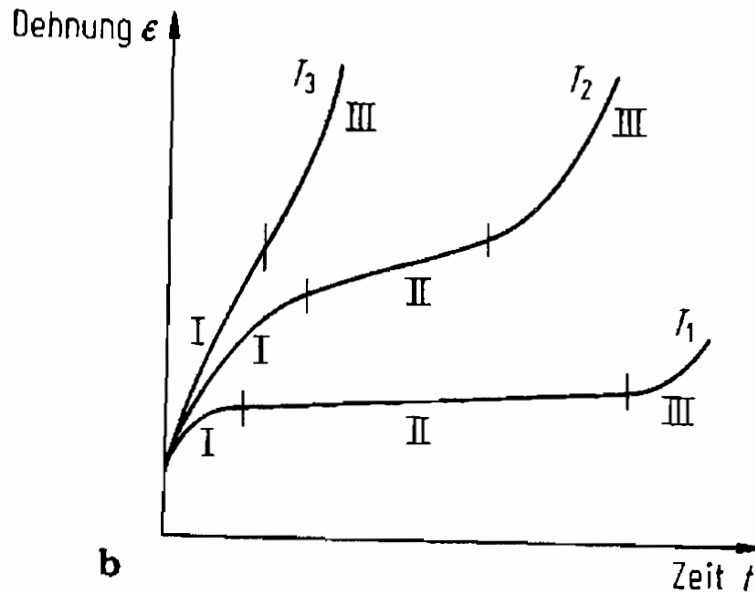
Bei Vielkristallen ist zu unterscheiden zwischen einem makroskopisch *isotropen* und einem *anisotropen*, d.h. richtungsabhängigen Verhalten. Bei Isotropie wird vorausgesetzt, daß der Vielkristall eine gleichmäßig häufige Verteilung der Orientierungen seiner Kristallite besitzt. Wird aber ein vielkristallines Metall zum Beispiel durch Walzen verformt, so treten mit dem Verformungsgrad zunehmende Abweichungen von der Isotropie auf, die auf die Anisotropie der Verformung in den einzelnen Kristalliten zurückzuführen sind.

Die Abweichung von der regellosen Verteilung der Orientierungen nach der Verformung wird *Verformungstextur* genannt.

### 2.1.4 Kriechen

Die plastische Verformung bei höheren Temperaturen hängt nicht nur von der Spannung, sondern außerdem von der Zeit ab, was auf einen Anteil thermisch aktivierter

Vorgänge (siehe Kapitel 2.2) bei der Verformung zurückzuführen ist. Zur Untersuchung dieses zeitabhängigen Verhaltens, des *Kriechens*, dient die Messung der zeitabhängigen Dehnung im statischen Zugversuch. Die Probe steht dann entweder unter konstanter Last (technischer Zeitstandversuch), oder aber unter konstanter Spannung (physikalischer Kriechversuch). Dabei wird die Dehnung als Funktion der Zeit gemessen (siehe Abb. 2.5).



**Abb. 2.5:** Physikalische Kriechkurven bei verschiedenen Temperaturen:  $T_1 < T_2 < T_3$  (aus [HW91])

Bei konstanter Spannung können die Kriechkurven in Abb. 2.5 in drei Bereiche eingeteilt werden:

- I In diesem Bereich überwiegt die *Kriechverfestigung*.
- II Die Verfestigung und thermisch aktivierte, entfestigende Vorgänge kompensieren sich zu *stationärem Kriechverhalten*.
- III Die thermisch aktivierten Verformungsvorgänge mit Entfestigung überwiegen.

Wie in Abb. 2.5 zu erkennen ist, nimmt der stationäre Kriechbereich mit steigender Temperatur ab.

## 2.2 Thermisch aktivierte Reaktionen

Thermisch aktiviert ist jeder Vorgang, der durch thermische Anregung bewirkt oder beeinflusst wird (siehe [HW91]). Als thermisch aktivierte Reaktionen werden insbesondere

Vorgänge bezeichnet, bei denen Atome aufgrund thermischer Schwingungen ihre Gitterplätze wechseln. Dabei treten insbesondere *Wechselwirkungen* zwischen *Leerstellen* und *Versetzungen* auf.

Leerstellen sind in metallischen Werkstoffen immer vorhanden; sie liegen nach dem Abschrecken von höheren Temperaturen oder nach plastischer Verformung vor. Bei thermischer Aktivierung diffundieren sie bevorzugt an Gitterbaufehler. An Versetzungen entstehen dadurch Sprünge; bei Anlagerung von Leerstellen in großer Zahl verlagern sich die Versetzungen. Diese Verlagerung wird als *Klettern* bezeichnet und tritt insbesondere beim Kriechen (siehe oben) auf.

### 2.2.1 Erholung

Erholung ist der Oberbegriff für alle thermisch aktivierten Reaktionen, die in gestörten Kristallen beim Abbau der nicht im thermodynamischen Gleichgewicht stehenden Gitterbaufehler ablaufen (siehe [HW91]). Die technisch wichtigste Auswirkung der Erholung ist die Abnahme innerer Spannungen und der Streckgrenze.

Die Erholung plastisch verformter und verfestigter Kristalle besteht aus der thermisch aktivierten Umordnung der Versetzungen zur *Annihilation* (Auslöschung). Für die Umordnung gibt es zwei Möglichkeiten; entweder werden die Versetzungslinien durch Bewegung auf Gleitsystemen gestreckt und teilweise durch Reaktionen von entgegengesetzten Versetzungen aufgehoben (annihiliert), oder es erfolgt Klettern (siehe oben) durch Wechselwirkung mit Leerstellen. Die Versetzungsdichte wird nur teilweise abgebaut.

### 2.2.2 Spannungsrelaxation

Als Spannungsrelaxation wird die Erscheinung bezeichnet, daß in einer vorbelasteten Probe, die bei konstanter Dehnung und Temperatur gehalten wird, ein *zeitabhängiger Spannungsabfall* eintritt. Bei Temperaturen unterhalb vier Zehnteln der Schmelztemperatur bleibt auch nach langen Zeiten eine Restspannung als Eigenspannung bestehen, bei höheren Temperaturen tritt im allgemeinen ein vollständiger Spannungsabbau ein.

Die Elementarvorgänge, die bei der Spannungsrelaxation ablaufen, sind bei tieferen Temperaturen die gleichen, die bei der Erholung zum Abbau der inneren Spannungen führen. Bei höheren Temperaturen überlagern sich Kriechvorgänge.

### 2.2.3 Rekristallisation

In verformten Metallen setzt bei Temperaturen oberhalb des Erholungsbereichs, d.h. bei Temperaturen oberhalb der Hälfte der Schmelztemperatur, im allgemeinen *Rekristallisation* ein (siehe [HW91]). Unter diesem Begriff werden alle Vorgänge der Neubildung und

des Wachstums weitgehend versetzungsfreier Körner bis zum vollständigen Abbau des Verformungs- und Erholungsgefüges zusammengefaßt.

### 3. Modellierung des inelastischen Verhaltens metallischer Werkstoffe

Wie in Kapitel 2 deutlich wurde, ist das makroskopische Antwortverhalten metallischer Werkstoffe bei Beanspruchung durch mechanische Lasten geprägt durch Mechanismen, die im Mikrobereich des Materials wirken. Die Untersuchung dieser Mechanismen kann auf verschiedenen *Größenskalen* erfolgen (siehe [Ste95]):

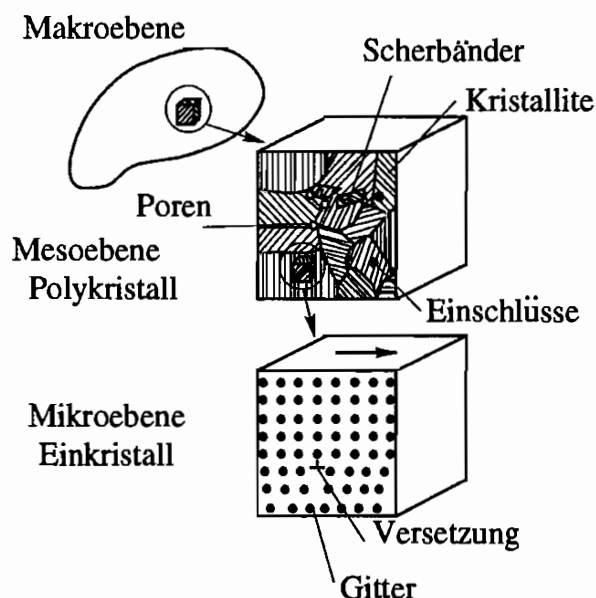


Abb. 3.1: Ebenen der Betrachtung eines Körpers (aus [Bru93])

Bei der *makroskopischen* Betrachtung eines Körpers (siehe Abb. 3.1) geht man von der Idealisierung aus, daß sich ein Körper als materielles *Punktkontinuum* beschreiben läßt und leitet daraus die Vorstellung der Kontinuumsmechanik ab, daß die Körperpunkte stetig mit Masse und weiteren physikalischen Eigenschaften belegt sind (siehe [Bru93]). Demzufolge kann die Beschreibung eines Körpers an einem repräsentativen Volumenelement erfolgen.

Betrachtet man ein solches Volumenelement näher, so stellt man auf der *Mesoebene* der Beschreibung des Körpers fest, daß das Kontinuum starke Inhomogenitäten aufweist; der *polykristalline* Körper besteht aus verschiedenen Körnern unterschiedlicher Kristallite (siehe Abb. 3.1). Die Körner sind regellos angeordnet und bilden an den Grenzen Korngrenzen. Die Gültigkeit der Kontinuumsmechanik läßt sich daher nur dadurch begründen, daß das repräsentative Volumenelement immer noch eine Vielzahl von Körnern enthält

und der Körper dadurch *lokal homogen* ist (siehe [Bru93]).

Die Frage, wie Erkenntnisse aus der *Mikroebene* des Materials Eingang in die Formulierung makroskopischer Stoffgleichungen finden, läßt sich nach Wegener [Weg96] auf zwei Wegen beantworten; makroskopische Stoffgleichungen werden entweder durch *Mittelungsvorschriften* gewonnen oder in direkter *Analogie zum mikromechanischen Verhalten* konstruiert. Die Analogie läßt sich dadurch rechtfertigen, daß ja auch die mikromechanischen Vorgänge den gleichen physikalischen Prinzipien zu gehorchen haben wie die makroskopischen. Der folgende Abschnitt ist daher der *phänomenologischen Beschreibung des Materialverhaltens* metallischer Werkstoffe gewidmet.

### 3.1 Phänomenologische Beschreibung des Materialverhaltens

Nach Haupt [Hau96] bestehen die Grundgleichungen der makroskopischen Kontinuums-*theorie* aus den materialunabhängigen *Bilanzrelationen* für den Impuls, den Drehimpuls, die Energie und die Entropie, sowie den *Materialgleichungen*, die die individuellen Eigenschaften eines jeden einzelnen materiellen Körpers darstellen.

Das *Stoffgesetz* verknüpft die durch die mechanischen und thermodynamischen Bilanzgleichungen festgelegten *Zustandsvariablen* *Spannung*  $\underline{\sigma}$  und *Temperatur*  $T$  eines Körperelementes mit dem aus seiner Kinematik resultierenden *Verzerrungszustand*  $\underline{\epsilon}$ .

*Elastisches Materialverhalten* ist durch eine eindeutige Funktion zwischen Verzerrung, Spannung und Temperatur gekennzeichnet:

$$\begin{aligned}\underline{\epsilon} &= \underline{\epsilon}(\underline{\sigma}, T) \\ \underline{\sigma} &= \underline{\sigma}(\underline{\epsilon}, T)\end{aligned}\tag{3.1}$$

Bei *inelastischem Materialverhalten* geht diese eindeutige Beziehung verloren; die Beziehung zwischen Verzerrung, Spannung und Temperatur wird abhängig von der *Prozeßgeschichte*. Der Zusammenhang zwischen dem Verzerrungszustand  $\underline{\epsilon}$  und den externen, meßbaren Zustandsvariablen  $\underline{\sigma}$  und  $T$  läßt sich dann nur als *Funktional* der gesamten Geschichte der Variablen beschreiben (siehe [Hau96]).

Funktionale kann man entweder durch Integrale über den Verlauf der Eingangsprozesse *explizit* darstellen, oder *implizit* durch *Differentialgleichungen* (Theorie der inneren Variablen). Der implizite Weg zur Darstellung der Prozeßgeschichte ist Gegenstand der in dieser Arbeit verwendeten Modelle.

Grundlage der Modellierung bildet die bei Metallen übliche Trennung von reversiblen und irreversiblen Prozessen. Darauf aufbauend spaltet man den Tensor der Verzerrungsgeschwindigkeiten  $\dot{\underline{\epsilon}}$  in einen Anteil  $\dot{\underline{\epsilon}}_r$ , dem die reversiblen elastischen Prozesse zugeordnet werden können, und in einen Anteil  $\dot{\underline{\epsilon}}_i$ , der mit sämtlichen irreversiblen Prozessen

verknüpft ist, auf (siehe [Bru93]):

$$\begin{aligned}\dot{\underline{\epsilon}} &= \dot{\underline{\epsilon}}_r + \dot{\underline{\epsilon}}_i \\ \dot{\underline{\epsilon}}_r &= \dot{\underline{\epsilon}}_r(\dot{\Lambda}), \quad \Lambda := \{\underline{\sigma}, T\}\end{aligned}\tag{3.2}$$

Für die reversible Verzerrungsrate  $\dot{\underline{\epsilon}}_r$  in (3.2) gilt der eindeutige funktionale Zusammenhang aus (3.1). Die Aufspaltung (3.2) basiert auf der Vorstellung einer virtuellen, spannungsfreien Konfiguration  $\mathcal{B}^*$  des Körpers, aus der sich der aktuelle Zustand  $\mathcal{B}$  durch eine rein elastische Verformung berechnen läßt. Die Konfiguration  $\mathcal{B}^*$  wird als *Zwischenkonfiguration* bezeichnet (siehe z.B. [Leh89]).

Wenn der inelastische *Deformationsgradient*  $\underline{F}_i$  den inelastischen Übergang von der Ausgangskonfiguration  $\mathcal{B}^0$  des Körpers in die Zwischenkonfiguration  $\mathcal{B}^*$  kennzeichnet und der elastische Deformationsgradient  $\underline{F}_r$  den rein elastischen Übergang von  $\mathcal{B}^*$  in die aktuelle Konfiguration  $\mathcal{B}$ , dann gilt für ein *Linienelement*  $d\bar{\mathbf{r}}^*$  im Zwischenzustand  $\mathcal{B}^*$ :

$$d\bar{\mathbf{r}}^* = \underline{F}_i \cdot d\bar{\mathbf{r}}^0\tag{3.3}$$

Ebenso gilt im aktuellen Zustand  $\mathcal{B}$ :

$$d\bar{\mathbf{r}} = \underline{F}_r \cdot d\bar{\mathbf{r}}^*\tag{3.4}$$

Aus (3.3) und (3.4) folgt unmittelbar:

$$d\bar{\mathbf{r}} = \underline{F}_r \cdot \underline{F}_i \cdot d\bar{\mathbf{r}}^0\tag{3.5}$$

Mit Hilfe von (3.5) ist der Deformationsgradient  $\underline{F}$  in einen elastisch reversiblen Anteil  $\underline{F}_r$  und in einen irreversiblen Anteil  $\underline{F}_i$  *multiplikativ zerlegt* worden:

$$\underline{F} = \underline{F}_r \cdot \underline{F}_i\tag{3.6}$$

Die Zerlegung (3.6) ist bis auf eine Drehung eindeutig, da mit einer beliebigen orthogonalen Matrix  $\underline{Q}$  aus

$$\begin{aligned}\underline{F}_r' &= \underline{F}_r \cdot \underline{Q}^T \\ \underline{F}_i' &= \underline{Q} \cdot \underline{F}_i\end{aligned}\tag{3.7}$$

die Zerlegung

$$\underline{F} = \underline{F}_r' \cdot \underline{F}_i'\tag{3.8}$$

folgt, die dieselben Hauptdehnungen aufweist und zu einer durch  $\underline{Q}$  gedrehten Zwischenkonfiguration gehört.

Aus dem Deformationsgradienten  $\underline{F}$  folgt der *Geschwindigkeitsgradient*  $\underline{L}$ :

$$\underline{L} = \dot{\underline{F}} \cdot \underline{F}^{-1}\tag{3.9}$$



Der symmetrische *Tensor der Verzerrungsgeschwindigkeit*  $\underline{D}$  läßt sich mit Hilfe von (3.9) ermitteln:

$$\underline{D} = \frac{1}{2} \cdot (\underline{L} + \underline{L}^T) \quad (3.10)$$

Aus (3.9) und (3.10) folgt:

$$\underline{D} = \frac{1}{2} \cdot (\dot{\underline{F}} \cdot \underline{F}^{-1} + \underline{F}^{-T} \cdot \dot{\underline{F}}^T) \quad (3.11)$$

Mit der multiplikativen Zerlegung (3.6) des Deformationsgradienten findet man aus (3.11):

$$\underline{D} = \frac{1}{2} \cdot (\dot{\underline{F}}_r \cdot \underline{F}_r^{-1} + \underline{F}_r \cdot \dot{\underline{F}}_i \cdot \underline{F}_i^{-1} \cdot \underline{F}_r^{-1} + \underline{F}_r^{-T} \cdot \dot{\underline{F}}_r^T + \underline{F}_r^{-T} \cdot \underline{F}_i^{-T} \cdot \dot{\underline{F}}_i^T \cdot \underline{F}_r^T) \quad (3.12)$$

Damit läßt sich der Tensor der Verzerrungsgeschwindigkeit  $\underline{D}$  rein formal additiv in einen reversiblen elastischen Anteil

$$\underline{D}_r = \frac{1}{2} \cdot (\dot{\underline{F}}_r \cdot \underline{F}_r^{-1} + \underline{F}_r^{-T} \cdot \dot{\underline{F}}_r^T) \quad (3.13)$$

sowie in einen Anteil

$$\underline{D}_i = \frac{1}{2} \cdot (\underline{F}_r \cdot \dot{\underline{F}}_i \cdot \underline{F}_i^{-1} \cdot \underline{F}_r^{-1} + \underline{F}_r^{-T} \cdot \underline{F}_i^{-T} \cdot \dot{\underline{F}}_i^T \cdot \underline{F}_r^T) \quad (3.14)$$

der mit den irreversiblen Prozessen verknüpft ist, aufspalten (siehe [Bru92]). In (3.14) wird deutlich, daß die inelastischen Anteile  $\underline{D}_i$  nach wie vor unter dem Einfluß elastischer Deformationen  $\underline{F}_r$  stehen. Bei metallischen Werkstoffen kann man jedoch ausnutzen, daß die elastischen Deformationen klein sind. Daher gilt mit guter Näherung:

$$d\vec{r} \approx \underline{F}_i \cdot d\vec{r}^0 \quad (3.15)$$

In diesem Fall ist die Zerlegung (3.6) eindeutig und die Verzerrungsgeschwindigkeit läßt sich aufspalten:

$$\underline{D} = \underline{D}_r + \underline{D}_i \quad (3.16)$$

Mit dem *Euler-Almansi-Verzerrungstensor*

$$\underline{\epsilon} = \frac{1}{2} \cdot (\underline{I} - \underline{F}^{-T} \cdot \underline{F}^{-1}) \quad (3.17)$$

besteht der Zusammenhang:

$$\underline{D} = \dot{\underline{\epsilon}} + \underline{F}^{-T} \cdot \dot{\underline{F}}^T \cdot \underline{\epsilon} + \underline{\epsilon} \cdot \dot{\underline{F}} \cdot \underline{F}^{-1} \quad (3.18)$$

Im Rahmen einer *geometrisch linearen Theorie* darf man

$$\underline{D} \approx \dot{\underline{\epsilon}} \quad (3.19)$$

annehmen (siehe [AA94]), so daß die Aufspaltung (3.2) verifiziert ist.

Die Erfassung der Belastungsgeschichte des Materials erfolgt durch eine Anzahl  $k$  interner Variablen  $q_n$ , deren Entwicklungsgesetze als Differentialgleichungen angegeben werden. Durch die *innere Variablen-Theorie* läßt sich für die *inelastische Verzerrungsrate*  $\dot{\underline{\epsilon}}_i$  eine allgemeine Beziehung angeben:

$$\begin{aligned}\dot{\underline{\epsilon}}_i &= \dot{\underline{\epsilon}}_i(\Lambda, \dot{\Lambda}, q_1, \dots, q_k), \quad \Lambda := \{\underline{\sigma}, T\} \\ \dot{q}_n &= \dot{q}_n(\Lambda, \dot{\Lambda}, q_1, \dots, q_k)\end{aligned}\tag{3.20}$$

Um den durch (3.20) gegebenen Rahmen sinnvoll ausfüllen zu können, sollten sich für die einzuführenden internen Variablen physikalische Interpretationen oder zumindest Motivationen angeben lassen (siehe [Bru93]). Nur auf diese Weise ist es überhaupt möglich, für die noch offenen Evolutionsgleichungen der internen Variablen  $q_n$  hinreichend zutreffende, d.h. das beobachtete Materialverhalten widerspiegelnde Materialfunktionen anzugeben.

Die durch (3.2) und (3.20) gegebenen Materialgleichungen müssen mit den *Bilanzrelationen* verträglich sein (siehe [Hau96]), d.h. keine Materialgleichung darf zu den Bilanzrelationen der Kontinuumsmechanik und der Thermodynamik im Widerspruch stehen. Die Verträglichkeit mit der *Entropieungleichung* (Prinzip der Irreversibilität) ist unverzichtbar.

## 3.2 Quasistatische Theorie

Geht man zur Beschreibung des *elastisch-plastischen Materialverhaltens* von der *Fließtheorie* (siehe [Bat90]) aus, kennzeichnen zusätzlich zu den elastischen Spannungs-Verzerrungs-Beziehungen drei weitere Eigenschaften das Materialverhalten:

1. eine *Fließbedingung*, die den mehrachsigen Spannungszustand festlegt, bei dem das plastische Fließen beginnt,
2. ein *Fließgesetz*, das die plastischen Verzerrungszuwächse mit den augenblicklichen Spannungen und den Spannungszuwächsen infolge des Fließens verknüpft und
3. ein *Verfestigungsgesetz*, das festlegt, auf welche Weise die Fließbedingung während des plastischen Fließens modifiziert wird.

Das rein elastische Materialverhalten wird als isotrop vorausgesetzt, was bei polykristallinen Metallen recht gut erfüllt ist. Weiterhin nimmt man an, daß die inelastischen Deformationen des Materials nicht mit Volumenänderungen verbunden sind (*plastische Inkompressibilität*) und die elastischen Deformationen klein bleiben (siehe [Bru92]).

Aus den klassischen Experimenten von *Taylor* und *Quinney* (1931) ist bekannt, daß die

inelastische Verzerrungsarbeit zu etwa 90% in Wärme umgesetzt wird. Der restliche Anteil von 10% ist in den durch die Versetzungen entstehenden *Mikroeigenstressfeldern* gespeichert (siehe Kapitel 2). Wenn die inelastischen Verzerrungen daher nicht so langsam erfolgen, daß die erzeugte Wärme nahezu vollständig abgeführt werden kann, treten Temperaturfelder auf und man erhält einen gekoppelten thermo-mechanischen Prozeß. Als Grenzwert für isotherme Prozeßführung gibt *Bruhns* in [Bru92] eine einaxiale Verzerrungsgeschwindigkeit  $\dot{\epsilon} = 10^{-4} \dots 10^{-3} \frac{1}{s}$  an. Bei diesen Geschwindigkeiten ist bei metallischen Werkstoffen der Zusammenhang zwischen den Spannungen und Verzerrungen nahezu unabhängig von der Prozeßgeschwindigkeit, so daß die Zeit als unabhängige Variable zur Prozeßbeschreibung nicht benötigt wird.

Für *isotropes reversibles Verhalten* kann man näherungsweise das *hypoelastische Gesetz*<sup>1</sup>

$$\dot{\underline{\epsilon}}_r = \frac{1}{2 \cdot G} \cdot \left( \dot{\underline{\sigma}} - \frac{\nu}{1 + \nu} \cdot Sp(\dot{\underline{\sigma}}) \cdot \underline{\mathbf{I}} \right) + \alpha \cdot \Delta \dot{T} \cdot \underline{\mathbf{I}} \quad (3.21)$$

ansetzen (siehe [Bru92]). In (3.21) bezeichnet  $G$  den *Schubmodul* des Materials, der mit dem *Elastizitätsmodul*  $E$  über die *Querkontraktionszahl*  $\nu$  gemäß der Beziehung

$$G = \frac{E}{2 \cdot (1 + \nu)} \quad (3.22)$$

zusammenhängt. Wegen der angenommenen InkompRESSIBILITÄT der inelastischen Deformationen kann man für die Fließbedingung die allgemeine Form

$$F(\underline{\sigma}', T, q_1, \dots, q_k) = 0 \quad (3.23)$$

ansetzen, wobei  $\underline{\sigma}'$  den *Spannungs-Deviator*

$$\underline{\sigma}' := \underline{\sigma} - \frac{1}{3} \cdot Sp(\underline{\sigma}) \cdot \underline{\mathbf{I}} \quad (3.24)$$

bezeichnet, welcher nach der obigen Annahme für die *inelastischen Formänderungen* verantwortlich ist. Die Notation  $Sp(\cdot)$  in (3.24) bezeichnet die erste *Invariante* des Tensors  $\underline{\sigma}$ , die *Spur*. Der *hydrostatische Spannungszustand*  $\underline{\sigma}'' = \frac{1}{3} \cdot Sp(\underline{\sigma}) \cdot \underline{\mathbf{I}}$  ist für die rein *elastischen Volumenänderungen* des Materials verantwortlich.

In dieser Arbeit findet die bei der Modellierung von Stählen übliche Fließbedingung nach *Melan* und *Prager* (siehe [Bru92])

$$F = (\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) : (\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) - g(\kappa, T) = 0 \quad (3.25)$$

Verwendung. Die durch (3.25) definierte Fließbedingung stellt anschaulich einen *Zylinder im Hauptspannungsraum* dar (siehe [Bat90]). Interpretiert man  $\underline{\xi}$  als Koordinaten des Mittelpunktes dieses Zylinders und  $\sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa, T)$  als den Radius, so wird klar, daß

<sup>1</sup>Ein *hypoelastisches* Gesetz, also eine Ratenformulierung, ist eine schwächere Formulierung als ein *hyperelastisches* Gesetz, welches aus einem Potential ableitbar ist (siehe Kapitel 3.4).

die beiden Größen  $\underline{\xi}$  und  $\kappa$  mit dem Verfestigungsgesetz zusammenhängen, welches die Fließbedingung, also den Zylinder im Hauptspannungsraum, während der plastischen Deformationen des Materials modifiziert.  $\underline{\xi}$  und  $\kappa$  sind dabei innere Variablen im Sinne der innere Variablen-Theorie. Da  $\underline{\sigma}'$  von deviatorischer Gestalt ist, muß entsprechend auch  $\underline{\xi}$  ein deviatorischer Tensor mit  $Sp(\underline{\xi}) = 0$  sein, um zu einem sinnvollen Ausdruck in der Fließbedingung (3.25) zu gelangen.

Als Fließgesetze verwendet man in der Regel sogenannte zugeordnete Fließregeln (*associated flow rules*) (siehe [Bru92]), die sich auf der Annahme gründen, daß die plastischen Verzerrungszuwächse normal auf der Fließfläche stehen. Dies führt zu der *Normalenregel*:

$$\dot{\underline{\epsilon}}_i = \lambda \cdot \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} = 2 \cdot \lambda \cdot (\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) \quad , \quad \lambda > 0 \quad (3.26)$$

In (3.26) bezeichnet der skalare Faktor  $\lambda$  den sogenannten *plastischen Multiplikator*. Als Bestimmungsgleichung für  $\lambda$  verwendet man die Ableitung der Fließbedingung; da  $F = 0$  gilt, muß auch

$$\begin{aligned} \dot{F} &= \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\sigma}} + \frac{\partial F}{\partial \underline{\xi}} : \dot{\underline{\xi}} + \frac{\partial F}{\partial \kappa} \cdot \dot{\kappa} + \frac{\partial F}{\partial T} \cdot \dot{T} \\ &= 2 \cdot (\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) : (\dot{\underline{\sigma}} - \dot{\underline{\xi}}) - \frac{\partial g}{\partial \kappa} \cdot \dot{\kappa} = 0 \end{aligned} \quad (3.27)$$

erfüllt sein. Die Beziehung (3.27) bezeichnet man als *Konsistenzbedingung*. Um aus (3.27) den plastischen Multiplikator  $\lambda$  ermitteln zu können, bedarf es der noch fehlenden *Evolutionsgesetze* für die bisher eingeführten inneren Variablen  $\underline{\xi}$  und  $\kappa$ . Hier setzt die Aufgabe des Stoffgesetzentwicklers an, da die Evolutionsgesetze nach hinreichender physikalischer Interpretierbarkeit verlangen (siehe Kapitel 3.1).

Das in dieser Arbeit verwendete INTERATOM-Modell von *Bruhns et al.* (siehe z.B. [Bru84], [BP87], [Rot91], [BR94] und [Wes95]) benutzt als Fließgesetz die Beziehung:

$$\dot{\underline{\epsilon}}_i = \frac{LC}{4 \cdot f \cdot h} \cdot \left\langle \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} \right\rangle \quad (3.28)$$

In (3.28) bezeichnet *LC* die sogenannte *Belastungsbedingung* (*loading condition*), die fordert, daß der Spannungszuwachs für Spannungspunkte, die die Fließbedingung erfüllen, also auf dem Zylinder (siehe oben) liegen, nach außen gerichtet sein muß, d.h. vom Zylinder weg zeigt:

$$LC = \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\sigma}} > 0 \quad (3.29)$$

Danach treten inelastische Deformationen nur auf, wenn sowohl  $F = 0$  als auch  $LC > 0$  erfüllt ist. Diese Forderung formuliert man in der Schalterfunktion:

$$\left\langle \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} \right\rangle = \begin{cases} \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} & , \quad \text{wenn } F = 0 \text{ und } LC > 0 \\ 0 & , \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (3.30)$$

Eine Entlastung des Materials ist daher rein elastisch. Die Größe  $f$  in (3.28) dient als Abkürzung in der *Pragerschen* Fließbedingung:

$$f = (\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) : (\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) \quad (3.31)$$

Mit (3.31) läßt sich (3.25) kurz als

$$F = f - g = 0 \quad (3.32)$$

schreiben. Die Größe  $h$  in (3.28) bezeichnet die Verfestigungsfunktion, für die in [Bru84]

$$h(\kappa, T) = c(\kappa, T) + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial g(\kappa, T)}{\partial \kappa} \quad (3.33)$$

angegeben wird, wobei die Funktion  $c(\kappa, T)$  noch zu spezifizieren ist. Als Evolutionsgleichungen der inneren Variablen  $\underline{\xi}$  und  $\kappa$  dienen die Beziehungen:

$$\dot{\underline{\xi}} = c(\kappa, T) \cdot \dot{\underline{\epsilon}}_i \quad (3.34)$$

$$\dot{\kappa} = (\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) : \dot{\underline{\epsilon}}_i$$

(3.34) unterscheidet sich vom klassischen *Pragerschen* Ansatz durch die Verwendung einer Funktion  $c(\kappa, T)$  anstelle einer Konstanten.

Im Hinblick auf die Implementierbarkeit des Modells in eine Finite-Elemente Formulierung im Rahmen der Verschiebungsmethode (siehe Kapitel 7) erscheint es angebracht, das durch (3.21), (3.28) und (3.34) gegebene Differentialgleichungssystem zu invertieren, d.h. Weggrößen als Eingangsgrößen zu wählen. Zu diesem Zweck bildet man zuerst die Spur der Verzerrungsrate:

$$Sp(\dot{\underline{\epsilon}}) = \frac{1}{2 \cdot G} \cdot \frac{1 - 2 \cdot \nu}{1 + \nu} \cdot Sp(\dot{\underline{\sigma}}) + \frac{LC}{4 \cdot f \cdot h} \cdot \left\langle Sp \left( \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} \right) \right\rangle \quad (3.35)$$

Durch (3.35) läßt sich in (3.21) die Spur der Spannungsrate eliminieren; dabei ist zu beachten, das  $Sp \left( \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} \right) = 2 \cdot Sp(\underline{\sigma}' - \underline{\xi})$  eine deviatorische Größe ist, so daß die Spur verschwindet. Deswegen gilt der einfache Zusammenhang:

$$Sp(\dot{\underline{\sigma}}) = 2 \cdot G \cdot \frac{1 + \nu}{1 - 2 \cdot \nu} \cdot Sp(\dot{\underline{\epsilon}}) \quad (3.36)$$

Als Zwischenergebnis aus diesen Überlegungen erhält man:

$$\frac{1}{2 \cdot G} \cdot \dot{\underline{\sigma}} + \frac{LC}{4 \cdot f \cdot h} \cdot \left\langle \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} \right\rangle = \dot{\underline{\epsilon}} + \frac{\nu}{1 - 2 \cdot \nu} \cdot Sp(\dot{\underline{\epsilon}}) \cdot \mathbf{I} \quad (3.37)$$

Die Belastungsbedingung  $LC$  ist allerdings noch von den Spannungsraten  $\dot{\underline{\sigma}}$  abhängig (siehe (3.29)), die ebenfalls eliminiert werden müssen. Dazu bildet man:

$$\frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\epsilon}} = \frac{1}{2 \cdot G} \cdot \left( \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\sigma}} - \frac{\nu}{1 + \nu} \cdot Sp(\dot{\underline{\sigma}}) \cdot \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} : \mathbf{I} \right) + \frac{LC}{4 \cdot f \cdot h} \cdot \left\langle \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} : \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} \right\rangle \quad (3.38)$$

Unter Beachtung von  $\frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\sigma}} = LC$ ,  $\frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} : \underline{\mathbf{I}} = 0$  und  $\frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} : \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} = 4 \cdot f$  erhält man aus (3.38) die Belastungsbedingung:

$$LC = \frac{\frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\epsilon}}}{\frac{1}{2G} + \frac{1}{4 \cdot f \cdot h} \cdot \langle 4 \cdot f \rangle} \quad (3.39)$$

Aus (3.37) und (3.39) ergibt sich:

$$\dot{\underline{\sigma}} = 2 \cdot G \cdot \left( \dot{\underline{\epsilon}} + \frac{\nu}{1 - 2 \cdot \nu} \cdot Sp(\dot{\underline{\epsilon}}) \cdot \underline{\mathbf{I}} - \frac{1}{4 \cdot f \cdot \left(1 + h \cdot \frac{1}{2G}\right)} \cdot \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\epsilon}} \cdot \left\langle \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} \right\rangle \right) \quad (3.40)$$

Mit der Abkürzung  $\delta = \frac{1}{1 + h \cdot \frac{1}{2G}}$  folgt die gesuchte Spannungs-Dehnungsbeziehung:

$$\dot{\underline{\sigma}} = 2 \cdot G \cdot \left( \dot{\underline{\epsilon}} + \frac{\nu}{1 - 2 \cdot \nu} \cdot Sp(\dot{\underline{\epsilon}}) \cdot \underline{\mathbf{I}} - \frac{\delta}{4 \cdot f} \cdot \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\epsilon}} \cdot \left\langle \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} \right\rangle \right) \quad (3.41)$$

Zur Spezifikation des noch unbestimmten Verfestigungsverhaltens des INTERATOM-Modells bedarf es der Wahl einer geeigneten Verfestigungsfunktion  $c(\kappa, T)$ . Zur Erfassung einer nichtlinearen Verfestigung des Materials wird in [Bru84] die Beziehung

$$c(\kappa, T) = c_0 + w(\kappa, T) - \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial g(\kappa, T)}{\partial \kappa} \quad (3.42)$$

mit der Funktion  $w(\kappa, T)$  als Abweichung von der linearen Verfestigung angegeben. Unter Zuhilfenahme des aus einaxialen Zugversuchen abgeleiteten *Tangentenmoduls*  $E_t$ , der wegen der vorausgesetzten Isotropie der Verfestigung  $\kappa$  auch für mehrdimensionale Spannungszustände Gültigkeit besitzt<sup>2</sup>, läßt sich für die Abweichung von der linearen Verfestigung

$$w(\kappa, T) = \frac{2}{3} \cdot \frac{E_t(\kappa, T)}{1 - \frac{E_t(\kappa, T)}{E(T)}} - c_0 \quad (3.43)$$

angeben. Aus (3.43) und (3.33) folgt die Funktion

$$h(\kappa, T) = \frac{2}{3} \cdot \frac{E_t(\kappa, T)}{1 - \frac{E_t(\kappa, T)}{E(T)}} \quad (3.44)$$

Für den von der isotropen Verfestigung  $\kappa$  abhängigen Radius  $g(\kappa, T)$  des durch die Fließbedingung aufgespannten Zylinders wird in [Bru84] die Funktion

$$g(\kappa, T) = \frac{2}{3} \cdot \sigma_F(T)^2 \cdot \left(1 + (c_2(T) - 1) \cdot \left(1 - e^{-c_1(T) \cdot \kappa}\right)\right) \quad (3.45)$$

<sup>2</sup>Der durch die Fließbedingung aufgespannte Zylinder im Hauptspannungsraum kann sich beim INTERATOM-Modell nur in alle Richtungen gleich aufweiten, d.h. eine Verfestigung in der einen Richtung bewirkt auch eine Verfestigung in alle anderen Richtungen, wohingegen die Verschiebung des Zylinders richtungsabhängig ist.

gewählt. Die Größe  $\sigma_F$  in (3.45) bezeichnet die aus einaxialen Zugversuchen zu bestimmende Fließgrenze des jungfräulichen Materials. Aus (3.42), (3.43) und (3.45) folgt die Funktion:

$$c(\kappa, T) = \frac{\frac{2}{3} \cdot E_t(\kappa, T)}{1 - \frac{E_t(\kappa, T)}{E(T)}} - \frac{1}{3} \cdot \sigma_F(T)^2 \cdot (c_2(T) - 1) \cdot c_1(T) \cdot e^{-c_1(T) \cdot \kappa} \quad (3.46)$$

Die Bestimmung des von der isotropen Verfestigung  $\kappa$  abhängenden Tangentenmoduls  $E_t$  erfolgt im INTERATOM-Modell über eine sogenannte *Strukturgedächtnisfunktion*  $\Delta(\kappa)$ , die in [Bru84] zur besseren Beschreibung einaxialer zyklischer Versuche eingeführt worden ist. Dabei stand das Bestreben im Vordergrund, den weichen Übergang der Spannungs-Dehnungskurve vom elastischen in den inelastischen Bereich im Modell abzubilden. Dazu dient die Funktion:

$$\Delta(\kappa) = p \cdot \int_{\kappa_{in}}^{\kappa} \sqrt{\frac{g(\kappa=0)}{g(\kappa)}} d\kappa + q \quad (3.47)$$

Das Integral in (3.47) läßt sich für eine gegebene Funktion  $g(\kappa)$  auswerten; so folgt aus (3.45) und (3.47):

$$\Delta(\kappa) = q - p \cdot \frac{1}{c_1 \cdot \sqrt{c_2}} \cdot \ln \left( \frac{\left( \sqrt{-(c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa} + c_2 - \sqrt{c_2}} \right) \cdot \left( \sqrt{-(c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa_{in}} + c_2 + \sqrt{c_2}} \right)}{\left( \sqrt{-(c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa_{in}} + c_2 - \sqrt{c_2}} \right) \cdot \left( \sqrt{-(c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa} + c_2 + \sqrt{c_2}} \right)} \right) \quad (3.48)$$

In (3.47) bezeichnet  $\kappa_{in}$  den Anfangswert der isotropen Verfestigungsvariable  $\kappa$  zu Beginn einer plastischen Deformation. Der Wert  $\kappa_{in}$  wird während einer plastischen Deformation nicht verändert. Ebenso werden die beiden Größen  $p$  und  $q$  während einer inelastischen Deformation konstant gehalten und am Ende einer elastischen Verformung neu bestimmt. Dies erfolgt durch die sogenannte *updating-procedure* (siehe [Bru84]):

$$p = \min \left\{ p_i ; \frac{1}{4} \cdot \left( \text{sign}(\beta) \cdot \sqrt{|\beta|} + 3 \right) \right\} \quad (3.49)$$

$$q = \frac{1}{2} \cdot q_i \cdot \left( \text{sign}(\beta) \cdot \sqrt{|\beta|} + 1 \right)$$

Die Größe  $\beta$  in (3.49) ist ein Maß für den Richtungswechsel der Belastung z.B. bei zyklischen Versuchen. Sie berechnet sich aus den Normalen an den durch die Fließbedingung aufgespannten Zylinder im Hauptspannungsraum:

$$\beta = \frac{\frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}}}{\left\| \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} \right\|_i} : \frac{\frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}}}{\left\| \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} \right\|_j}, \quad 0 \leq \beta \leq 1 \quad (3.50)$$

Der Ablauf der Berechnung ist nun folgender; man startet den Prozeß mit den Anfangswerten  $p = 1$  und  $q = 0$ . Am Ende der ersten inelastischen Verformung, die mit  $i$  gekennzeichnet wird (siehe (3.50)), gilt dann  $p_i = p$  und  $q_i = \Delta(\kappa)$ . Diese Werte werden gespeichert, bis wieder ein inelastischer Prozeß stattgefunden hat, dessen Endpunkt mit  $j$  gekennzeichnet wird (siehe (3.50)). Dann erfolgt ein *updating* gemäß (3.49) und (3.50). Bei weiterer Be- und Entlastung wiederholt sich der Vorgang entsprechend.

Aus der Strukturgedächtnisfunktion  $\Delta(\kappa)$  läßt sich eine *assoziierte Dehnung*  $\varepsilon(\Delta(\kappa))$  berechnen, die den aktuellen Verfestigungszustand des Materials widerspiegelt. Die Einführung der assoziierten Dehnung ermöglicht einen Vergleich einer beliebigen mehraxialen Belastung mit einaxialen Zugversuchen, welche aufgrund der Isotropie der Verfestigung  $\kappa$  repräsentativ für das gesamte Verfestigungsverhalten sind. Bei einaxialen, monotonen Zugversuchen gilt für die Strukturgedächtnisfunktion  $\Delta$  die Beziehung (siehe [Bru84]):

$$\Delta(\kappa) = \sigma_F \cdot \left( \varepsilon - \frac{1}{E} \cdot \sigma \right), \quad \sigma > \sigma_F \quad (3.51)$$

Setzt man voraus, daß die Spannungs-Dehnungsbeziehung invertierbar ist, dann ergibt sich aus (3.51) die assoziierte Dehnung  $\varepsilon(\Delta(\kappa))$ . Als Spannungs-Dehnungsbeziehung wird in [BP87]

$$\sigma(\varepsilon) = \frac{a \cdot \varepsilon^2 + b \cdot \varepsilon + c}{d + \varepsilon}, \quad \sigma > \sigma_F \quad (3.52)$$

angegeben. Aus (3.51) und (3.52) folgt:

$$\varepsilon(\Delta(\kappa)) = -\frac{\frac{b}{E} - d + \frac{\Delta(\kappa)}{\sigma_F}}{2 \cdot \left(\frac{a}{E} - 1\right)} + \sqrt{\frac{\left(\frac{b}{E} - d + \frac{\Delta(\kappa)}{\sigma_F}\right)^2}{4 \cdot \left(\frac{a}{E} - 1\right)^2} - \frac{\frac{c}{E} + \Delta(\kappa) \cdot \frac{d}{\sigma_F}}{\frac{a}{E} - 1}} \quad (3.53)$$

Das nichtlineare Verfestigungsverhalten läßt sich im monotonen Zugversuch durch die aktuelle Steigung der  $\sigma - \varepsilon$ -Kurve beschreiben. Der Tangentenmodul  $E_t$  stellt sich dann mit Hilfe von (3.52) als

$$E_t = E_t(\varepsilon(\Delta(\kappa))) = E_t(\kappa) = \frac{d\sigma(\varepsilon)}{d\varepsilon} = a + \frac{d \cdot (b - a \cdot d) - c}{(d + \varepsilon(\Delta(\kappa)))^2} \quad (3.54)$$

dar. Die vier noch unbestimmten Parameter  $a, b, c$  und  $d$  in (3.54) müssen entsprechend den obigen Annahmen aus monotonen, einaxialen Zugversuchen ermittelt werden. Um die Parameter mit meßbaren Größen zu verknüpfen, wird in [BP87] der folgende Weg beschritten; das asymptotisch linear-verfestigende Verhalten des Materials läßt sich durch die letzte Steigung  $E_{t\infty}$  der  $\sigma - \varepsilon$ -Kurve sowie den Ordinatenabschnitt  $c_3$  beschreiben (siehe Abb. 3.2). Daraus folgt:

$$E_{t\infty} = \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \frac{\sigma(\varepsilon)}{\varepsilon} \quad (3.55)$$

$$c_3 = \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} (\sigma(\varepsilon) - E_{t\infty} \cdot \varepsilon)$$



Weiterhin zu erfüllen ist die Stetigkeitsforderung an der Fließgrenze

$$\sigma \left( \frac{\sigma_F}{E} \right) = \sigma_F \quad (3.56)$$

und die Bedingung für die Anfangssteigung der Kurve (siehe Abb. 3.2)

$$E_t \left( \frac{\sigma_F}{E} \right) = E_{t_0} \quad (3.57)$$

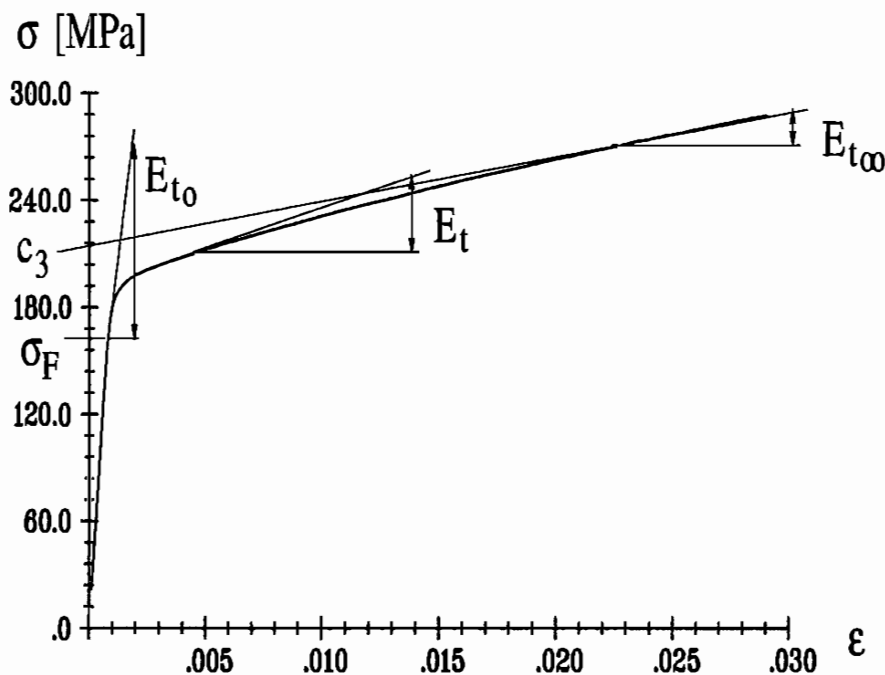


Abb. 3.2: Entwicklung des Tangentenmoduls  $E_t$  im monotonen Zugversuch

Aus diesen vier Bedingungen (3.55), (3.56) und (3.57) folgen die gesuchten vier Parameter  $a, b, c, d$  des gebrochen rationalen Ansatzes (3.54), ausgedrückt durch die meßbaren Größen  $E, \sigma_F, E_{t_0}, c_3, E_{t_{\infty}}$ :

$$\begin{aligned} a &= E_{t_{\infty}} \\ b &= c_3 \\ c &= \frac{\sigma_F}{E_{t_0}} \cdot \left( c_3 - \sigma_F \cdot \left( 1 - 2 \cdot \frac{E_{t_{\infty}}}{E} \right) \right) - \frac{\sigma_F}{E} \cdot \left( c_3 + \sigma_F \cdot \frac{E_{t_{\infty}}}{E} \right) \\ d &= \frac{1}{E_{t_0}} \cdot \left( c_3 - \sigma_F \cdot \left( 1 - 2 \cdot \frac{E_{t_{\infty}}}{E} \right) \right) - \frac{\sigma_F}{E} \end{aligned} \quad (3.58)$$

Im Hinblick auf die Ermittlung der noch unbestimmten Parameter  $c_1$  und  $c_2$  für den von der isotropen Verfestigung  $\kappa$  abhängigen Radius  $g(\kappa, T)$  (siehe (3.45)) des durch die Fließ-

bedingung aufgespannten Zylinders im Hauptspannungsraum wird das INTERATOM-Modell im folgenden auf einaxiale Versuche spezifiziert. Im einaxialen Fall gilt:

$$\underline{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \underline{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_q & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_q \end{pmatrix}; \underline{\xi} = \begin{pmatrix} \xi & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\xi & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\xi \end{pmatrix}; \quad (3.59)$$

$$\underline{\sigma}' = \begin{pmatrix} \frac{2}{3}\sigma & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3}\sigma & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3}\sigma \end{pmatrix}$$

Aus (3.59) wird deutlich, daß zu einem einaxialen Spannungszustand aufgrund der Querkontraktion  $\epsilon_q$  des Materials ein räumlicher Dehnungszustand gehört. Ebenso muß auch die kinematische Verfestigung räumlich sein, da gefordert wurde, daß  $\underline{\xi}$  genauso wie  $\underline{\sigma}'$  ein deviatorischer Tensor ist.

Die Komponenten des Stoffgesetzes in  $yy$ - bzw.  $zz$ -Richtung können dazu benutzt werden, die bisher noch offene Querkontraktion  $\epsilon_q$  des Materials zu bestimmen:

$$\dot{\epsilon}_q = -\dot{\epsilon} \cdot \left( \frac{1}{2} + \frac{E_t}{E} \cdot \left( \nu - \frac{1}{2} \right) \right) \quad (3.60)$$

In (3.60) erkennt man die beiden Grenzzustände der Dehnung im einaxialen Zugversuch; für  $E_t = E_{t0}$  gilt  $\dot{\epsilon}_q \approx -\nu \cdot \dot{\epsilon}$ , was der rein elastischen Dehnung entspricht, und für  $E_t = E_{t\infty}$  gilt  $\dot{\epsilon}_q \approx -\frac{1}{2} \cdot \dot{\epsilon}$ , was der rein plastischen Dehnung entspricht, d.h. für große plastische Formänderungen sind die elastischen Dehnungen vernachlässigbar. Unter Ausnutzung der Beziehung (3.60) erhält man die folgende einfache Form des INTERATOM-Modells für einaxiale Versuche (siehe [BP87]):

$$\begin{aligned} \dot{\sigma} &= E_t(\kappa) \cdot \dot{\epsilon} \\ \dot{\xi} &= c(\kappa) \cdot \left( 1 - \frac{E_t(\kappa)}{E} \right) \cdot \dot{\epsilon} \\ \dot{\kappa} &= \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \left( 1 - \frac{E_t(\kappa)}{E} \right) \cdot \dot{\epsilon} \end{aligned} \quad (3.61)$$

Die mit (3.61) zu erzielenden Ergebnisse sind in den folgenden Abbildungen dargestellt; dies ist zum einen die Simulation monotoner Zugversuche (Abb. 3.3), zum anderen die Simulation zyklischer Versuche (Abb. 3.4) um beliebige Mitteldehnungen. Zusätzlich ist in den Abb. 3.5 und Abb. 3.6 die Entwicklung der im INTERATOM-Modell verwendeten inneren Variablen  $\xi$  und  $\kappa$  bei zyklischen Versuchen dargestellt.

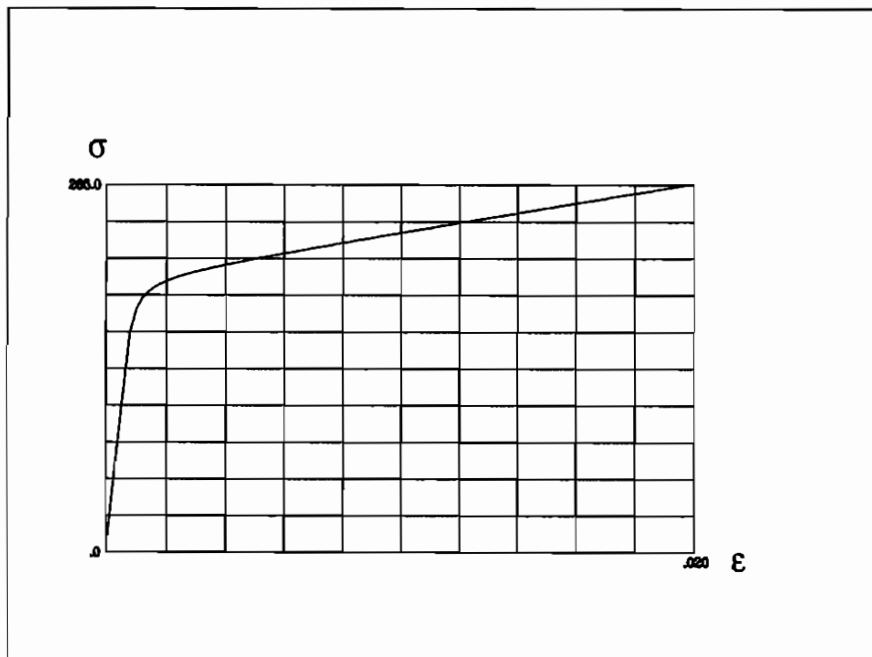


Abb. 3.3: Simulation eines monotonen Zugversuches mit dem INTERATOM-Modell

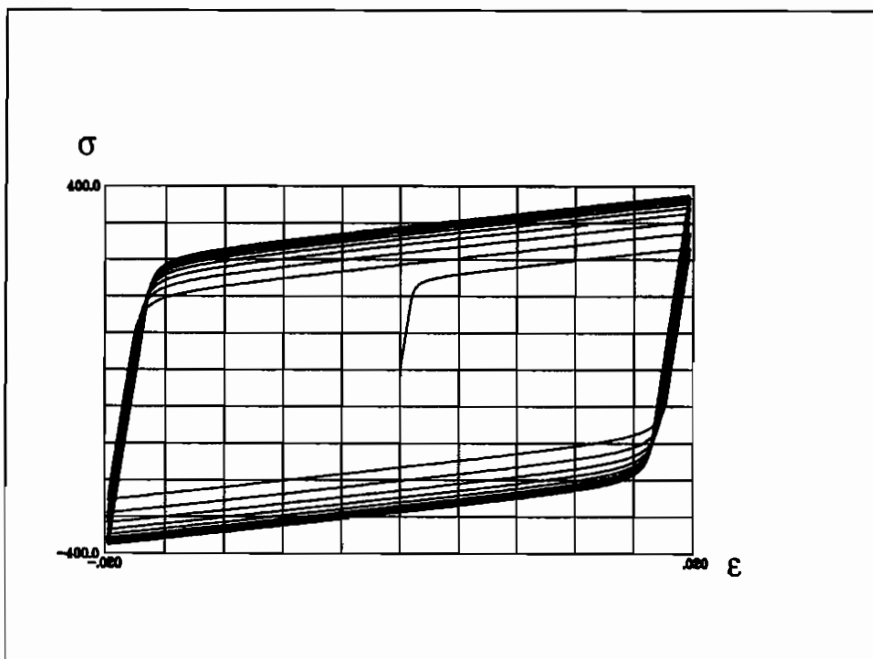


Abb. 3.4: Simulation eines zyklischen Versuches mit dem INTERATOM-Modell

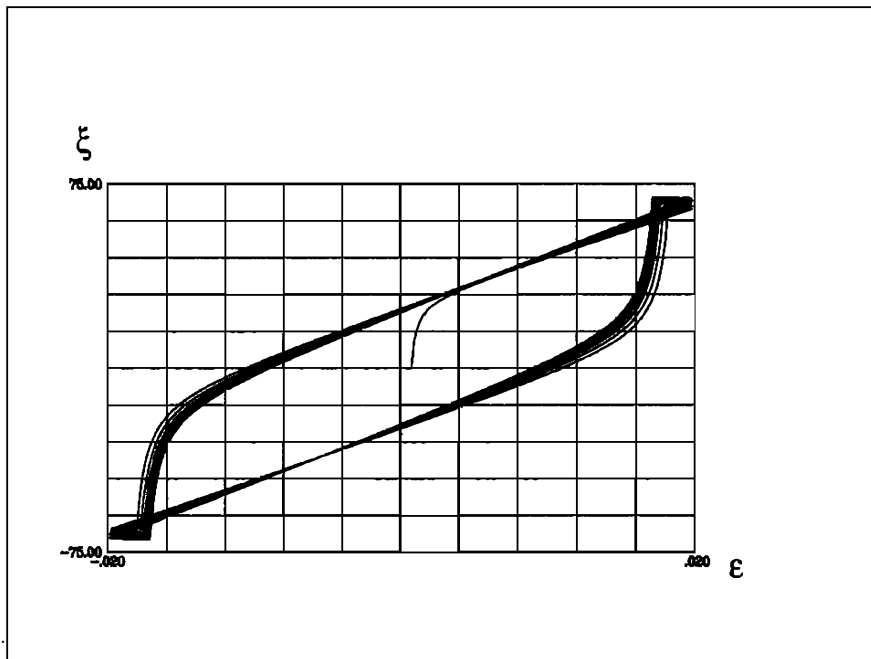


Abb. 3.5: Entwicklung der kinematischen Verfestigung bei der Simulation zyklischer Versuche

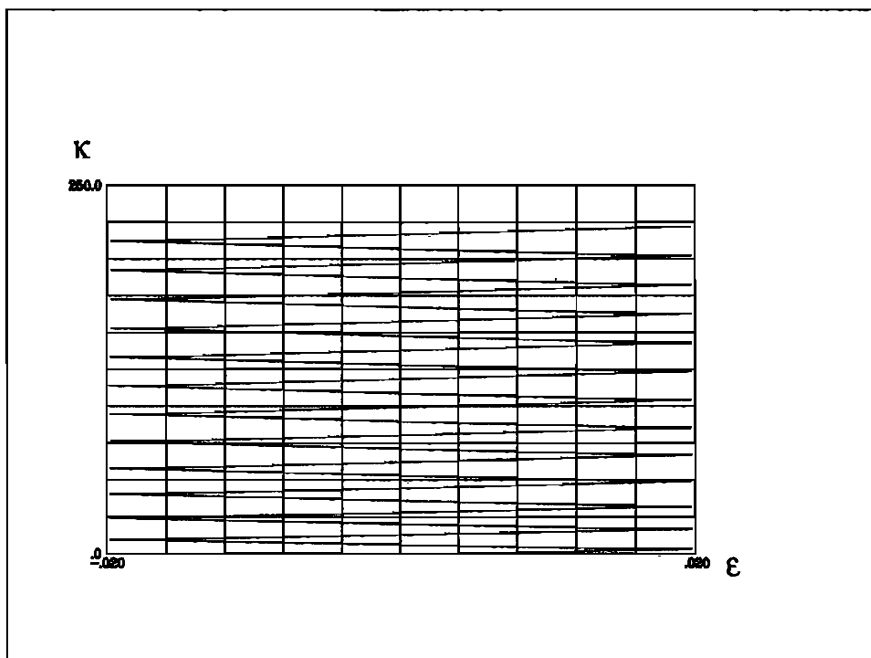


Abb. 3.6: Entwicklung der isotropen Verfestigung bei der Simulation zyklischer Versuche

### 3.3 Viskoplastisches Materialverhalten

In industriellen Anwendungen tritt das Problem der viskoplastischen Deformation metallischer Werkstoffe besonders da auf, wo instationäre Temperaturfelder die Lebensdauer von Maschinenteilen herabsetzen und dadurch die Standsicherheit der Maschine gefährden. So treten insbesondere bei Turbinenschaufeln im praktischen Betrieb Haltezeiten auf, die bei hohen Temperaturen infolge *Kriechens* die Lebensdauer der Schaufeln wesentlich herabsetzen (siehe [BK87]). Aus diesem Grunde ist es außerordentlich wichtig, die Kriecheigenschaften der eingesetzten Stähle hinreichend genau simulieren zu können, um konkrete Prognosen über die Lebensdauer solcher hochbelasteten Maschinenteile geben zu können.

In der Praxis werden dazu in erster Linie *isotrope Kriechgesetze* eingesetzt, wobei die Kriechspannungen aus einer Verallgemeinerung von *einachsigen Kriechgesetzen* ermittelt werden (siehe [Bat90]). Als isotropes Kriechgesetz wird z.B. in [MAR94] die Beziehung

$$\underline{\dot{\epsilon}}^{kriech} = \dot{\epsilon}_V^{kriech} \cdot \frac{\partial F}{\partial \underline{\sigma}} \quad (3.62)$$

verwendet. Das isotrope Kriechgesetz (3.62) basiert auf der *von Mises*-Fließbedingung:

$$F = \underline{\sigma}' : \underline{\sigma}' - g(\kappa, T) = 0 \quad (3.63)$$

Die Größe  $\epsilon_V^{kriech}$  in (3.62) bezeichnet eine aus dem allgemeinen, mehrachsigen Dehnungszustand geeignete zu berechnende *Vergleichsdehnung*.

Während des Kriechens nimmt die Kriechdehnungsrate ab (siehe Kapitel 2.1.4). Dieser Effekt wird *creep hardening* (Kriechverfestigung) genannt und kann eine Funktion der Zeit oder der akkumulierten Kriechdehnung sein. Dies führt zu unterschiedlichen Ansätzen zur Berechnung der Kriechdehnungsrate; geht man von der bei einaxialen Versuchen gewonnenen Erkenntnis aus, daß die Kriechdehnung eine Funktion des Spannungsniveaus und der Zeit ist, so kann man den einfachen Potenzansatz (*power law*)

$$\epsilon_V^{kriech} = a_0 \cdot \sigma_V^{a_1} \cdot t^{a_2} \quad (3.64)$$

machen. In (3.64) bezeichnet  $\sigma_V$  die *von Mises*-Vergleichsspannung (siehe z.B. [AA94]):

$$\sigma_V = \sqrt{\frac{3}{2} \cdot \underline{\sigma}' : \underline{\sigma}'} \quad (3.65)$$

Gleichung (3.64) kann dazu benutzt werden, die effektive Kriechzeit zu berechnen:

$$t = \left( \frac{\epsilon_V^{kriech}}{a_0 \cdot \sigma_V^{a_1}} \right)^{\frac{1}{a_2}} \quad (3.66)$$

Differenziert man  $\epsilon_V^{kriech}$  nach der Zeit, so erhält man mit (3.66) die *Vergleichsdehnungsrate*:

$$\dot{\epsilon}_V^{kriech} = a_0^{\frac{1}{a_2}} \cdot \sigma_V^{\frac{a_1}{a_2}} \cdot a_2 \cdot (\epsilon_V^{kriech})^{(1-\frac{1}{a_2})} \quad (3.67)$$

Verwendet man die *von Mises*-Vergleichsdehnung (siehe z.B. [AA94])

$$\epsilon_V^{kriech} = \sqrt{\frac{2}{3} \cdot \underline{\underline{\epsilon}}^{kriech} : \underline{\underline{\epsilon}}^{kriech}} \quad (3.68)$$

so erhält man aus (3.67) und (3.62) das isotrope Kriechgesetz:

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{kriech} = a_0^{\frac{1}{a_2}} \cdot \sigma_V^{\frac{a_1}{a_2}} \cdot a_2 \cdot \left( \sqrt{\frac{2}{3} \cdot \underline{\underline{\epsilon}}^{kriech} : \underline{\underline{\epsilon}}^{kriech}} \right)^{\left(1 - \frac{1}{a_2}\right)} \cdot \frac{\partial F}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \quad (3.69)$$

Im Hinblick auf die Implementierung des Gesetzes (3.69) in eine Finite-Elemente Formulierung (siehe Kapitel 7.1.3) werden das *Kriechdehnungsinkrement*

$$\Delta \underline{\underline{\epsilon}}^{kriech} = \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{kriech} \cdot \Delta t \quad (3.70)$$

und das *Spannungsinkrement*

$$\Delta \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} \cdot (\Delta \underline{\underline{\epsilon}} - \Delta \underline{\underline{\epsilon}}^{kriech}) \quad (3.71)$$

mit der *inkrementellen Elastizitätsmatrix*  $\underline{\underline{C}}$  benötigt.

Ein anderer als der bisher beschriebene Weg zur Erfassung viskoplastischen Materialverhaltens wird von *Bruhns et al.* mit dem INTERATOM-Modell besprochen; der Grundgedanke der Modellierung besteht darin, nicht mehr von einem reinen Verfestigungsgesetz und einem separaten Kriechgesetz auszugehen, sondern stattdessen beide praktisch relevanten Anwendungen in einem Stoffgesetz zu vereinigen. Aus diesem Grund wird das INTERATOM-Modell als *unified model* oder *vereinheitlichtes Werkstoffgesetz* bezeichnet (siehe [Rot91]).

Zur Realisation dieser vereinheitlichten Modellierung dient im INTERATOM-Modell das *Überspannungskonzept* von *Perzyna* (siehe [Rot91]); dieses Konzept geht von Spannungszuständen aus, die über den von der verwendeten Fließbedingung aufgespannten Zylinder im Hauptspannungsraum (siehe Kapitel 3.2) hinausgehen, d.h. Spannungen dürfen größer sein als von der Fließbedingung vorgegeben. Um dies im Modell zu erfassen, bedarf es einer Erweiterung der Nomenklatur gegenüber Kapitel 3.2; im folgenden werden Spannungszustände, die wie bisher die Fließbedingung erfüllen, zur Unterscheidung mit  $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$  bezeichnet. Die aktuellen Spannungen, die auch jenseits der Fließfläche liegen dürfen, behalten ihre Bezeichnung  $\underline{\underline{\sigma}}$ . Die Spannungen  $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$  werden auch als *statische Gleichgewichtsspannungen* bezeichnet (siehe z.B. [Tsa96]).

Die folgenden Ausführungen betrachten die Erweiterungen des INTERATOM-Modells in der Fassung des Kapitels 3.2 zur Beschreibung viskoplastischer Prozesse. Beibehalten wird die Trennung von reversiblen und irreversiblen Prozessen und das hypoelastische Stoffgesetz:

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} = \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_r + \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_i \quad (3.72)$$

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_r = \frac{1}{2 \cdot G} \cdot \left( \underline{\underline{\dot{\sigma}}} - \frac{\nu}{1 + \nu} \cdot Sp(\underline{\underline{\dot{\sigma}}}) \cdot \underline{\underline{I}} \right)$$

Wie vorher erfolgt die Erfassung der Belastungsgeschichte durch 2 interne Variablen  $\kappa$  und  $\underline{\xi}$ :

$$\begin{aligned}\dot{\underline{\xi}} &= c(\kappa, T) \cdot \dot{\underline{\epsilon}}_i \\ \dot{\kappa} &= (\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) : \dot{\underline{\epsilon}}_i\end{aligned}\quad (3.73)$$

Das Überspannungskonzept von Perzyna setzt bei der Formulierung der inelastischen Verzerrungsrate an; es wird zwar weiterhin die *Normalenregel* postuliert, allerdings tritt eine neue Schalterfunktion hinzu (siehe [Rot91]):

$$\dot{\underline{\epsilon}}_i = \ll \Phi(\Lambda, T) \gg \cdot \frac{\underline{\sigma}' - \underline{\xi}}{\sqrt{(\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) : (\underline{\sigma}' - \underline{\xi})}} \quad (3.74)$$

Die inelastische Verzerrungsrate  $\dot{\underline{\epsilon}}_i$  nimmt nur Werte an, wenn die aktuellen Spannungen  $\underline{\sigma}$  die Belastungsbedingung *LC* erfüllen und die Fließbedingung *F* übererfüllen:

$$\ll \Phi(\Lambda, T) \gg = \begin{cases} \Phi(\Lambda, T) & , \text{ wenn } F > 0 \text{ und } LC > 0 \\ 0 & , \text{ sonst} \end{cases} \quad (3.75)$$

Als Konsequenz folgt aus (3.75), daß *quasistatische Zustände* mit dieser Formulierung nicht mehr erfaßt werden können, d.h. eine verschwindende Überspannung führt zu einem rein elastischen Stoffgesetz. Zur Behebung dieses in der praktischen Anwendung nicht sehr bedeutsamen Mankos dienen einige später erläuterte Erweiterungen des Modells.

Neu hinzugekommen ist in (3.74) die sogenannte *Überspannungsfunktion*  $\Phi(\Lambda, T)$ , für die in [BP87] der Ansatz

$$\Phi(\Lambda, T) = 2 \cdot \gamma(T) \cdot \frac{\Lambda}{E(T)} \cdot \left(1 + \frac{\Lambda}{c_4(T)}\right)^{c_5(T)} \quad (3.76)$$

angegeben wird. Die Funktion (3.76) quantifiziert den Einfluß der Übererfüllung der Fließbedingung auf die inelastische Verzerrungsrate  $\dot{\underline{\epsilon}}_i$ . Als berechenbares Maß für die Größe der Abweichung des aktuellen Spannungspunktes  $\underline{\sigma}$  von dem durch die Fließbedingung aufgespannten Zylinder dient in (3.76) die *verallgemeinerte Überspannung*  $\Lambda$ :

$$\Lambda = \sqrt{f} - \sqrt{g} \quad (3.77)$$

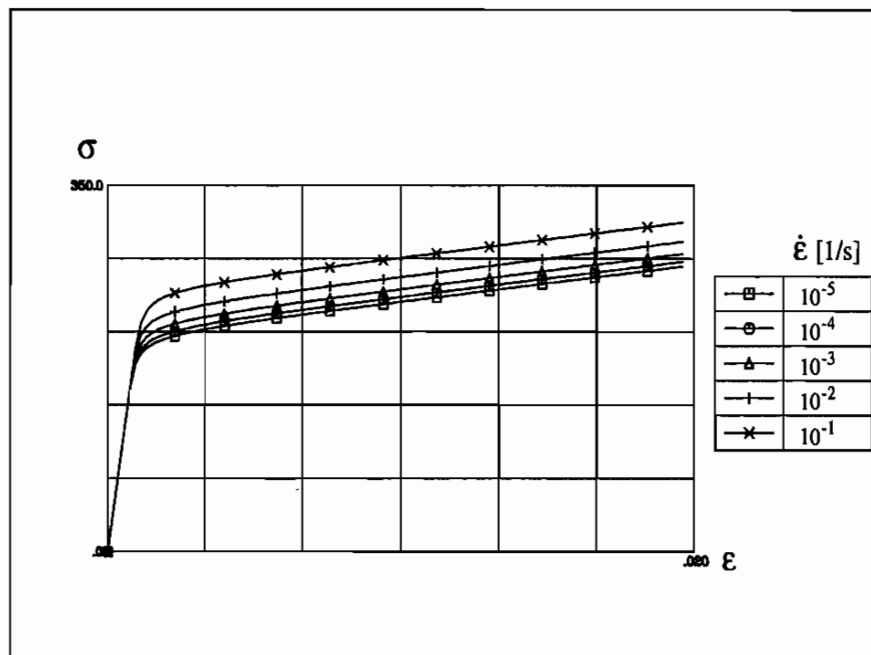
Das inverse Stoffgesetz nimmt die einfache Form an (siehe [BP87]):

$$\underline{\sigma} = 2 \cdot G \cdot \left( \dot{\underline{\epsilon}} + \frac{\nu}{1 - 2 \cdot \nu} \cdot Sp(\dot{\underline{\epsilon}}) \cdot \underline{I} - \ll \Phi(\Lambda, T) \gg \cdot \frac{\underline{\sigma}' - \underline{\xi}}{\sqrt{(\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) : (\underline{\sigma}' - \underline{\xi})}} \right) \quad (3.78)$$

Im Hinblick auf die spätere Bestimmung der drei Materialparameter  $\gamma$ ,  $c_4$  und  $c_5$  in (3.76) wird das INTERATOM-Modell (3.78) in [BP87] auf einaxiale Versuche spezifiziert:

$$\begin{aligned}\dot{\sigma} &= E \cdot \left( \dot{\varepsilon} - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Phi(\Lambda, T) \right) \\ \dot{\xi} &= c(\kappa, T) \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Phi(\Lambda, T) \\ \dot{\kappa} &= \sqrt{\frac{3}{2} \cdot g(\kappa, T)} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Phi(\Lambda, T) \\ \Lambda &= \sqrt{\left( \frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi \right) \cdot \left( \sigma - \frac{3}{2} \cdot \xi \right)} - \sqrt{g(\kappa, T)}\end{aligned}\quad (3.79)$$

Mit dem Stoffgesetz (3.79) läßt sich vor allen Dingen der Einfluß der Dehngeschwindigkeit bei monotonen, dehnungsgesteuerten Zugversuchen simulieren:



**Abb. 3.7:** Einfluß der Dehngeschwindigkeit bei monotonen, dehnungsgesteuerten Zugversuchen

Ebenso lassen sich mit (3.79) auch zyklische dehnungsgesteuerte Versuche (siehe Kapitel 3.2) beschreiben.

Das vorher erwähnte Manko des INTERATOM-Modells in der Form (3.78), daß der quasistatische Grenzfall nicht mit im Modell enthalten ist, führte in den Arbeiten von *Rott* [Rot91] und *Westerhoff* [Wes95] zu den im folgenden erläuterten Erweiterungen des INTERATOM-Modells. Der Grundgedanke bei der Erweiterung des Modells war die Trennung von plastischen und viskosen Effekten; es sollte zwar nach wie vor ein Modell zur



Beschreibung sämtlicher viskoplastischer Phänomene dienen, jedoch sollten innerhalb des Modells Grenzübergänge möglich sein, um das oben erwähnte Manko zu beseitigen. Dies führte zu der Aufspaltung der Verzerrungsrate in einen elastischen Anteil  $\dot{\underline{\epsilon}}_r$ , einen plastischen Anteil  $\dot{\underline{\epsilon}}_p$  und einen rein viskosen Anteil  $\dot{\underline{\epsilon}}_v$ , wobei für den elastischen Anteil  $\dot{\underline{\epsilon}}_r$  nach wie vor das hypoelastische Stoffgesetz Gültigkeit besitzt:

$$\dot{\underline{\epsilon}} = \dot{\underline{\epsilon}}_r + \dot{\underline{\epsilon}}_i = \dot{\underline{\epsilon}}_r + \dot{\underline{\epsilon}}_p + \dot{\underline{\epsilon}}_v \quad (3.80)$$

$$\dot{\underline{\epsilon}}_r = \frac{1}{2 \cdot G} \cdot \left( \dot{\underline{\sigma}} - \frac{\nu}{1 + \nu} \cdot Sp(\dot{\underline{\sigma}}) \cdot \underline{\mathbf{I}} \right)$$

Durch die Aufspaltung (3.80) ist das INTERATOM-Modell nicht mehr im strengen Sinne als *unified* (vereinheitlicht) zu bezeichnen, es sei jedoch betont, daß es sich nach wie vor um ein einziges Gesetz handelt. Für den viskosen Anteil der Verzerrungsrate gilt wie vorher das Überspannungskonzept von *Perzyna*:

$$\dot{\underline{\epsilon}}_v = \ll \Phi(\Lambda, T) \gg \cdot \frac{\underline{\sigma}' - \underline{\xi}}{\sqrt{(\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) : (\underline{\sigma}' - \underline{\xi})}} \quad (3.81)$$

Als Überspannungsfunktion wählt *Rott* in [Rot91] eine etwas modifizierte Funktion:

$$\Phi(\Lambda, T) = e^{d_1(T) \cdot \left(\frac{\Lambda}{\tilde{\Lambda}}\right)^{d_2(T)}} - 1 \quad (3.82)$$

Die Größe  $\tilde{\Lambda}$  in (3.82) dient dazu, die Überspannung  $\Lambda$  dimensionslos zu machen und damit die Potenzbildung zu ermöglichen.

Ein wesentlicher Unterschied ergibt sich im erweiterten Modell allerdings für den Fall, daß die viskose Rate verschwindet, wenn keine Überspannung vorhanden ist, also der quasi-statische Grenzfall eintritt. In diesem Fall beinhaltet das INTERATOM-Modell immer noch ein Fließgesetz, welches sich durch die Normalenregel

$$\dot{\underline{\epsilon}}_p = \frac{\dot{\underline{\sigma}} : \frac{\underline{\sigma}' - \underline{\xi}}{\sqrt{(\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) : (\underline{\sigma}' - \underline{\xi})}}}{\frac{\frac{2}{3} \cdot E_t}{1 - \frac{E_t}{E}}} \cdot \frac{\underline{\sigma}' - \underline{\xi}}{\sqrt{(\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) : (\underline{\sigma}' - \underline{\xi})}} \quad (3.83)$$

ausdrücken läßt. Da die inelastische Verzerrungsrate (3.83) aber von der Rate der statischen Gleichgewichtsspannung  $\underline{\sigma}$ , also der Spannung auf der Fließfläche, abhängt, muß das INTERATOM-Modell um eine Entwicklungsgleichung für  $\underline{\sigma}$  erweitert werden. In [Rot91] wird die Beziehung

$$\dot{\underline{\sigma}}' = \langle A(\Lambda, \nu, T) \cdot \dot{\underline{\sigma}}' + B(\underline{\sigma}', \underline{\xi}, T) \cdot \langle \underline{\sigma}' - \underline{\sigma}' \rangle \rangle \quad (3.84)$$

mit zwei noch näher zu bestimmenden Materialfunktionen  $A(\Lambda, \nu, T)$  und  $B(\underline{\sigma}', \underline{\xi}, T)$  angegeben. Für das Fließgesetz (3.84) gilt die ursprüngliche Schalterfunktion, daß Fließ-

und Belastungsbedingung von der statischen Gleichgewichtsspannung erfüllt sein müssen. Im Fließgesetz (3.84) erfolgt die Erfassung der Belastungsgeschichte wie vorher durch 2 interne Variablen  $\kappa$  und  $\underline{\xi}$ :

$$\dot{\underline{\xi}} = c(\kappa, T) \cdot \dot{\underline{\epsilon}}_p \quad (3.85)$$

$$\dot{\kappa} = (\bar{\underline{\sigma}}' - \underline{\xi}) : \dot{\underline{\epsilon}}_p$$

Für die Materialfunktion  $A(\Lambda, v, T)$ , die wesentlich für die Entwicklung der statischen Gleichgewichtsspannung  $\bar{\underline{\sigma}}$  verantwortlich ist, wählt *Rott* in [Rot91] die Beziehung:

$$\begin{aligned} A(\Lambda, v, T) &= a_1(\Lambda, T) \cdot a_2(v, T) \\ a_1(\Lambda, T) &= \frac{1 - a_{11}(T)}{\tanh(a_{13}(T)) - 1} \cdot (\tanh(a_{12}(T) \cdot \Lambda + a_{13}(T)) - 1) + a_{11}(T) \\ a_2(v, T) &= a_{21}(T) \cdot e^{a_{22}(T) \cdot (v - v_0)^{a_{23}(T)}} + (1 - a_{21}(T)) \cdot e^{a_{24}(T) \cdot (v - v_0)^{a_{25}(T)}} \end{aligned} \quad (3.86)$$

In (3.86) ist zu der vorher erläuterten verallgemeinerten Überspannung  $\Lambda$  ein weiteres skalares Maß  $v$  hinzugetreten, welches auch bei verschwindender Überspannung ( $a_1(\Lambda = 0, T) = 1$ ) noch einen Beitrag zur Funktion  $A$  liefert. In [Rot91] dient  $v$  als Maß für die Prozeßgeschwindigkeit bei beliebigen mehraxialen Belastungen des Materials. Als geeignete Vergleichsgröße wird die euklidische Norm der Rate der Deviatorspannungen gewählt:

$$v = \|\dot{\underline{\sigma}}'\|_2 := \sqrt{\sum_{i,k=1}^3 |\dot{\sigma}'_{ik}|^2} \quad (3.87)$$

Die Größe  $v_0 > 0$  in (3.86) kennzeichnet den quasistatischen Grenzfall der Belastung, bei dem die Last so langsam aufgebracht wird, daß die viskosen Effekte verschwinden. Die zweite neu hinzugekommene Materialfunktion  $B(\underline{\sigma}', \underline{\xi}, T)$  dient im INTERATOM-Modell vor allen Dingen zur realistischen Wiedergabe von Kriechprozessen. Da, wie vorher erläutert, experimentelle Kriechkurven in erster Linie vom Spannungsniveau abhängen, wählt *Rott* in [Rot91] einen Ansatz in den effektiven Spannungen  $\sqrt{(\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) : (\underline{\sigma}' - \underline{\xi})}$ :

$$B(\underline{\sigma}', \underline{\xi}, T) = d_3(\underline{\sigma}', T) \cdot \tanh\left(d_4(\underline{\sigma}', T) \cdot \sqrt{(\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) : (\underline{\sigma}' - \underline{\xi})} + d_5(\underline{\sigma}', T)\right) + d_6(\underline{\sigma}', T) \quad (3.88)$$

Die Koeffizienten  $d_3, d_4, d_5$  und  $d_6$  in (3.88) sind von der Deviatorspannung abhängig:

$$\begin{aligned} d_3 &= p_{31} + p_{32} \cdot \|\underline{\sigma}'\|_2 + p_{33} \cdot \|\underline{\sigma}'\|_2^2 \\ d_4 &= p_{41} + p_{42} \cdot \|\underline{\sigma}'\|_2 + p_{43} \cdot \|\underline{\sigma}'\|_2^2 \\ d_5 &= p_{51} + p_{52} \cdot \|\underline{\sigma}'\|_2 + p_{53} \cdot \|\underline{\sigma}'\|_2^2 \\ d_6 &= p_{61} + p_{62} \cdot \|\underline{\sigma}'\|_2 + p_{63} \cdot \|\underline{\sigma}'\|_2^2 \end{aligned} \quad (3.89)$$

Die tanh-Funktion in (3.88) dient als 'Schalter'<sup>3</sup>, so daß der Einfluß der Materialfunktion  $B$  auf die Entwicklung der quasistatischen Gleichgewichtsspannung vom Wert des

<sup>3</sup>Eine tanh-Funktion erzeugt einen stetigen Übergang, im Gegensatz zu den vorher eingeführten Schalterbedingungen, s.o.

Argumentes der Funktion abhängt, also der aktuellen Verfestigung und der Norm der Deviatorspannung. Durch die richtige Einstellung der Materialparameter ist dieser Einfluß zu steuern. Im Hinblick auf die Identifikation der 22 Materialparameter  $a_{11}$ ,  $a_{12}$ ,  $a_{13}$ ,  $a_{21}$ ,  $a_{22}$ ,  $a_{23}$ ,  $a_{24}$ ,  $a_{25}$ ,  $d_1$ ,  $d_2$ ,  $p_{31}$ ,  $p_{32}$ ,  $p_{33}$ ,  $p_{41}$ ,  $p_{42}$ ,  $p_{43}$ ,  $p_{51}$ ,  $p_{52}$ ,  $p_{53}$ ,  $p_{61}$ ,  $p_{62}$  und  $p_{63}$  des erweiterten INTERATOM-Modells erfolgt die Spezifikation der Modellgleichungen auf einaxiale Versuche; im viskoplastischen Fall gilt:

$$\begin{aligned}
 \dot{\sigma} &= \frac{E}{1 + \left\langle \frac{A(\Lambda, v) \cdot (E - E_t(\kappa))}{E_t(\kappa)} \right\rangle} \cdot \left( \dot{\epsilon} - \ll \frac{B(\sigma, \xi) \cdot \left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{E_t(\kappa)} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \gg \right. \\
 &\quad \left. - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \ll \Phi(\Lambda) \gg \cdot \text{sign} \left( \frac{2}{3} \cdot \bar{\sigma} - \xi \right) \right) \\
 \dot{\xi} &= c(\kappa) \cdot \left( 1 - \frac{E_t(\kappa)}{E} \right) \cdot \frac{\dot{\bar{\sigma}}}{E_t(\kappa)} \\
 \dot{\kappa} &= \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \left( 1 - \frac{E_t(\kappa)}{E} \right) \cdot \frac{\dot{\bar{\sigma}}}{E_t(\kappa)} \\
 \dot{\bar{\sigma}} &= \langle A(\Lambda, v) \cdot \dot{\sigma} \rangle + \ll B(\sigma, \xi) \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \gg
 \end{aligned} \tag{3.90}$$

Entsprechend ergeben sich die Modellgleichungen im quasistatischen Grenzfall:

$$\begin{aligned}
 \dot{\sigma} &= \frac{E}{1 + \left\langle \frac{A(v) \cdot (E - E_t(\kappa))}{E_t(\kappa)} \right\rangle} \cdot \dot{\epsilon} \\
 \dot{\xi} &= c(\kappa) \cdot \left( 1 - \frac{E_t(\kappa)}{E} \right) \cdot \frac{\dot{\bar{\sigma}}}{E_t(\kappa)} \\
 \dot{\kappa} &= \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \left( 1 - \frac{E_t(\kappa)}{E} \right) \cdot \frac{\dot{\bar{\sigma}}}{E_t(\kappa)} \\
 \dot{\bar{\sigma}} &= \langle A(v) \cdot \dot{\sigma} \rangle
 \end{aligned} \tag{3.91}$$

Wie vorher läßt sich auch mit dem erweiterten INTERATOM-Modell (3.90) der Einfluß der Dehngeschwindigkeit bei monotonen, dehnungsgesteuerten Zugversuchen erfassen:

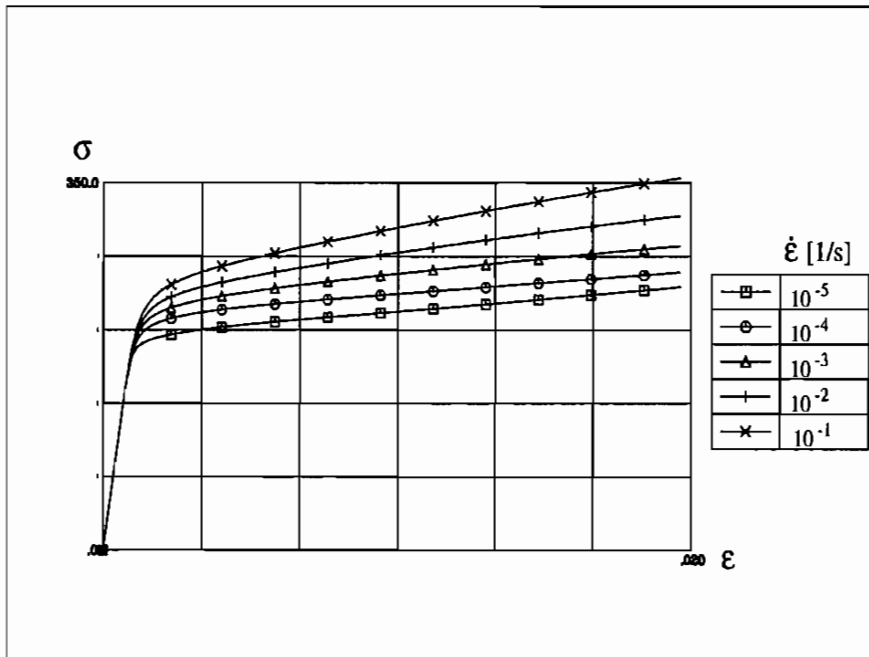


Abb. 3.8: Einfluß der Dehngeschwindigkeit bei monotonen, dehnungsgesteuerten Zugversuchen

### 3.3.1 Beschreibung von Kriechvorgängen

Die Beschreibung von Kriechvorgängen mit dem INTERATOM-Modell wird im folgenden anhand einaxialer Kriechversuche erläutert, da sich die im Modell verwendeten Mechanismen dadurch besser beleuchten lassen. Im einaxialen Fall wird die Spannung  $\sigma$  über die Zeit konstant gehalten, wodurch die Spannungsgeschwindigkeit  $\dot{\sigma}$  verschwindet. In diesem Fall gelten die konstitutiven Gleichungen (vergleiche (3.79)):

$$\begin{aligned}
 \dot{\epsilon} &= \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Phi(\Lambda, T) \\
 \dot{\xi} &= c(\kappa, T) \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Phi(\Lambda, T) \\
 \dot{\kappa} &= \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa, T) \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Phi(\Lambda, T) \\
 \Lambda &= \sqrt{\left(\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi\right) \cdot \left(\sigma - \frac{3}{2} \cdot \xi\right) - g(\kappa, T)}
 \end{aligned} \tag{3.92}$$

Zur Erfassung des realen Kriechverhaltens des Materials, nämlich der vorher erwähnten Kriechverfestigung, die eine Abnahme der Kriechdehnungsrate während des Kriechens bewirkt, dient im Modell (3.92) der *Abbau der Überspannung*  $\Lambda$ . Für kleiner werdende Werte von  $\Lambda$  sinkt auch der Wert der Überspannungsfunktion  $\Phi$  und damit die Kriechdehnungs-

rate  $\dot{\epsilon}$ . Da die Spannung  $\sigma$  beim einaxialen Kriechen konstant bleibt, kann dieser Abbau nur über das Anwachsen der inneren Variable  $\xi$  erfolgen (siehe Abb. 3.9):

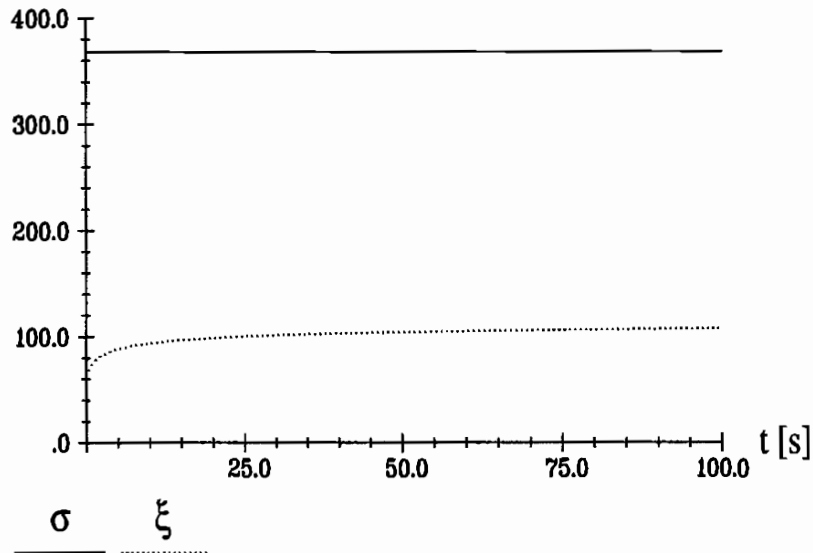


Abb. 3.9: Anwachsen der inneren Variable  $\xi$  bei Kriechversuchen

Stellt man sich wiederum den durch die Fließbedingung aufgespannten Zylinder im Hauptspannungsraum vor, so bedeutet das in Abb. 3.9 dargestellte Anwachsen der inneren Variable  $\xi$ , daß bei Kriechversuchen der Zylinder an den jenseits von ihm liegenden aktuellen Spannungspunkt  $\sigma$  durch Verschiebung seines Mittelpunktes heranbewegt wird, und zwar solange, bis der Spannungspunkt wieder die Fließbedingung erfüllt. Das auf diese Weise zu erzielende Kriechverhalten des Modells ist in der folgenden Abbildung dargestellt:

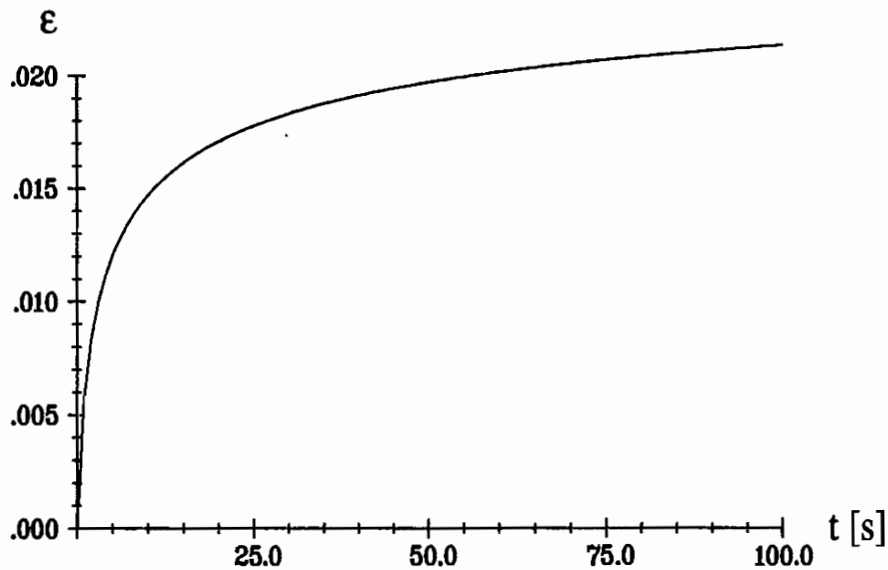


Abb. 3.10: Simulation von Kriechversuchen mit dem INTERATOM-Modell

Ein anderer Weg zur Erfassung des Kriechverhaltens metallischer Werkstoffe wird im erweiterten INTERATOM-Modell besprochen; im einaxialen Fall lauten die Modellgleichungen zur Beschreibung des Kriechens (vergleiche (3.90)):

$$\begin{aligned}
 \dot{\varepsilon} &= \ll \frac{B(\sigma, \xi) \cdot \left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right) \cdot (\sigma - \bar{\sigma})}{E_t(\kappa)} \gg + \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \ll \Phi(\Lambda) \gg \cdot \text{sign} \left( \frac{2}{3} \cdot \bar{\sigma} - \xi \right) \\
 \dot{\xi} &= c(\kappa) \cdot \left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right) \cdot \frac{\dot{\bar{\sigma}}}{E_t(\kappa)} \\
 \dot{\kappa} &= \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right) \cdot \frac{\dot{\bar{\sigma}}}{E_t(\kappa)} \\
 \dot{\bar{\sigma}} &= \ll B(\sigma, \xi) \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \gg
 \end{aligned} \tag{3.93}$$

Der wesentliche Mechanismus zur Erfassung der Kriechverfestigung im INTERATOM-Modell in der Form (3.93) ist das Anwachsen der statischen Gleichgewichtsspannung  $\bar{\sigma}$ , bis die aktuelle Spannung  $\sigma$  erreicht ist. Ebenso wächst aber auch die innere Variable  $\xi$  weiter an, so daß im erweiterten INTERATOM-Modell die Fließfläche sowohl im Hauptspannungsraum verschoben, als auch etwas vergrößert wird, da ja eine weitere Verfestigung stattfindet. Als Resultat folgt wiederum, daß das Kriechen solange erfolgt, bis die Überspannung  $\Lambda$  im Modell abgebaut ist (siehe Abb. 3.11).

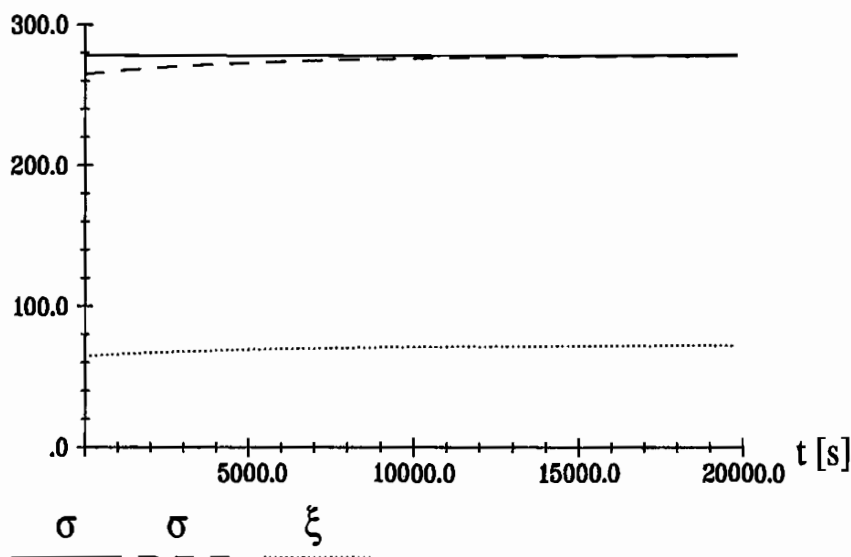


Abb. 3.11: Anwachsen der statischen Gleichgewichtsspannung  $\bar{\sigma}$  und der inneren Variable  $\xi$  bei Kriechversuchen

Die mit den oben beschriebenen Mechanismen zu erzielenden Ergebnisse sind in der folgenden Abbildung dargestellt:

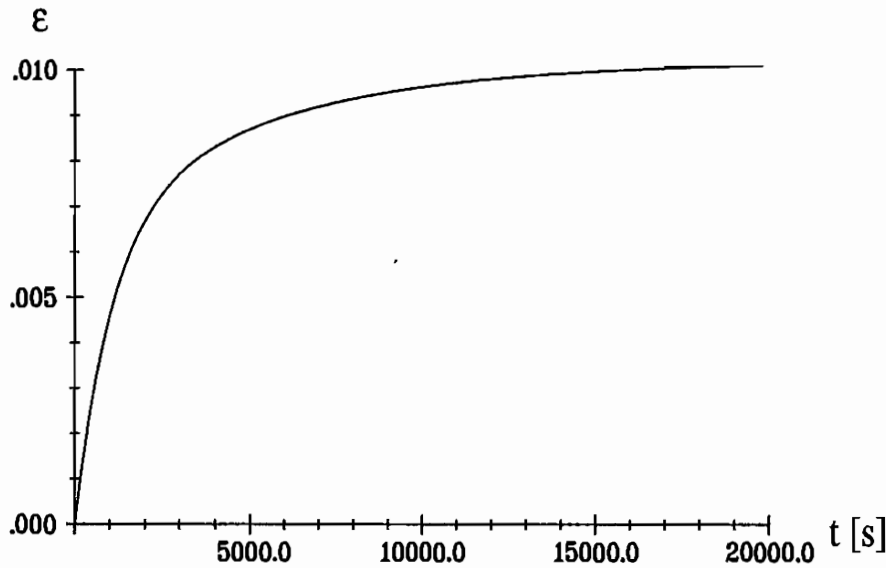


Abb. 3.12: Simulation von Kriechversuchen mit dem erweiterten INTERATOM-Modell

### 3.3.2 Beschreibung von Relaxationsvorgängen

Ebenso wie bei der Simulation der Kriechversuche in Abschnitt 3.3.1 beschränkt sich der folgende Abschnitt auf die Erläuterung der im INTERATOM-Modell enthaltenen Mechanismen anhand einaxialer Versuche. Im einaxialen Fall wird die Dehnung  $\varepsilon$  über die Zeit konstant gehalten, wodurch die Dehnungsgeschwindigkeit  $\dot{\varepsilon}$  verschwindet. In diesem Fall gelten die konstitutiven Gleichungen (vergleiche (3.79)):

$$\begin{aligned}
 \dot{\sigma} &= -E \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Phi(\Lambda, T) \\
 \dot{\xi} &= c(\kappa, T) \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Phi(\Lambda, T) \\
 \dot{\kappa} &= \sqrt{\frac{3}{2} \cdot g(\kappa, T)} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Phi(\Lambda, T) \\
 \Lambda &= \sqrt{\left(\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi\right) \cdot \left(\sigma - \frac{3}{2} \cdot \xi\right) - g(\kappa, T)}
 \end{aligned} \tag{3.94}$$

Zur Erfassung des realen Relaxationsverhaltens des Materials dient im Modell (3.94), wie vorher bei der Simulation von Kriechversuchen, der Abbau der Überspannung  $\Lambda$ . Der grundlegende Unterschied zu den Kriechkurven ist aber die Konstanz der inneren Variable  $\xi$  bei Relaxationsversuchen. Der Abbau der Überspannung findet dadurch statt, daß der aktuelle Spannungspunkt  $\sigma$  bis zur Fließgrenze abfällt (siehe Abb. 3.13):

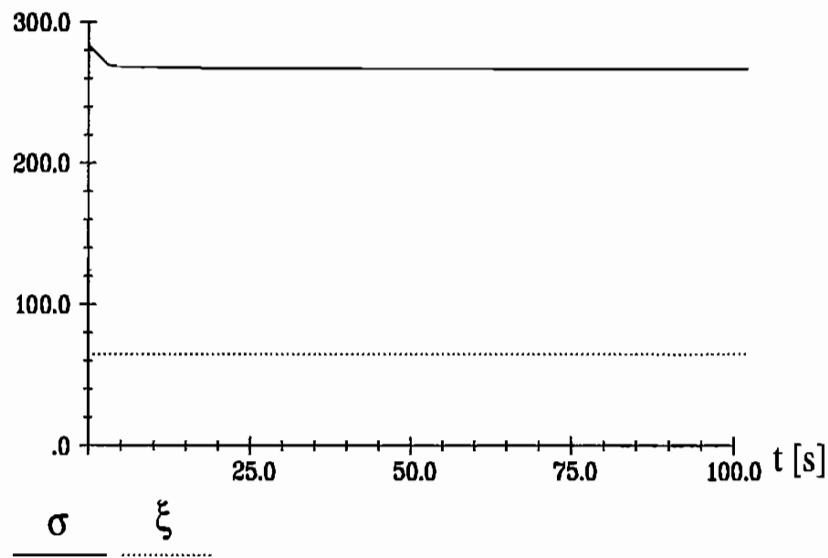


Abb. 3.13: Konstanz der inneren Variable  $\xi$  bei Relaxationsversuchen

Stellt man sich wiederum den von der Fließbedingung aufgespannten Zylinder im Hauptspannungsraum vor, so bedeutet das in Abb. 3.13 dargestellte Verhalten, daß sich der aktuelle Spannungspunkt  $\sigma$  bei der Simulation der Relaxation auf den Zylinder zu bewegt, bis die Fließbedingung erfüllt ist. Das sich daraus ergebende Relaxationsverhalten des Modells ist in der folgenden Abbildung dargestellt:

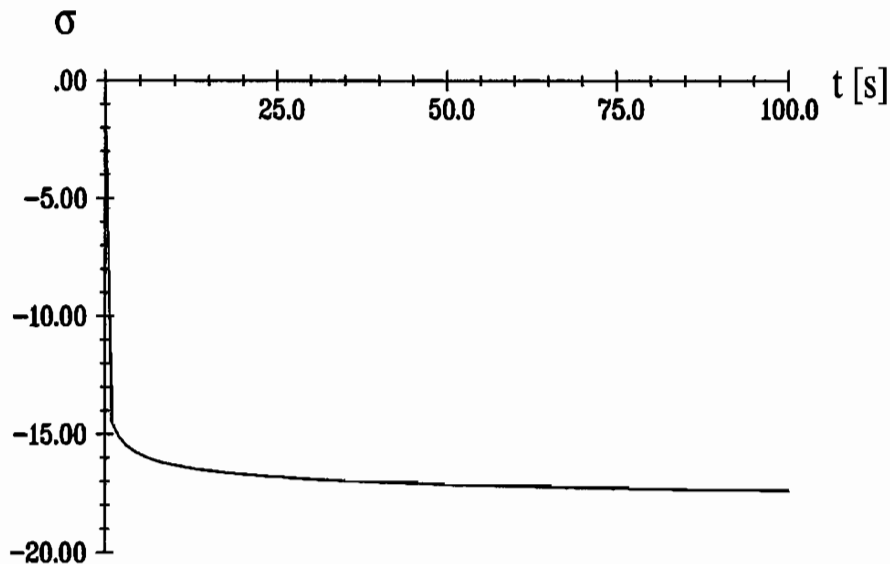


Abb. 3.14: Simulation von Relaxationsversuchen mit dem INTERATOM-Modell

Das erweiterte INTERATOM-Modell (vergleiche (3.90))

$$\dot{\sigma} = -E \cdot \left( \ll \frac{B(\sigma, \xi) \cdot \left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{E_t(\kappa)} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \gg + \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \ll \Phi(\Lambda) \gg \cdot \text{sign} \left( \frac{2}{3} \cdot \bar{\sigma} - \xi \right) \right)$$

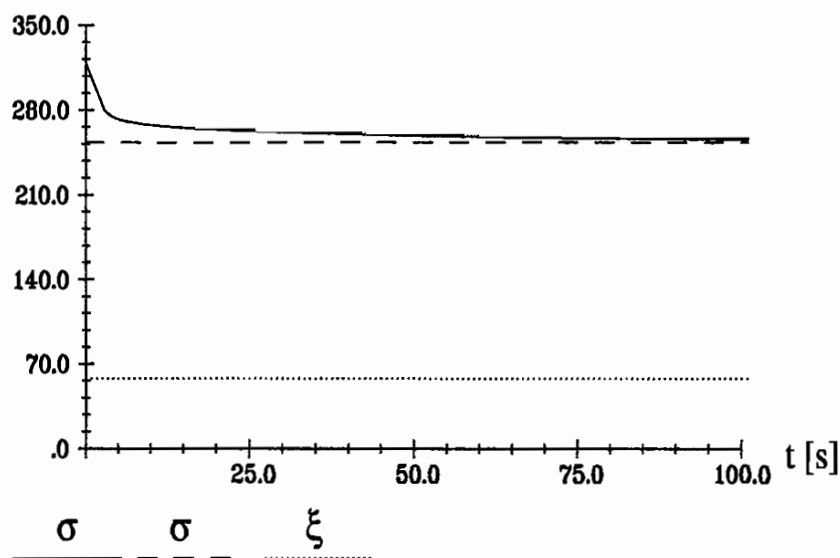


$$\dot{\xi} = c(\kappa) \cdot \left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right) \cdot \frac{\dot{\bar{\sigma}}}{E_t(\kappa)} \quad (3.95)$$

$$\dot{\kappa} = \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right) \cdot \frac{\dot{\bar{\sigma}}}{E_t(\kappa)}$$

$$\dot{\bar{\sigma}} = \ll B(\sigma, \xi) \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \gg$$

verhält sich in diesem Falle völlig analog; die statische Gleichgewichtsspannung  $\bar{\sigma}$  und die innere Variable  $\xi$  verändern sich während der Relaxation nicht:



**Abb. 3.15:** Konstanz der statischen Gleichgewichtsspannung  $\bar{\sigma}$  und der inneren Variable  $\xi$  bei Relaxationsversuchen

Aus Abb. 3.15 wird ersichtlich, daß der Fließzylinder bei der Relaxation weder seine Lage noch seine Größe verändert, stattdessen bewegt sich der aktuelle Spannungspunkt  $\sigma$  auf den Fließzylinder zu, bis die Fließbedingung erfüllt ist. Die mit dem erweiterten INTERATOM-Modell zu erzielenden Ergebnisse sind in der folgenden Abbildung dargestellt:

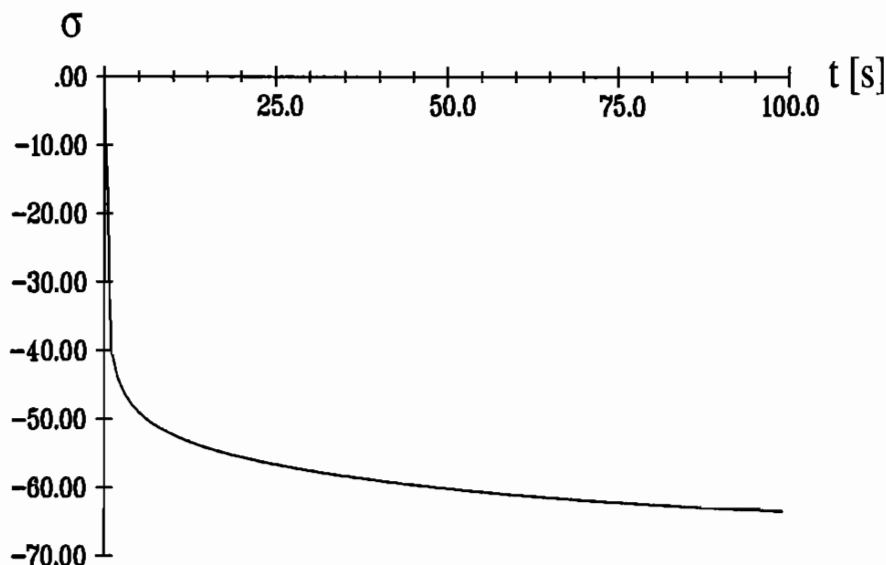


Abb. 3.16: Simulation von Relaxationsversuchen mit dem erweiterten INTERATOM-Modell

### 3.4 Thermodynamischer Rahmen für die Formulierung von Stoffgesetzen

Wie bereits in Abschnitt 3.1 erwähnt, müssen die Materialgleichungen mit der *Entropieungleichung* (Prinzip der Irreversibilität) verträglich sein. Das folgende Kapitel ist daher dem Nachweis dieser Verträglichkeit für das in den Kapiteln 3.2 und 3.3 vorgestellte INTERATOM-Modell gewidmet. Ausgangspunkt der Betrachtungen ist dabei die Aufspaltung der *Formänderungsleistung*  $\dot{w}$  nach *Lehmann* (siehe [Leh89]):

$$\begin{aligned}\dot{w} &= \dot{w}_r + \dot{w}_i = \dot{w}_r + \dot{w}_d + \dot{w}_h \\ \dot{w}_r &= \frac{1}{\rho_0} \cdot \underline{\sigma} : \underline{\dot{\epsilon}}_r \\ \dot{w}_d &= \frac{\beta}{\rho_0} \cdot (\underline{\bar{\sigma}} - \underline{\xi}) : \underline{\dot{\epsilon}}_i + \frac{1}{\rho_0} \cdot (\underline{\sigma} - \underline{\bar{\sigma}}) : \underline{\dot{\epsilon}}_i \\ \dot{w}_h &= \frac{1 - \beta}{\rho_0} \cdot \underline{\bar{\sigma}} : \underline{\dot{\epsilon}}_i + \frac{\beta}{\rho_0} \cdot \underline{\xi} : \underline{\dot{\epsilon}}_i\end{aligned}\quad (3.96)$$

Gleichung (3.96) besagt, daß sich die gesamte Formänderungsleistung  $\dot{w}$  additiv in einen reversiblen Anteil  $\dot{w}_r$  und einen irreversiblen Anteil  $\dot{w}_i$  aufspalten läßt. Der irreversible Anteil  $\dot{w}_i$  läßt sich weiter aufspalten in einen Anteil  $\dot{w}_d$ , der bei inelastischen Deformationen des Materials sofort dissipiert, d.h. in Wärme umgesetzt wird, sowie in einen Anteil  $\dot{w}_h$ , welcher in den bei inelastischen Deformationen entstehenden Mikroeigenstressfeldern (siehe Kapitel 2) gespeichert wird. Aus den Arbeiten von *Taylor* und *Quinney* ist

bekannt, daß der Anteil  $\dot{w}_d$  etwa 90% beträgt, daher läßt sich der skalare Faktor  $\beta \approx 0,9$  angeben. Die Größe  $\rho_0$  in (3.96) bezeichnet die Dichte des Materials. Zu bemerken ist, daß in (3.96) wiederum zwischen den aktuellen Spannungen  $\underline{\sigma}$ , die auch jenseits der Fließfläche liegen können (siehe Kapitel 3.3), und den statischen Gleichgewichtsspannungen  $\underline{\bar{\sigma}}$  auf der Fließfläche unterschieden wird. Entsprechend kennzeichnet  $\underline{\bar{\sigma}} - \underline{\xi}$  die effektive Spannung. Die *Bilanzierung der spezifischen Entropie*  $s$  erfolgt durch die sogenannte *Gibb'sche Gleichung* (siehe [Leh89]):

$$T \cdot \dot{s} = \dot{w}_d + \dot{w}_h - \frac{1}{\rho} \cdot \text{div}(\underline{\bar{q}}) + r - \frac{\partial \psi}{\partial \kappa} \cdot \dot{\kappa} - \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\xi}} : \dot{\underline{\xi}} \quad (3.97)$$

In (3.97) bezeichnet die Größe  $\psi(\underline{\sigma}, T, \kappa, \underline{\xi})$  die *spezifische freie Enthalpie*, die von der aktuellen Spannung, der Temperatur und den im INTERATOM-Modell verwendeten inneren Variablen abhängt. Die Größe  $r$  kennzeichnet spezifische Energiequellen im Material, die beispielsweise aus chemischen Prozessen stammen können. Die Größe  $\underline{\bar{q}}$  bezeichnet den *Wärmeflußvektor*, der den durch die plastische Verformung des Materials entstehenden Wärmestrom erfaßt.

Nach *Lehmann* (siehe [Leh89]) läßt sich die *Gibb'sche Gleichung* entsprechend der oben getroffenen Annahme  $\dot{w} = \dot{w}_r + \dot{w}_i$  weiter aufteilen. Zum einen läßt sich ein reversibler Anteil

$$T \cdot \dot{s}_r = \dot{w}_h - \frac{T}{\rho} \cdot \text{div}\left(\frac{\underline{\bar{q}}}{T}\right) + r - \frac{\partial \psi}{\partial \kappa} \cdot \dot{\kappa} - \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\xi}} : \dot{\underline{\xi}} - T \cdot \dot{\eta} \quad (3.98)$$

angeben, für den entsprechend auch  $T \cdot \dot{s}_r < 0$  möglich ist, sowie ein irreversibler Anteil

$$T \cdot \dot{s}_d = \dot{w}_d - \frac{1}{\rho \cdot T} \cdot \underline{\bar{q}} \cdot \text{grad}(T) + T \cdot \dot{\eta} \geq 0 \quad (3.99)$$

der keinesfalls negativ werden darf. Die Größe  $\dot{\eta}$  in (3.98) und (3.99) beschreibt die Entropieproduktion aufgrund innerer Strukturänderungen des Materials, die bei der plastischen Deformation mit dem Wandern von Versetzungen (siehe Kapitel 2) verbunden sind.

Für die plastische Formänderungsleistung  $\dot{w}_h$  wird in [Leh89] der Ansatz

$$\dot{w}_h = \frac{\partial \psi}{\partial \kappa} \cdot \dot{\kappa} + \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\xi}} : \dot{\underline{\xi}} + T \cdot \dot{\eta} - r \quad (3.100)$$

angegeben. Der Nachweis der *thermodynamischen Konsistenz* des INTERATOM-Modells erfolgt dann durch die Befriedigung des Ansatzes (3.100) in Verbindung mit der Aufspaltung der Formänderungsleistung (3.96) und den Nachweis der Erfüllung der Entropiegleichung (3.99).

Dazu bedarf es eines Ansatzes für die Entropieproduktion aufgrund interner Strukturänderungen des Materials:

$$\dot{\eta} = \frac{1}{\rho_0 \cdot T} \cdot \left(1 - \frac{c(\kappa, T)}{c(\kappa = 0, T)}\right) \cdot \underline{\xi} : \dot{\underline{\xi}} \quad (3.101)$$

Der Ansatz (3.101) ist über die im INTERATOM-Modell verwendete Verfestigungsfunktion  $c(\kappa, T)$  (siehe Kapitel 3.2) mit der *Änderung der Versetzungsdichte*, die die oben erwähnte innere Strukturänderung des Materials bewirkt, verknüpft. Zu Beginn der plastischen Deformation des Materials ( $\kappa = 0$ ) ist diese Entropieproduktion entsprechend Null.

Weiterhin bedarf es eines Ansatzes für die spezifische freie Enthalpie:

$$\begin{aligned} \psi(\underline{\sigma}, T, \kappa, \underline{\xi}) &= \frac{\nu}{4 \cdot \rho_0 \cdot G \cdot (1 + \nu)} \cdot Sp(\underline{\sigma})^2 - \frac{1}{4 \cdot \rho_0 \cdot G} \cdot \underline{\sigma} : \underline{\sigma} \\ &- \frac{\alpha}{\rho_0} \cdot \Delta T \cdot Sp(\underline{\sigma}) + \frac{1}{2 \cdot \rho_0 \cdot c(\kappa = 0, T)} \cdot \underline{\xi} : \underline{\xi} + \frac{1 - \beta}{\rho_0} \cdot \kappa \end{aligned} \quad (3.102)$$

Aus der *thermischen Zustandsgleichung* folgt in Verbindung mit dem Ansatz (3.102) das *hyperelastische* Werkstoffgesetz:

$$\underline{\varepsilon}_r = -\rho_0 \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\sigma}} = \frac{1}{2 \cdot G} \cdot \left( \underline{\sigma} - \frac{\nu}{1 + \nu} \cdot Sp(\underline{\sigma}) \cdot \underline{\mathbf{I}} \right) + \alpha \cdot \Delta T \cdot \underline{\mathbf{I}} \quad (3.103)$$

Aus der Forderung nach Erfüllung der Entropieungleichung (3.99) folgt die spezielle Forderung zur Sicherung der thermodynamischen Konsistenz des INTERATOM-Modells:

$$c(\kappa, T) \leq c(\kappa = 0, T) \quad (3.104)$$

Die Ungleichung (3.104) schränkt den zu verwendenden Typ von Funktionen für die Verfestigungsfunktion  $c(\kappa, T)$  wesentlich ein; nur *monotone Funktionen* sind in der Lage, die Forderung (3.104) zu erfüllen. Für die im INTERATOM-Modell verwendete spezielle Funktion (3.46) läßt sich die Forderung (3.104) nur garantieren, wenn die thermodynamischen Restriktionen

$$\begin{aligned} 0 < c_1 < \frac{1}{(c_2 - 1) \cdot \sigma_F^2} \cdot \left[ \frac{2 \cdot E_{t_0}}{1 - \frac{E_{t_0}}{E}} - 2 \cdot E_{t_\infty} \right] \\ c_2 > 1 \end{aligned} \quad (3.105)$$

für die Werkstoffparameter  $c_1$  und  $c_2$  erfüllt sind. Unter Berücksichtigung von (3.105) erfüllt das INTERATOM-Modell die Entropieungleichung und ist damit *thermodynamisch konsistent*.

Ein zweiter Weg zur Erfüllung der Entropieungleichung wird von *Chaboche* in [Cha83] gezeigt. Dazu wird die Existenz eines zweiten Potentials, des sogenannten *Dissipationspotentials*

$$\varphi = \varphi(\underline{\sigma}, K_\kappa, \underline{\mathbf{K}}_\xi, \underline{\varepsilon}_r, T, \kappa, \underline{\xi}) \quad (3.106)$$

postuliert. In (3.106) bezeichnen  $K_\kappa = \frac{\partial \psi}{\partial \kappa}$  und  $\underline{\mathbf{K}}_\xi = \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\xi}}$  sogenannte *verallgemeinerte Kräfte*. Unter Verwendung des Potentials  $\varphi$  liefert eine verallgemeinerte Normalenregel

den irreversiblen Anteil der Verzerrungsgeschwindigkeit und die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen. Für zeitabhängiges Materialverhalten ist die Normalenregel durch die folgenden Beziehungen festgelegt:

$$\dot{\underline{\epsilon}}_i = \frac{\partial \varphi}{\partial \underline{\sigma}}; \quad \dot{\kappa} = -\frac{\partial \varphi}{\partial K_\kappa}; \quad \dot{\underline{\xi}} = -\frac{\partial \varphi}{\partial \underline{K}_\xi} \quad (3.107)$$

Bei geeigneter Wahl eines Ansatzes für das Dissipationspotential läßt sich mit (3.107) ein thermodynamisch konsistentes Stoffgesetz formulieren.

Als weitere Konsequenz aus der Thermodynamik ergibt sich die Möglichkeit der Angabe einer Entwicklungsgleichung für die Temperatur bei plastischen Deformationen. Dazu dient die *kalorische Zustandsgleichung*  $s = -\frac{\partial \psi}{\partial T}$  in Verbindung mit der *spezifischen Wärmekapazität*  $c_p = -T \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial T^2} = T \cdot \frac{\partial s}{\partial T}$ . Als Entwicklungsgleichung für die Temperatur ergibt sich:

$$c_p \cdot \dot{T} = \dot{w}_d + T \cdot \dot{\eta} - r - \frac{1}{\rho} \cdot \text{div}(\underline{\vec{q}}) + T \cdot \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\sigma}} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \kappa} \cdot \dot{\kappa} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \underline{\xi}} : \dot{\underline{\xi}} \right) \quad (3.108)$$

Unter Vernachlässigung der inneren Wärmequellen  $r$  und der gemischten Ableitungen folgt aus (3.108) in Verbindung mit den Ansätzen (3.96) und (3.101) für *adiabate Prozesse*:

$$c_p \cdot \dot{T} = \frac{\beta}{\rho_0} \cdot (\underline{\bar{\sigma}} - \underline{\xi}) : \dot{\underline{\epsilon}}_i + \frac{1}{\rho_0} \cdot (\underline{\sigma} - \underline{\bar{\sigma}}) : \dot{\underline{\epsilon}}_i + \frac{1}{\rho_0} \cdot \left( 1 - \frac{c(\kappa, T)}{c(\kappa = 0, T)} \right) \cdot \underline{\xi} : \dot{\underline{\epsilon}}_i \quad (3.109)$$

Aus (3.109) folgt, daß in die Temperaturentwicklung zum einen der gesamte viskose Anteil der Leistung eingeht, da die viskosen Prozesse vollständig dissipativ sind, zum anderen wird die Strukturänderungsleistung in Wärme umgesetzt.

### 3.4.1 Temperaturabhängiges Materialverhalten

Mit der im letzten Kapitel hergeleiteten Temperaturentwicklungsgleichung ist es möglich, mit dem in Kapitel 3.3 vorgestellten INTERATOM-Modell *adiabate Prozesse* zu simulieren, d.h. Prozesse, die so schnell ablaufen, daß die bei der plastischen Verformung entstehende Wärme nicht nach außen abgeführt werden kann, sondern am Ort ihrer Entstehung verbleibt und somit für eine Temperaturerhöhung des Materials sorgt. Der Effekt ist eine gegenüber einem *isothermen Prozeß*, der bisher stets vorausgesetzt worden war, zunehmende Entfestigung des Materials bei steigender plastischer Verformung. Deutlich wird, daß beide Prozeßführungen, isotherme und adiabate, Grenzzustände des realen thermo-mechanischen Prozesses sind.

Für das INTERATOM-Modell ergibt sich die Gleichung für die Temperaturentwicklung bei adiabater Prozeßführung:

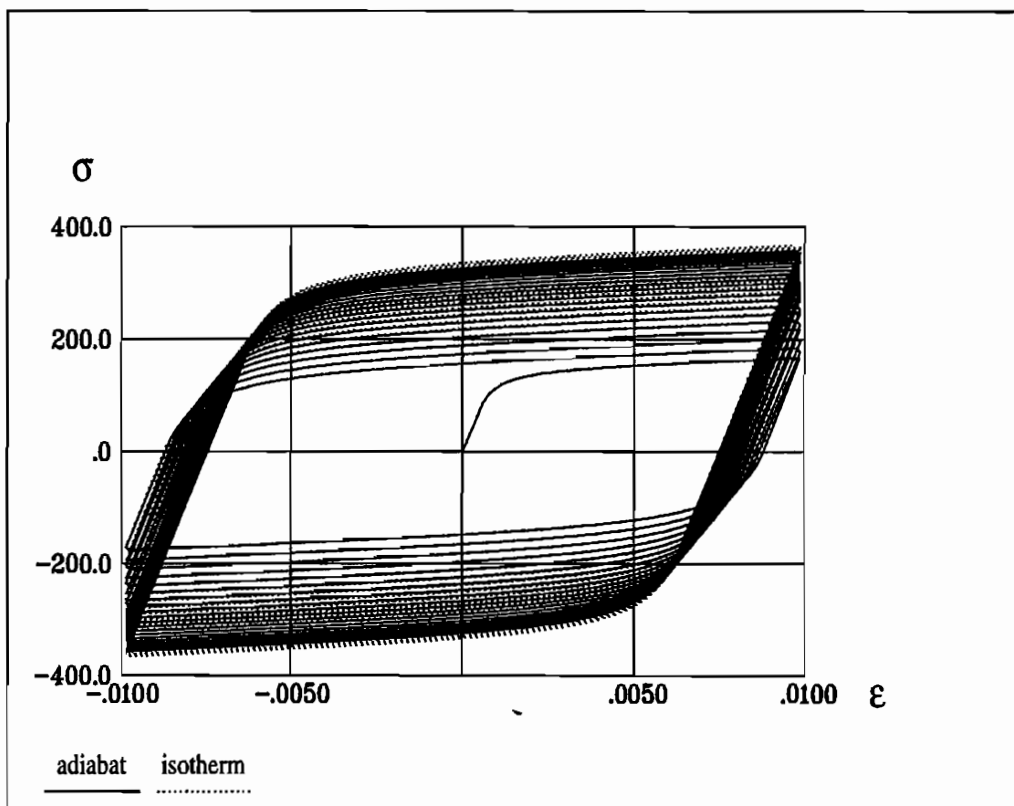
$$c_p \cdot \dot{T} = \frac{1}{\rho_0} \cdot \frac{\Phi(\Lambda, T)}{\sqrt{g(\kappa, T)}} \cdot \left( \beta \cdot (\underline{\bar{\sigma}} - \underline{\xi}) : (\underline{\bar{\sigma}}' - \underline{\xi}) + (\underline{\sigma} - \underline{\bar{\sigma}}) : (\underline{\bar{\sigma}}' - \underline{\xi}) \right)$$

$$+ \left( 1 - \frac{c(\kappa, T)}{c(\kappa=0, T)} \right) \cdot \underline{\xi} : (\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) \quad (3.110)$$

Das Differentialgleichungssystem (3.79) für einaxiale Prozesse lautet dann:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma} &= E \cdot \left( \dot{\epsilon} - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Phi(\Lambda, T) \right) \\ \dot{T} &= \frac{\beta \cdot \sqrt{g(\kappa, T)} + \frac{2}{3} \cdot \Lambda + \left( 1 - \frac{c(\kappa, T)}{c(\kappa=0, T)} \right) \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \xi}{c_p \cdot \rho_0} \cdot \Phi(\Lambda, T) \\ \dot{\xi} &= c(\kappa, T) \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Phi(\Lambda, T) \\ \dot{\kappa} &= \sqrt{\frac{3}{2} \cdot g(\kappa, T)} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Phi(\Lambda, T) \\ \Lambda &= \sqrt{\left( \frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi \right) \cdot \left( \sigma - \frac{3}{2} \cdot \xi \right)} - \sqrt{g(\kappa, T)} \end{aligned} \quad (3.111)$$

Der entscheidende Unterschied von (3.111) zum Differentialgleichungssystem (3.79) ist die *Temperaturabhängigkeit* aller Parameter  $c_p, \rho_0, E, \sigma_F, c_1, c_2, c_3, E_{t_0}, E_{t_\infty}, \gamma, c_4, c_5$  des INTERATOM-Modells. Die funktionale Abhängigkeit der einzelnen Parameter von der Temperatur ist in Kapitel 6.4 erläutert. Das Differentialgleichungssystem (3.111) ermöglicht nun eine Abschätzung des größtmöglichen Temperatureinflusses bei der plastischen Verformung. Entsprechend stellt das isotherme Stoffgesetz (3.79) eine untere Schranke für den Temperatureinfluss dar. Die folgende Abbildung zeigt einen Vergleich zwischen diesen beiden Grenzzuständen bei der Simulation eines zyklischen Versuches mit konstanter Dehnschwingbreite und einer konstanten Dehngeschwindigkeit  $\dot{\epsilon} = 10^{-2} \frac{1}{s}$ :



**Abb. 3.17:** Vergleich zwischen isothermer ( $\cdots$ ) und adiabater ( $—$ ) Prozeßführung bei zyklischen Versuchen

In Abb. 3.17 erkennt man deutlich den entfestigenden Einfluß der Temperaturerhöhung bei der adiabaten Prozeßführung. Die zyklische Verfestigung beim isothermen Prozeß ist entsprechend größer. Aus der Differentialgleichung (3.111) folgt auch die Temperaturerhöhung bei den in Abb. 3.17 dargestellten zyklischen Versuchen:

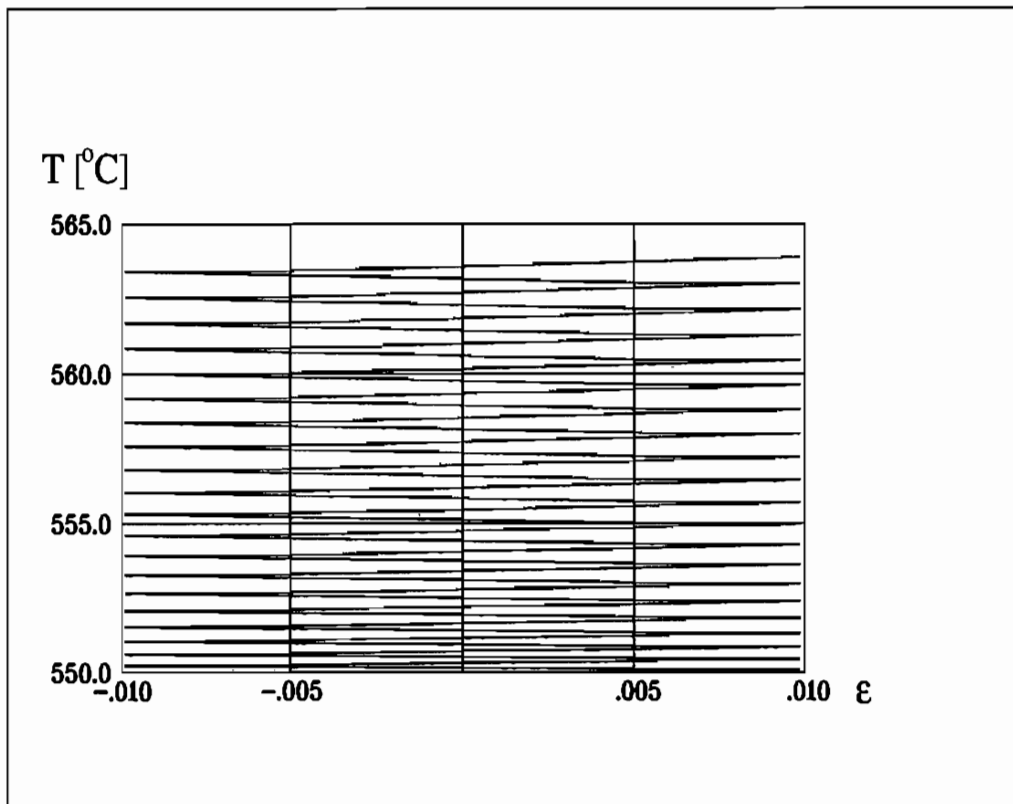


Abb. 3.18: Temperaturerhöhung bei zyklischen Versuchen

Wie man in Abb. 3.18 sieht, erhöht sich die Temperatur bei den zyklischen Versuchen um ca.  $15^{\circ}\text{C}$ . Der Temperatureinfluß wird bei größeren Dehngeschwindigkeiten allerdings noch wesentlich stärker, wie beispielsweise in der Arbeit von *Mittelbach* [Mit95] bei der Simulation des Auftreffens eines Körpers auf eine Platte demonstriert wird.



## 4. Experimentelle Strategien zur Ermittlung der Modellparameter

Bei klassischen Identifikationsverfahren erfolgt die Minimierung eines Least-Squares Funktionals, wobei zur Ermittlung der Versuchsdaten die zugehörigen Spannungs- oder Dehnungsfelder als homogen über die Materialprobe verteilt angenommen werden [ADF<sup>+</sup>96]. Zur Realisation entsprechender homogener Zustände bieten sich verschiedene Versuchsarten an; als Beispiele seien hier die Torsions- und Zug-/Druckbelastung dünnwandiger Hohlzylinderproben [Kik93], die Zugbelastung zylindrischer Vollproben [Wic96] und die Zug-/Druckbelastung dünnwandiger Hohlzylinderproben [Wes95] genannt. Bei der Zug-/Druckbelastung dünnwandiger Hohlzylinderproben bzw. zylindrischer Vollproben erhält man bei entsprechenden Versuchsbedingungen einen eindimensionalen Spannungszustand, aber einen räumlichen Verzerrungszustand (siehe Kap. 3.2). Bei der Torsionsbelastung dünnwandiger Hohlzylinderproben dagegen ist bei entsprechender Lasteinleitung sowohl der Spannungs- als auch der Verzerrungszustand eindimensional.

Die dieser Arbeit zugrundeliegende Auswertung von Proben mit homogener Spannungsverteilung im Meßgebiet wird im folgenden Kapitel 4.1 dargestellt.

Geht man von der Annahme der Homogenität der Spannungs- oder Dehnungsfelder zur Ermittlung der Versuchsdaten ab, so müssen die Inhomogenitäten der Spannungen und Dehnungen im Rahmen einer Finite-Element Methode mitberücksichtigt werden [ADF<sup>+</sup>96], [KMK95], [Kre96], [MS94b].

Als Versuchsarten bieten sich hierfür Belastungen von Proben mit ausgeprägt inhomogener Spannungs-/Dehnungsverteilung an; als Beispiele seien hier die Zugbelastung einer modifizierten CT-Probe [ADF<sup>+</sup>96] und die Biegebelastung einer gekerbten 4-Punkt Biegeprobe [KMK95], [Kre96] genannt.

Ein kurzer Abriss der Vorgehensweise bei der Auswertung von Proben mit inhomogener Verteilung der Spannungen und Dehnungen im Meßgebiet mit Betonung der Unterschiede zu der Vorgehensweise bei der Auswertung von Proben mit homogener Verteilung wird in Kapitel 4.2 vorgestellt.

### 4.1 Auswertung von Proben mit homogener Spannungsverteilung im Meßgebiet

Die Grundlage dieser Arbeit bildet die Auswertung von Proben mit homogener Verteilung der Meßwerte. Die entsprechenden Versuche sind von *Westerhoff* durchgeführt und in seiner Arbeit [Wes95] dokumentiert worden, so daß hier auf eine ausführliche Darstellung

verzichtet wird.

Stattdessen wird in diesem Abschnitt das Augenmerk auf die Versuchsbedingungen gelegt. Insbesondere wird gezeigt, daß die Annahme der Homogenität der Versuchsdaten im Meßgebiet plausibel ist.

#### 4.1.1 Werkstoff und Probenform

Das in Kapitel 3 vorgestellte INTERATOM-Modell zur Beschreibung des inelastischen Verhaltens metallischer Werkstoffe ist speziell für *rostfreie austenitische Stähle* entwickelt worden [Bru84]. Aus diesem Grund wurde von *Westerhoff* der hochwarmfeste austenitische Stahl X 6 CrNi 18 11 ausgewählt.

Bei Raumtemperatur besitzt dieser Stahl laut *Stahlschlüssel* [Weg92] und *Dubbel* [BK87] die folgenden Eigenschaften:

Warmfestigkeit [°C]	Streckgrenze $R_e \left[ \frac{N}{mm^2} \right]$	Zugfestigkeit $R_m \left[ \frac{N}{mm^2} \right]$	Elastizitätsmodul $E \left[ \frac{N}{mm^2} \right]$	Querkontraktionszahl $\nu$
650	185	490 – 690	196000	0.3

Tabelle 4.1: Eigenschaften von X 6 CrNi 18 11 bei Raumtemperatur

Neben den in Tabelle 4.1 aufgeführten Eigenschaften besitzt der Stahl X 6 CrNi 18 11 bei Raumtemperatur ein ausgeprägtes Verfestigungs- und Kriechverhalten, was ihn besonders für die Kraftwerkstechnik zu einem sehr geeigneten Werkstoff macht, da er auch unter langzeitiger mechanischer Beanspruchung gute Festigkeitseigenschaften zeigt.

Zur Realisation der zur einaxialen Anpassung vorausgesetzten Homogenität der Versuchsdaten im Messbereich sind von *Westerhoff* dünnwandige Hohlzylinderproben gewählt worden (siehe Abb. 4.1). Bei geeigneter Versuchsdurchführung können die Spannungen als homogen angenommen werden. Das Versuchsprogramm umfaßte dabei monotone Versuche mit und ohne Haltezeiten sowie zyklische Versuche.

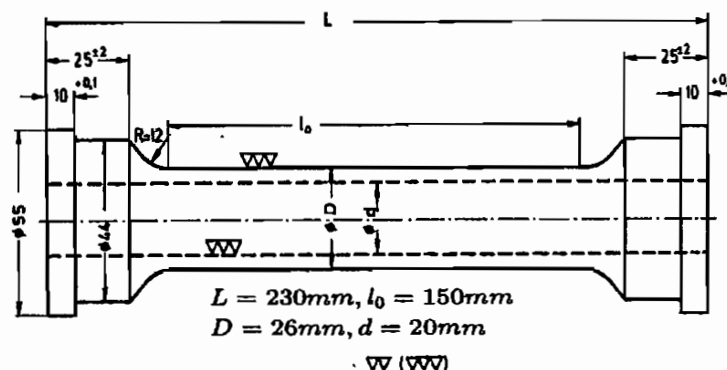


Abb. 4.1: Geometrie der dünnwandigen Hohlzylinderprobe (aus [Wes95])

### 4.1.2 Meßeinrichtung

Die in Abb. 4.1 dargestellten Köpfe der Probe dienen zur Einspannung in die Prüfmaschine. Die Funktionsweise der Prüfmaschine ist in [Kik93], [Wes95] und [Fos96] ausführlich erläutert und soll hier nicht näher betrachtet werden. Die in die Maschine eingespannte Probe ist in der Abb. 4.2 zu erkennen:



Abb. 4.2: Hohlzylinderprobe bei Versuchsbeginn (aus [Wes95])

Die Prüfmaschine verfügt über interne Aufnehmer zur Messung von Kraft und Torsionsmoment bzw. von Weg und Verdrehung. Bei Benutzung dieser internen Wegaufnehmer treten allerdings Fehler auf, die auf die elastische Verformung der Maschine, der Einspannvorrichtung und der Köpfe der Probe sowie auf plastische Verformungen außerhalb der betrachteten Meßlänge zurückzuführen sind [Wes95], [Wic96].

Zur Korrektur dieser Einflüsse bieten sich verschiedene Wege an; *Wichtmann* [Wic96] führt einen *Korrekturfaktor* für die gemessene Probenverlängerung ein, um den Einfluß der ungewünschten plastischen Verformungen zu tilgen. *Westerhoff* verwendet *externe Wegaufnehmer*, um genauere Messungen zu erzielen. Diese externen Aufnehmer sind direkt auf der Probe plaziert, wie in Abb. 4.2 zu erkennen ist, so daß die oben erwähnten Einflüsse nicht mit in das Meßergebnis eingehen können.

Die Verformung der Probe wurde zwischen den Tastspitzen der Aufnehmer gemessen, wobei die untere Spitze fest anlag und die obere die Verformung an Dehnungsmeßstreifen weitergab (siehe Abb. 4.3).

Auf diese Weise ist der Meßbereich klar definiert. Von besonderem Interesse ist nun, ob die zugrundegelegte Annahme der Homogenität im Meßbereich plausibel ist. *Körber* diskutiert in seiner Arbeit [Kö94] dieses Problem anhand der von *Kikillus* verwendeten

Kragenproben [Kik93]. Dazu simulierte er das Strukturverhalten der Probe im Zugversuch mit der Finite-Element Methode und kam zu dem Ergebnis, daß sich durch Modifizierung der Meßlänge deutlich bessere Ergebnisse erzielen lassen. In analoger Weise wird im folgenden das Strukturverhalten der von *Wichtmann* verwendeten zylindrischen Vollproben im Zugversuch [Wic96] untersucht.

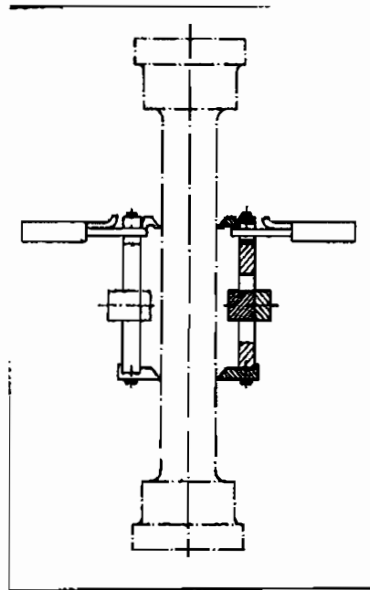


Abb. 4.3: Anklemmungsdehnungsaufnehmer (aus [Wes95])

Der komplette Gang der Rechnung mit der Diskretisierung der Geometrie der Probe ist in Kap. 7.2.2 dargestellt. Als Ergebnis der Simulation zeigt sich die Spannungsverteilung in der Probe laut Abb. 4.4. Man erkennt eine homogene Spannungsverteilung im Meßgebiet. Die Einspannköpfe der Probe verformen sich elastisch, was, wie oben beschrieben, einen großen Einfluß auf das Meßergebnis hat, falls man die Verlängerung der Probe zwischen den Einspannungen mißt. Ebenso zu erkennen ist die plastische Verformung der Radien der Probe, so daß die externen Wegaufnehmer in genügendem Abstand zu plazieren sind, um gute Meßergebnisse zu erhalten.

Diese Voraussetzung ist jedoch bei der Vorgehensweise nach *Westerhoff* erfüllt (siehe Abb. 4.3), so daß insgesamt der Schluß zulässig erscheint, daß die im Meßbereich aufgenommenen Daten die Voraussetzung der Homogenität mit hinreichender Genauigkeit erfüllen. Es sei betont, daß für diesen Fall die Simulation des Versuches nicht notwendigerweise mit Finite-Element Methoden erfolgen muß, was einen wesentlichen Unterschied zu der in Kapitel 4.2 beschriebenen Vorgehensweise darstellt.

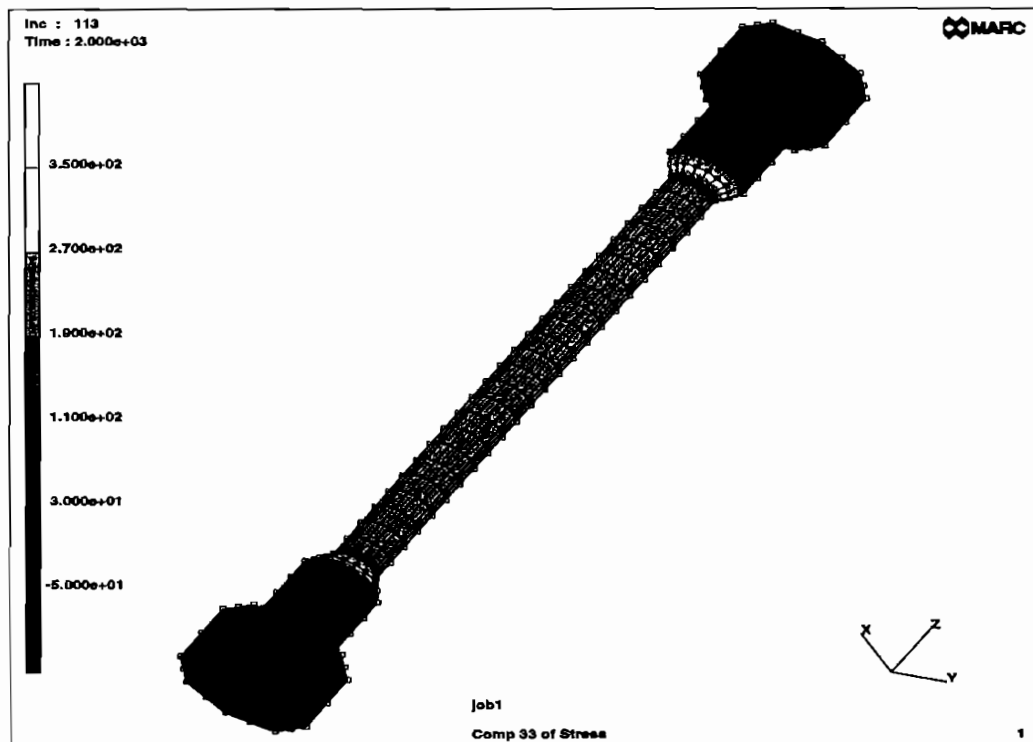


Abb. 4.4: Normalspannung in der Zugprobe

## 4.2 Auswertung von Proben mit inhomogener Spannungsverteilung im Meßgebiet

Im Gegensatz zu der im vorherigen Kapitel 4.1 beschriebenen Vorgehensweise zur Erzeugung von Meßdaten, bei der ein großes Augenmerk auf die Homogenität der Spannungen und Dehnungen im Meßbereich gelegt wurde, ist das Ziel der im folgenden dargestellten Methoden, möglichst inhomogene Spannungs- und Dehnungsverteilungen im Meßgebiet zu erzeugen. Durch diese Vorgehensweise werden eine Vielzahl der in Kapitel 2 beschriebenen Mechanismen im Material gleichzeitig ausgelöst, so daß die so gewonnenen Meßwerte

einen hohen Informationsgehalt aufweisen. Das Problem des Informationsgehalts in den Meßdaten wird in Kapitel 6.3 ausführlich erläutert.

Die Forderung nach starken Inhomogenitäten bedingt nun spezielle Probenformen, von denen im folgenden exemplarisch eine herausgegriffen wird, um gegenüber der in Kapitel 4.1 erläuterten Vorgehensweise Unterschiede herauszuarbeiten. Die folgenden Ausführungen stützen sich auf den in [ADF<sup>+</sup>96] veröffentlichten Bericht.

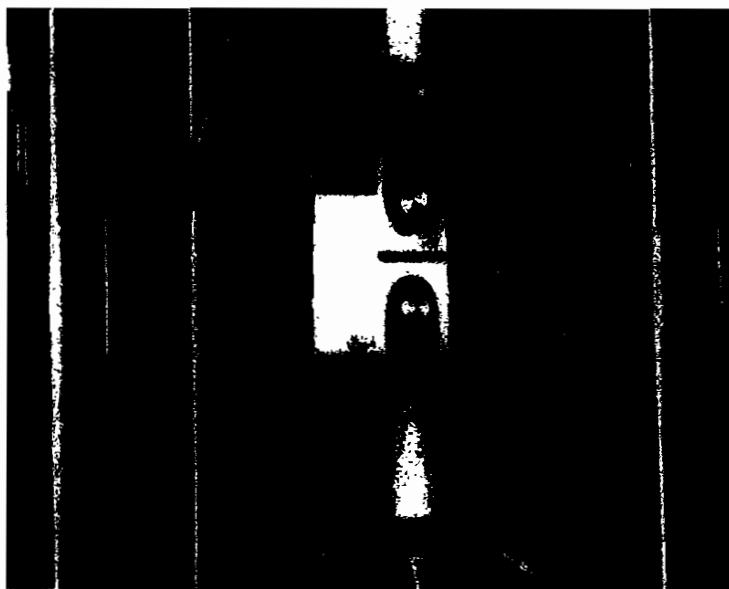


Abb. 4.5: CT-Probe bei Versuchsbeginn (aus [ADF<sup>+</sup>96])

In Abb. 4.5 dargestellt ist die in [ADF<sup>+</sup>96] verwendete Probe; hierbei handelt es sich um eine modifizierte CT-Probe ohne Anrißkerbe im Radiengrund. Bei Zugbelastung der Probe wird sich im Bereich des Radiengrundes eine stark inhomogene Dehnungsverteilung einstellen. Die Geometrie der Probe ist in Abb. 4.6 dargestellt.

Zur Bestimmung der flächenhaft verteilten Versuchsdaten werden regelmäßige, periodische Punkt- oder Kreuzraster, die fest mit der Oberfläche der Probe verbunden sind, in unterschiedlichen Laststufen aufgenommen. Mit Methoden der digitalen Bildverarbeitung werden die Rasterkoordinaten bestimmt und daraus die gesuchten Verschiebungen und Dehnungen berechnet.

Die Berücksichtigung von Inhomogenitäten bei der numerischen Simulation des Experiments erfolgt im Rahmen einer Finite-Element Methode. Die zur Simulation benötigte Diskretisierung der Geometrie der Probe ist in Abb. 4.7 dargestellt. Da die Rasterkoordinaten im allgemeinen nicht mit den Knotenpunkten des Finiten-Element-Netzes übereinstimmen, ist zur Simulation der Verformung des Rasters eine geeignete Interpolation zwischen den Knotenpunkten durchzuführen.

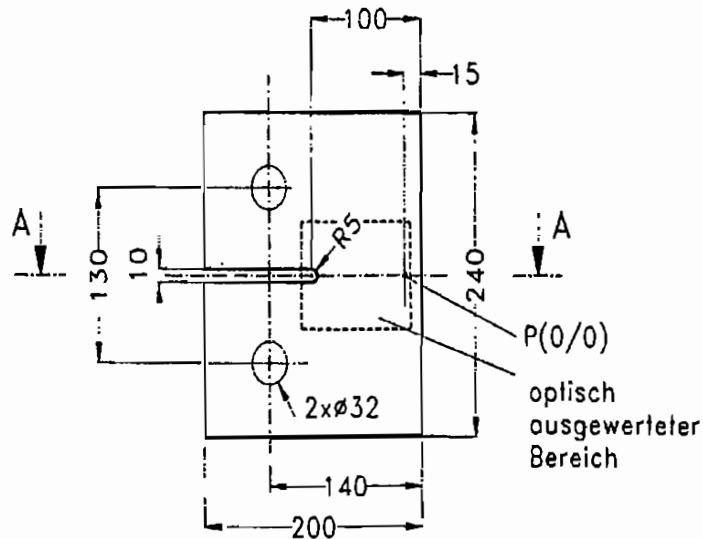


Abb. 4.6: Geometrie der CT-Probe (aus [ADF<sup>+</sup>96])

Aus den vorstehenden Ausführungen leiten sich die wesentlichen Unterschiede der in den Kapiteln 4.1 und 4.2 beschriebenen Vorgehensweisen ab.

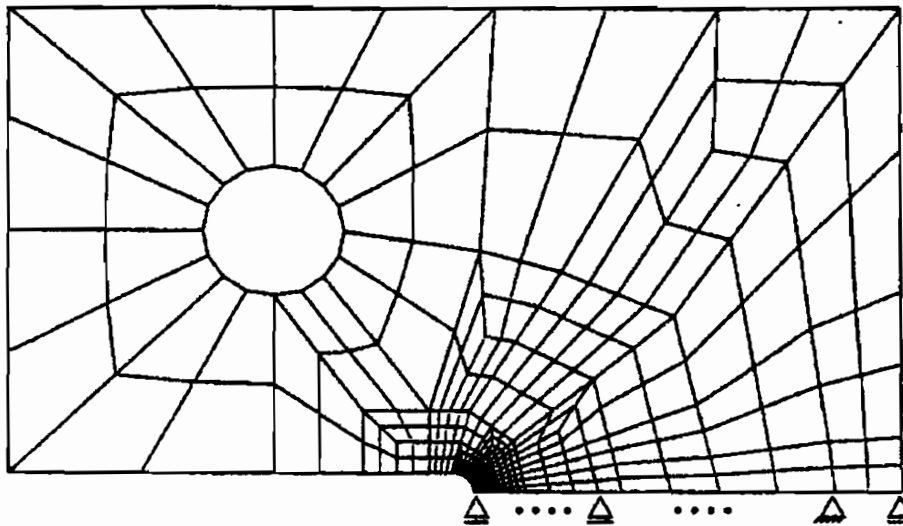


Abb. 4.7: Diskretisierung für die FE-Rechnung (aus [ADF<sup>+</sup>96])

Zusätzlich zu dem bei der Bestimmung plastischer Verformungen von metallischen Proben notwendigen versuchstechnischen Aufwand ist bei der Bestimmung materialabhängiger Koeffizienten inelastischer Werkstoffgesetze aus Versuchen mit inhomogener Verteilung der Spannungen und Dehnungen im Meßgebiet in jedem Anpassungsschritt eine

FE-Analyse der gesamten Struktur durchzuführen, was neben der in Kapitel 5.1 beschriebenen Zeitintegration der konstitutiven Gleichungen und den damit verbundenen *Stabilitätsproblemen* (siehe Kap. 5.1.1) einen erheblichen zusätzlichen Aufwand mit weiteren Fehlerquellen aus der Ortsdiskretisierung darstellt.

Bei der Auswertung von Proben mit homogener Verteilung der Spannungen im Meßbereich stellt sich dagegen die Frage des Informationsgehaltes der Versuchsdaten, so daß unter Umständen eine große Anzahl von *unabhängigen* Versuchen gefahren werden müssen, um zu aussagekräftigen Materialparametern zu gelangen. Die Diskussion dieser Fragestellung wird in den Kapiteln 6.2 und 6.3 geführt.



## 5. Numerische Methoden zur Ermittlung der Modellparameter

In diesem Kapitel werden numerische Methoden präsentiert, um die in Kapitel 3 beschriebenen Modelle an die mit den experimentellen Methoden aus Kapitel 4 gewonnenen Meßdaten anzupassen. Zu unterscheiden sind dabei nach [ADF<sup>+</sup>96] zwei große Problem-bereiche; dies ist zum einen die numerische Simulation des Experimentes, auch *direktes Problem* genannt, zum anderen die Lösung des Schätzproblems der Modellparameter, was in der Literatur<sup>1</sup> als *inverses Problem* bezeichnet wird.

### 5.1 Direktes Problem

Aufgrund der in Kapitel 4.1 beschriebenen Auswertung von Proben mit homogener Spannungsverteilung im Meßgebiet beschränkt sich in der vorliegenden Arbeit das direkte Problem auf die zeitliche Integration der *einaxialen* Modellgleichungen aus Kapitel 3 für verschiedene Lastpfade.

#### 5.1.1 Zeitintegration der konstitutiven Gleichungen

Sämtliche in Kapitel 3 vorgestellten Modelle zur Beschreibung des inelastischen Verhaltens metallischer Werkstoffe stellen mathematisch gesehen ein *System von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung* dar. Die numerische Simulation eines Experimentes mit Hilfe dieser Differentialgleichungen führt auf ein *Anfangswertproblem*.

Aufgrund der komplexen Struktur der Differentialgleichungen entziehen sich diese einer Lösung in geschlossener Form. Man ist daher auf numerische Verfahren zur Ermittlung einer Näherungslösung des Anfangswertproblems angewiesen.

Als mögliche Verfahren stehen Ein- und Mehrschrittverfahren zur Verfügung, sowohl implizite als auch explizite (siehe z.B. [Bra90]). Dieser Abschnitt beschäftigt sich daher mit der Auswahl geeigneter Verfahren zur Lösung des Anfangswertproblems für die Differentialgleichungssysteme aus Kapitel 3.

---

<sup>1</sup>Zu Lehrbuchversionen dieses Problemereiches siehe z.B. [Tar87] oder [DS83]

In allgemeiner Form stellt sich das Anfangswertproblem wie folgt dar:

$$\dot{\vec{y}}(t) = \vec{F}(\vec{y}(t)), \quad \vec{y} = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ q_1 \\ \vdots \\ q_m \end{pmatrix}, \quad t_0 \leq t \leq t_e \quad (5.1)$$

mit den Anfangswerten:

$$\vec{y}(t_0) = \vec{y}_0 \quad (5.2)$$

Es werden also zu jedem Zeitpunkt  $t$ , beginnend zum Anfangszeitpunkt  $t_0$  des Prozesses bis zum Endzeitpunkt  $t_e$ , die Werte des Vektors  $\vec{y}$  der Zustandsgrößen gesucht, die den aktuellen Zustand des Materials während der Belastung beschreiben. Die Werte der Zustandsgrößen zum Zeitpunkt  $t_0$  müssen dabei bekannt sein. In (5.1) ist die allgemeine Formulierung des Vektors  $\vec{y}$  der Zustandsgrößen im Rahmen der phänomenologischen Beschreibung des Materialverhaltens (siehe Kapitel 3) mit  $m$  internen Variablen  $q_m$  und der Dehnung  $\varepsilon$  angegeben.

*Einschrittverfahren*, auf die sich diese Arbeit beschränkt, berechnen mit  $\vec{y}_0 = \vec{y}_0$  sukzessive zu einem Näherungswert  $\vec{y}_n$  für  $\vec{y}(t_n)$  einen Näherungswert  $\vec{y}_{n+1}$  für  $\vec{y}(t_n + \Delta t_n)$ . Dabei ist  $\Delta t_n$  die Schrittweite. Entscheidend für den erfolgreichen Einsatz eines Einschrittverfahrens sind eine möglichst hohe Konsistenzordnung, in der sich die *Genauigkeit* des Verfahrens widerspiegelt, und gute *Stabilitätseigenschaften*. Ein Einschrittverfahren besitzt die Konsistenzordnung  $p$ , wenn mit  $\vec{y}_0 = \vec{y}_0$  für den *lokalen Diskretisierungsfehler* (Fehler nach einem Schritt) gilt (siehe [RSW96]):

$$\vec{y}_1 - \vec{y}(t_0 + \Delta t_0) = \mathcal{O}(\Delta t_0^{p+1}) \quad \text{für } \Delta t_0 \rightarrow 0 \quad (5.3)$$

Gleichung (5.3) sagt aus, daß der Fehler nach einem Schritt umso kleiner ist, und damit die Genauigkeit des Verfahrens umso größer, je höher die Konsistenzordnung  $p$  des Verfahrens ist. Die Notation  $\mathcal{O}(\cdot)$  in (5.3) drückt aus, daß die Größenordnung von  $\vec{y}_1 - \vec{y}(t_0 + \Delta t_0)$  höchstens die gleiche ist wie die von  $\Delta t_0^{p+1}$  (siehe [DS83]).

Eine formale Darstellung von *verallgemeinerten Crank-Nicolson-Verfahren* ist durch

$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + \Delta t_n \cdot \left( (1 - \Theta) \cdot \vec{F}(\vec{y}_n) + \Theta \cdot \vec{F}(\vec{y}_{n+1}) \right) \quad (5.4)$$

gegeben. Der Klammerausdruck in (5.4) stellt die Verfahrensfunktion des Einschrittverfahrens dar. Kennzeichnend für ein bestimmtes Einschrittverfahren ist der Verfahrensparameter  $\Theta$ ; so folgt für  $\Theta = 0$  aus (5.4) das *explizite Euler-Verfahren* der Ordnung  $p = 1$ , für  $\Theta = 1$  das *implizite Euler-Verfahren* der Ordnung  $p = 1$  und für  $\Theta = \frac{1}{2}$  das *Crank-Nicolson-Verfahren*

$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + \frac{1}{2} \cdot \left( \vec{F}(\vec{y}_n) + \vec{F}(\vec{y}_{n+1}) \right) \cdot \Delta t_n \quad (5.5)$$

der Ordnung  $p = 2$  (siehe [Bra90]). Eine weitere Erhöhung der Ordnung der Einschrittverfahren läßt sich durch eine Vergrößerung der Anzahl der Auswertungen der Funktion  $\vec{F}(\vec{y}(t))$  im Zeitschritt erzielen. Auf diese Weise gelangt man beispielsweise zum *klassischen Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung* oder zu den *Runge-Kutta Dormand-Prince-Verfahren* (siehe z.B. [RSW96], [Bra90] oder [PTVF92]).

Eine hohe Ordnung des Verfahrens und damit eine gute Genauigkeit alleine reichen jedoch nicht aus, um das durch (5.1) und (5.2) gegebene Anfangswertproblem erfolgreich zu lösen, weil die vorliegenden Differentialgleichungssysteme *steif* sind, wie im folgenden verdeutlicht wird.

Der *Stabilitätsbegriff für steife Differentialgleichungen* wird anhand der skalaren Differentialgleichung

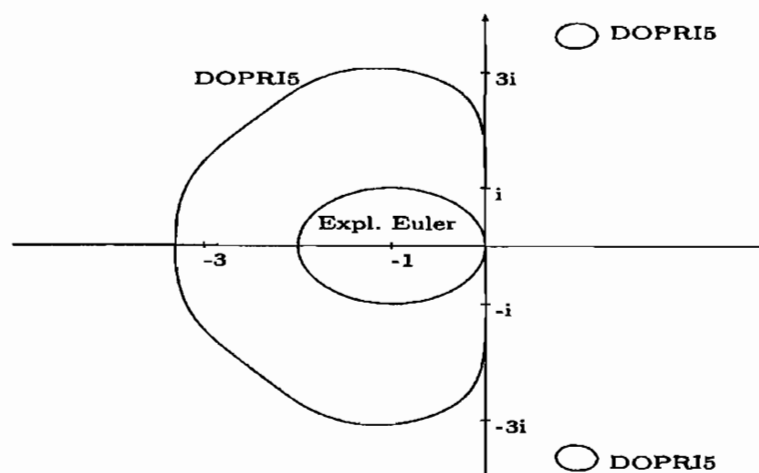
$$\dot{y} = \lambda \cdot y, \quad \operatorname{Re} \lambda \leq 0 \quad (5.6)$$

definiert (siehe [RSW96]) und auf Differentialgleichungssysteme der Form (5.1) erweitert. Einschrittverfahren liefern für (5.6) eine Näherungslösung der Form

$$\tilde{y}_n = [R_0(z)]^n \cdot \tilde{y}_0, \quad z = \Delta t_n \cdot \lambda \quad (5.7)$$

mit der *Stabilitätsfunktion*  $R_0(z)$ . Ein Einschrittverfahren heißt *A-stabil*, wenn die Näherungslösung (5.7) für große  $n$  begrenzt bleibt, d. h. wenn  $|R_0(z)| \leq 1 \forall \operatorname{Re} z \leq 0$  gilt. Sie heißt weiterhin *L-stabil*, wenn sie für negative, unendlich große Realteile des Argumentes der Stabilitätsfunktion abklingt, d. h. wenn  $\lim_{\operatorname{Re} z \rightarrow -\infty} R_0(z) = 0$  gilt.

Die Stabilitätsfunktion eines expliziten Einschrittverfahrens ist ein Polynom in  $\Delta t_n$ , die eines impliziten Verfahrens eine gebrochen rationale Funktion. Aus diesem Grund kann die Beziehung  $|R_0(z)| \leq 1 \forall \operatorname{Re} z \leq 0$  bei einem expliziten Verfahren nur in einem beschränkten Gebiet, dem sogenannten *Stabilitätsgebiet*, erfüllt sein (siehe Abb. 5.1).



**Abb. 5.1:** Stabilitätsgebiete des expliziten Euler-Verfahrens und des Runge-Kutta Dormand-Prince-Verfahrens 5. Ordnung DOPRI5 (aus [RSW96])

Abb. 5.1 zeigt den Vergleich zwischen den Stabilitätsgebieten des expliziten Euler-Verfahrens 1. Ordnung und des Runge-Kutta Dormand-Prince-Verfahrens 5. Ordnung. Für das Euler-Verfahren ergibt sich als Stabilitätsbereich gerade der Einheitskreis, während das Dormand-Prince-Verfahren einen etwas größeren Bereich aufzuweisen hat. Eine unbegrenzte Schrittweite und damit einen Stabilitätsbereich über die gesamte linke Halbebene können jedoch nur implizite Verfahren aufweisen. Für ein gegebenes  $\lambda$  in (5.6) bedeutet dies eine starke Einschränkung an die Schrittweite  $\Delta t_n$  der Integration bei Benutzung eines expliziten Verfahrens. Analoge Einschränkungen ergeben sich für Differentialgleichungssysteme der Form (5.1) (siehe [RSW96]).

Welche Folgen die Verletzung des Stabilitätsbereiches bei der Wahl eines expliziten Verfahrens zur Integration der Differentialgleichungssysteme der Form (5.1) aus Kapitel 3 haben kann, wird anhand des folgenden Beispiels verdeutlicht:

Simuliert wurde ein monotoner Zugversuch mit konstanter Dehngeschwindigkeit  $\dot{\epsilon} = 10^{-2} \frac{1}{s}$  bis zu einer Dehnung  $\epsilon = 1\%$ . Als Werkstoffmodell wurde das in Kapitel 3.3 beschriebene viskoplastische INTERATOM-Modell gewählt. Der freie Scharparameter in diesem Beispiel ist der Modellparameter  $\gamma(T)$  aus der Überspannungsfunktion (3.76). Zur numerischen Integration des für diesen Versuch gültigen Differentialgleichungssystems (3.79) wurden zwei Verfahren gewählt. Als erstes das klassische Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung mit einer *Schrittweitensteuerung*, die auf folgender Schätzung des lokalen Fehlers (5.3) basiert:

Es werden mit ein- und demselben Verfahren ausgehend von  $\tilde{\mathbf{y}}_n$  zwei Näherungswerte für  $\tilde{\mathbf{y}}(t_n + \Delta t_n)$  bestimmt; zum einen mit der Schrittweite  $\Delta t_n$  der Wert  $\tilde{\mathbf{y}}_{n+1}$ , zum anderen durch zwei Schritte mit der Schrittweite  $\frac{\Delta t_n}{2}$  der Wert  $\tilde{\mathbf{y}}_{n+1}$ . Die Differenz der beiden Werte dient als Fehlerschätzer (siehe z.B. [Bra90]). Effektivere Fehlerschätzer erhält man bei den *eingebetteten Verfahren*, wie dem vorher beschriebenen Dormand-Prince-Verfahren (siehe z.B. [RSW96]).

Das andere eingesetzte Verfahren ist das A-stabile Crank-Nicolson-Verfahren (5.5), welches keine Schrittweitensteuerung benötigt. Die anfängliche Schrittweite beider Verfahren wird identisch gewählt. Da die Eingangsgröße des Differentialgleichungssystems (3.79) bei monotonem Zug die vorgegebene Dehngeschwindigkeit  $\dot{\epsilon}$  darstellt, erscheint es angebracht, die Schrittweite  $\Delta t_n$  von dieser Größe abhängig zu machen. Aus diesem Grund wird für die Schrittweite der Ansatz

$$\Delta t_n = 10^{-(\log_{10}(\dot{\epsilon}) + k)} \quad (5.8)$$

gewählt. Mit der Konstanten  $k$  in (5.8) läßt sich eine gleichmäßig dichte Anzahl von Dehnungspunkten während der Simulation des Zugversuchs erzielen. Im vorliegenden Fall wird  $k = 5$  gewählt. Die minimale Schrittweite des Runge-Kutta-Verfahrens wird auf  $\frac{1}{1000}$  der anfänglichen Schrittweite (5.8) festgelegt<sup>2</sup>.

Die mit den beiden oben genannten Verfahren erzielten Ergebnisse sind in Abb. 5.2 und Abb. 5.3 dargestellt:

<sup>2</sup>Schrittweitensteuerungen müssen immer minimale und maximale Werte beinhalten, um einen regulären Programmablauf zu gewährleisten (siehe [Bra90], S. 147)

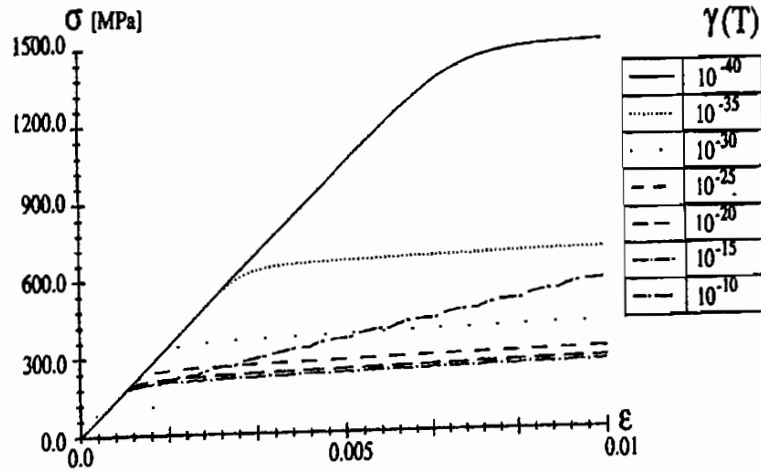


Abb. 5.2: Explizite Integration des INTERATOM-Modells mit dem Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung

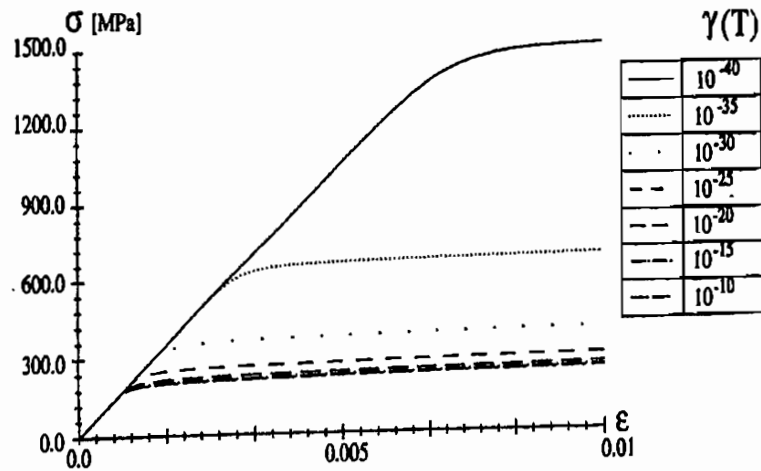


Abb. 5.3: Implizite Integration des INTERATOM-Modells mit dem Crank-Nicolson-Verfahren 2. Ordnung

In Abb. 5.2 erkennt man die Verletzung des Stabilitätsbereiches des Runge-Kutta-Verfahrens aus dem instabilen Verlauf der Kurve mit  $\gamma(T) = 10^{-10} \frac{1}{s}$ . Eine erfolgreiche Anwendung des Runge-Kutta-Verfahrens auf das obige Problem ließe sich nur über eine extreme Verkleinerung der Schrittweite erzielen, bis der Schritt innerhalb des Stabilitätsbereiches verläuft.

Dies führt allerdings zu einem enormen Anwachsen der Rechenzeit, weswegen explizite Verfahren für das vorliegende Problem nicht geeignet sind.

Das Crank-Nicolson-Verfahren dagegen hat trotz 1000-fach größerer Schrittweite, die sich außerdem nicht ändert, keinerlei Probleme, die Zugkurven stabil und genau zu integrieren. Diese Erfahrung deckt sich mit vielen aus der Literatur bekannten Problemen bei der numerischen Integration konstitutiver Gleichungen; so schreiben *Stein* und *Wriggers* in [SW89], daß sich heute implizite Verfahren zur Integration der nichtlinearen Materialgesetze durchgesetzt haben. *Braasch* berichtet in [Bra92] von der Überlegenheit impliziter Verfahren gegenüber expliziten. *Cordts* und *Kollmann* geben in [CK86] einen Überblick über die Problemstellung der Zeitintegration verschiedenster Werkstoffgesetze und entwickeln ein implizites Zeitintegrationsschema für das Modell von *Hart*. *Hartmann* und *Kollmann* vergleichen in [HK87] das einaxiale Antwortverhalten der inelastischen Modelle von *Hart* und *Miller* und kommen zu dem Schluß, daß insbesondere für das Modell von *Hart* das implizite Integrationsschema am effizientesten ist.

In dieser Arbeit sind daher alle Ergebnisse mit dem Crank-Nicolson-Verfahren (5.5) bzw. mit der verbesserten Version des *fractional step Algorithmus* erzielt worden. Das *fractional step*-Verfahren besteht aus einer mehrmaligen Anwendung des Crank-Nicolson-Verfahrens innerhalb eines Zeitschrittes, dabei wird eine geeignete Kombination von stabilisierenden, glättenden und weit tragenden Teilschritten gewählt. Die Ordnung ist um 1 höher als beim Crank-Nicolson-Verfahren. Zu Details dieses Verfahrens siehe z.B. [Bra90].

Die Anwendung des Crank-Nicolson-Verfahrens (5.5) auf Differentialgleichungssysteme der Form (5.1) führt in jedem Zeitschritt auf ein *nichtlineares Gleichungssystem* für die unbekanntenen Werte der Zustandsgrößen  $\vec{y}_{n+1}$ :

$$\vec{y}_{n+1}^{(j)} - \vec{y}_n - \frac{1}{2} \cdot \left( \vec{F}(\vec{y}_n) + \vec{F}(\vec{y}_{n+1}^{(j)}) \right) \cdot \Delta t_n = \vec{0}, \quad j = 0, 1, \dots \quad (5.9)$$

Die Lösung von (5.9) kann aufgrund der Nichtlinearität nur iterativ erfolgen; aus diesem Grunde ist in (5.9) der Iterationsindex  $j$  angegeben. Die richtige Methode zur Lösung von (5.9) ist das *Newton-Verfahren*<sup>3</sup>. Als Startwerte der Iteration  $\vec{y}_{n+1}^{(0)}$  setzt man die bekannten Werte der Zustandsgrößen  $\vec{y}_n$  ein. Bei der Iteration sollte man nicht mehr als drei Schritte ausführen, sondern zur Steigerung der Genauigkeit lieber die Schrittweite  $\Delta t_n$  herabsetzen.

Bei der Anwendung des Newton-Verfahrens auf Gleichung (5.9) wird zuerst eine *Suchrichtung*  $\vec{s}^{(j)}$  ermittelt. Dazu löst man das lineare Gleichungssystem:

$$\underline{J}(\vec{y}_{n+1}^{(j)}) \cdot \vec{s}^{(j)} = - \left( \vec{y}_{n+1}^{(j)} - \vec{y}_n - \frac{1}{2} \cdot \left( \vec{F}(\vec{y}_n) + \vec{F}(\vec{y}_{n+1}^{(j)}) \right) \cdot \Delta t_n \right) \quad (5.10)$$

<sup>3</sup>Nach *Braess* kommt weiterhin im Prinzip noch die Fixpunktiteration in Frage, jedoch fällt man durch die Einführung dieser Iteration 'durch die Hintertür' wieder auf ein explizites Integrationsverfahren zurück, wodurch die Stabilitätseigenschaften verloren gehen (siehe [Bra90], S. 156)

mit der *Jacobi-* bzw. *Funktionalmatrix*

$$J_{kl} := \frac{\partial y_{n+1k}^{(j)}}{\partial y_l} - \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial F_k(\bar{\mathbf{y}}_{n+1}^{(j)})}{\partial y_l} \cdot \Delta t_n \quad (5.11)$$

des nichtlinearen Gleichungssystems (5.9). Zur Lösung des linearen Gleichungssystems (5.10) wurde in dieser Arbeit das *Gaußsche Eliminationsverfahren* [Bra90] verwendet.

Nach Bestimmung der Suchrichtung führt man einen Newton-Schritt zur Bestimmung der gesuchten Zustandsgrößen durch. Für den allgemeinen Fall des *gedämpften Newton-Verfahrens* mit einem Dämpfungsparameter  $\alpha \leq 1$  lautet die Iterationsvorschrift:

Setze  $\bar{\mathbf{y}}_{n+1} = \bar{\mathbf{y}}_{n+1}^{(j)} + \alpha \cdot \bar{\mathbf{s}}^{(j)}$  und prüfe, ob

$$\left\| \bar{\mathbf{y}}_{n+1} - \bar{\mathbf{y}}_n - \frac{1}{2} \cdot (\bar{\mathbf{F}}(\bar{\mathbf{y}}_n) + \bar{\mathbf{F}}(\bar{\mathbf{y}}_{n+1})) \cdot \Delta t_n \right\| \leq \left(1 - \frac{\alpha}{4}\right) \cdot \left\| \bar{\mathbf{y}}_{n+1}^{(j)} - \bar{\mathbf{y}}_n - \frac{1}{2} \cdot (\bar{\mathbf{F}}(\bar{\mathbf{y}}_n) + \bar{\mathbf{F}}(\bar{\mathbf{y}}_{n+1}^{(j)})) \cdot \Delta t_n \right\| \quad (5.12)$$

gilt. Eine geeignete Vektornorm  $\|\cdot\|$  in (5.12) ist z.B. die durch die Anfangswerte der Iteration gewichtete euklidische Vektornorm:

$$\left\| \bar{\mathbf{y}}_{n+1} - \bar{\mathbf{y}}_n - \frac{1}{2} \cdot (\bar{\mathbf{F}}(\bar{\mathbf{y}}_n) + \bar{\mathbf{F}}(\bar{\mathbf{y}}_{n+1})) \cdot \Delta t_n \right\| = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{m+1} \left| y_{n+1k} - y_{nk} - \frac{1}{2} \cdot (F_k(\bar{\mathbf{y}}_n) + F_k(\bar{\mathbf{y}}_{n+1})) \cdot \Delta t_n \right|^2}{\sum_{k=1}^{m+1} \left| y_{n+1k}^{(0)} - y_{nk} - \frac{1}{2} \cdot (F_k(\bar{\mathbf{y}}_n) + F_k(\bar{\mathbf{y}}_{n+1}^{(0)})) \cdot \Delta t_n \right|^2}} \quad (5.13)$$

Durch die Normierung (5.13) sind alle Summanden gleichwertig, und man hat eine sinnvolle Größe zur Steuerung der Iteration. Die Liniensuche (5.12) wird durch Halbierung des Schrittweitenparameters  $\alpha$  fortgesetzt. Nach erfolgreicher Liniensuche setzt man  $\bar{\mathbf{y}}_{n+1}^{(j+1)} = \bar{\mathbf{y}}_{n+1}^{(j)} + \alpha \cdot \bar{\mathbf{s}}^{(j)}$  und startet einen neuen Iterationsschritt. Die Iteration wird solange fortgesetzt, bis die Norm  $\left\| \bar{\mathbf{y}}_{n+1}^{(j+1)} - \bar{\mathbf{y}}_n - \frac{1}{2} \cdot (\bar{\mathbf{F}}(\bar{\mathbf{y}}_n) + \bar{\mathbf{F}}(\bar{\mathbf{y}}_{n+1}^{(j+1)})) \cdot \Delta t_n \right\|$  hinreichend klein ist oder der Iterationsindex  $j$  die Zahl 3 übersteigt. Festzuhalten bleibt, daß man im Falle des gedämpften Newton-Verfahrens zwei ineinander geschachtelte Schleifen zu durchlaufen hat; eine innere für die Schrittweitsuche und eine äußere der Iteration. Das ungedämpfte Newton-Verfahren ( $\alpha \equiv 1$ ) hingegen enthält nur eine Schleife.

Entscheidend bei der Anwendung des Newton-Verfahrens zur Lösung der nichtlinearen Gleichungen (5.9) ist die Sicherung der *Konvergenz* des Verfahrens. *Kollmann* beschäftigt sich in [Kol86] mit dieser Fragestellung und kommt zu dem Ergebnis, daß die maximal zulässige Schrittweite bei der numerischen Integration der konstitutiven Gleichungen (5.1) mit dem Crank-Nicolson-Verfahren vom betragsgrößten Eigenwert  $\lambda_{\max}$  der Jacobi-Matrix (5.11) des nichtlinearen Gleichungssystems (5.9) in der Form

$$\Delta t_n \leq \frac{1}{\lambda_{\max}}, \quad \lambda_{\max} := \max_{1 \leq k \leq m+1} |\lambda_k| \quad (5.14)$$

abhängt. In der vorliegenden Arbeit erwies sich die Abschätzung (5.14) allerdings in den meisten Fällen als zu konservativ.

Die bei der Anwendung des Crank-Nicolson-Verfahrens zur Integration der Modellgleichungen aus Kapitel 3 benötigten Jacobi-Matrizen der nichtlinearen Gleichungssysteme (5.9) sind für verschiedene Lastpfade im Anhang aufgeführt.

## 5.2 Inverses Problem

Die Anpassung der Modelle an einen Satz von Meßdaten führt in der Regel zu *unterbestimmten* Modellparametern (siehe [Tar87]). Dafür gibt es im wesentlichen zwei Gründe:

- Der erste Grund ist der Mangel an Information in den Meßdaten; man versucht, einen kompletten Kurvenverlauf aus einer begrenzten Anzahl an Funktionswerten zu bestimmen. Die eindeutige Bestimmung einer Kurve ist jedoch nur möglich, wenn man alle Punkte kennt.
- Der zweite Grund sind die unvermeidbaren Meßfehler bei den Versuchen; die Streuung der Meßwerte durch die Meßfehler führt zu einer Unsicherheit in der Kenntnis der Modellparameter.

Die beiden oben genannten Gründe führen dazu, daß das inverse Problem im allgemeinen keine eindeutige Lösung besitzt. Die berechnete Lösung hängt von den Lösungsverfahren und den benutzten Schätzern ab. Im Sinne der Mathematik nennt man das inverse Problem daher *schlecht gestellt* (siehe [Tar87]).

Die Wahl der richtigen Methode zur erwartungstreuen Schätzung der Modellparameter der in Kapitel 3 vorgestellten Modelle ist in erster Linie durch die Art der bei den in Kapitel 4 vorgestellten Versuchen auftretenden *Meßfehler* bestimmt. Im Falle *normalverteilter*

Meßfehler mit der Verteilung  $e^{-\frac{1}{2} \cdot \left( \frac{y_i - y(x_i; a_1, \dots, a_m)}{\sigma_i} \right)^2}$  erhält man eine Optimierungsaufgabe

zur  $\ell_2$ -Norm, wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird. Sind dagegen Zweifel an der Normalverteilung angebracht, beispielsweise bei signifikanten *Ausreißern* der Meßwerte, kommt man zu robusteren Methoden. So führt die *Exponentialverteilung*  $e^{-\left| \frac{y_i - y(x_i; a_1, \dots, a_m)}{\sigma_i} \right|}$  (siehe [HG72]) zu der  $\ell_1$ -Norm, die *Cauchy-Verteilung*  $\frac{1}{1 + \frac{1}{2} \cdot \left( \frac{y_i - y(x_i; a_1, \dots, a_m)}{\sigma_i} \right)^2}$  (siehe [HG72])

zur  $\ell_\infty$ -Norm (siehe [Tar87]). Die  $\ell_1$ -Norm weist dabei eine signifikante Unempfindlichkeit gegenüber *Ausreißern* der Meßwerte auf (siehe [PTVF92]).

Die vorliegende Arbeit geht von normalverteilten Meßfehlern aus und beschränkt sich daher auf die im folgenden erläuterte Fehlerquadratmethode.



### 5.2.1 Fehlerquadratmethode

Die Fehlerquadratmethode beruht auf der Fragestellung nach der Wahrscheinlichkeit der gemessenen Daten. Dazu geht man von der Annahme aus, daß die Wirklichkeit durch ein Modell beschrieben wird, wobei ein Satz von Parametern noch fixiert werden muß. In diesem Fall läßt sich die Frage nach der Wahrscheinlichkeit der Realisation eines bestimmten Datensatzes für einen gegebenen Satz Modellparameter stellen. Wenn diese Wahrscheinlichkeit klein ist, läßt dies den Schluß zu, daß die betrachteten Modellparameter nicht die richtigen sein werden. Auf der anderen Seite sollte der Datensatz für die richtige Wahl der Modellparameter nicht zu unwahrscheinlich sein.

Um diesen Sachverhalt zu quantifizieren, geht man von normalverteilten Meßfehlern jedes Meßpunktes  $y_i$  um den wahren Wert  $y(x_i; a_1, \dots, a_m)$  aus. Weiterhin wird angenommen, daß die Standardabweichungen  $\sigma$  dieser Normalverteilungen an jedem Meßpunkt identisch sind. Dann ist die Wahrscheinlichkeit, daß der Datensatz gemessen wird, gerade das Produkt der Wahrscheinlichkeiten jedes Meßpunktes (siehe [PTVF92]):

$$\prod_{i=1}^n \left\{ e^{-\frac{1}{2} \cdot \left( \frac{y_i - y(x_i; a_1, \dots, a_m)}{\sigma} \right)^2} \cdot \Delta y \right\} \rightarrow \max \quad (5.15)$$

In (5.15) bezeichnet die Größe  $\Delta y$  eine feste Streuung an jedem Meßpunkt. Ohne diese wäre die obige Wahrscheinlichkeit immer gleich Null. Die Aufgabe der Fehlerquadratmethode ist nun gerade die *Maximierung* der Wahrscheinlichkeit (5.15). Löst man die Aufgabe erfolgreich, so hat man einen erwartungstreuen Schätzer der Modellparameter gefunden. Die Maximierung von (5.15) ist aufgrund der Monotonie identisch mit der *Minimierung* des negativen Logarithmus der Wahrscheinlichkeit (siehe [PTVF92]). Auf diese Weise erhält man die Wahrscheinlichkeit der Meßdaten  $(x_i, y_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$  zu gegebenen Modellparametern  $a_j$ ,  $j = 1, \dots, m$ :

$$\left[ \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - y(x_i; a_1, \dots, a_m))^2}{2 \cdot \sigma^2} \right] - n \cdot \log \Delta y \rightarrow \min \quad (5.16)$$

Da die Anzahl  $n$  der Meßwerte und die Streuung  $\Delta y$  in (5.16) konstant sind, haben sie im Prinzip keinen Einfluß auf das Minimum. Läßt man weiterhin eine separate Standardabweichung jedes Meßpunktes zu, so gelangt man zu einer *Maximum-Likelihood*-Schätzung der Modellparameter, also einer Schätzung, die das beobachtete Verhalten mit maximaler Wahrscheinlichkeit wiedergibt (siehe [PTVF92]):

$$f(\vec{a}) = \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - y(x_i; a_1, \dots, a_m))^2}{\sigma_i^2} \rightarrow \min_{\vec{a} \in \mathbb{R}^m} \quad (5.17)$$

Die Fehlerquadratfunktion (5.17) wird in der Literatur (siehe z.B. [DS83]) häufig in Vektordarstellung geschrieben. Auf diese Weise gelangt man zur *Least-Squares*-Anpassung der Modellparameter:

$$f(\vec{a}) = \frac{1}{2} \cdot \vec{r}(\vec{a})^T \cdot \underline{\mathbf{G}} \cdot \vec{r}(\vec{a}), \quad \vec{r}: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad n > m \quad (5.18)$$

In (5.18) bezeichnet  $\vec{r}(\vec{a})$  den von  $m$  Modellparametern abhängigen Vektor der *Residuen* oder Schätzfehler:

$$\vec{r}(\vec{a})^T = (r_1(\vec{a}), r_2(\vec{a}), \dots, r_n(\vec{a})) \quad , \quad r_i(\vec{a}) = (y_i - y(x_i; a_1, \dots, a_m)) \quad , \quad i = 1, \dots, n \quad (5.19)$$

Die Standardabweichungen  $\sigma_i$  werden in der Diagonalmatrix  $\underline{G}$  angeordnet:

$$G_{ii} = \frac{1}{\sigma_i^2} \quad , \quad i = 1, \dots, n \quad (5.20)$$

Sinnvoll ist die Least-Squares-Anpassung, wenn eine wesentlich größere Anzahl von Meßwerten als von Modellparametern vorliegt.

### 5.2.1.1 Optimalitätsbedingungen

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der Frage, wann die Optimierungsaufgabe (5.17) als gelöst betrachtet werden kann. Oft gibt es eine Reihe von lokalen Lösungen des Optimierungsproblems, die eine mehr oder minder gute Anpassung des Modells an die Meßdaten liefern. Aus diesem Grund wird im folgenden zwischen *globalen und lokalen Optima* unterschieden.

In mathematischer Schreibweise formuliert man (5.17) als Optimierungsaufgabe (siehe [GT93]):

$$f(\vec{x}) \longrightarrow \min_{\vec{x} \in G} \quad (5.21)$$

In (5.21) bezeichnen:

$f : G \rightarrow \mathbb{R}$     *Zielfunktion*  
 $G \subset \mathbb{R}^n$         *zulässiger Bereich*  
 $\vec{x} \in G$             *zulässige Lösung*

Man hat also die Aufgabe zu lösen, das Minimum einer Funktion  $f$  von  $n$  Veränderlichen  $\vec{x}$  in einem Bereich  $G$  zu suchen, der eine Teilmenge des  $n$ -dimensionalen Parameterraums  $\mathbb{R}^n$  ist. Der zulässige Bereich  $G$  sei durch Nebenbedingungen in Form von Ungleichungen gegeben:

$$G = \{ \vec{x} \in \mathbb{R}^n : g_j(\vec{x}) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m \} \quad (5.22)$$

Gleichung (5.22) besagt, daß die Suche nach dem Optimum der Funktion  $f$  durch  $m$  beliebige Funktionen  $g_j(\vec{x})$  eingeschränkt wird, für die jeweils gefordert wird, daß sie nicht positiv werden. Für den Spezialfall der freien Minimierung von  $f$  darf  $m$  auch 0 sein. Die Funktionen  $g_j$  in (5.22) werden als *Restriktionen* bezeichnet.

Eine optimale Lösung von Problem (5.21) hat definitionsgemäß zwei Forderungen zu erfüllen:

- (i)  $\vec{x}^* \in G$

$$(ii) f(\vec{x}^*) \leq f(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in G$$

Forderung (i) besagt, daß die optimale Lösung  $\vec{x}^*$  im zulässigen Gebiet liegt und (ii), daß der Funktionswert an dieser Stelle kleiner ist als alle anderen im zulässigen Gebiet.

Die Frage, ob es überhaupt eine Lösung von (5.21) gibt, wird durch den *Satz von Weierstraß* beantwortet (siehe [GT93]):

Wenn

- (i)  $G \subset \mathbb{R}^n$ ,  $G \neq \emptyset$ ,  $G$  eine abgeschlossene und beschränkte Menge ist und
- (ii)  $f$  stetig auf  $G$  ist,

dann gilt:

$\Rightarrow$  Problem (5.21) besitzt mindestens eine optimale Lösung.

Aufgrund der oben beschriebenen Multimodalität der Zielfunktion kommt man zur Formulierung einer lokalen Lösung von Problem (5.21); man verlangt nicht mehr, daß die Lösung für das gesamte Gebiet  $G$  gilt, sondern nur noch für einen Teilbereich:

- (i)  $\vec{x}^* \in G$
- (ii)  $f(\vec{x}^*) \leq f(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in G \cap U(\vec{x}^*)$

Die Umgebung  $U$  ist wie folgt definiert:

$$U(\vec{x}^*) = \{\vec{x} \in \mathbb{R}^n : \|\vec{x} - \vec{x}^*\| < \varepsilon, \varepsilon > 0\} \quad (5.23)$$

(5.23) bezeichnet eine passende  $\varepsilon$ -Umgebung der optimalen Lösung  $\vec{x}^*$  mit einer geeigneten Vektornorm  $\|\cdot\|$ .

Eine globale Lösung von Problem (5.21) läßt sich durch Einschränkungen an die Zielfunktion und den zulässigen Bereich erreichen. Wenn z.B.

- (i)  $G$  eine konvexe Menge ist und
- (ii)  $f$  eine konvexe Funktion,

dann gilt:

$\Rightarrow$  Jede lokale Lösung von (5.21) ist auch eine globale Lösung.

Eine konvexe Menge enthält dabei mit zwei beliebigen Punkten auch stets die Verbindungslinie zwischen den beiden. Eine konvexe Funktion ist durch ihre Krümmung gekennzeichnet. Um handliche *Optimalitätsbedingungen* herzuleiten, stellt man weitere Forderungen an die Funktionen  $f$  und  $g_j$ . Im weiteren wird vorausgesetzt, daß

$f, g_j : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  zweimal stetig differenzierbar

sind. Unter diesen Voraussetzungen lassen sich für die beiden Grundtypen von Optimierungsaufgaben Optimalitätskriterien angeben. Als erster Typ wird betrachtet:

(i) Aufgaben ohne Nebenbedingungen:

$$f(\vec{x}) \rightarrow \min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^n} \quad (5.24)$$

Für eine konvexe Funktion  $f$  lautet die notwendige und hinreichende Bedingung für ein Minimum von (5.24):

$$\nabla f(\vec{x}^*) = 0 \quad (5.25)$$

Dabei bezeichnet

$$\nabla f(\vec{x}^*) = \left( \frac{\partial f(\vec{x}^*)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f(\vec{x}^*)}{\partial x_n} \right)^T \in \mathbb{R}^n \quad (5.26)$$

den Gradientenvektor im Minimum. In Worten ausgedrückt verlangt (5.25), daß der Gradient der Zielfunktion  $f$  im Minimum verschwindet, so daß  $f$  an dieser Stelle eine horizontale Tangente besitzt.

Der zweite Typ von Aufgaben ist der allgemeine Fall der Minimierung einer Zielfunktion unter Berücksichtigung von Nebenbedingungen:

(ii) Aufgaben mit Nebenbedingungen:

$$f(\vec{x}) \rightarrow \min_{\vec{x} \in G} \quad (5.27)$$

$$G = \{ \vec{x} \in \mathbb{R}^n : g_j(\vec{x}) \leq 0, j = 1, \dots, m \} \quad (5.28)$$

Die vorher gestellte Forderung nach dem Verschwinden des Gradientenvektors ist beim Typ (ii) zu stark. Die Herleitung geeigneter Kriterien bedingt zusätzliche Forderungen an die Restriktionsfunktionen. Dabei ist eine Restriktion *aktiv*, wenn sie am Ort des Minimums greift. Weiter davon entfernt liegende Restriktionen brauchen für die folgenden Überlegungen nicht betrachtet zu werden. Zur Festlegung, welche Restriktionen aktiv sind und welche nicht, definiert man die *Indexmenge der aktiven Restriktionen*:

$$I_0(\vec{x}^*) = \{ j \in \{1, \dots, m\} : g_j(\vec{x}^*) = 0 \} \quad (5.29)$$

(5.29) drückt aus, daß nach Kontrolle aller Restriktionen diejenigen markiert werden, deren Wert gerade an der zulässigen Grenze liegt. Wir verlangen von den aktiven Restriktionen folgende *Regularitätsbedingungen*:

- a)  $g_j$ ,  $j = 1, \dots, m$ , sind konvexe Funktionen.  
 b)  $\nabla g_j(\bar{\mathbf{x}}^*)$ ,  $j \in I_0(\bar{\mathbf{x}}^*)$ , sind linear unabhängig.

Mit Hilfe der Indexmenge (5.29) lassen sich notwendige und hinreichende Bedingungen für das Vorliegen eines Minimums definieren, die sogenannten *Kuhn-Tucker-Bedingungen* (siehe [GT93]):

$$\nabla f(\bar{\mathbf{x}}^*) + \sum_{j \in I_0(\bar{\mathbf{x}}^*)} u_j^* \cdot \nabla g_j(\bar{\mathbf{x}}^*) = 0, \quad u_j^* \geq 0, \quad j \in I_0(\bar{\mathbf{x}}^*) \quad (5.30)$$

(5.30) besagt, daß Zahlen  $u_j^* \geq 0$  existieren, für die die Bedingung  $\nabla f(\bar{\mathbf{x}}^*) + \sum_{j \in I_0(\bar{\mathbf{x}}^*)} u_j^* \cdot \nabla g_j(\bar{\mathbf{x}}^*) = 0$  erfüllt ist, wenn die Restriktionen aktiv sind. Wenn keine Restriktion aktiv ist, geht die Forderung (5.30) in (5.25) über. Anschaulich besagen die Kuhn-Tucker-Bedingungen, daß der negative Gradient der Zielfunktion im Minimum innerhalb des Kegels liegen muß, der von den Gradienten der aktiven Restriktionen aufgespannt wird (siehe Abb. 5.4).

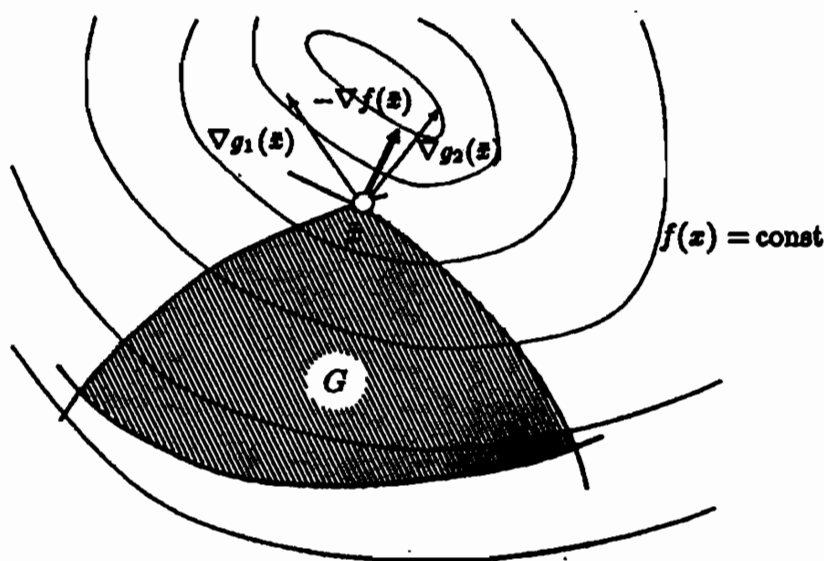


Abb. 5.4: Kuhn-Tucker-Bedingungen (aus [GT93])

Einen Überblick über weitere Möglichkeiten zur Kennzeichnung von Minima der Zielfunktion gibt die Arbeit von *Mahnken* [Mah92].

### 5.2.1.2 Approximation von Gradienten

Um eine Optimierungsaufgabe erfolgreich zu lösen, braucht man in der Regel Informationen über die ersten Ableitungen der Zielfunktion  $f$  und der Restriktionen  $g_j$ . Der folgende

Abschnitt beschäftigt sich daher mit der Bereitstellung der zur Charakterisierung eines Minimums notwendigen Information über die Gradienten der Zielfunktion.

Im vorliegenden Fall der Minimierung einer Fehlerquadratsumme für die in Kapitel 3 beschriebenen Modelle stößt man auf eine Besonderheit; wie in Kapitel 5.1.1 beschrieben, handelt es sich bei den Modellen um Differentialgleichungssysteme 1. Ordnung, deren Lösung in die Fehlerquadratsumme eingeht. Da diese Lösung nach Kapitel 5.1.1 jedoch numerisch ermittelt wird, läßt sich in der Fehlerquadratsumme kein analytischer Ausdruck für die Modelle angeben. Entsprechend ist es dann auch nicht möglich, für die ersten Ableitungen der Zielfunktion analytische Ausdrücke zu finden. Man ist daher auf numerische Verfahren zur Bestimmung der Gradienten angewiesen. Dies sind in erster Linie Approximationen von Gradienten durch *Differenzenquotienten* (siehe z.B. [DS83]).

Im einfachsten Fall einer Funktion  $f$  einer Veränderlichen  $x$  und einer Sekantenapproximation des Gradienten durch den vorwärtsgenommenen Differenzenquotienten erhält man:

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \frac{\Delta f}{h} \quad (5.31)$$

In (5.31) bezeichnet  $h$  die Schrittweite, um die  $x$  verändert wird, um die Steigung der Kurve  $f(x)$  zu approximieren. Eine exakte Kenntnis dieser Steigung läßt sich jedoch nur für den Grenzübergang  $h \rightarrow 0$  erzielen, was jedoch aus numerischen Gründen nicht möglich ist, wie die folgenden Ausführungen verdeutlichen.

Bei der numerischen Berechnung des Gradienten von  $f$  macht man zwei Fehler; der erste ist der sogenannte *Abbruch- oder Diskretisierungsfehler*  $E_A$ , der ausdrückt, wie genau die Sekantenapproximation den wahren Kurvenverlauf wiedergibt:

$$E_A = \left| \frac{\frac{f(x+h)-f(x)}{h} - \frac{df(x)}{dx}}{\frac{df(x)}{dx}} \right| = \left| \frac{\frac{\Delta f}{h} - \frac{df(x)}{dx}}{\frac{df(x)}{dx}} \right| \quad (5.32)$$

Desweiteren macht man bei der numerischen Berechnung von Funktionswerten auf einem Rechner mit einer begrenzten Rechengenauigkeit Fehler durch *Aufrunden* bzw. *Abbrechen* reeller Zahlen nach einer gewissen Anzahl Nachkommastellen (siehe z.B. [DS83]). Aus diesem Grund läßt sich für die Funktion  $f(x)$  nur eine Näherung

$$f^*(x) = f(x) \cdot (1 + \zeta_1) \quad , \quad |\zeta_1| \leq \eta \quad (5.33)$$

angeben. Die Größe  $\zeta_1$  in (5.33) quantifiziert den Fehler, den man bei der Berechnung macht. Zur Abschätzung dieses Fehlers dient die *Fehlergrenze*  $\eta$ . Analog zu (5.33) macht man auch bei der Berechnung des Funktionswertes an der Stelle  $x+h$  einen Fehler  $\zeta_2$ , der wiederum durch  $\eta$  abgeschätzt wird.

$$f^*(x+h) = f(x+h) \cdot (1 + \zeta_2) \quad , \quad |\zeta_2| \leq \eta \quad (5.34)$$

Von entscheidender Bedeutung für die Größe der Ungenauigkeit bei der Berechnung der Funktionswerte ist die Fehlergrenze  $\eta$ .

Im Fall, daß ein analytischer Ausdruck für die Funktion gegeben ist, läßt sich die Ungenauigkeit leicht ermitteln; dazu führt man die sogenannte *Maschinengenauigkeit* *macheps*

ein (siehe [DS83]). Zur Bestimmung der Maschinengenauigkeit dient das einfache Programm:

$$\begin{aligned} & macheps := 1 \\ & WHILE 1 + macheps > 1 DO \\ & macheps := \frac{macheps}{2} \end{aligned} \quad (5.35)$$

Mit dem Programm (5.35) findet man beispielsweise auf einer SUN Sparc-Station 10/20 bei einer Rechnung mit doppelter Genauigkeit den Wert:

$$macheps = 2^{-53} \approx 1.11022302 \cdot 10^{-16} \quad (5.36)$$

(5.36) besagt, daß der Rechner 53 Halbierungsschritte ausführen kann, bevor die Unterscheidung zweier fast gleichgroßer Zahlen auf der 16. Nachkommastelle scheitert. Bei einer Rechnung mit einfacher Genauigkeit würde die Unterscheidung entsprechend früher scheitern.

Aus (5.33) und (5.34) folgt:

$$\Delta f^* = \Delta f + \zeta_2 \cdot f(x+h) - \zeta_1 \cdot f(x) \quad (5.37)$$

$$\text{mit:} \quad \Delta f = f(x+h) - f(x)$$

Der zweite Fehler bei der Sekantenapproximation von Gradienten ist daher der sogenannte *Rundungsfehler*  $E_R$ , der ausdrückt, wie stark die Ungenauigkeit der Berechnung der Funktionswerte in die Approximation eingeht.

$$E_R = \left| \frac{\Delta f^* - \Delta f}{\Delta f} \right| \quad (5.38)$$

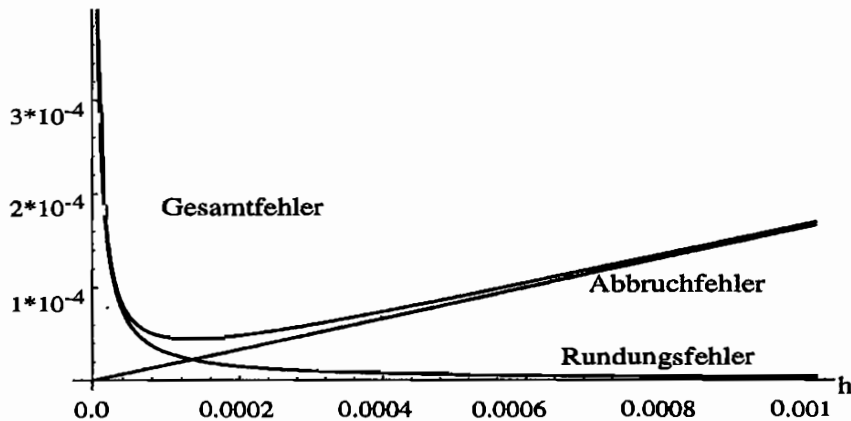
Aus (5.37) und (5.38) folgt:

$$E_R = \left| \frac{\zeta_2 \cdot f(x+h) - \zeta_1 \cdot f(x)}{\Delta f} \right| \quad (5.39)$$

Beide Fehler, Abbruch- und Rundungsfehler, überlagern sich bei der konkreten Problemstellung zum *Gesamtfehler*  $E_G$ , so daß

$$E_G = E_A + E_R \quad (5.40)$$

gilt. Dabei zeigt sich die typische Gegenläufigkeit der Effekte, wie in Abb. 5.5 dargestellt ist:



**Abb. 5.5:** Gegenläufiges Verhalten von Abbruch- und Rundungsfehlern

Wie aus Abb. 5.5 deutlich wird, sinkt der Abbruchfehler mit kleiner werdender Schrittweite  $h$ , weil die Sekantenapproximation der wahren Steigung immer genauer wird. Gegenteilig verhält sich der Rundungsfehler; je größer die Schrittweite  $h$  wird, desto weniger geht die Genauigkeit der Berechnung der Funktionswerte in die Sekantenapproximation ein. Durch die Überlagerung dieser beiden Effekte entsteht das sogenannte *Schrittweitendilemma*, welches in vielen anderen Bereichen der Numerik ebenso von Bedeutung ist (siehe [Bra90], S. 64).

Bei dem in dieser Arbeit vorliegenden Fall, daß der Funktionswert das Ergebnis der Integration eines Differentialgleichungssystems ist, hängt der zweite Fehler nicht mehr nur von der Maschinengenauigkeit ab; wesentlich ist die Genauigkeit des benutzten Integrationsverfahrens (siehe Kapitel 5.1.1). Daher ist der zweite Fehler nicht eigentlich ein Rundungsfehler, sondern der Fehler bei der Auswertung des Differentialgleichungssystems, also ein *Diskretisierungsfehler*. Eine allgemeine Abschätzung der Fehlergrenze  $\eta$  kann nicht angegeben werden.

Zur Lösung des Schrittweitendilemmas betrachtet Stewart in [Ste67] die folgende quadra-



tische Funktion<sup>4</sup>:

$$f(x) = a \cdot x^2 + b \cdot x + c \quad (5.41)$$

Aus (5.41) folgt:

$$f(x+h) = f(x) + h \cdot \frac{df(x)}{dx} + a \cdot h^2 \quad (5.42)$$

Der wahre Gradient von (5.41) lautet:

$$\frac{df(x)}{dx} = 2 \cdot a \cdot x + b \quad (5.43)$$

Für den *Abbruchfehler* gilt in diesem Fall:

$$E_A = \left| \frac{a \cdot h}{\frac{df(x)}{dx}} \right| \quad (5.44)$$

Der *Rundungsfehler* ergibt sich zu:

$$E_R \leq \eta \cdot \left\{ \frac{2 \cdot |f(x)|}{\left| h \cdot \left( \frac{df(x)}{dx} + a \cdot h \right) \right|} + 1 \right\} \quad (5.45)$$

Als beste Kompromißlösung des oben beschriebenen Dilemmas wird im allgemeinen angestrebt (siehe Abb. 5.5):

$$E_A \approx E_R$$

Aus (5.44) und (5.45) folgt dann der Kompromiß:

$$h^2 \cdot |a| \cdot \left| \frac{df(x)}{dx} + a \cdot h \right| - 2 \cdot \eta \cdot |f(x)| \cdot \left| \frac{df(x)}{dx} \right| - |h| \cdot \eta \cdot \left| \frac{df(x)}{dx} \right| \cdot \left| \frac{df(x)}{dx} + a \cdot h \right| = 0 \quad (5.46)$$

Zur Auflösung der Gleichung (5.46) dienen die folgenden Fallunterscheidungen:

1.  $a > 0 \Rightarrow \text{sign}(h) = \text{sign}\left(\frac{df(x)}{dx}\right)$
2.  $a < 0 \Rightarrow \text{sign}(h) = -\text{sign}\left(\frac{df(x)}{dx}\right)$

Anschaulich verlangt man durch 1. und 2., daß die Sekante bei der Approximation immer vom Scheitelpunkt der Parabel (5.41) weggeführt. Die weitere Auflösung der Gleichung (5.46) führt auf die folgenden beiden Fallunterscheidungen; für  $f(x) > 0$  folgt aus (5.41):

$$h^3 \cdot a^2 + h^2 \cdot a \cdot \frac{df(x)}{dx} - h \cdot \eta \cdot \left( \frac{df(x)}{dx} \right)^2 - 2 \cdot \eta \cdot f(x) \cdot \frac{df(x)}{dx} = 0 \quad , \quad a > 0 \quad (5.47)$$

<sup>4</sup>Quadratische Funktionen werden oft benutzt, um Funktionen zu approximieren, daher ist eine quadratische Funktion durchaus repräsentativ für die Problemstellung

$$h^3 \cdot a^2 + h^2 \cdot a \cdot \frac{df(x)}{dx} - h \cdot \eta \cdot \left( \frac{df(x)}{dx} \right)^2 + 2 \cdot \eta \cdot f(x) \cdot \frac{df(x)}{dx} = 0 \quad , \quad a < 0 \quad (5.48)$$

Für  $f(x) < 0$  folgt aus (5.41):

$$h^3 \cdot a^2 + h^2 \cdot a \cdot \frac{df(x)}{dx} - h \cdot \eta \cdot \left( \frac{df(x)}{dx} \right)^2 + 2 \cdot \eta \cdot f(x) \cdot \frac{df(x)}{dx} = 0 \quad , \quad a > 0 \quad (5.49)$$

$$h^3 \cdot a^2 + h^2 \cdot a \cdot \frac{df(x)}{dx} - h \cdot \eta \cdot \left( \frac{df(x)}{dx} \right)^2 - 2 \cdot \eta \cdot f(x) \cdot \frac{df(x)}{dx} = 0 \quad , \quad a < 0 \quad (5.50)$$

Für die optimale Schrittweite  $h$  zur Lösung von (5.47) bis (5.50) gilt nach *Dennis* und *Schnabel* [DS83] die einfache Abschätzung:

$$h = \sqrt{\eta} \cdot \max(|x|, \text{typ}(x)) \cdot \text{sign}(x) \quad (5.51)$$

In (5.51) bezeichnet  $\text{typ}(\cdot)$  die *Größenordnung* einer Zahl und  $\text{sign}(\cdot)$  deren Vorzeichen. Eine einfache Abschätzung der Größenordnung einer Zahl  $x$  liefert:

$$\text{typ}(x) = \begin{cases} 10^{\text{int}(\log_{10}(|x|)+0.30103)} & , \quad \text{falls } |x| \geq 1 \\ 10^{\text{int}(\log_{10}(|x|)-0.69897)} & , \quad \text{falls } 0 < |x| < 1 \end{cases} \quad (5.52)$$

Die Größe  $\text{int}(\cdot)$  in (5.52) bezeichnet den ganzzahligen Anteil einer Zahl. Die Faustformel (5.51) läßt sich problemlos auf den allgemeinen Fall einer quadratischen Funktion von  $n$  Veränderlichen erweitern:

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{2} \cdot \vec{x}^T \cdot \underline{\mathbf{A}} \cdot \vec{x} + \vec{x}^T \cdot \vec{\mathbf{b}} + c \quad (5.53)$$

Aus (5.53) folgt:

$$f(\vec{x} + h_j \cdot \vec{\mathbf{e}}_j) = f(\vec{x}) + h_j \cdot \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_j} + \frac{1}{2} \cdot a_{jj} \cdot h_j^2 \quad (5.54)$$

In (5.54) bezeichnet  $\vec{\mathbf{e}}_j$  den Einheitsvektor in  $j$ -Richtung und  $h_j$  die Schrittweite zur  $j$ -ten Komponente  $x_j$  des Vektors  $\vec{x}$ . Der wahre Gradientenvektor von (5.53) lautet:

$$\nabla f(\vec{x}) = \underline{\mathbf{A}} \cdot \vec{x} + \vec{\mathbf{b}} \quad (5.55)$$

Entsprechend ergibt sich der *Abbruchfehler*:

$$E_A = \left| \frac{\frac{1}{2} \cdot a_{jj} \cdot h_j}{\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_j}} \right| \quad (5.56)$$

und der *Rundungsfehler*:

$$E_R \leq \eta \cdot \left\{ \frac{2 \cdot |f(\vec{x})|}{\left| h_j \cdot \left( \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_j} + \frac{1}{2} \cdot a_{jj} \cdot h_j \right) \right|} + 1 \right\} \quad (5.57)$$

Man erkennt sofort die Analogien zum eindimensionalen Fall:

$$\begin{aligned} h_j &\hat{=} h \\ \frac{1}{2} \cdot a_{jj} &\hat{=} a \\ \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_j} &\hat{=} \frac{df(x)}{dx} \end{aligned} \quad (5.58)$$

Aufgrund der Analogien (5.58) bleiben alle vorher gewonnenen Ergebnisse gültig; man braucht nur die entsprechenden Komponenten in die Faustformel (5.51) einzusetzen und kommt so zu der einfachen Abschätzung (siehe DS83, S. 103):

$$h_j = \sqrt{\eta} \cdot \max(|x_j|, \text{typ}(x_j)) \cdot \text{sign}(x_j) \quad (5.59)$$

### 5.2.1.3 Nichtlineare Least-Squares-Verfahren

Der folgende Abschnitt zeigt spezielle Lösungsmethoden für das in Kapitel 5.2.1 vorgestellte *Least-Squares-Problem* (5.18). Diese Lösungsverfahren nutzen die spezielle Struktur der Least-Squares-Funktion (5.18) zur Lösung des Problems aus (siehe [DS83]). Dies ist der wesentliche Unterschied zu den in Kapitel 5.2.1.4 vorgestellten Optimierungsverfahren, wie im folgenden deutlich wird.

Im Sonderfall, daß genauso viele Meßwerte wie zu bestimmende Modellparameter vorliegen, geht das Least-Squares-Problem (5.18) über in die Lösung von  $n$  Gleichungen mit  $n$  Unbekannten. Dieser Fall ist so zu behandeln wie in Abschnitt 5.1.1 beschrieben. Im reinen Least-Squares-Fall mit mehr Meßwerten als zu schätzenden Modellparametern geht man von einem quadratischen Modell der Least-Squares-Funktion  $f(\vec{a})$  von  $m$  Modellparametern  $a_j$  um einen gegebenen Parametersatz  $\vec{a}^k$  aus. Die notwendige Bedingung für ein Minimum der quadratischen Approximation von  $f(\vec{a})$  in einem Punkt  $\vec{a}^{k+1}$  führt unmittelbar zur Iterationsvorschrift des *Newton-Verfahrens*:

$$\vec{a}^{k+1} = \vec{a}^k - \left( \underline{\mathbf{J}}(\vec{a}^k)^T \cdot \underline{\mathbf{J}}(\vec{a}^k) + \underline{\mathbf{S}}(\vec{a}^k) \right)^{-1} \cdot \underline{\mathbf{J}}(\vec{a}^k)^T \cdot \vec{r}(\vec{a}^k) \quad (5.60)$$

In (5.60) bezeichnet  $\vec{r}(\vec{a})$  wie vorher den Vektor der Residuen oder Schätzfehler,

$$J(\vec{a})_{ij} = \frac{\partial r_i(\vec{a})}{\partial a_j}; \quad \underline{\mathbf{J}}(\vec{a}) \in \mathbb{R}^{n \times m} \quad (5.61)$$

die Jacobi- oder Funktionalmatrix und die Matrix

$$\underline{\mathbf{S}}(\vec{a}) = \sum_{i=1}^n r_i(\vec{a}) \cdot \nabla^2 r_i(\vec{a}) \quad (5.62)$$

die Informationen aus den zweiten Ableitungen der Least-Squares-Funktion. Das reine Newton-Verfahren (5.60) zeichnet sich dabei durch lokale *quadratische Konvergenz* aus, was durch folgende Beziehung quantifiziert wird (siehe [GT93]):

$$\|\vec{a}^{k+1} - \vec{a}^*\| \leq c \cdot \|\vec{a}^k - \vec{a}^*\|^2 \quad \forall k \geq \hat{k} \geq 0, c \geq 0 \quad (5.63)$$

Gleichung (5.63) besagt, daß ab einer bestimmten Anzahl  $\hat{k}$  Iterationen der Abstand der Iterierten  $\vec{a}^{k+1}$  vom Minimum  $\vec{a}^*$  der Fehlerquadratsumme quadratisch abnimmt. Ein Problem des reinen Newton-Verfahrens ist allerdings die Bereitstellung der in der Matrix  $\underline{S}(\vec{a})$  enthaltenen Information über die zweiten Ableitungen der Fehlerquadratsumme. Aus diesem Grund wird vielfach diese Information vernachlässigt, d.h.  $\underline{S}(\vec{a}) = \underline{0}$  gesetzt. In diesem Fall spricht man vom *Gauss-Newton-Verfahren* (siehe [DS83]). In der Regel ist nur noch mit linearer Konvergenz zu rechnen.

Eine andere Darstellung des Gauss-Newton-Verfahrens wird von *Braess* in [Bra66] benutzt, um eine Dämpfung auf natürliche Weise einzubringen und auch Restriktionen in den Parametern zuzulassen. Anstatt von (5.18) geht es von dem aus der Taylorreihenentwicklung der Funktionen  $y(x_i; a_1, \dots, a_m)$  im Punkt  $\vec{a}^k$  folgenden quadratischen Ausdruck

$$\frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{\left( y_i - y(x_i; a_1^k, \dots, a_m^k) - \nabla y(x_i; a_1^k, \dots, a_m^k)^T \cdot (\vec{a} - \vec{a}^k) \right)^2}{\sigma_i^2} \rightarrow \min_{\vec{a} \in \mathbb{R}^m} \quad (5.64)$$

aus. Mit (5.64) ist ein *quadratisches Programm* definiert, welches mit dem Verfahren von *Wolfe* (siehe [CW66]) gelöst werden kann.

Es wird in jedem Iterationsschritt getestet, ob die Lösung zu einer Verkleinerung der Fehlerquadratsumme führt. Ist das der Fall, hat man die Näherung  $\vec{a}^{k+1}$  gefunden. Andernfalls führt man einen Halbierungsschritt aus, d.h. man halbiert die Änderung gegenüber  $\vec{a}^k$  und wiederholt den Test. Ist  $\vec{a}^k$  nicht schon ein Minimum der Fehlerquadratsumme, so fällt der Test nach einer endlichen Anzahl von Halbierungsschritten, welche in der Praxis auf ca. 10 zu begrenzen ist, positiv aus (siehe [Bra66]).

Eine Umsetzung findet das Verfahren von *Wolfe* in dem von *Braess* entwickelten Programm SQUFIT (siehe [Bra76]).

### 5.2.1.4 Allgemeine Optimierungsverfahren

In diesem Abschnitt werden allgemeine Lösungsmethoden für das *Least-Squares-Problem* (5.18) vorgestellt, welche —im Gegensatz zu den nichtlinearen Least-Squares-Verfahren aus Kapitel 5.2.1.3— nicht mehr von einer Fehlerquadratsumme als zu minimierender Funktion ausgehen. Sie sind prinzipiell genauso geeignet, das vorliegende Schätzproblem der Modellparameter zu lösen. Insbesondere sind sie auch geeignet, eine große Zahl von Parametern zu optimieren, was besonders auf den im folgenden vorgestellten Algorithmus von *Schittkowski* zutrifft (siehe z.B. [MS94a] und [MS94b]). Da das erweiterte INTERATOM-Modell aus Kapitel 3.3 eine größere Zahl von Parametern enthält, wurde in dieser Arbeit

—neben dem in Kapitel 5.2.1.3 beschriebenen Gauß-Newton-Verfahren— auch das Verfahren der sequentiellen quadratischen Programmierung benutzt.

Der Grundgedanke der allgemeinen Optimierungsverfahren ist wie vorher die *lokale Approximation* der Zielfunktion  $f$  im Iterationspunkt  $\vec{x}^k$  durch ihre nach dem quadratischen Glied abgebrochene *Taylor-Reihe*. Die notwendige Bedingung für das Vorliegen eines Minimums des lokalen Modells von  $f$  im Punkt  $\vec{x}^{k+1}$  führt dann unmittelbar zur Iterationsvorschrift des *Newton-Verfahrens* (vergleiche Gleichung (5.60)):

$$\vec{x}^{k+1} = \vec{x}^k - \nabla^2 f(\vec{x}^k)^{-1} \cdot \nabla f(\vec{x}^k) \quad (5.65)$$

Wie man in (5.65) erkennt, gehen im vorliegenden Fall der Minimierung einer Fehlerquadratsumme die einzelnen Summanden, sprich die Residuen, nicht mehr mit in die Iterationsvorschrift ein; stattdessen werden nur noch die ersten und zweiten Ableitungen der Summe benötigt. Dies ist der wesentliche Unterschied zu den vorher diskutierten Least-Squares-Verfahren.

Das reine Newton-Verfahren zeichnet sich, wie vorher, durch lokale quadratische Konvergenz aus, was wiederum durch Gleichung (5.63) quantifiziert wird. Das Problem der Bereitstellung der Information über die Krümmung der Zielfunktion durch die zweiten Ableitungen von  $f$ , welches bereits in Abschnitt 5.2.1.3 diskutiert wurde, besteht auch hier. Dies führt zu verschiedenen Varianten des Newton-Verfahrens, von denen hier nur einige genannt werden sollen. Verzichtet man ganz auf die Krümmungsinformation, d.h. setzt man  $\nabla^2 f(\vec{x}) = \mathbf{I}$ , gelangt man zum *Verfahren des steilsten Abstiegs* mit lokaler linearer Konvergenz. Ein weiterer Weg ist die iterative Bestimmung der Krümmungsinformation durch die ersten Ableitungen von  $f$ ; dies führt zu den sogenannten *Quasi-Newton-Verfahren*. Populär ist hier die *Aufdatierungsformel* von *Broyden*, *Fletcher*, *Goldfarb* und *Shanno*, welche auch unter dem Namen des *Verfahrens der variablen Metrik* bekannt ist. Zu Einzelheiten der vorgenannten Verfahren siehe z.B. [GT93], [DS83], [Bra90] oder [Mah92].

Eine spezielle Form des Newton-Verfahrens ist von *Bertsekas* für Probleme mit einfachen Restriktionen entwickelt worden (siehe [Ber82]):

$$G = \{\vec{x} \in \mathbb{R}^n : x^u_i \leq x_i \leq x^o_i, i = 1, \dots, n\} \quad (5.66)$$

Nach Gleichung (5.66) geht man in diesem Fall davon aus, daß für die zu optimierenden Parameter  $\vec{x}$  nur obere und untere Schranken existieren, die den zulässigen Bereich markieren. Um die Zulässigkeit der Iterierten zu sichern, führt *Bertsekas* einen *Projektionsoperator*:

$$P : \mathbb{R}^n \longrightarrow G, \left( P \left\{ \vec{x} \right\} \right)_i = \min(\max(x^u_i, \tilde{x}_i), x^o_i), i = 1, \dots, n \quad (5.67)$$

ein. Durch  $P$  werden Iterierte, die außerhalb des zulässigen Bereiches  $G$  liegen, auf die nächstliegende Schranke projiziert. Die Iterationsvorschrift des Newton-Verfahrens nimmt dann die folgende Form an:

$$\vec{x}^{k+1} = P \left\{ \vec{x}^k - \alpha_k \cdot \mathbf{H}_k^{-1} \cdot \nabla f(\vec{x}^k) \right\}, k = 0, 1, \dots \quad (5.68)$$

Die Funktionsweise des Projektionsverfahrens läßt sich anhand der folgenden Abbildung verdeutlichen:

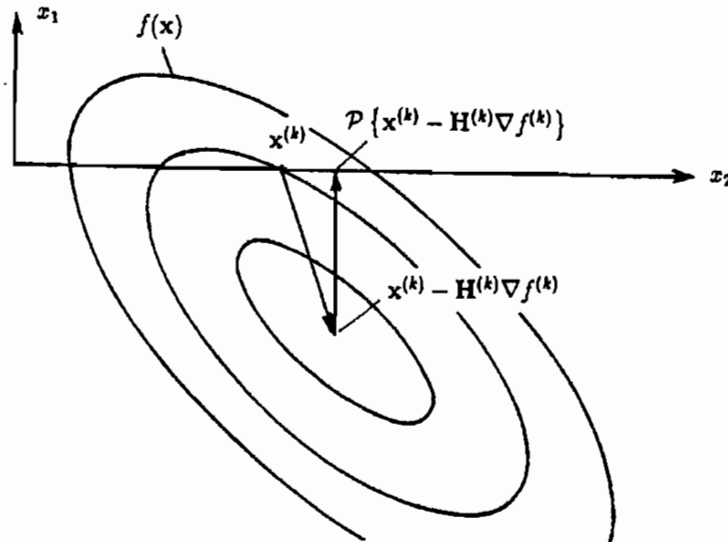


Abb. 5.6: Beispiel für eine Suchrichtung ohne Abstiegs-eigenschaft (aus [Mah92])

In Abb. 5.6 ist der Fall einer Funktion zweier Veränderlicher dargestellt, die beide vorzeichenbeschränkt sind. Die aktuelle Iterierte liegt an der Schranke für  $x_1$ . Die Newton-Richtung führt direkt ins Minimum der Funktion, welches jedoch außerhalb des zulässigen Bereichs liegt. Der Projektionsoperator (5.67) erzeugt eine Suchrichtung ohne Abstiegs-eigenschaft, so daß das Verfahren an der Schranke terminiert wird.

Die im Verfahren benutzten Iterationsmatrizen besitzen die Form:

$$\underline{H}_k^{ij} = \begin{cases} 0 & , \text{ falls } i \neq j \text{ und } i \in I_k^\# \text{ oder } j \in I_k^\# \\ \frac{\partial^2 f(\bar{x}^k)}{\partial x_i \partial x_j} & , \text{ sonst} \end{cases} \quad (5.69)$$

Im Falle, daß keinerlei Restriktionen verletzt werden, gehen die Iterationsmatrizen in die *Hesse-Matrix* der zweiten Ableitungen der Zielfunktion über. Falls Restriktionen aktiv sind, werden die Nebendiagonalelemente der Iterationsmatrizen zu Null gesetzt, wodurch die Suchrichtung beeinflußt wird. Zur Kennzeichnung, welche Restriktionen verletzt werden, dient wiederum die Indexmenge der aktiven Restriktionen (siehe Abschnitt 5.2.1.1), die hier die folgende Form annimmt:

$$I_k^\# = \left\{ i \mid x_i^u \leq x_i^k \leq x_i^u + \varepsilon_k \text{ und } \frac{\partial f(\bar{x}^k)}{\partial x_i} > 0 \right. \\ \left. \text{oder } x_i^o - \varepsilon_k \leq x_i^k \leq x_i^o \text{ und } \frac{\partial f(\bar{x}^k)}{\partial x_i} < 0 \right\} \quad (5.70)$$

In (5.70) wird eine  $\varepsilon$ -aktive Umgebung der Schranken eingeführt, die das Problem des *Zick-Zack-Verhaltens* beheben soll (siehe z.B. [GT93] oder [Mah92]). Punkte in der Umgebung der Schranken werden vom Algorithmus wie Randpunkte behandelt.

Weiterhin führt *Bertsekas* eine *Dämpfung* in das Verfahren ein, welche auf der *Armijo-Methode* beruht (siehe z.B. [GT93]):

$$\alpha_k = \max \left\{ \alpha \in S : f(\bar{\mathbf{x}}^k + \alpha \cdot \bar{\mathbf{d}}^k) \leq f(\bar{\mathbf{x}}^k) + \alpha \cdot \delta \cdot \nabla f(\bar{\mathbf{x}}^k)^T \cdot \bar{\mathbf{d}}^k \right\} \quad (5.71)$$

$$S = \{2^{-j}\}_{j=0}^{\infty} \subset \mathbb{R}^+, \delta \in (0, 1)$$

Gleichung (5.71) besagt, daß die Schrittweite  $\alpha$  in Richtung des vermeintlichen Abstiegs  $\bar{\mathbf{d}}^k$  solange halbiert wird, bis der neue Funktionswert  $f(\bar{\mathbf{x}}^k + \alpha \cdot \bar{\mathbf{d}}^k)$  unterhalb der sogenannten *Armijo-Geraden*  $f(\bar{\mathbf{x}}^k) + \alpha \cdot \delta \cdot \nabla f(\bar{\mathbf{x}}^k)^T \cdot \bar{\mathbf{d}}^k$  verläuft (siehe Abb. 5.7).

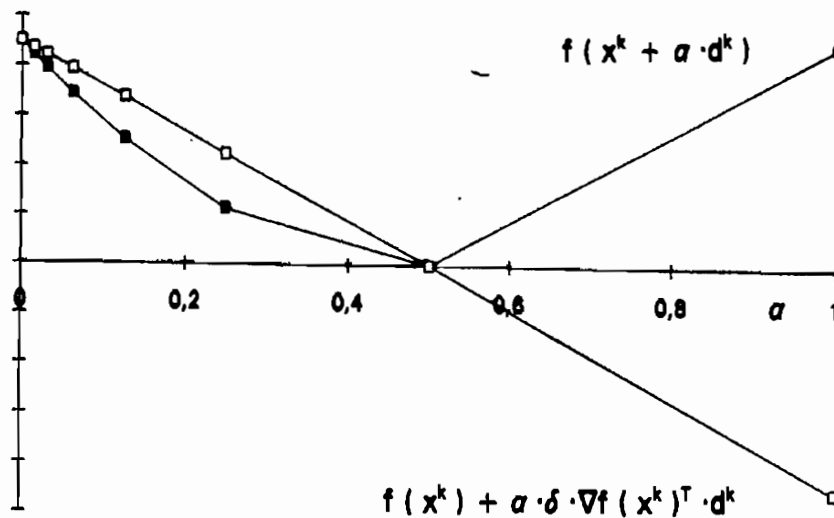


Abb. 5.7: Armijo-Schrittweite

Durch (5.71) ist für einen festen Parameter  $\delta$  stets ein hinreichender Abstieg gesichert.

Ein Weg zur Lösung von Optimierungsproblemen mit *nichtlinearen Restriktionen* wird von *Schittkowski* in [Sch81] gezeigt; er geht von einer Folge von quadratischen Ersatzproblemen zum Ausgangsproblem aus und gelangt so zur *Methode der sequentiellen quadratischen Programmierung für Probleme mit nichtlinearen Restriktionen*:

$$G = \{ \bar{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n : g_j(\bar{\mathbf{x}}) = 0, j = 1, \dots, m_e, g_j(\bar{\mathbf{x}}) \geq 0, j = m_e + 1, \dots, m \} \quad (5.72)$$

Wie aus (5.72) deutlich wird, sind sowohl eine Anzahl  $m_e$  beliebiger Gleichheitsrestriktionen als auch eine Anzahl  $m - m_e$  beliebiger Ungleichheitsrestriktionen zugelassen. Der

Grundgedanke des Verfahrens ist die Überführung des durch (5.72) restringierten Ausgangsproblems in ein unrestringiertes Problem. Die Bestimmung einer Suchrichtung im Parameterraum  $G \subset \mathbb{R}^n$  erfolgt durch die Konstruktion und anschließende Lösung eines *Subproblems*. Bei der Konstruktion des Subproblems nutzt man die Äquivalenz der Optimalitätskriterien des Subproblems und der Lagrange-Funktion des Ausgangsproblems

$$L(\vec{x}, \vec{u}) := f(\vec{x}) - \sum_{j=1}^m u_j \cdot g_j(\vec{x}) \quad (5.73)$$

aus. Mit Hilfe von (5.73) erfolgt die Konstruktion eines quadratischen Subproblems mit linearen Restriktionen:

$$\frac{1}{2} \cdot \vec{d}^T \cdot \nabla^2_{xx} L(\vec{x}^k, \vec{u}^k) \cdot \vec{d} + \nabla f(\vec{x}^k)^T \cdot \vec{d} \rightarrow \min! \quad \vec{d} \in G \quad (5.74)$$

Die Nebenbedingungen des Subproblems (5.74)

$$G = \left\{ \vec{d} \in \mathbb{R}^n : g_j(\vec{x}^k) + \nabla g_j(\vec{x}^k)^T \cdot \vec{d} = 0, j = 1, \dots, m_e, \right. \\ \left. g_j(\vec{x}^k) + \nabla g_j(\vec{x}^k)^T \cdot \vec{d} \geq 0, j = m_e + 1, \dots, m \right\} \quad (5.75)$$

stimmen dabei mit denen des Ausgangsproblems bis zu Termen erster Ordnung überein. *Schittkowski* verwendet die Iterationsvorschrift:

$$\begin{pmatrix} \vec{x}^{k+1} \\ \vec{v}^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{x}^k \\ \vec{v}^k \end{pmatrix} + \alpha_k \cdot \begin{pmatrix} \vec{d}^k \\ \vec{u}^k - \vec{v}^k \end{pmatrix}, k = 0, 1, \dots \quad (5.76)$$

In der Iterationsvorschrift (5.76) kennzeichnet  $(\vec{x}^k, \vec{v}^k)^T$  einen Vektor, der als Unbekanntenvektor für eine Bewertungs- oder *Meritfunktion*  $\Phi$  angesehen werden kann. Der Vektor  $\vec{d}^k$  ist ein Korrekturschritt, der durch die Lösung des Subproblems (5.74) erhalten wird. In diesem Sinne ist das restringierte Ausgangsproblem in ein unrestringiertes Problem mit der Merit-Funktion:

$$\Phi(\vec{x}, \vec{v}) = f(\vec{x}) + \sum_{j=1}^{m_e} v_j \cdot g_j(\vec{x}) + \frac{1}{2} \cdot r \cdot g_j(\vec{x})^2 \\ + \sum_{j=m_e+1}^{m_e} \begin{cases} v_j \cdot g_j(\vec{x}) + \frac{1}{2} \cdot r \cdot g_j(\vec{x})^2, & g_j(\vec{x}) \geq -\frac{v_j}{r} \\ -\frac{1}{2} \cdot \frac{v_j^2}{r}, & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.77)$$

als Zielfunktion überführt worden. Merit-Funktionen haben dabei die Eigenschaft, daß die erste Komponente ihres *Sattelpunktes*  $(\vec{x}^*, \vec{v}^*)^T$  mit dem Minimalpunkt der Zielfunktion  $f(\vec{x}^*)$  zusammenfällt. Zu Details dieser Problematik siehe z.B. [Mah92].

Die Lösung  $\vec{d}^k$  des Subproblems (5.74) wird als Suchrichtung für die Merit-Funktion (5.77)



aufgefaßt. Die Länge des Suchschrittes wird dabei in einem Schrittweisenalgorithmus, z.B. nach *Armijo* (siehe Gleichung (5.71)), bestimmt. Die Änderung des Straf- oder *Penalty-Parameters*  $r$  in (5.77) erfolgt durch eine Aufdatierungsvorschrift.

Eine Umsetzung findet das Verfahren der sequentiellen quadratischen Programmierung in dem Programm NLPQLD von Schittkowski (siehe [Sch81]).

### 5.2.1.5 Evolutionsstrategien

Die in den beiden vorherigen Abschnitten vorgestellten Optimierungsverfahren zeichnen sich durch eine hohe Konvergenzgeschwindigkeit in der Nähe des Minimums der Fehlerquadratsumme aus. Wenn man jedoch wenig über die Modellparameter weiß, so sind die Startwerte der Parameter unter Umständen weit vom Minimum entfernt. In diesem Fall benutzt man *stochastische Suchverfahren* zur Auffindung hinreichend guter Startwerte für die Modellparameter. Prinzipieller Vorteil dieser Methoden ist die geringe Anforderung an die Zielfunktion der Optimierung; so ist für die stochastische Suche lediglich zu fordern, daß die verwendete Zielfunktion für alle Parameter aus dem zulässigen Gebiet auswertbar ist. Höhere Anforderungen bezüglich Stetigkeit und Differenzierbarkeit brauchen im Gegensatz zu den Algorithmen aus den Kapiteln 5.2.1.3 und 5.2.1.4 nicht gestellt zu werden. Nachteil der stochastischen Suchverfahren ist die gegenüber den deterministischen Verfahren wesentlich größere Rechenzeit.

Nach [SHF94] unterscheidet man bei modernen stochastischen Suchverfahren in erster Linie zwischen *genetischen Algorithmen* und *Evolutionsstrategien*. Genetische Algorithmen sind iterative Prozeduren, die eine *Population*  $\mathcal{P}$  von möglichen Lösungen des Minimierungsproblems der Zielfunktion  $f(\vec{x})$  unterhalten:

$$\mathcal{P}(t) = \langle \vec{x}_1(t), \vec{x}_2(t), \dots, \vec{x}_n(t) \rangle \quad (5.78)$$

Jede Struktur  $\vec{x}_i(t)$  in der Population  $\mathcal{P}$  ist bei den genetischen Algorithmen eine Folge von *Binärzeichen*<sup>5</sup>, so daß die Bedeutung der Parameter dem Algorithmus verborgen bleibt. Dies ist als der wesentliche Unterschied zu den Evolutionsstrategien anzusehen.

Während eines Iterationsschrittes, der als *Generation* bezeichnet wird, wird die aktuelle Population  $\mathcal{P}(t)$  ausgewertet und auf der Basis dieser Auswertung eine neue Population von möglichen Lösungen des Optimierungsproblems gebildet. Die Ausgangspopulation  $\mathcal{P}(0)$  wird üblicherweise aus Zufallszahlen generiert, da man in der Regel nichts über die Parameter weiß. Die Strukturen in der Population  $\mathcal{P}(t+1)$  werden durch eine zufallsbasierte Auswahlprozedur aus der aktuellen Population  $\mathcal{P}(t)$  ermittelt, und zwar so, daß die Häufigkeit, mit der eine bestimmte Struktur ausgewählt wird, proportional zu der Güte des Parametersatzes ist. Das bedeutet, wenn der Parametersatz  $\vec{x}_i(t)$  doppelt so gut ist wie alle anderen Parametersätze in  $\mathcal{P}(t)$ , dann soll  $\vec{x}_i(t)$  auch zweimal in  $\mathcal{P}(t+1)$  vorkommen. Damit enthält die neue Population exakte Duplikate der Parametersätze aus

<sup>5</sup>Zur Problematik der Datenverarbeitung auf Digitalrechnern siehe z.B. [BK87]

der alten Population.

Um auch andere Punkte im Parameterraum zu erreichen, werden durch Verwendung idealisierter *genetischer Rekombinationsmechanismen* Variationen in die neue Population  $\mathcal{P}(t + 1)$  eingeführt. Der wichtigste Rekombinationsmechanismus wird als *crossover* bezeichnet. Durch den crossover-Operator tauschen zwei Strukturen in der neuen Population Teile ihrer binären Zeichenfolgen miteinander aus. Dies läßt sich beispielsweise dadurch erzielen, daß man einen Punkt in den Zeichenfolgen zufällig auswählt und alle Teile rechts davon austauscht. Dieser Punkt wird im folgenden durch einen Doppelpunkt ':' gekennzeichnet. Sei zum Beispiel

$$x_1 = 100 : 01010 \quad (\hat{=} 138) \quad (5.79)$$

und

$$x_2 = 010 : 10100 \quad (\hat{=} 84) \quad (5.80)$$

Der crossover-Punkt ':' sei so gewählt wie angegeben. Dann würden die neuen Strukturen das Aussehen

$$\tilde{x}_1 = 100 : 10100 \quad (\hat{=} 148) \quad (5.81)$$

und

$$\tilde{x}_2 = 010 : 01010 \quad (\hat{=} 74) \quad (5.82)$$

haben. Der crossover-Mechanismus dient zwei zusammenhängenden Suchmechanismen; zuerst stellt er neue Suchpunkte innerhalb eines bereits in der Population vorhandenen *Schemas* zur Verfügung. Im obigen Beispiel sind sowohl  $x_1$  als auch  $\tilde{x}_1$  Repräsentanten des Schemas  $100\#\#\#\#$ . Durch Auswertung des Parameters  $\tilde{x}_1$  gewinnt man daher weitere Informationen über diesen Teil des Parameterraumes. Als zweites gewinnt man Informationen über Teile des Parameterraumes, die vorher nicht erfaßt wurden; so repräsentiert der Parameter  $\tilde{x}_2$  das Schema  $\#1001\#\#\#$ , welches vorher gar nicht vorhanden war. Wenn dieses Schema einen geringen Wert der Zielfunktion aufweist, wird es sich im Laufe der Iterationen weiter durchsetzen.

*Abbruchkriterien* der genetischen Algorithmen sind hinreichend gute Werte der Zielfunktion oder eine maximale Zahl an Zielfunktionsauswertungen.

Als weiterführende Literatur sei das Buch von *Goldberg* [Gol89] empfohlen. Einen Überblick gibt das Buch von *Schöneburg, Heinzmann* und *Feddersen* [SHF94], welches sich auch mit den Evolutionsverfahren auseinandersetzt. Eine Umsetzung finden die genetischen Algorithmen beispielsweise in dem Programm GENESIS 5.0 von *Grefenstette* [Gre90]. Einen Vergleich zwischen den oben beschriebenen genetischen Algorithmen und den im folgenden beschriebenen Evolutionsstrategien stellen *Schwefel, Hammel* und *Bäck* in [SHB94] bei der Anwendung auf stetige Zielfunktionen an; es zeigt sich eine deutliche Überlegenheit der Evolutionsstrategien, so daß in dieser Arbeit ausschließlich Evolutionsstrategien zur Anwendung kamen. Genetische Algorithmen bieten dagegen große Vorteile bei diskontinuierlichen Zielfunktionen, von denen hier jedoch nicht ausgegangen werden kann.

*Evolutionsstrategien* gehen auf *Rechenberg* [Rec73] und *Schwefel* [Sch95] zurück. Die Stra-

ategie nutzt —wie auch die genetischen Algorithmen— Mechanismen der natürlichen Evolution wie *Mutation*, *Rekombination* und *Selektion*, um verbesserte Parametersätze zu finden. Das allgemeine Schema einer Evolutionsstrategie wird durch

$$(\mu/\rho+, \lambda) \quad (5.83)$$

gekennzeichnet. In (5.83) bezeichnet der Parameter  $\mu$  die Anzahl der *Eltern* in einer *Population* von Parametersätzen (siehe oben),  $\rho$  die Anzahl der zur *sexuellen Rekombination* ausgewählten Eltern und  $\lambda$  die Anzahl der Nachkommen. Die Steuerungsparameter '+' und ',' entscheiden darüber, ob die Eltern in der neuen Generation weiterleben dürfen ('+') oder nicht (',').

Der *Mutationsoperator* ist, wie in der Natur, verantwortlich für eine Weiterentwicklung innerhalb einer Population. Kleine Variationen der Parametervektoren der Eltern kreieren neue Nachkommen:

$$\vec{x}_N^g = \vec{x}_E^g + \vec{\delta}_N^g \cdot \vec{z} \quad (5.84)$$

In (5.84) bezeichnet der Index  $N$  die Nachkommen, der Index  $E$  die Eltern und der Index  $g$  die aktuelle Generation. Die kleinen Variationen werden durch *normalverteilte* Zufallszahlen  $\vec{z}$  mit dem *Mittelwert* 0 und der *Standardabweichung*  $\sigma = \frac{1}{\sqrt{n}}$  ( $n$  = Anzahl der Parameter), multipliziert mit der *Schrittweite*  $\vec{\delta}_N^g$ , erzeugt. Die Schrittweite  $\vec{\delta}_N^g$  paßt sich selbstständig an die Topologie der Zielfunktion an; wenn es nur kleine Bereiche der Zielfunktion gibt, für die das Prinzip der strengen Kausalität gilt, wird sich die Schrittweite so anpassen, daß nur kleine Variationen der Parameter entstehen. Die Steuerung der Schrittweite erfolgt durch

$$\vec{\delta}_N^g = \vec{\delta}_E^g \cdot \vec{\xi} \quad (5.85)$$

mit einem Steuerungsparameter  $\vec{\xi}$ . Die Komponenten  $\xi_i$  werden entweder auf  $\frac{3}{2}$  oder  $\frac{2}{3}$  gesetzt, je nach lokaler Struktur der Zielfunktion.

Eine verfeinerte Strategie der Schrittweitensteuerung verfolgen *Ostermeier*, *Gawelczyk* und *Hansen* in [OGH94]:

$$\begin{aligned} \vec{x}_N^g &= \vec{x}_E^g + \delta^g \cdot \vec{\delta}_{scal}^g \cdot \vec{z} \\ \vec{z}^g &= \left(1 - \frac{1}{\sqrt{n}}\right) \cdot \vec{z}^{g-1} + \frac{1}{\sqrt{n}} \cdot \vec{z} \\ \delta^{g+1} &= \delta^g \cdot \left( \exp \left( |\vec{z}^g| \cdot \left( \frac{\sqrt{n}}{2 \cdot \sqrt{n} - 1} \right)^{-\frac{1}{2}} - 1 + \frac{1}{5 \cdot n} \right) \right)^{\frac{1}{\sqrt{n}}} \\ \vec{\delta}_{scal}^{g+1} &= \vec{\delta}_{scal}^g \cdot \left( |\vec{z}^g| \cdot \left( \frac{1}{2 \cdot \sqrt{n} - 1} \right)^{-\frac{1}{2}} + 0.35 \right)^{\frac{1}{n}} \end{aligned} \quad (5.86)$$

In (5.86) geht, abhängig von der Anzahl  $n$  der Parameter und damit der Größe des Optimierungsproblems, Information aus vorherigen Optimierungsschritten über die Topologie

der Zielfunktion in die Festlegung der Suchrichtung sowie der Schrittweite der Suche mit ein. Dabei wird, im Gegensatz zu (5.84), sowohl eine globale Schrittweite  $\delta^g$  für alle Parameter, als auch eine individuelle Schrittweite  $\tilde{\delta}_{scal}^g$  verwendet.

Der Mutation vorgeschaltet ist die *Rekombination*. Im biologischen Vorbild werden die  $\lambda$  Nachkommen aus der Rekombination der  $\rho$  Eltern gebildet. In der Evolutionsstrategie sind die Komponenten der Rekombination die Elemente der Parametervektoren. Der Vektor der Nachkommen wird durch eine normalverteilte Zufallsauswahl aus den Elementen der  $\rho$  Eltern gebildet.

Im Anschluß an die Erzeugung der Nachkommen erfolgt die *Selektion* der Parameter; dazu müssen sämtliche Parameter durch Einsetzen in die Zielfunktion ausgewertet werden. Dann entscheidet der Wert der Zielfunktion über die Güte der Parameter. Entscheidend für den Fortschritt der Evolution ist die gewählte Strategie; im Falle der '+'-Strategie werden aus der Menge der Eltern *und* der Kinder die besten herausgesucht. Dies beinhaltet die Gefahr der *Stagnation* der Evolution, da gewisse Bereiche der Zielfunktion die Optimierung dominieren können. Im Gegensatz dazu sichert die ','-Strategie, bei der nur aus den Kindern die besten ausgewählt werden, den stetigen Fortschritt der Evolution, wobei die Gefahr besteht, daß kurzzeitig auch Verschlechterungen der Parametersätze möglich sind.

Ausführlich beschrieben sind alle vorgestellten Evolutionsmechanismen in den Büchern von *Rechenberg* [Rec73] und *Schwefel* [Sch95]. Eine praktische Umsetzung der oben beschriebenen Methoden ist durch das Programm evoC 2.0 von *Trint* und *Utecht* [TU94] gegeben.

Evolutionsverfahren sind prinzipiell in der Lage, zumindest in die Nähe des gesuchten *globalen Minimums* der Fehlerquadratsumme zu gelangen. Dem steht jedoch die in der Praxis immer begrenzte Rechenzeit im Weg, so daß im allgemeinen die Zahl der Zielfunktionsauswertungen des Algorithmus nicht ausreicht, diese optimale Lösung zu finden. Aus diesem Grund ist man bestrebt, die Anzahl der Zielfunktionsauswertungen bei der evolutionären Suche signifikant zu erhöhen. Dabei kommt einem die *implizite Parallelität* der Evolutionsalgorithmen zugute, da der Parameterraum von beliebig vielen Evolutionsalgorithmen *gleichzeitig* durchsucht werden kann, ohne daß sich die Verfahren gegenseitig stören. Daraus folgt, daß mit größer werdender Anzahl an eingesetzten Verfahren die Kenntnis über die Zielfunktion zunimmt.

Die Durchsuchung des Parameterraums läßt sich auch so organisieren, daß zwischen den eingesetzten Verfahren periodisch Parametersätze ausgetauscht werden, so daß nach einer endlichen Zeit der beste Parametersatz allen Algorithmen zur Verfügung steht. Zu Details der impliziten Parallelität der verschiedenen Ebenen der Evolutionsverfahren siehe die Arbeit von *Schöneburg, Heinzmann* und *Feddersen* [SHF94].

Ein populäres Konzept bei der Organisation der parallelen Durchsuchung des Parameterraums einer beliebigen Zielfunktion ist das sogenannte *Master-Slave Paradigma* (siehe Abb. 5.8):

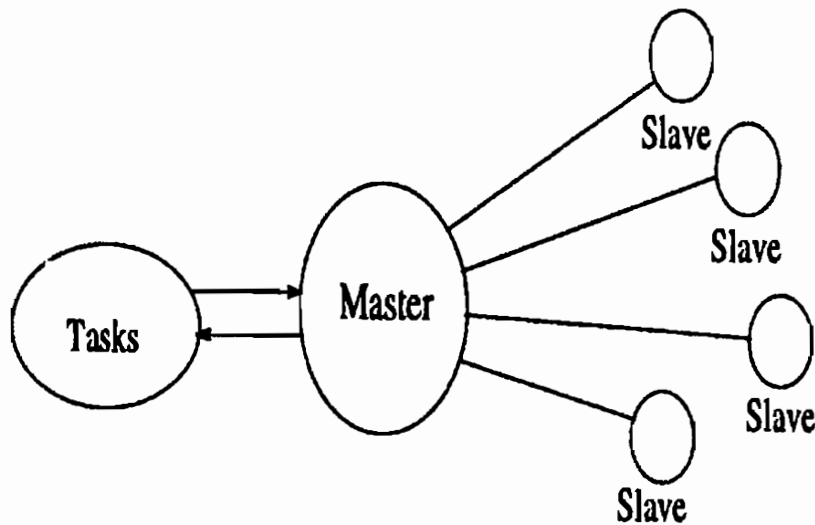


Abb. 5.8: Master-Slave Paradigma (aus [GBD<sup>+</sup>94])

In Abb. 5.8 bildet man einen sogenannten *pool of tasks*, also eine geordnete Menge von Aufgaben, die in diesem Fall die gesamte Anzahl an Evolutionen beinhaltet. Der *Master* übernimmt die Überprüfung des Abbruchkriteriums, ob überhaupt noch Aufgaben zu erledigen sind, oder ob Wert der Zielfunktion bereits hinreichend klein ist, so daß eine weitere Suche nicht mehr notwendig ist. Weiterhin übernimmt der *Master* die Verschickung des jeweils besten Parametersatzes aus den von den einzelnen Evolutionsalgorithmen zurückgesendeten Parametersätzen, und damit die globale Bewertung der Parameter. Aufgabe der *Slaves* ist nun die eigentliche Evolution; dabei teilt ihnen der *Master* mit, wieviele Generationen sie ihre Suche durchführen dürfen und versorgt sie mit guten Startparametern. Damit wird klar, daß Zielfunktionsaufrufe nur auf der Ebene der *Slaves* stattfinden und der *Master* selbst nur indirekt Informationen über die Topologie der Zielfunktion sammelt.

Mit dem *Master-Slave Konzept* liegen im Zusammenhang mit der Bestimmung der Parameter viskoplastischer Werkstoffmodelle durch Evolutionsstrategien viele Erfahrungen vor; so verwendet *Bergmann* [Ber93] das Programm PVM [GBD<sup>+</sup>94] —das auch in dieser Arbeit benutzt wurde (siehe unten)— zur Organisation dieses Konzeptes in einem Netzwerk heterogener Workstations. *Lassota* untersucht in [Las95] die Effizienz des *Master-Slave Konzeptes*. *Mittelbach* verwendet in [Mit95] das Konzept zur Bestimmung der Parameter eines Kontinuums-Damage-Modells.

Zur praktischen Umsetzung der Parallelisierung der Evolutionsstrategie diente in dieser Arbeit das System *Parallel Virtual Machine* (PVM), welches das sogenannte *message passing*-Modell zum Datenaustausch zwischen den parallelen Prozessen verwendet. Die Vernetzung der einzelnen Prozessoren zu einem *virtuellen* Parallelrechner übernimmt der

sogenannte *daemon*, ein Kommunikationsprogramm<sup>6</sup>, welches zu Beginn einer parallelen Berechnung von Hand auf einem der eingesetzten Rechner gestartet werden muß. Anschließend kann der *Master* gestartet werden, welcher mit Kommunikationsroutinen aus der PVM-Programmbibliothek ausgestattet sein muß. Der *daemon* startet dann auf den ausgewählten Rechnern die *Slaves*, die ebenfalls über die Kommunikationsroutinen verfügen. Bei der Verschickung von Daten im virtuellen Parallelrechner müssen Adressat und Absender eindeutig bekannt sein; hierzu dient im PVM-System der sogenannte *task identifier* (TID), der vom Nutzer des Programms nicht beeinflusst werden kann, um die Eindeutigkeit nicht zu gefährden. Weiterhin müssen Art, Größe und Inhalt der Daten eindeutig angegeben werden, um einen korrekten Datentransfer zu ermöglichen.

Wesentliche Aspekte beim Einsatz des PVM-System auf einem Netz heterogener Workstations, die zudem noch durch weitere Anwendungen stark unterschiedlich ausgelastet sein können, sind die *Datenübertragungszeiten* und die *dynamische Auslastung* der eingesetzten Rechner [GBD<sup>+</sup>94]. Eine geeignete Parallelisierung der Programme und die Organisation der eingesetzten Rechner sollten dafür Sorge tragen.

### 5.2.1.6 Skalierung der Modellparameter

Ein wesentlicher Aspekt bei der Minimierung beliebiger Zielfunktionen ist die *Größenordnung* der Parameter; falls diese Größenordnung zwischen den einzelnen Parametern zu stark variiert, ist der erfolgreiche Einsatz aller vorgenannten Verfahren in Frage gestellt (siehe [DS83]). Die Größenordnung läßt sich dabei durch die in Kapitel 5.2.1.2 verwendete Formel

$$\text{typ}(x) = \begin{cases} 10^{\text{int}(\log_{10}(|x|)+0.30103)} & , \text{ falls } |x| \geq 1 \\ 10^{\text{int}(\log_{10}(|x|)-0.69897)} & , \text{ falls } 0 < |x| < 1 \end{cases} \quad (5.87)$$

abschätzen. Stellt man nun fest, daß die Parameter der Zielfunktion stark unterschiedliche Größenordnungen aufweisen, ist eine *Skalierung* der Parameter dringend geboten. Die folgenden Ausführungen dienen der Erläuterung der Skalierung und stützen sich auf die Arbeit von *Dennis* und *Schnabel* [DS83].

Der Grundgedanke der Skalierung läßt sich an dem einfachen Fall einer Funktion  $f$  einer Veränderlicher  $x$  darstellen; geht man davon aus, daß der Parameter  $x$  eine extreme Größenordnung besitzt, z.B.  $10^{-30}$ , so besteht die Aufgabe der Skalierung darin, die Größenordnung in den Bereich von  $10^0$  zu überführen, ohne am Wert der Zielfunktion  $f$  etwas zu verändern. Anschaulich wird die Vorgehensweise durch die folgende Abbildung:

<sup>6</sup>Ein bekanntes Beispiel für ein *daemon*-Programm ist das *mail*-Programm, welches im Hintergrund läuft und die ein- und ausgehenden elektronischen Briefe auf einem Computer verwaltet

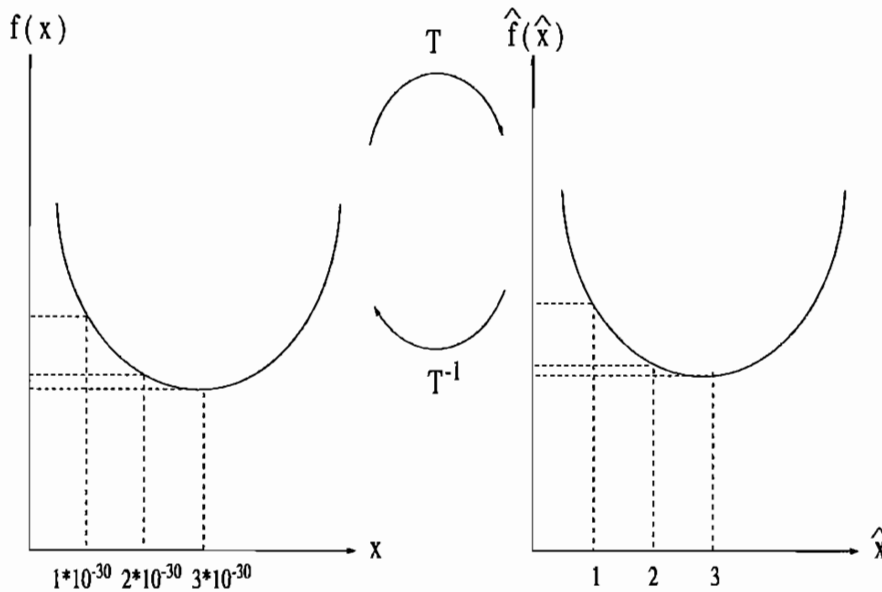


Abb. 5.9: Skalierung von Modellparametern

Wie in Abb. 5.9 ersichtlich ist, führt die *Transformation* des Parameters  $x$  zu einer Zielfunktion  $\hat{f}(\hat{x})$ , die dieselben Funktionswerte wie die ursprüngliche Funktion  $f$  aufweist. Der neue Parameter  $\hat{x}$  weist jedoch eine wesentlich günstigere Größenordnung auf, was für die Minimumsuche von großem Vorteil ist<sup>7</sup>.

Im allgemeinen Fall einer Funktion  $f$   $n$  Veränderlicher  $\vec{x}$  definiert man daher:

$$\begin{aligned}\hat{\vec{x}} &= \underline{\mathbf{T}} \cdot \vec{x} \\ \hat{f}(\hat{\vec{x}}) &= f(\underline{\mathbf{T}}^{-1} \cdot \hat{\vec{x}})\end{aligned}\quad (5.88)$$

Nach [DS83] erhält man dann den Gradientenvektor

$$\nabla \hat{f}(\hat{\vec{x}}) = \underline{\mathbf{T}}^{-T} \cdot \nabla f(\vec{x}) \quad (5.89)$$

und die Hesse-Matrix der zweiten Ableitungen

$$\nabla^2 \hat{f}(\hat{\vec{x}}) = \underline{\mathbf{T}}^{-T} \cdot \nabla^2 f(\vec{x}) \cdot \underline{\mathbf{T}}^{-1} \quad (5.90)$$

von  $f$ . Die Transformationsmatrix  $\underline{\mathbf{T}}$  ist typischerweise eine Diagonalmatrix mit den Elementen:

$$(\underline{\mathbf{T}})_{ii} = (\text{typ}(x_i))^{-1} \quad (5.91)$$

In der Regel muß die Transformationsmatrix  $\underline{\mathbf{T}}$  nach jedem erfolgreichen Optimierungsschritt neu berechnet werden, so daß man zu einer *dynamischen Skalierung* gelangt.

<sup>7</sup>Die Skalierung ist bei Gradientenverfahren wichtig, während sie auf Newton-Verfahren keinen Einfluß hat (siehe [DS83])

### 5.2.2 Fehlerschätzer und Konfidenzintervalle für die Modellparameter

Die alleinige Anpassung der Modellparameter an die Meßdaten mit den in den vorherigen Kapiteln vorgestellten Methoden reicht nicht aus. So bestimmen die Streuungen der Meßwerte an den einzelnen Meßpunkten wesentlich die Anpassung des Modells, wie aus der folgenden Abbildung am Beispiel der Anpassung einer Ausgleichsgerade an eine Reihe von Meßpunkten mit individueller, normalverteilter Streuung hervorgeht:

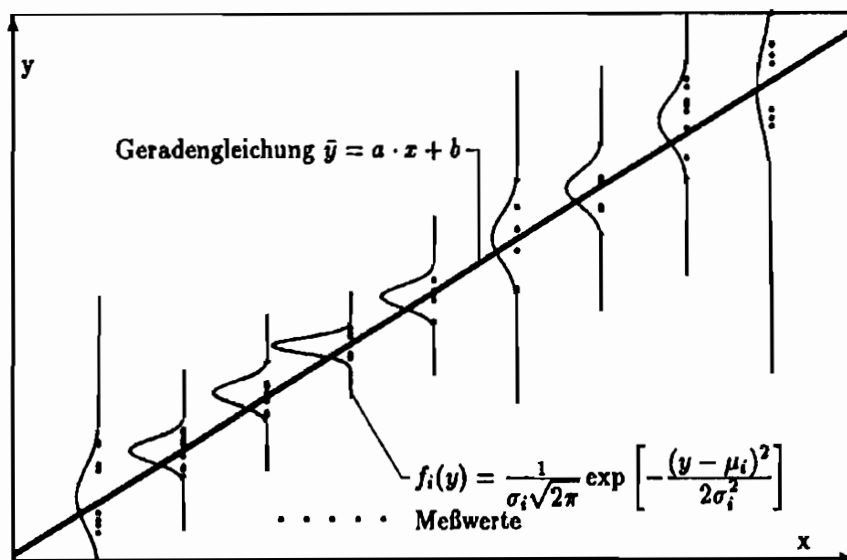


Abb. 5.10: Maximum-Likelihood-Anpassung (aus [Bra93])

Aus Abb. 5.10 folgt unmittelbar, daß die Größe der Standardabweichung  $\sigma_i$  der einzelnen Meßwerte entscheidend ist für die Genauigkeit der Kenntnis der Modellparameter; im Beispiel für die Kenntnis der Parameter  $a$  und  $b$ . Aus diesem Grund gehört zur Anpassung der Modellparameter immer auch die Abschätzung des Einflusses der Meßfehler auf die Parameter [PTVF92]. Als Maß für die *Sensitivität* der Modellparameter dient die *Kovarianzmatrix*  $\underline{C}$  der Fehlerquadratsumme:

$$f(\vec{a}) = \frac{1}{2} \cdot \vec{r}(\vec{a})^T \cdot \underline{G} \cdot \vec{r}(\vec{a}) \quad (5.92)$$

$$\underline{C} = \nabla^2 f(\vec{a})^{-1}$$

Die durch die Meßfehler verursachten Streuungen der Modellparameter sind die Hauptdiagonalelemente der Matrix  $\underline{C}$  in (5.92). Die Wechselwirkung oder *Korrelation* zwischen



den Unsicherheiten in den Modellparametern kennzeichnet man durch die *Korrelationskoeffizienten*:

$$\rho(a_i, a_j) = \frac{C_{ij}}{\sqrt{C_{ii} \cdot C_{jj}}}; \quad -1 \leq \rho(a_i, a_j) \leq +1 \quad (5.93)$$

Im Falle der *linearen Unabhängigkeit* der einzelnen Modellparameter sollte sich die unsichere Kenntnis eines Parameters nicht auf die Kenntnis eines anderen Parameters auswirken, so daß man in diesem Falle mit Werten für die Korrelationskoeffizienten nahe Null rechnen kann. Erhält man dagegen Werte für  $\rho = \pm 1$ , bedeutet dies, daß die Unsicherheit der Kenntnis des einen Parameters einen großen Einfluß auf die Kenntnis des anderen hat, d.h. durch die Ungenauigkeit des einen Parameters läßt sich der andere auch nicht bestimmen. In diesem Fall spricht man von *linear abhängigen* Parametern, so daß man *keine eindeutige* Lösung seines Schätzproblems finden kann. Ein Ausweg hieraus ist die Einbringung weiterer Information in das Schätzproblem; sei es durch *a-priori* Information über die Lösung oder durch weitere Meßwerte zur besseren Einschätzung des unbekanntes Funktionsverlaufes (siehe [Tar87] oder [PTVF92]).

Zur Berechnung der Kovarianzmatrix (5.92) sind einige weiterführende Überlegungen notwendig; schreibt man die einzelnen Elemente der Matrix  $\nabla^2 f(\vec{a})$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f(\vec{a})}{\partial a_k \partial a_l} = & \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2} \cdot \left( \frac{\partial y(x_i; a_1, \dots, a_m)}{\partial a_k} \cdot \frac{\partial y(x_i; a_1, \dots, a_m)}{\partial a_l} \right. \\ & \left. - (y_i - y(x_i; a_1, \dots, a_m)) \cdot \frac{\partial^2 y(x_i; a_1, \dots, a_m)}{\partial a_k \partial a_l} \right) \end{aligned} \quad (5.94)$$

an, so findet man, daß die zweiten Ableitungen des Modells bei einer hinreichend guten Anpassung durch die Summation über alle  $n$  Meßpunkte aus der zweiten Ableitung der Fehlerquadratsumme herausfallen, da der Term  $(y_i - y(x_i; a_1, \dots, a_m))$  dann lediglich die normalverteilten Meßfehler repräsentiert (siehe [PTVF92]). Hat man allerdings eine schlechte Anpassung des Modells, so hat die Hinzunahme der Terme der zweiten Ableitungen des Modells fatale Folgen, da in diesem Fall die Residuen unter Umständen alle ein gleiches Vorzeichen besitzen, was zu völlig falschen Ergebnissen führt. Aus diesen Gründen wird in dieser Arbeit immer mit der Näherung

$$\frac{\partial^2 f(\vec{a})}{\partial a_k \partial a_l} \approx \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2} \cdot \left( \frac{\partial y(x_i; a_1, \dots, a_m)}{\partial a_k} \cdot \frac{\partial y(x_i; a_1, \dots, a_m)}{\partial a_l} \right) \quad (5.95)$$

gearbeitet. Dies steht im Einklang mit der in [PTVF92] beschriebenen Vorgehensweise.

Ein Weg zur Bestimmung der Streuungen der Modellparameter *ohne* Berechnung der Kovarianzmatrix (5.92) ist die *Erzeugung von simulierten Meßdaten* (siehe [PTVF92]). Diese Vorgehensweise ist an einige grundsätzliche Annahmen gebunden; zur Verdeutlichung dient die folgende Abbildung:

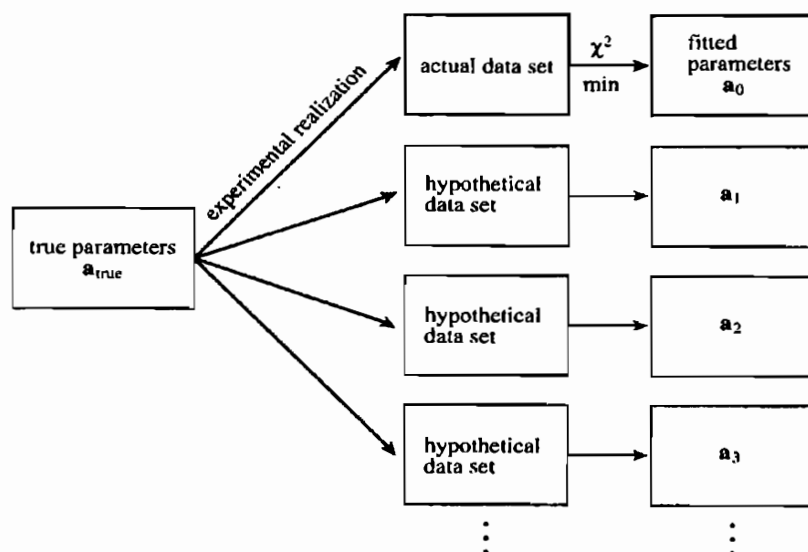


Abb. 5.11: Ermittlung der Verteilung von Modellparametern aus einer unendlich großen Anzahl von Versuchen (aus [PTVF92])

Die gesuchte Verteilung der Modellparameter ergibt sich aus einer wiederholten Realisation der unbekanntem wahren Parameter  $\vec{a}_{true}$  durch die Messungen. Die anschließende Anpassung liefert Parametersätze  $\vec{a}_0, \vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3, \dots$  (siehe Abb. 5.11), deren Unterschiede die gesuchte Streuung widerspiegeln. Eine exakte Kenntnis der Modellparameter und ihrer Streuungen läßt sich allerdings nur für eine unendliche Anzahl Wiederholungen desselben Experimentes erzielen; für eine sehr gute Kenntnis wird eine *ausreichende* Anzahl Wiederholungen benötigt. Häufig ist diese Vorgehensweise jedoch nicht möglich. So steht dem gerade in der vorliegenden Arbeit der hohe Preis eines einzelnen Versuchskörpers (siehe Kapitel 4) im Wege, zudem läßt sich mit einer Probe nur ein einziger Versuch fahren!

Aus diesem Grund ist man auf eine andere Vorgehensweise angewiesen. Dazu nimmt man an, daß sich die unbekannte Verteilung  $\vec{a}_i - \vec{a}_{true}$  durch die Verteilung  $\vec{a}_i^{(s)} - \vec{a}_0$  abschätzen läßt, wobei  $\vec{a}_0$  einen aus einer realen Messung bestimmten Parametersatz und  $\vec{a}_i^{(s)}$  einen aus *simulierten Meßdaten* bestimmten Satz darstellt (siehe Abb. 5.12).

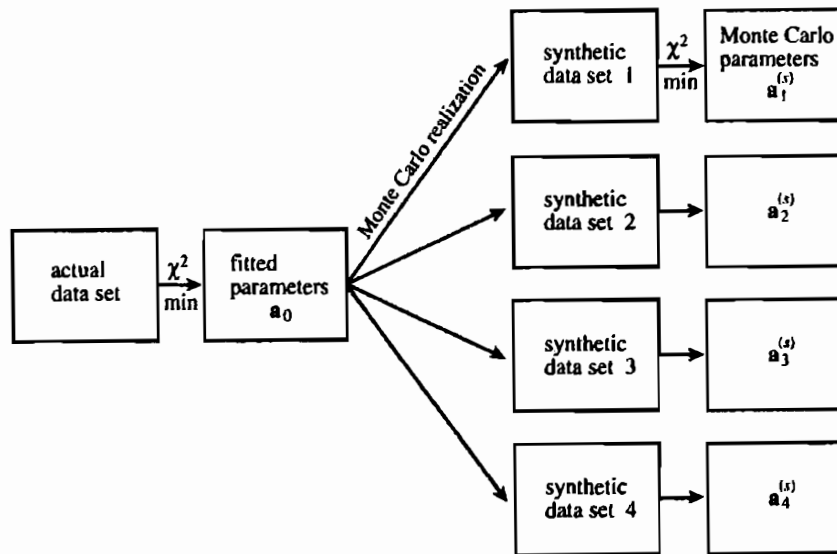


Abb. 5.12: Monte-Carlo Simulation eines Experimentes (aus [PTVF92])

Die Grundvoraussetzung für diese Vorgehensweise ist die bestmögliche Kenntnis der in die Messungen eingehenden Meßfehler; sind diese ausreichend bekannt, lassen sich mit einer geeigneten Verteilung synthetische Meßdaten erzeugen, beispielsweise durch Aufbringen eines weißen Rauschens auf das Modell mit den Parametern  $\vec{a}_0$ . Bei dieser Vorgehensweise ist der Nachweis der Eignung der benutzten Verteilung zwingend geboten, andernfalls hat man keine Gewähr, daß die simulierten Meßdaten irgendeine Beziehung zu den realen Meßdaten besitzen.

Zum Nachweis der Eignung einer beliebigen Verteilung dient der  $\chi^2$ -Anpassungstest. Dieser Test wird im folgenden anhand der Normalverteilung demonstriert; seien eine Anzahl Werte  $y_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , gemessen worden, so lassen sich diese in Klassen einteilen (siehe [BK87]). Dazu erfolgt eine Einteilung des Wertebereiches  $y_{\min}$  bis  $y_{\max}$  in  $k$  gleich breite, abgeschlossene Klassen. Dabei ist etwa  $k = 10$  zu wählen, was sich jedoch noch ändern kann (siehe unten). Die Klassenmitten  $y_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, k$ , sind die arithmetischen Mittelwerte der Klassengrenzen. Die Besetzungszahlen  $n_j$  geben an, wieviele Werte in die  $j$ -te Klasse fallen. Die relative Häufigkeit für das Auftreten des Wertes  $y_j$  wird mit

$$h_j = \frac{n_j}{n}, \quad \sum_{j=1}^k n_j = n, \quad \sum_{j=1}^k h_j = 1 \quad (5.96)$$

bezeichnet. Die Darstellung der relativen Häufigkeiten erfolgt im sogenannten Histogramm als Funktion der Klassenmitten durch eine Treppenkurve der Häufigkeitsdichte der Stichprobe. Sie stellt eine Näherung für die Wahrscheinlichkeitsdichte der Grundgesamtheit dar.

Aufgabe des  $\chi^2$ -Anpassungstests ist es dann, zu einer gegebenen Verteilungsfunktion die

Näherung  $h_j$  für die Wahrscheinlichkeitsdichte gegen die angenommene Wahrscheinlichkeitsdichte  $p_j$  zu testen. Dazu dient die *Fehlerquadratsumme* [HG72]:

$$\chi^2 = \sum_{j=1}^k \frac{(n_j - n \cdot p_j)^2}{n \cdot p_j} \quad (5.97)$$

Die Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte  $p_j$  erfolgt im Beispiel der Normalverteilung mit Hilfe der *normierten Verteilungsfunktion*  $\Phi_0$ , welche in Tabellen ausgewertet ist (siehe z.B. [BK87]). Sei eine Klasse durch die untere Schranke  $a$  und die obere Schranke  $b$  gegeben. Wenn aus den Meßwerten  $y_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , der *Mittelwert*  $\mu$  und die Standardabweichung  $\sigma$  bestimmt worden ist, dann gilt für die *Intervallwahrscheinlichkeiten*:

$$P(a < Y < b) = \begin{cases} \Phi_0\left(\frac{\mu-a}{\sigma}\right) - \Phi_0\left(\frac{\mu-b}{\sigma}\right) & : a < b < \mu \\ \Phi_0\left(\frac{\mu-a}{\sigma}\right) + \Phi_0\left(\frac{b-\mu}{\sigma}\right) & : a < \mu < b \\ \Phi_0\left(\frac{b-\mu}{\sigma}\right) - \Phi_0\left(\frac{a-\mu}{\sigma}\right) & : \mu < a < b \end{cases} \quad (5.98)$$

Um in (5.97) zu einem sinnvollen Vergleich zu gelangen, muß die Anzahl  $k$  der Intervalle so gewählt werden, daß die Bedingung  $n \cdot p_j \geq 5$  erfüllt ist [HG72]; erst dann kann der  $\chi^2$ -Test erfolgreich durchgeführt werden.

Der eigentliche Test besteht in der Wahl einer *Irrtumswahrscheinlichkeit*  $\alpha$  (z.B. 5%), die ein seltenes Ereignis kennzeichnet, welches *nicht* eintreten sollte. Im Falle der Normalverteilung erhält man aus (5.97) eine zu prüfende Verteilung mit  $k - 2$  Freiheitsgraden. Der *maximal zulässige* Wert für  $\chi^2$  kann dabei Standardwerken entnommen werden, z.B. [PTVF92]. Ist der mit (5.97) ermittelte Wert für  $\chi^2$  kleiner als der maximal zulässige, ist das durch  $\alpha$  gekennzeichnete seltene Ereignis *nicht* eingetreten und die zugrundegelegte Hypothese der Normalverteilung braucht nicht verworfen zu werden. Es sei angemerkt, daß dies *kein Nachweis* der Normalverteilung ist; es wird lediglich bewiesen, daß die Normalverteilung zutreffen könnte!

Mit der so ermittelten Streuung  $\sigma$  läßt sich ein *weißes Rauschen* erzeugen, das auf das Modell mit den Parametern  $\vec{a}_0$  aufgebracht werden kann. Auf diese Weise läßt sich eine beliebige Menge synthetischer Meßdaten erzeugen, so daß dieser Vorgehensweise nur die Rechenzeit bei der Anpassung der Modellparameter  $\vec{a}_i^{(s)}$  an die simulierten Meßdaten im Wege steht. Allerdings ergeben sich hier ausgezeichnete Möglichkeiten der *Parallelisierung* (siehe Kapitel 5.2.1.5).

Die Verteilung der Parametersätze  $\vec{a}_i^{(s)} - \vec{a}_0$  faßt man in der Regel in Form von *Konfidenzintervallen* zusammen; die Aussage eines solchen Konfidenzintervalls ist dann beispielsweise:

"Es existiert eine Wahrscheinlichkeit von 99%, daß die wahren Parameter  $\vec{a}_{true}$  in dem Konfidenzintervall um die Parameter  $\vec{a}_0$  liegen."

Die folgende Abbildung zeigt ein Konfidenzintervall im Falle zweier Modellparameter  $a_1$  und  $a_2$ :

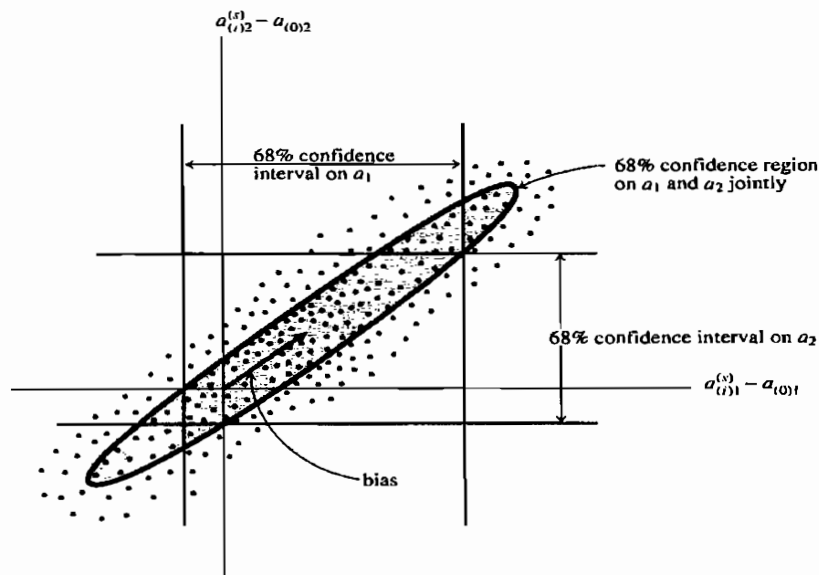


Abb. 5.13: Konfidenzintervalle in 1 und 2 Dimensionen (aus [PTVF92])

Die Wahl der Konfidenzintervalle ergibt sich auf natürlichem Wege; für den gemessenen Datensatz hat die Fehlerquadratsumme  $f(\vec{a})$  ihr Minimum in den Modellparametern  $\vec{a}_0$ . Wenn der Vektor  $\vec{a}$  von  $\vec{a}_0$  weg verändert wird, so steigt der Wert der Fehlerquadratsumme an. Der Bereich, in dem die Fehlerquadratsumme um nicht mehr als einen Betrag  $\Delta f$  wächst, definiert ein Konfidenzintervall um  $\vec{a}_0$ . Die Konfidenzintervalle der einzelnen Parameter  $a_1, a_2, \dots, a_m$  sind dabei *Projektionen* des gesamten Intervalls in die entsprechenden Unterräume (siehe Abb. 5.13).

Im Falle der Normalverteilung der Meßfehler gelten die einfachen Zusammenhänge:  $\Delta f < 1$  definiert das 68.3% Konfidenzintervall, welches gerade der Standardabweichung  $\sigma$  der Normalverteilung entspricht. Entsprechend gilt für  $2 \cdot \sigma$  das Konfidenzintervall  $\Delta f < 4$  ( $\hat{=} 95.4\%$ ).

Für weitere Informationen zu den simulierten Meßdaten sei [PTVF92] empfohlen.

## 6. Bestimmung der Parameter des INTERATOM-Modells

Die in diesem Kapitel dargestellte Schätzung der Parameter des in Kapitel 3 vorgestellten INTERATOM-Modells gründet sich auf die von *Pitzer* in [BP87] und *Rott* in [Rot91] vorgeschlagene Anpassungsstrategie. Die genannten Autoren schlagen eine Aufspaltung der temperaturabhängigen<sup>1</sup> Freiheitsgrade des Modells in drei Kategorien vor:

- (i) Parameter, die das elastische Verhalten des Materials beschreiben, wie der Elastizitätsmodul  $E$ , die Querkontraktionszahl  $\nu$  und der thermische Ausdehnungskoeffizient  $\alpha$ ,
- (ii) Parameter, die die geschwindigkeitsunabhängige statische Theorie charakterisieren, wie zum Beispiel die anfängliche Fließspannung  $\sigma_F$  und der Tangentenmodul  $E_t$  und
- (iii) Parameter, die die Geschwindigkeitsabhängigkeit des Materials erfassen.

Die Parameter der ersten Kategorie lassen sich nach [BP87] durch Standard-Versuche<sup>2</sup> im Bereich elastischer Deformationen des Materials bestimmen.

Die Parameter der zweiten Kategorie werden nach [BP87] aus einaxialen, quasistatischen, monotonen bzw. zyklischen Versuchen ermittelt, das heißt aus Versuchen, die mit sehr kleinen Dehngeschwindigkeiten gefahren werden, oder alternativ aus dynamischen Versuchen mit einer Reihe von Haltezeiten und anschließender Extrapolation der Relaxationspunkte. Dieser alternative Weg zur Ermittlung einer quasistatischen Kurve wird ebenso von *Haupt* in [HK95] vorgeschlagen.

*Westerhoff* geht in [Wes95] einen anderen Weg zur Ermittlung einer quasistatischen Grenzkurve; er verwendet monotone Zugversuche mit einer Reihe von Haltepunkten der Spannung und anschließender Extrapolation der Kriechpunkte. Seinen Ergebnissen zufolge liegt eine quasistatische Grenzkurve noch wesentlich unter der Kurve mit der häufig als quasistatisch bezeichneten Dehnungsrate<sup>3</sup> von  $\dot{\epsilon} = 10^{-5\frac{1}{s}}$  [Wes95].

Zur Bestimmung der Parameter der dritten Kategorie werden von *Rott* in [Rot91] monotone, dehnungsgesteuerte Zugversuche bei verschiedenen Dehngeschwindigkeiten sowie Kriechversuche mit unterschiedlichen Spannungsniveaus gewählt. *Westerhoff* ermittelt die Parameter der dritten Kategorie aus monotonen, spannungs- bzw. dehnungsgesteuerten

<sup>1</sup>Zur Erfassung der Temperaturabhängigkeit der Parameter siehe Kap. 6.4

<sup>2</sup>Zur Beschreibung des Standard-Zugversuches siehe [Dom87] S. 304 ff.

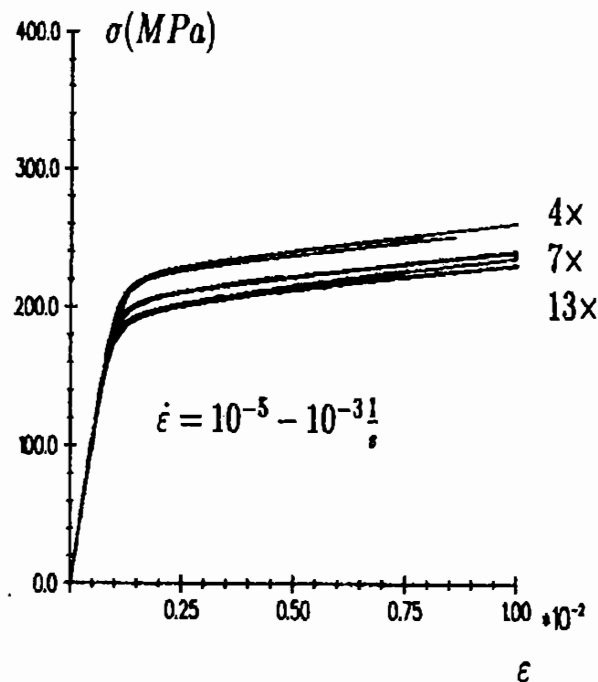
<sup>3</sup>*Bruhns* bezeichnet in [Bru84] Dehngeschwindigkeiten  $< 10^{-6\frac{1}{s}}$  als quasistatisch

Zugversuchen, Kriechversuchen mit unterschiedlichen Spannungsniveaus und Relaxationskurven mit unterschiedlichen Dehnungspunkten.

In den folgenden Abschnitten 6.1 - 6.3 werden —basierend auf der oben erwähnten Strategie— für den in Kapitel 4.1.1 beschriebenen austenitischen Stahl X 6 CrNi 18 11 die Ergebnisse der Anpassung des INTERATOM-Modells mit Hilfe der in Kapitel 5 erläuterten Methoden zur Identifikation der Parameter an die von *Westerhoff* [Wes95] durchgeführten Versuche<sup>4</sup> vorgestellt.

## 6.1 Bestimmung der elastischen Kenngrößen

Der Bereich elastischen Materialverhaltens wird durch den Elastizitätsmodul charakterisiert. Die Abgrenzung des elastischen Bereichs vom Bereich plastischer Deformationen erfolgt durch die anfängliche Fließspannung. Das vorliegende Kapitel beschreibt die Bestimmung dieser Größen aus den Meßdaten von Versuchen mit dem austenitischen Stahl X 6 CrNi 18 11. Zur Bestimmung des Elastizitätsmoduls dienen sämtliche von *Westerhoff* [Wes95] durchgeführten monotonen Zugversuche:



**Abb. 6.1:** 24 monotone, dehnungsgesteuerte Zugversuche mit den drei unterschiedlichen Dehnungsgeschwindigkeiten  $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \frac{1}{s}$  (13 Versuche),  $\dot{\epsilon} = 10^{-4} \frac{1}{s}$  (7 Versuche) und  $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \frac{1}{s}$  (4 Versuche) (aus [Wes95])

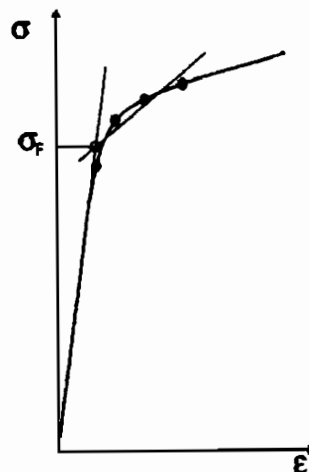
<sup>4</sup>siehe Kap. 4.1

Der Elastizitätsmodul von X 6 CrNi 18 11 stellt die Steigung der *Hookeschen* Geraden dar. Um diesen Proportionalitätsbereich festzulegen, bedarf es einer geeigneten Definition der Fließgrenze des Materials (siehe [Fos96]).

In Tabelle 4.1 wurde für X 6 CrNi 18 11 eine *Streckgrenze*  $R_e$  von  $185 \frac{N}{mm^2}$  angegeben. Da nur bei kohlenstoffarmen, geglühtem Stahl eine natürliche Streckgrenze zu beobachten ist<sup>5</sup>, stellt dieser Wert eine Näherung für die Fließgrenze durch Einführung eines geeigneten *Offset*-Maßes<sup>6</sup> für die erste nichtproportionale Dehnung dar.

In dieser Arbeit findet die von *Phillips et al.*<sup>7</sup> eingeführte Definition der Fließgrenze Verwendung (siehe Abb. 6.2):

- Die Fließspannung ist der Schnittpunkt der elastischen Gerade mit einer Regressionskurve durch die ersten Meßpunkte, die von der linear-elastischen Geraden abweichen.



**Abb. 6.2:** Festlegung der Fließgrenze nach *Phillips et al.* (aus [Fos96])

Bei der Durchführung des Verfahrens wird zuerst ein geeignetes Regressionsfenster für die gemessenen Spannungen bestimmt, innerhalb dessen ein elastisches Verhalten des Materials sicher angenommen werden kann. Dazu dienen die Spannungen  $\sigma_{\max}$  und  $\sigma_{\min}$ . Anschließend erfolgt eine lineare Regression für diesen Bereich mit dem linearen Ansatz:

$$\sigma = a_1 + b_1 \cdot \epsilon \quad (6.1)$$

Als Schätzer für den gesuchten  $E$ -Modul wird die Steigung  $b_1$  der Regressionsgeraden (6.1) verwendet, d.h.:

$$E \approx b_1 \quad (6.2)$$

<sup>5</sup>siehe [Dom87], S. 312 f.

<sup>6</sup>siehe [Fos96]

<sup>7</sup>siehe [Fos96], S. 47 f.



Mit dem so festgelegten  $E$ -Modul erfolgt eine näherungsweise Berechnung der plastischen Dehnung  $\varepsilon^{plast.}$  gemäß:

$$\varepsilon^{plast.} \approx \varepsilon - \frac{\sigma}{b_1} + \frac{a_1}{b_1} \quad (6.3)$$

Mit (6.3) läßt sich die oben erwähnte *Offset*-Dehnung  $\varepsilon_{min}^{plast.}$  festlegen. Wenn  $\varepsilon^{plast.}$  diesen Wert überschreitet, wird plastisches Verhalten des Materials angenommen. Mit  $\varepsilon_{min}^{plast.}$  und einer weiteren, geeignet anzusetzenden plastischen Dehnung  $\varepsilon_{max}^{plast.}$  wird ein zweites Regressionsfenster festgelegt.

Die Regression in diesem Bereich liefert:

$$\sigma = a_2 + b_2 \cdot \varepsilon \quad (6.4)$$

Der Schnittpunkt der beiden Geraden (6.1) und (6.4) stellt eine Näherung für die gesuchte Fließgrenze  $\sigma_F$  des Materials dar:

$$\sigma_F \approx a_1 + b_1 \cdot \frac{a_1 - a_2}{b_2 - b_1} \quad (6.5)$$

Aufgrund der Streuungen der Meßwerte sind die Werte für  $a_1, b_1, a_2, b_2$  sämtlich fehlerbehaftet (siehe Kapitel 5.2.2); die Ungenauigkeiten in den Parametern werden durch die jeweiligen Standardabweichungen<sup>8</sup>  $S_{a_1}, S_{b_1}, S_{a_2}, S_{b_2}$  beschrieben. Aus dem Fehlerfortpflanzungsgesetz<sup>9</sup> folgt die Standardabweichung der geschätzten Fließgrenze  $\sigma_F$ :

$$S_{\sigma_F} = \sqrt{\left(\frac{b_2}{b_2 - b_1}\right)^2 \cdot S_{a_1}^2 + \left(b_1 \cdot \frac{a_1 - a_2}{(b_2 - b_1)^2}\right)^2 \cdot S_{b_1}^2 + \left(\frac{b_1}{b_2 - b_1}\right)^2 \cdot S_{a_2}^2 + \left(b_2 \cdot \frac{a_1 - a_2}{(b_2 - b_1)^2}\right)^2 \cdot S_{b_2}^2} \quad (6.6)$$

Zur Festlegung der Regressionsfenster werden für den austenitischen Stahl X 6 CrNi 11 die Werte gewählt:

$$\begin{aligned} \sigma_{min} &= 20 \frac{N}{mm^2} \\ \sigma_{max} &= 120 \frac{N}{mm^2} \\ \varepsilon_{min}^{plast.} &= 0.002\% \\ \varepsilon_{max}^{plast.} &= 0.02\% \end{aligned} \quad (6.7)$$

Die Regressionsanalyse der Daten aus Abb. 6.1 liefert für den Elastizitätsmodul  $E$  und die Fließgrenze  $\sigma_F$  bei *Raumtemperatur* die Werte:

$$\begin{aligned} E &= 205734 \pm 5224 \frac{N}{mm^2} \\ \sigma_F &= 159 \pm 5 \frac{N}{mm^2} \end{aligned} \quad (6.8)$$

<sup>8</sup>siehe Kapitel 5.2.2

<sup>9</sup>siehe z.B. [BK87], S. A 86 f.

Westerhoff kommt in [Wes95] zu vergleichbaren Ergebnissen; er gibt für den Elastizitätsmodul  $206000 \frac{N}{mm^2}$  und für die anfängliche Fließspannung  $164.2 \frac{N}{mm^2}$  an. Damit liegt die Fließgrenze des Materials deutlich unter dem in Tabelle 4.1 angegebenen Wert, was letztlich auf das verwendete *Offset*-Maß zurückzuführen ist. Zur Diskussion des Einflusses des *Offset*-Maßes auf die Bestimmung der Fließgrenze des Materials sei an dieser Stelle auf die Arbeit von Fosså [Fos96] verwiesen.

Der Wert des Elastizitätsmoduls liegt, unter Berücksichtigung des Streubandes, leicht über dem in Tabelle 4.1 angegebenen Wert, was aber ebenso an die Festlegung des proportionalen Bereichs gekoppelt ist.

Weiterhin von Bedeutung ist die Verteilung des Elastizitätsmoduls über alle Proben der Charge. Aufgrund der relativ umfangreichen Stichprobe erscheint es angebracht, die zugrundegelegte Normalverteilung der Modellparameter durch einen entsprechenden Anpassungstest nachzuprüfen. Dazu dient der in Kapitel 5.2.2 beschriebene  $\chi^2$ -Anpassungstest.

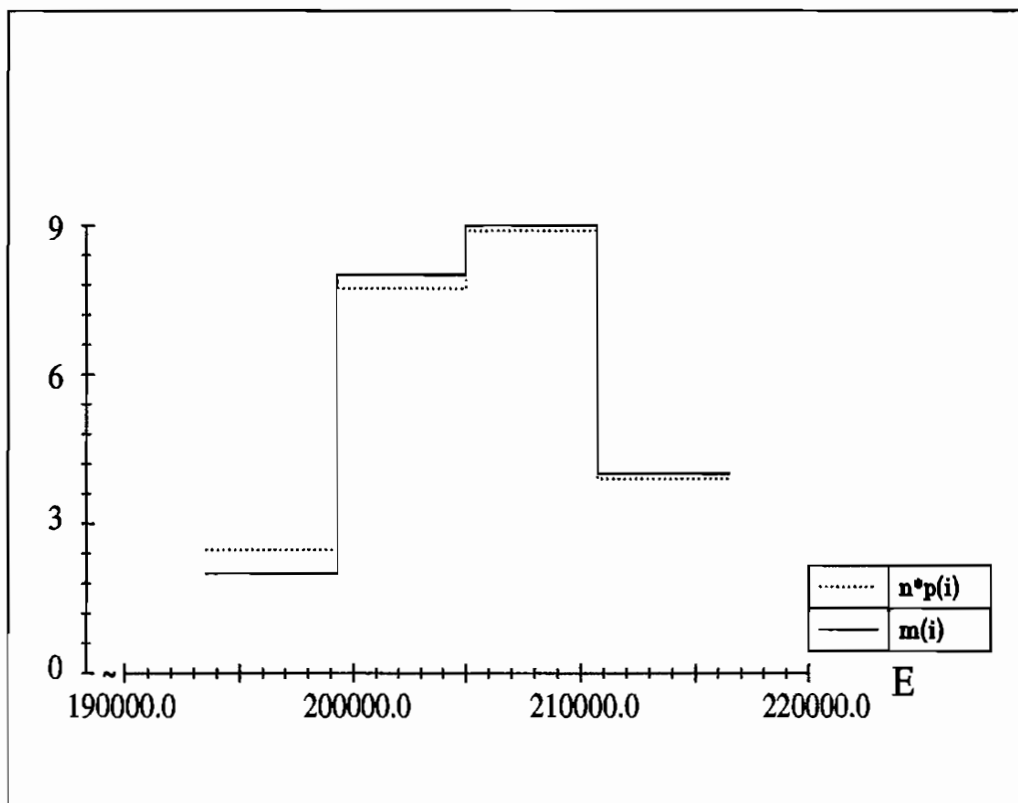


Abb. 6.3: Verteilung des Elastizitätsmoduls in einer Charge

Abb. 6.3 zeigt die Häufigkeit  $m(i)$  des Auftretens eines bestimmten Wertes des  $E$ -Moduls in einem passend gewählten Intervall<sup>10</sup> zusammen mit der aus der zugrundegelegten Nor-

<sup>10</sup>Die Intervalle müssen stets genügend Meßwerte enthalten, um zu einer sinnvollen statistischen Aussage zu gelangen, siehe z.B. [HG72]

malverteilung des  $E$ -Modules folgenden wahrscheinlichen Häufigkeit  $n \cdot p(i)$ . Deutlich wird aus Abb. 6.3 die geringe Abweichung der Häufigkeiten.

Der  $\chi^2$ -Anpassungstest liefert bei einer zugrundegelegten Irrtumswahrscheinlichkeit von 5% und einem Freiheitsgrad der Verteilung einen Wert für  $\chi^2$  von 0.105 gegenüber einem größtmöglichen Wert von  $\chi_{\alpha=0.05}^2 = 3.8$ , so daß die Hypothese der Normalverteilung nicht verworfen werden muß.

Die weiterhin zu bestimmenden elastischen Parameter wie die Querkontraktionszahl  $\nu$  und der thermische Ausdehnungskoeffizient  $\alpha$  werden aus der Literatur [BK87] übernommen, so gilt z.B.  $\alpha = 12 \cdot 10^{-6} \frac{1}{K}$ .

## 6.2 Bestimmung der Parameter des quasistatischen Modells

Der Bereich plastischen Materialverhaltens wird durch die Modellparameter der zweiten Kategorie charakterisiert. In diesem Abschnitt wird die Identifikation dieser Parameter beschrieben, die das geschwindigkeitsunabhängige Verfestigungsverhalten des Materials erfassen.

Das nichtlineare Verfestigungsverhalten läßt sich im monotonen Zugversuch durch die aktuelle Steigung der  $\sigma$ - $\varepsilon$ -Kurve beschreiben. Für den Verlauf der  $\sigma$ - $\varepsilon$ -Kurve wird in [BP87] und [Rot91] eine gebrochen-rationale Funktion mit asymptotisch linear-verfestigendem Materialverhalten<sup>11</sup> angegeben. Der Tangentenmodul  $E_t$  stellt sich dann als

$$E_t = \frac{d\sigma(\varepsilon)}{d\varepsilon} = a + \frac{d \cdot (b - a \cdot d) - c}{(d + \varepsilon)^2} \quad (6.9)$$

dar (siehe Gleichung (3.54) sowie [Wes95], S. 143). Das asymptotisch linear-verfestigende Verhalten läßt sich dabei durch die letzte Steigung  $E_{t\infty}$  der  $\sigma$ - $\varepsilon$ -Kurve sowie den Ordinatenabschnitt  $c_3$  beschreiben. Entsprechend werden die vier Freiheitsgrade  $a, b, c, d$  des gebrochen rationalen Ansatzes (6.9) durch die meßbaren Größen  $E, \sigma_F, E_{t0}, c_3, E_{t\infty}$  ausgedrückt (siehe [BP87] sowie Kapitel 3.2).

Als Grundlage der Anpassung der Parameter dienen die von *Westerhoff* [Wes95] bei einer näherungsweise quasistatischen Geschwindigkeit  $\dot{\varepsilon} = 10^{-5} \frac{1}{s}$  durchgeführten monotonen Zugversuche (siehe Abb. 6.4).

---

<sup>11</sup>siehe Kapitel 3.2

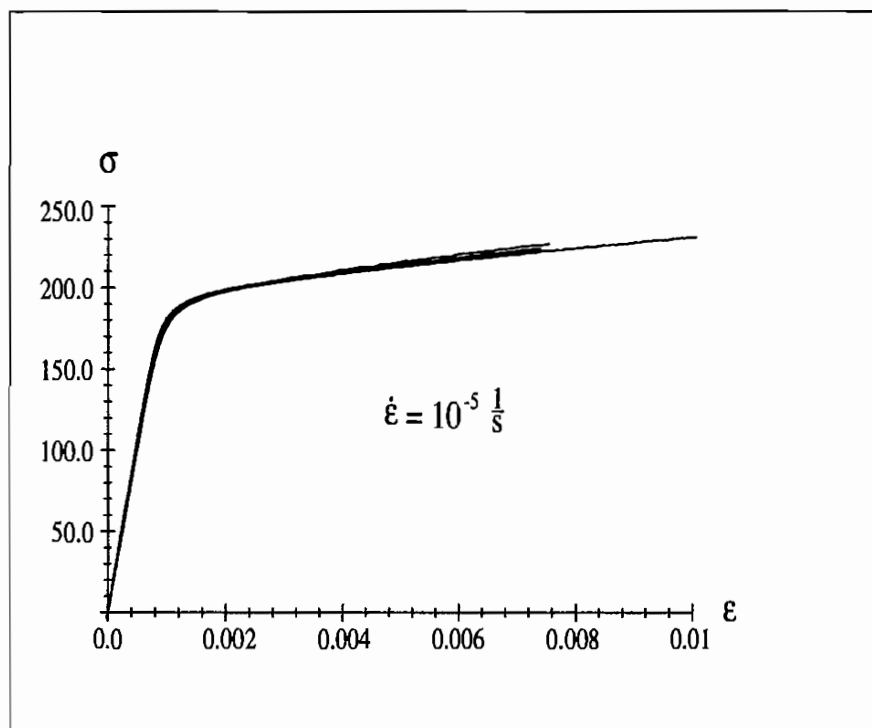


Abb. 6.4: Monotone Zugversuche bei einer näherungsweise quasistatischen Geschwindigkeit

Die Anpassung erfolgte mit der Fehlerquadratmethode aus Kapitel 5.2.1. Als Restriktionen sind dabei zu beachten:

$$E \geq E_{t_0} \geq E_t \geq E_{t_\infty} \quad (6.10)$$

Die Beziehung (6.10) besagt, daß der Tangentenmodul mit wachsender Verfestigung des Materials stets monoton abnehmen muß. Für die Freiheitsgrade des Modells (6.9) ergibt dies die beiden Restriktionsfunktionen:

$$g_1(a, b, c, d) = E - \frac{b - \sigma_F \cdot \left(1 - 2 \cdot \frac{a}{E}\right)}{d + \frac{\sigma_F}{E}} \geq 0 \quad (6.11)$$

$$g_2(a, b, c, d) = \frac{b - \sigma_F \cdot \left(1 - 2 \cdot \frac{a}{E}\right)}{d + \frac{\sigma_F}{E}} - a \geq 0$$

Weiterhin gilt die Stetigkeitsforderung für  $\varepsilon = \frac{\sigma_F}{E}$ ; diese ergibt die Gleichung<sup>12</sup>:

$$g_3(a, b, c, d) = \frac{a \cdot \left(\frac{\sigma_F}{E}\right)^2 + b \cdot \left(\frac{\sigma_F}{E}\right) + c}{d + \frac{\sigma_F}{E}} - \sigma_F = 0 \quad (6.12)$$

<sup>12</sup>Gleichheitsrestriktionen können immer dazu benutzt werden, einen Freiheitsgrad des Modells zu eliminieren [Pr<sup>88</sup>], was laut Braess [Bra76] zu einer Verbesserung der Problemstellung führt

Für die meßbaren Parameter  $E_{t_0}$ ,  $c_3$ ,  $E_{t_\infty}$  lassen sich nun leicht gute Startwerte zur Optimierung angeben; im vorliegenden Fall (siehe Abb. 6.4) werden gewählt:

$$\begin{aligned} E_{t_0}^0 &= 100000 \frac{N}{mm^2} \\ c_3^0 &= 100 \frac{N}{mm^2} \\ E_{t_\infty}^0 &= 1000 \frac{N}{mm^2} \end{aligned} \quad (6.13)$$

Die *Least-Squares*-Funktion beinhaltet neben den Residuen die Streuungen der Meßwerte an jedem Meßpunkt. Um zu einer sinnvollen Abschätzung dieser Ungenauigkeiten zu gelangen, bieten sich im wesentlichen zwei Wege an:

Dort, wo eine Anzahl wiederholter Versuche vorliegt (siehe Abb. 6.1), läßt sich die Streuung der Meßwerte durch Definition von Vergleichsdehnungspunkten und geeigneter Interpolation der Meßwerte direkt ermitteln (siehe Abb. 6.5):

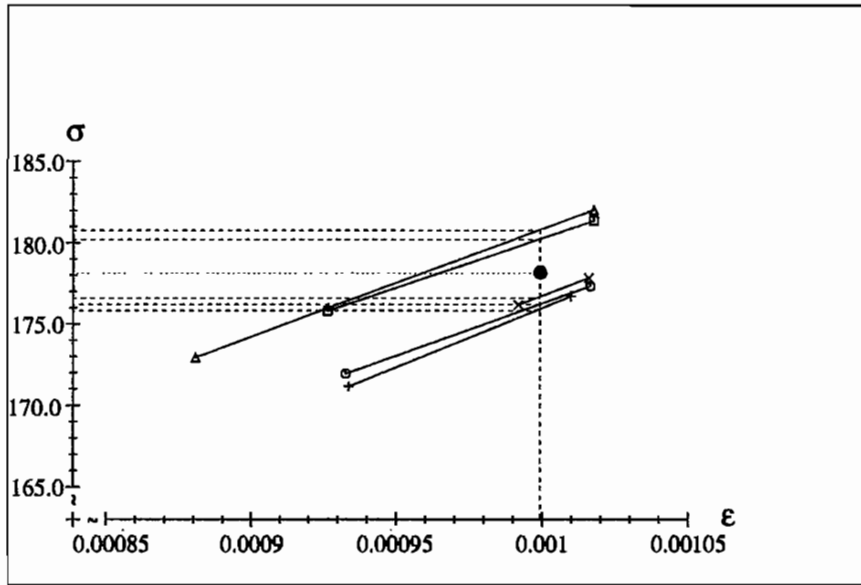


Abb. 6.5: Streuung der Spannung  $\sigma$  bei einer Referenzdehnung  $\epsilon = 0.1\%$  und Mittelwert  $\bullet$

Bei den in Abb. 6.5 dargestellten —näherungsweise quasistatischen— monotonen Zugkurven mit einer Dehngeschwindigkeit  $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \frac{1}{s}$  (siehe Abb. 6.4) ergibt sich beispielsweise bei einer Referenzdehnung  $\epsilon = 0.1\%$  und linearer Interpolation zwischen den Meßpunkten eine Streuung der Spannung  $\sigma$ :

$$S_\sigma |_{\epsilon=0.1\%} = 2.344 \frac{N}{mm^2} \quad (6.14)$$

Aufgrund des geringen Umfangs der Stichprobe kann (6.14) jedoch nur ein grober Anhalt für die Streuung sein. Zudem ist die oben beschriebene Vorgehensweise nur für wenige

Bereiche der Spannungs-Dehnungskurve anwendbar, da mit wachsender Dehnung immer weniger Meßdaten zur Verfügung stehen (siehe Abb. 6.4).

Als weiterer Weg bietet sich daher die Nutzung von Informationen aus der Anpassung des Modells an die Meßwerte an [PTVF92]. Diese Vorgehensweise bedarf zweier Grundannahmen:

- (i) Alle Meßpunkte besitzen dieselbe Standardabweichung und
- (ii) das Modell liefert die bestmögliche Anpassung an die Meßpunkte.

Annahme (ii) führt nun dazu, daß eine unabhängige Einschätzung der Güte der Anpassung nicht mehr möglich ist [PTVF92]. Ebenso muß die Fehlerquadratsumme hinreichend klein sein, um eine sinnvolle Abschätzung der Streuungen vornehmen zu können. Wenn die Voraussetzungen erfüllt sind, folgt aus der Minimierung der Fehlerquadratsumme ein *a posteriori*-Schätzer der Varianz [PTVF92]:

$$S^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - y(x_i; a_1, \dots, a_m))^2}{n - m} \quad (6.15)$$

Die Minimierung der Fehlerquadratsumme erfolgte mit dem in Kapitel 5.2.1.3 beschriebenen nichtlinearen Least-Squares Verfahren SQUFIT [Bra76] von *Braess*. Aufgrund der guten Startwerte der Optimierung und der leichten Nachprüfbarkeit des gefundenen Optimums durch Ausmessen der Kurven kann auf ein globales Suchverfahren (siehe Kapitel 5.2.1.1) verzichtet werden. Das Ergebnis der optimalen Anpassung des Modells (6.9) an die Meßwerte ist in Abb. 6.6 dargestellt:

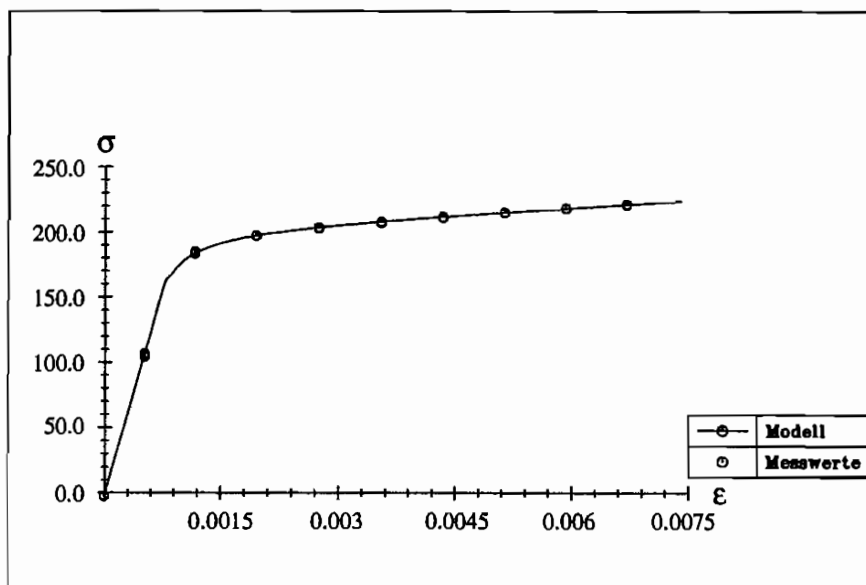


Abb. 6.6: Optimale Anpassung des Modells (6.9) an die Meßwerte

Nach der Anpassung läßt sich die unbekannte Varianz der Meßwerte aus (6.15) bestimmen; nachzuprüfen ist aber die zugrundegelegte Normalverteilung der Meßwerte und die obige Annahme (i). Dazu ist in Abb. 6.7 die Verteilung der Residuen nach der Anpassung aufgeführt:

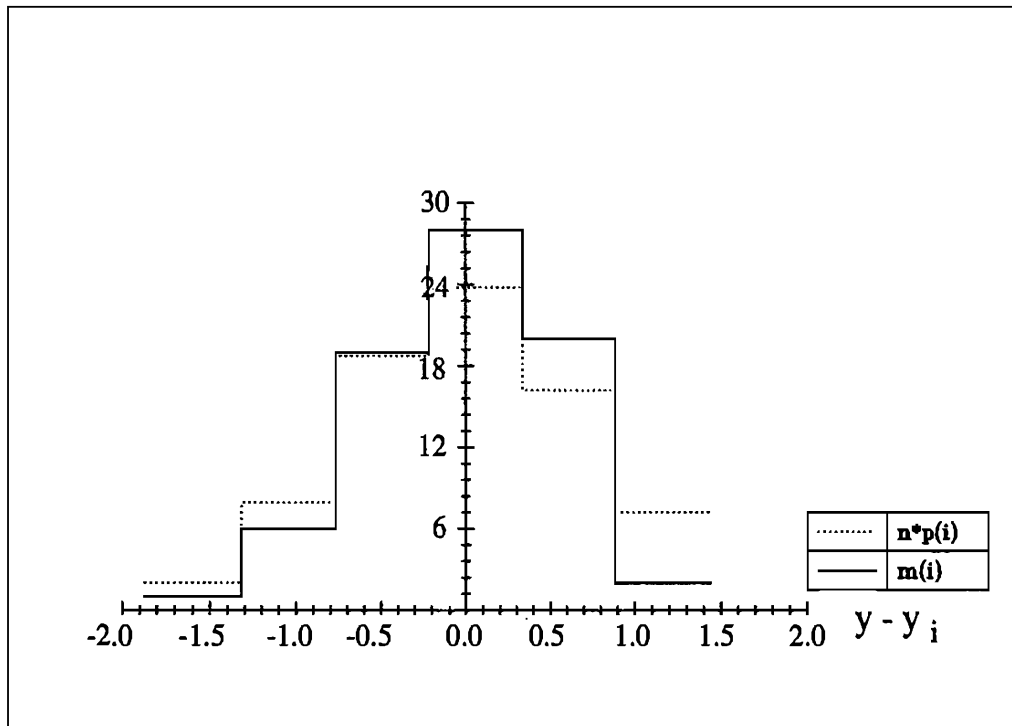


Abb. 6.7: Verteilung der Residuen nach Minimierung der Fehlerquadratsumme

Abb. 6.7 zeigt die Häufigkeit  $m(i)$  des Auftretens eines bestimmten Wertes des Residuums in einem passend gewählten Intervall zusammen mit der aus der zugrundegelegten Normalverteilung der Residuen folgenden wahrscheinlichen Häufigkeit  $n * p(i)$ . Deutlich wird aus Abb. 6.7 die geringe Abweichung der Häufigkeiten.

Der  $\chi^2$ -Anpassungstest liefert bei einer zugrundegelegten Irrtumswahrscheinlichkeit von 5% und drei Freiheitsgraden der Verteilung einen Wert für  $\chi^2$  von 6.401 gegenüber einem größtmöglichen Wert von  $\chi^2_{\alpha=0.05} = 7.815$ , so daß die Hypothese der Normalverteilung nicht verworfen werden muß.

Analog zur obigen Argumentation brauchen auch die beiden Grundannahmen (i) und (ii) nicht verworfen zu werden, so daß sich die Vorgehensweise der Erzeugung synthetischer Meßwerte auf diese Weise rechtfertigen läßt.

Als Streuung der Spannung  $\sigma$  folgt aus der statistischen Analyse:

$$S_{\sigma} = 0.68 \frac{N}{mm^2} \quad (6.16)$$

Deutlich wird aus (6.14) und (6.16) der große Unterschied zwischen der Streuung der Meßwerte einer Probe und der Streuung der Meßwerte in einer Charge gleichen Materials. Dies zeigt den großen Einfluß des Probenmaterials; zu einem analogen Ergebnis kommt *Kikillus* bei der Bestimmung der Härte der Proben aus derselben Charge, weswegen er die Proben in Gruppen einteilt [Kik93].

Die mit der Streuung (6.16) erzeugten synthetischen Meßdaten sind zusammen mit den ihnen zugrundeliegenden realen Meßdaten in der Abb. 6.8 dargestellt:

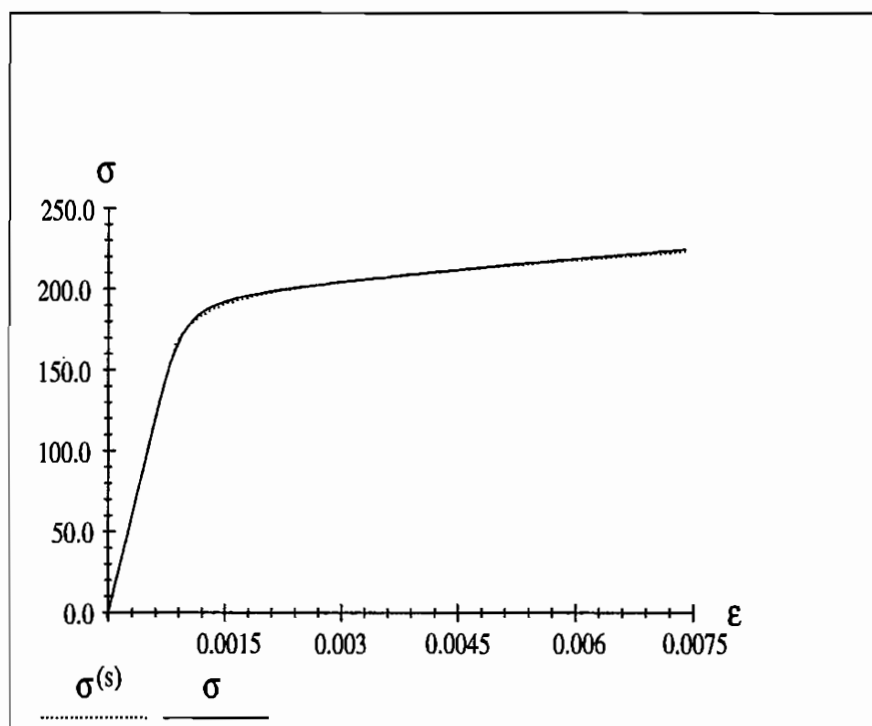


Abb. 6.8: Vergleich der simulierten Daten ( $\cdots$ ) mit den Meßwerten ( $\text{—}$ )

Aufgrund der Annahme (ii) der bestmöglichen Wiedergabe der Meßdaten durch das Modell besitzen die synthetischen Meßdaten exakt dieselbe statistische Beziehung zu den optimal angepaßten Modellparametern wie die nicht realisierten Meßdaten zu den unbekanntem wahren Parametern<sup>13</sup>, so daß sie ein adäquates Surrogat darstellen.

Zur Bestimmung der Streuung der Modellparameter wurden jeweils 1000 Monte Carlo Simulationen durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 6.1 aufgelistet:

<sup>13</sup>siehe [PTVF92], S. 685



Versuch Nr.	Anfangstangentenmodul $E_{t0} \left[ \frac{N}{mm^2} \right]$	Endtangentenmodul $E_{t\infty} \left[ \frac{N}{mm^2} \right]$	Ordinatenabschnitt $c_3 \left[ \frac{N}{mm^2} \right]$
1	193785 $\pm 2904$	4013 $\pm 33$	196.1 $\pm 0.2$
2	138032 $\pm 2286$	2973 $\pm 28$	200.1 $\pm 0.2$
3	183256 $\pm 5094$	3244 $\pm 36$	198.7 $\pm 0.1$
4	144750 $\pm 2104$	3045 $\pm 112$	198.4 $\pm 0.5$
5	170590 $\pm 2305$	3411 $\pm 5$	198.9 $\pm 0.1$
6	167885 $\pm 1292$	3187 $\pm 6$	198.9 $\pm 0.1$
$\bar{x}$ $\pm S_x$	166383 $\pm 21575$	3312 $\pm 376$	198.5 $\pm 1.3$

Tabelle 6.1: Verteilung der Parameter des Tangentenmoduls bei quasistatischen Zugversuchen und Mittelwerte

Auf das Nachprüfen einer Verteilung der Modellparameter aus Tabelle 6.1 analog zum Nachweis der Normalverteilung des Elastizitätsmoduls in Kapitel 6.1 wird hier aufgrund des geringen Umfangs der Stichprobe jedoch verzichtet.

Zur Beschreibung des *zyklischen Verfestigungsverhaltens* sind im INTERATOM-Modell weitere Freiwerte enthalten (siehe Kapitel 3.2). Die Identifikation dieser Parameter ist Gegenstand der folgenden Ausführungen.

Das zyklische Verfestigungsverhalten des Materials stellt sich wie in Abb. 6.9 dar:

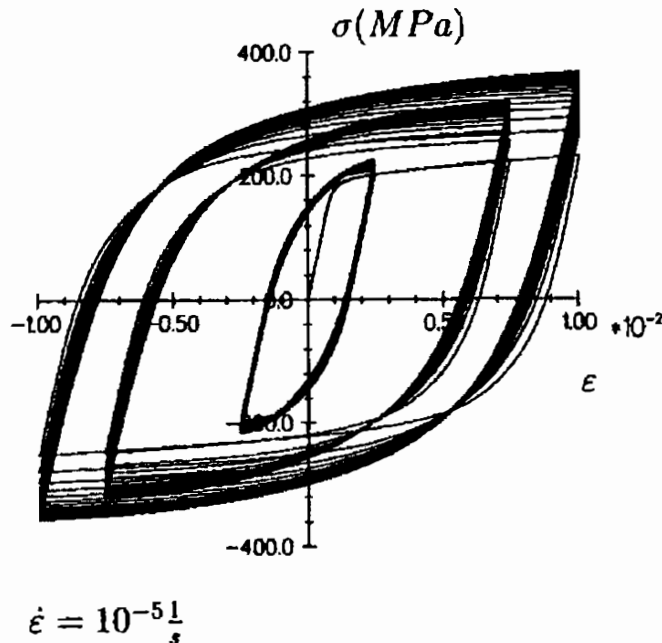


Abb. 6.9: Zyklische Versuche (aus [Wes95])

Abb. 6.9 zeigt drei verschiedene zyklische Versuche mit den konstanten Dehnschwingbreiten  $\Delta\epsilon = 2\%$ ,  $\Delta\epsilon = 1.5\%$  und  $\Delta\epsilon = 0.5\%$ . Die drei Zyklen wurden von *Westerhoff* bei einer quasistatischen Geschwindigkeit von  $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \frac{1}{s}$  ermittelt. Man erkennt in jedem der drei Zyklen die zyklische Verfestigung, die laut *Westerhoff* [Wes95] nach ungefähr 20 Zyklen erreicht ist.

Das INTERATOM-Modell erfasst das zyklische Verfestigungsverhalten durch eine Entwicklungsgleichung für den Radius der Fließfläche im Rahmen der gewählten Fließtheorie (siehe Kapitel 3.2). In [BP87] und [Rot91] wird für den aktuellen Radius der Fließfläche die Beziehung

$$g(\kappa) = g_0 + (g_\infty - g_0) \cdot (1 - e^{-c_1 \cdot \kappa}) \quad (6.17)$$

angegeben. In Gleichung (6.17) bezeichnet

$$g_0 = \frac{2}{3} \cdot \sigma_F^2 \quad (6.18)$$

den anfänglichen Radius der Fließfläche. Für den Radius  $g_\infty$  der Fließfläche im Grenzzustand der Verfestigung wird in [BP87] und [Rot91] der Ansatz

$$g_\infty = c_2 \cdot g_0 \quad (6.19)$$

gemacht. Das INTERATOM-Modell besitzt daher zwei Freiheitsgrade  $c_1$  und  $c_2$ , die aus den in Abb. 6.9 dargestellten zyklischen Versuchen bestimmt werden müssen. Die Anpassung erfolgte mit der in Kapitel 5.2.1 beschriebenen Fehlerquadratmethode, und zwar mit

dem in Kapitel 5.2.1.4 beschriebenen Optimierungsverfahren NLPQLD von *Schittkowski* [Sch81], sowie mit dem Evolutionsverfahren evoC von *Trint* und *Utecht* [TU94].

Die zum vorliegenden Anpassungsproblem gehörige Fehlerquadratsumme läßt sich im Fall zweier Modellparameter anschaulich darstellen:

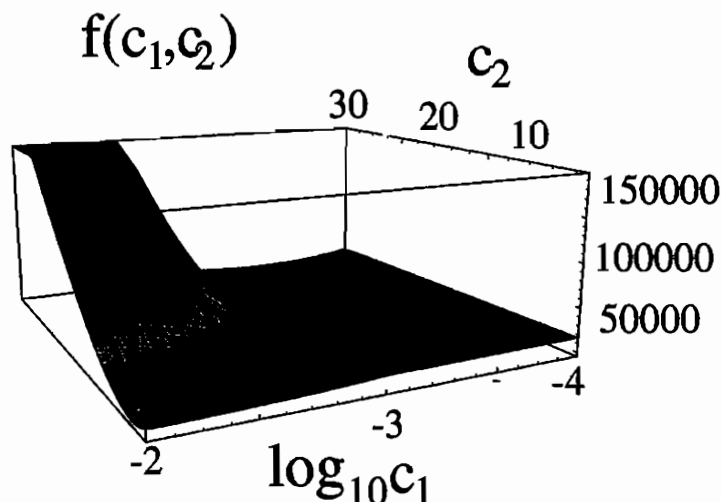


Abb. 6.10: Fehlerquadratsumme zu den Zyklen

Abb. 6.10 offenbart einen ungünstigen Verlauf der Zielfunktion zur Bestimmung der beiden Parameter  $c_1$  und  $c_2$ . Das Minimum der Fehlerquadratsumme ist in einem langgestreckten, hyperbelförmigen Tal zu suchen, dessen Boden nur geringe Gradienten aufweist. Diese Form der Zielfunktion zeugt von einer *fast linearen Abhängigkeit* der beiden Parameter. Es ist daher angebracht, eine andere Verfestigungsfunktion  $g(\kappa)$  für das INTERATOM-Modell zu wählen, welche einen günstigeren Verlauf der Zielfunktion aufweist. Wünschenswert wäre eine konvexe Funktion. Die Angabe einer solchen Verfestigungsfunktion ist jedoch a priori nicht möglich. Aus diesem Grunde wird in dieser Arbeit die Funktion (6.17) beibehalten. Die ungünstigen Form der Zielfunktion führt dazu, daß deterministische Optimierungsverfahren (siehe Kapitel 5.2.1.4) nur im Falle guter Startwerte der Optimierung erfolgreich eingesetzt werden können. So findet das oben genannte Verfahren von *Schittkowski* bei schlechten Startwerten nur ein lokales Minimum; beispielsweise führt der Startparametersatz  $c_1 = 0.001$  und  $c_2 = 20.0$  nach 4 Iterationsschritten zu dem Ergebnis  $c_1 = 0.0011$  und  $c_2 = 17.0$ , was nach Abb. 6.10 und Abb. 6.11 noch weit weg vom Optimum ist. Zum Auffinden von Startwerten in der Nähe des gesuchten Minimums eignen sich in besonderer Weise Evolutionsverfahren (siehe Kapitel 5.2.1.5). Die folgenden Ergebnisse wurden mit dem Programm evoC [TU94] in paralleler Version eingebettet in das

Programm PVM [GBD<sup>+</sup>94] erzielt. Initialisiert wurde eine (1/1,10) - Evolutionsstrategie, also eine Strategie mit einem Elter und zehn Nachkommen, die für jeweils 20 Generationen auf jedem der eingesetzten Rechner innerhalb des Master-Slave-Konzeptes<sup>14</sup> (siehe Kapitel 5.2.1.5) isoliert ablief. Die Steuerung der Schrittweite der Mutationen berücksichtigte Informationen aus vorhergehenden Evolutionsschritten.

In der Abb. 6.11 ist die Suche nach dem globalen Minimum der Fehlerquadratsumme mit dem oben beschriebenen Evolutionsverfahren dargestellt:

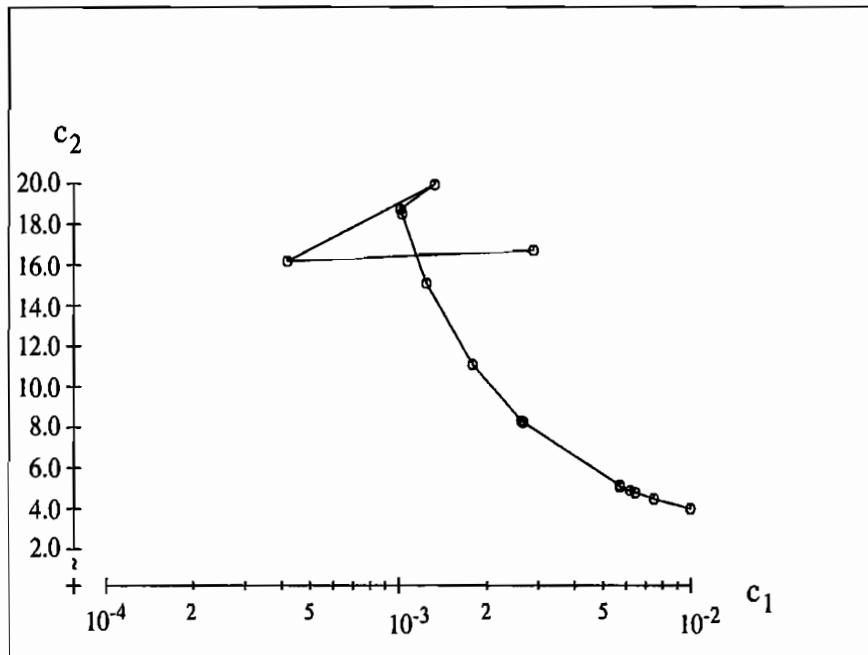


Abb. 6.11: Auffinden guter Startwerte mit der Evolutionsstrategie

In Abb. 6.11 erkennt man deutlich, wie die Evolutionsstrategie dem Verlauf der in Abb. 6.10 dargestellten Zielfunktion folgt; nach einer anfänglichen Suche in der Umgebung des Tales folgt das Evolutionsverfahren genau dem hyperbelförmigen Verlauf des Talgrundes. Mit den so gefundenen Werten der Parameter  $c_1$  und  $c_2$  aus (6.17) lassen sich die in den Kapiteln 5.2.1.3 und 5.2.1.4 beschriebenen Verfahren erfolgreich einsetzen.

Die Minimierung der Fehlerquadratsumme unterliegt dabei verschiedenen Restriktionen; zum einen sind das die in Kapitel 3.4 hergeleiteten thermodynamischen Restriktionen für die Parameter  $c_1$  und  $c_2$ , die die Befriedigung der Entropieungleichung sichern:

$$0 < c_1 < \frac{1}{(c_2 - 1) \cdot \sigma_F^2} \cdot \left[ \frac{2 \cdot E_{t0}}{1 - \frac{E_{t0}}{E}} - 2 \cdot E_{t\infty} \right], \quad c_2 > 1 \quad (6.20)$$

<sup>14</sup>Es wurden 12 Rechner mit dynamischer Auslastung eingesetzt

Zum anderen ergeben sich Restriktionen aus numerischer Sicht; dies wird deutlich, wenn man die im INTERATOM-Modell enthaltene Strukturgedächtnisfunktion  $\Delta(\kappa)$  (siehe Kapitel 3.2) betrachtet:

$$\Delta(\kappa) = p \cdot \int_{\kappa_{in}}^{\kappa} \sqrt{\frac{g_0}{g(\kappa)}} d\kappa + q \quad (6.21)$$

Wertet man das in (6.21) enthaltene Integral für die Funktion (6.17) aus, so findet man:

$$\Delta(\kappa) = q - p \cdot \frac{1}{c_1 \cdot \sqrt{c_2}} \cdot \ln \left( \frac{\left( \sqrt{-(c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa} + c_2} - \sqrt{c_2} \right) \cdot \left( \sqrt{-(c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa_{in}} + c_2} + \sqrt{c_2} \right)}{\left( \sqrt{-(c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa_{in}} + c_2} - \sqrt{c_2} \right) \cdot \left( \sqrt{-(c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa} + c_2} + \sqrt{c_2} \right)} \right) \quad (6.22)$$

Der im Zähler des Argumentes des Logarithmus enthaltene Exponentialterm  $-(c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa}$  in (6.22) wird für große Werte von  $c_1$  und  $\kappa$  sehr klein. Das wird dann relevant, wenn die Größenordnung in den Bereich der Maschinengenauigkeit *macheps* (siehe Kapitel 5.2.1.2) kommt. In diesem Fall kann der Rechner den Ausdruck  $-(c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa} + c_2$  nicht mehr von  $c_2$  unterscheiden<sup>15</sup>, so daß der Zähler des Logarithmus zu Null wird und damit den Definitionsbereich des Logarithmus verletzt. Um diesen Fall auszuschließen, wird daher gefordert:

$$(c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa} \gg \text{macheps} \quad (6.23)$$

Die Maschinengenauigkeit *macheps* in (6.25) besitzt beispielsweise auf einer SUN Sparc-Station 10/20 den Wert<sup>16</sup>:

$$\text{macheps} = 1.11022302 \cdot 10^{-16} \quad (6.24)$$

Numerische Rechnungen sollten so verlaufen, daß man deutlich weg von den Rundungen bleibt, z.B. oberhalb von  $10^{-12}$ . Die Forderung (6.23) führt daher zu der numerischen Restriktion:

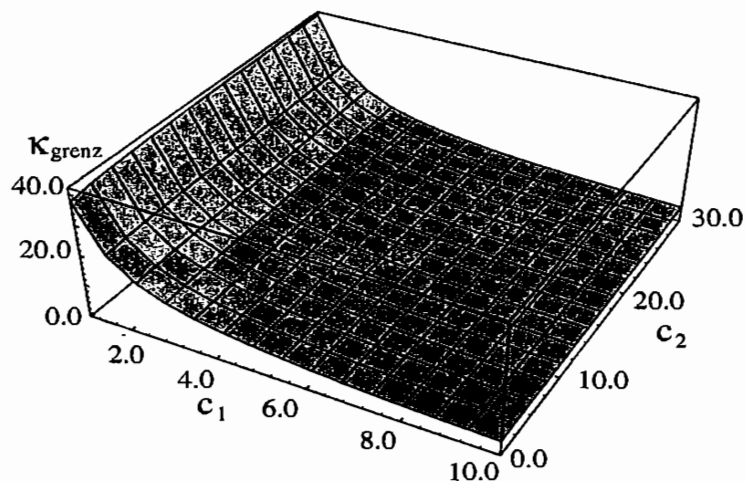
$$\kappa < \frac{-\ln(10^{-12}) + \ln(c_2 - 1)}{c_1} \quad (6.25)$$

Aus (6.25) und (6.24) ergibt sich ein maximal zulässiger Wert  $\kappa_{\text{grenz}}$  für die isotrope Verfestigungsvariable  $\kappa$  (siehe Abb. 6.12):

$$\kappa_{\text{grenz}} = \frac{25.3284 + \ln(c_2 - 1)}{c_1} \quad (6.26)$$

<sup>15</sup>Zur Problematik der Maschinengenauigkeit bei der Arithmetik mit endlicher Genauigkeit siehe auch [DS83], S. 10 ff.

<sup>16</sup>Zur Ermittlung der Maschinengenauigkeit siehe Kap. 5.2.1.2



**Abb. 6.12:** Numerische Restriktion  $\kappa_{\text{grenz}}$  für die isotrope Verfestigung

Die endgültige Anpassung der Parameter  $c_1$  und  $c_2$  in (6.17) an die Zyklen in Abb. 6.9 unter Berücksichtigung der Restriktionen (6.20) und (6.25) erfolgte mit dem in Kapitel 5.2.1.4 beschriebenen Optimierungsverfahren NLPQLD von *Schittkowski* [Sch81].

Entscheidend bei der Auffindung der Werte für die Materialparameter, die in der Lage sind, das Verfestigungsverhalten des Materials bei Raumtemperatur adäquat zu beschreiben, ist die Menge an Informationen, die in die Parameter eingeht. Zur Verdeutlichung dieser Problematik wird im folgenden die Anpassung an die einzelnen Zyklen vorgenommen und mit den so gefundenen Parametern versucht, die jeweils nicht in die Anpassung miteinbezogenen Zyklen zu beschreiben. Das Resultat dieser Vorgehensweise ist die jeweils sehr gute Modellierung des angepaßten Zyklus, aber die teilweise sehr ungenaue Wiedergabe der nicht mitangepaßten Zyklen, so daß sich eine befriedigende Lösung des Optimierungsproblems nur über die Hinzunahme sämtlicher Informationen über das Verfestigungsverhalten des Materials erzielen läßt.

Abb. 6.13 zeigt die Anpassung an den Zyklus mit  $\Delta\varepsilon = 2\%$ , der entsprechend auch gut vom Modell wiedergegeben wird. Die beiden Zyklen mit  $\Delta\varepsilon = 1.5\%$  und  $\Delta\varepsilon = 0.5\%$  werden dagegen nicht richtig erfaßt. Bei der Anpassung an den Zyklus mit  $\Delta\varepsilon = 1.5\%$  (siehe Abb. 6.14) und an den Zyklus mit  $\Delta\varepsilon = 0.5\%$  (siehe Abb. 6.15) ergeben sich analoge Ergebnisse. Erst die gleichzeitige Anpassung an alle drei Zyklen (siehe Abb. 6.16) liefert

das gewünschte Ergebnis.

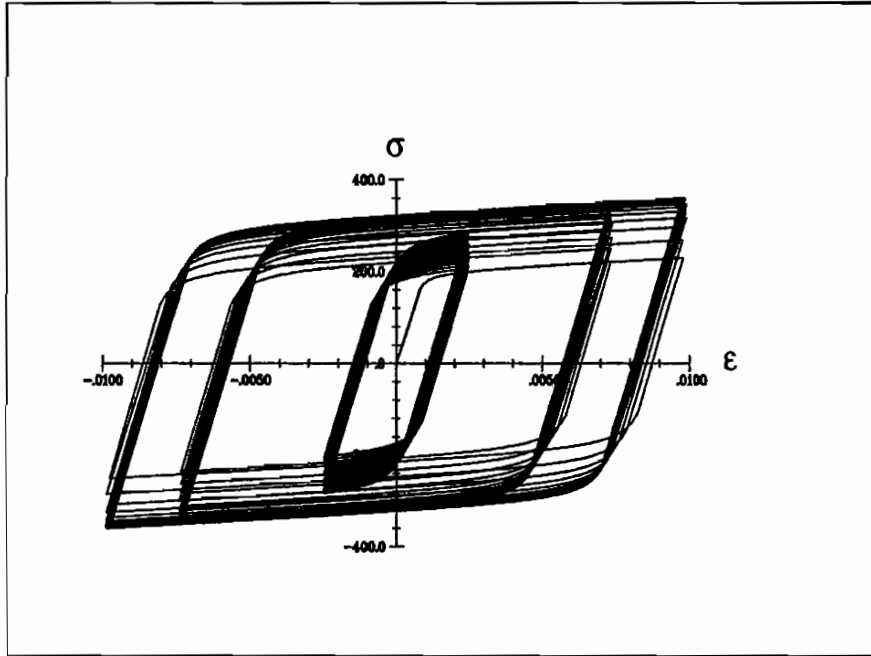


Abb. 6.13: Ergebnis der Anpassung an den Zyklus mit  $\Delta\epsilon = 2\%$

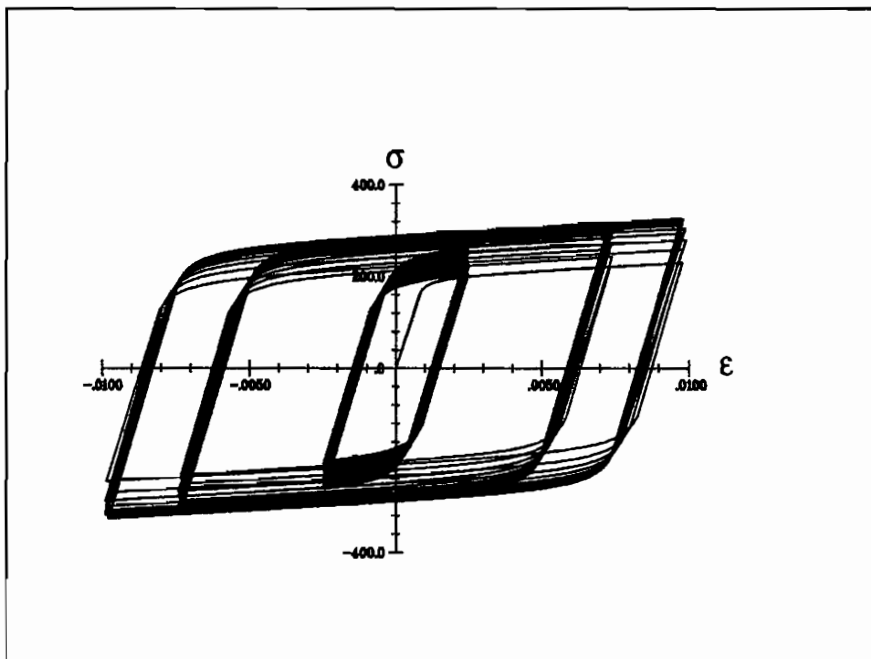


Abb. 6.14: Ergebnis der Anpassung an den Zyklus mit  $\Delta\epsilon = 1.5\%$

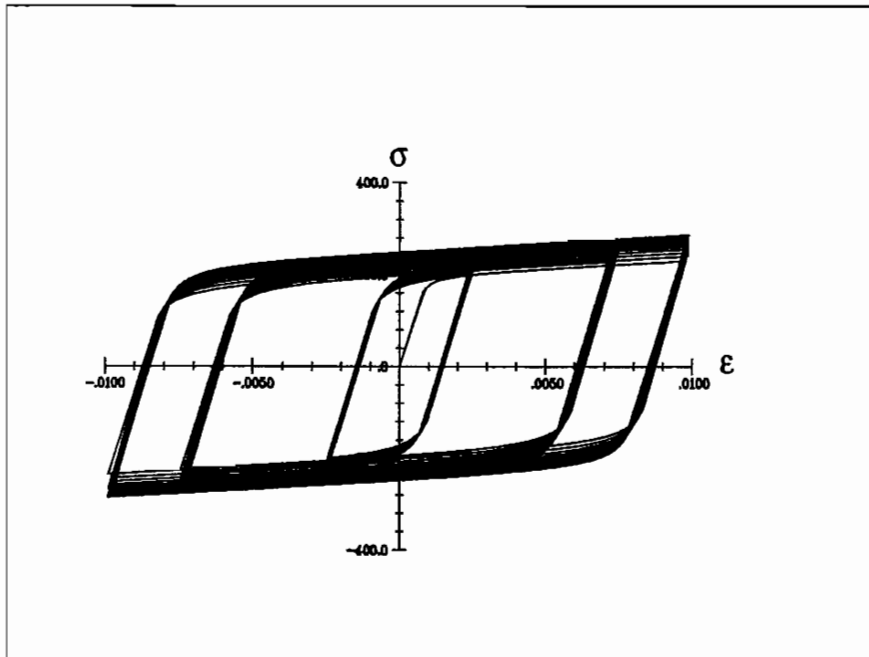


Abb. 6.15: Ergebnis der Anpassung an den Zyklus mit  $\Delta\epsilon = 0.5\%$

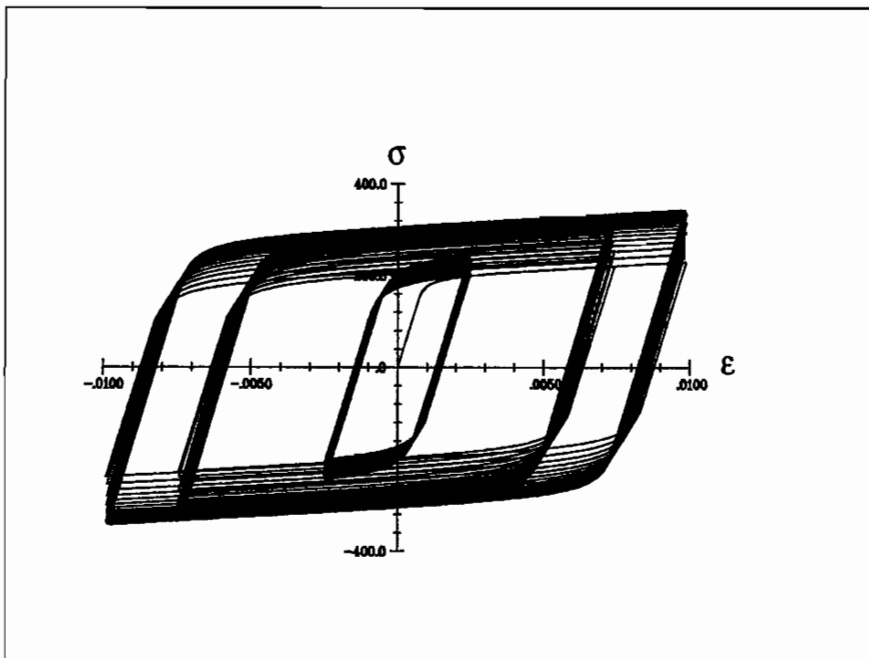


Abb. 6.16: Ergebnis der Anpassung an alle drei Zyklen gleichzeitig

Die Anpassung an alle drei Zyklen gleichzeitig (siehe Abb. 6.16) ergibt einen Parametersatz, der in der Lage ist, das Verfestigungsverhalten des Materials insgesamt gut zu



erfassen. Die gesuchten Werte der Parameter  $c_1$  und  $c_2$  bei Raumtemperatur lauten damit:

$$\begin{aligned} c_1 &= 0.0199 \pm 0.0005 \frac{mm^2}{N} \\ c_2 &= 3.06 \pm 0.02 \end{aligned} \quad (6.27)$$

Aus der statistischen Analyse (siehe Kapitel 5.2.2) folgen die Korrelationen zwischen den beiden Parametern  $c_1$  und  $c_2$ :

$\rho$	$c_1$	$c_2$
$c_1$	1.0	-0.81
$c_2$	-0.81	1.0

Tabelle 6.2: Korrelationskoeffizienten

Aus Tabelle 6.2 folgt eine starke negative Korrelation zwischen den Parametern  $c_1$  und  $c_2$ , die auf die lineare Beziehung

$$c_1 = -0.037 \frac{mm^2}{N} \cdot c_2 + k; \quad k \in \mathbb{R} \quad (6.28)$$

hindeutet. Die statistische Analyse bestätigt die in Abb. 6.10 zu erkennende lineare Abhängigkeit zwischen den Parametern. Setzt man die lineare Abhängigkeit (6.28) in die Verfestigungsfunktion (6.17) ein, so erhält man die modifizierte Verfestigungsfunktion:

$$g(\kappa) = g_0 + (g_\infty - g_0) \cdot \left( 1 - e^{-k \cdot \kappa} \cdot \left( e^{c_2 \frac{mm^2}{N} \cdot \kappa} \right)^{0.037} \right) \quad (6.29)$$

Der Parameter  $k$  muß wiederum aus den zyklischen Versuchen aus Abb. 6.9 bestimmt werden.

Die Anpassung ergibt:

$$\begin{aligned} k &= 0.15 \pm 0.0007 \frac{mm^2}{N} \\ c_2 &= 3.06 \pm 0.01 \end{aligned} \quad (6.30)$$

Der neue Korrelationskoeffizient  $\rho(k, c_2)$  zu den Parametern (6.30) lautet:

$$\rho(k, c_2) = -0.38 \quad (6.31)$$

In diesem Fall ergibt sich durch Einsetzen der linearen Abhängigkeit eine Verbesserung der Situation.

### 6.3 Bestimmung der Parameter des viskoplastischen Modells

Als dritter und letzter Bereich der Anpassung des INTERATOM-Modells verbleiben die Parameter der dritten Kategorie, die das viskose Materialverhalten erfassen. Typische viskose Phänomene sind in den Abb. 6.17 bis Abb. 6.20 dargestellt:

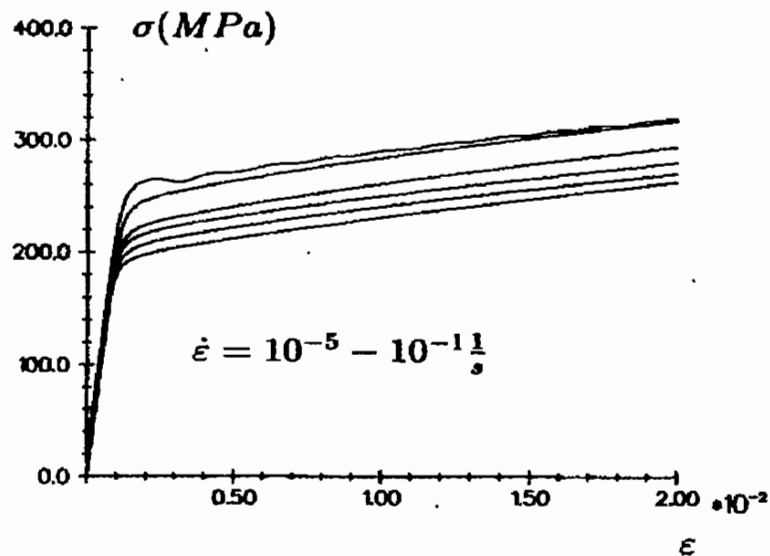


Abb. 6.17: Dehnungsgesteuerte Zugversuche (aus [Wes95])

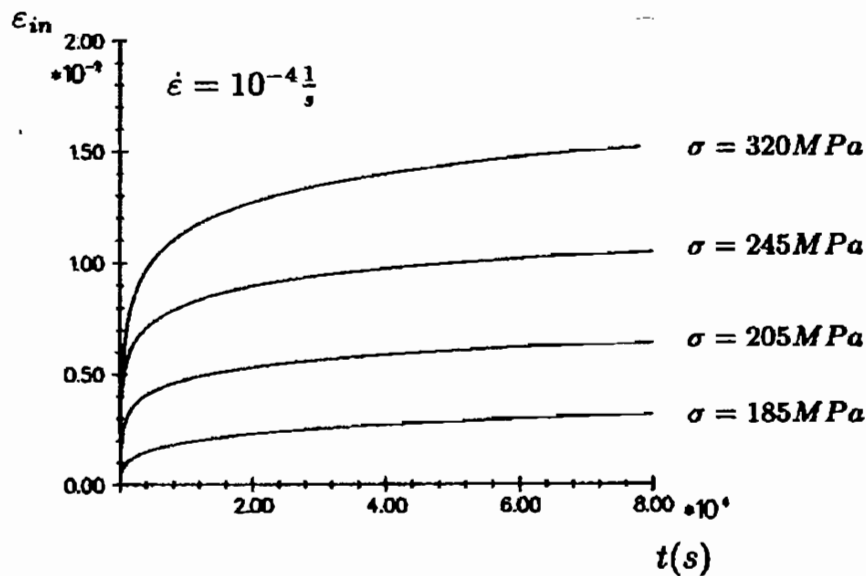


Abb. 6.18: Kriechversuche bei verschiedenen Spannungsniveaus (aus [Wes95])

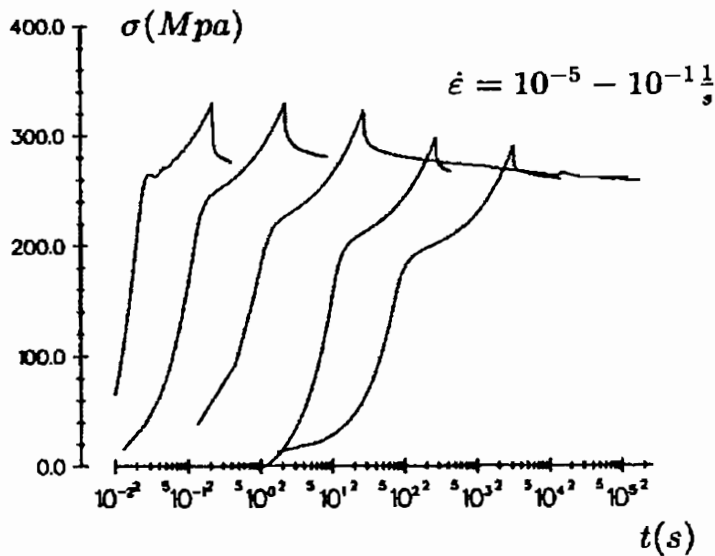


Abb. 6.19: Relaxationsversuche (aus [Wes95])

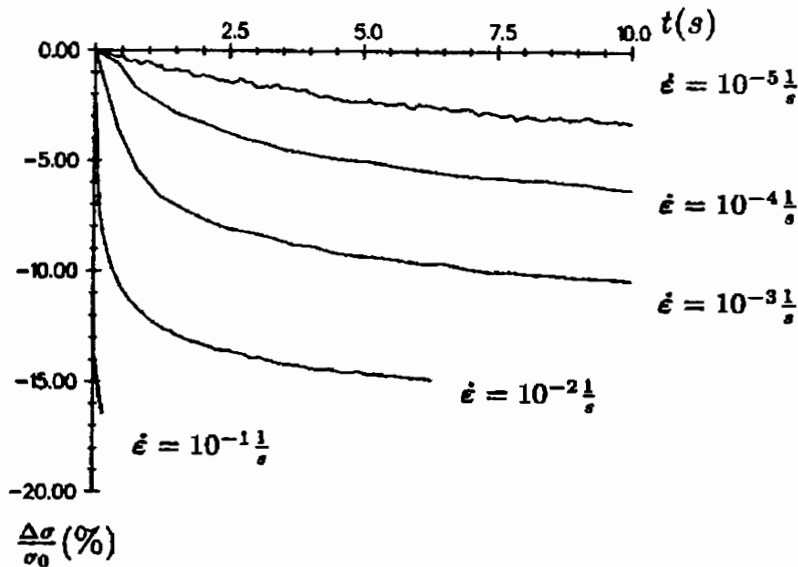


Abb. 6.20: Relative Abnahme der Spannung bei Relaxationsversuchen (aus [Wes95])

Die Versuche wurden von *Westerhoff* bei Raumtemperatur durchgeführt. Abb. 6.17 zeigt sechs monotone Zugversuche mit jeweils konstanter Dehngeschwindigkeit  $\dot{\epsilon}$  von einer quasistatischen Geschwindigkeit  $10^{-5} \frac{1}{s}$  bis zu einer Geschwindigkeit von  $10^{-1} \frac{1}{s}$ . Man erkennt die nichtlineare Zunahme der Spannung pro Dekade der Geschwindigkeit und damit eine positive Dehnratenabhängigkeit des Materials. Das in bestimmten Temperaturbereichen

zu beobachtende Phänomen der negativen Dehnratenabhängigkeit, welches auf die Reckalterung des Materials zurückzuführen ist, wird in [Wic96] ausführlich untersucht.

Das in Kapitel 2.1.4 beschriebene Kriechverhalten ist in Abb. 6.18 zu erkennen. Abhängig vom Niveau der Spannung zu Beginn des Kriechvorganges akkumuliert eine mehr oder weniger große Kriechdehnung. Dabei gilt: Je höher das Spannungsniveau war, desto größer die akkumulierte Dehnung.

Die Abb. 6.19 und Abb. 6.20 zeigen das in Kapitel 2.2.2 beschriebene Phänomen der Spannungsrelaxation. In Abb. 6.20 erkennt man die Abhängigkeit der Größe der relaxierten Spannung von der Geschwindigkeit des vorhergehenden monotonen Zugversuches. Hierbei gilt: Je größer die Geschwindigkeit des monotonen Zugversuches war, desto stärker nimmt die Spannung mit der Zeit ab.

### 6.3.1 INTERATOM-Modell

Das INTERATOM-Modell erfaßt das viskose Verhalten des Materials im Rahmen des Überspannungskonzeptes von *Perzyna* (siehe Kap. 3.3) durch die Überspannungsfunktion  $\Phi(\Lambda)$ . In [Bru84], [BP87] und [Rot91] wird für die Überspannungsfunktion die Beziehung

$$\Phi(\Lambda, T) = 2 \cdot \gamma(T) \cdot \frac{\Lambda}{E} \cdot \left( 1 + \frac{\Lambda}{c_4(T)} \right)^{c_5(T)} \quad (6.32)$$

bzw. für konstante Prozeßtemperatur

$$\Phi(\Lambda) = 2 \cdot \gamma \cdot \frac{\Lambda}{E} \cdot \left( 1 + \frac{\Lambda}{c_4} \right)^{c_5} \quad (6.33)$$

angegeben. Das INTERATOM-Modell besitzt daher drei Freiheitsgrade  $\gamma$ ,  $c_4$  und  $c_5$ , die aus den Meßwerten der in den Abb. 6.17 bis Abb. 6.20 dargestellten Versuche zu bestimmen sind. Die Anpassung erfolgte mit der in Kapitel 5.2.1 beschriebenen Fehlerquadratmethode.

Die *Least-Squares*-Funktion beinhaltet neben den Residuen die Streuungen der Meßwerte an jedem Meßpunkt. Um zu einer sinnvollen Abschätzung dieser Ungenauigkeiten zu gelangen, wird, wie in Kapitel 5.2, die aus der Anpassung des INTERATOM-Modells folgende Information herangezogen. Voraussetzung ist wiederum die optimale Anpassung des Modells an die Meßwerte.

Die Minimierung der Fehlerquadratsumme erfolgte mit dem in Kapitel 5.2.1.3 beschriebenen nichtlinearen Least-Squares Verfahren SQUFIT [Bra76] von *Braess*. Als Startwerte der Optimierung wurden gewählt:

$$\begin{aligned} \gamma &= 10^{-30} \frac{1}{s} \\ c_4 &= 0.01 \frac{N}{mm^2} \\ c_5 &= 8.0 \end{aligned} \quad (6.34)$$

Das Ergebnis der optimalen Anpassung des INTERATOM-Modells an die Meßwerte am Beispiel des monotonen Zugversuches mit der Dehngeschwindigkeit  $\dot{\epsilon} = 10^{-4} \frac{1}{s}$  aus Abb. 6.17 ist in Abb. 6.21 dargestellt:

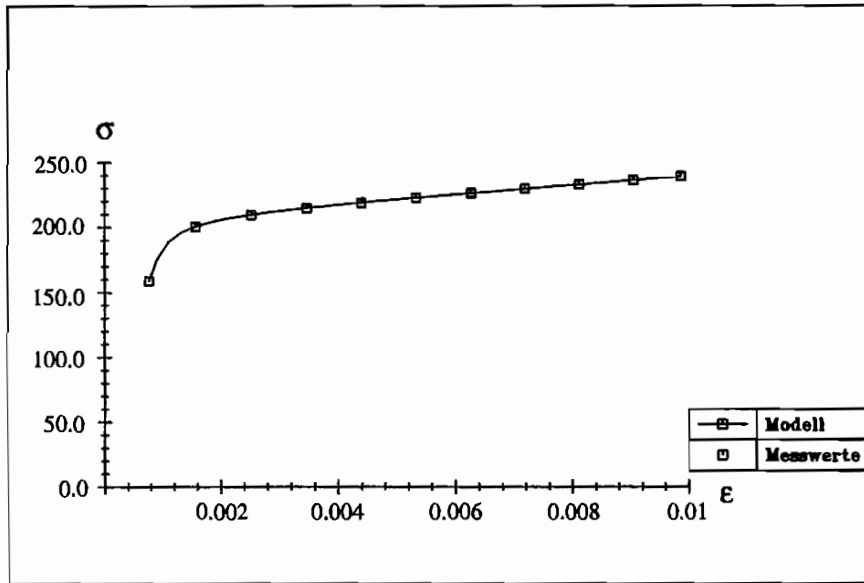


Abb. 6.21: Optimale Anpassung des INTERATOM-Modells an die Meßwerte

Nach der Anpassung läßt sich die unbekannte Varianz der Meßwerte aus (6.15) bestimmen; nachzuprüfen ist aber die zugrundegelegte Normalverteilung der Meßwerte. Dazu ist in Abb. 6.22 die Verteilung der Residuen nach der Anpassung aufgeführt:

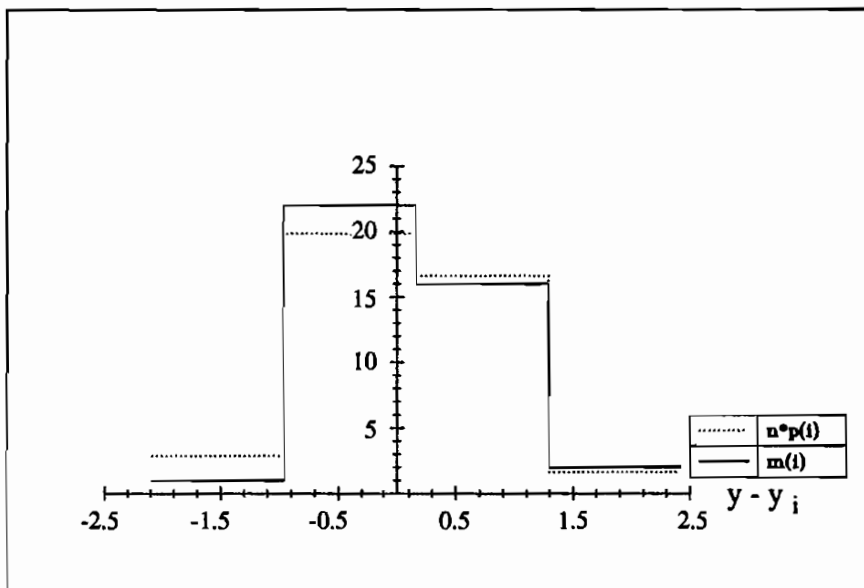


Abb. 6.22: Verteilung der Residuen nach Minimierung der Fehlerquadratsumme

Abb. 6.22 zeigt die Häufigkeit  $m(i)$  des Auftretens eines bestimmten Wertes des Residuums in einem passend gewählten Intervall zusammen mit der aus der zugrundegelegten Normalverteilung der Residuen folgenden wahrscheinlichen Häufigkeit  $n * p(i)$ . Deutlich wird aus Abb. 6.22 die geringe Abweichung der Häufigkeiten.

Der  $\chi^2$ -Anpassungstest liefert bei einer zugrundegelegten Irrtumswahrscheinlichkeit von 5% und einem Freiheitsgrad der Verteilung einen Wert für  $\chi^2$  von 1.554 gegenüber einem größtmöglichen Wert von  $\chi_{\alpha=0.05}^2 = 3.842$ , so daß die Hypothese der Normalverteilung nicht verworfen werden muß.

Als Streuung der Spannung  $\sigma$  folgt aus der statistischen Analyse:

$$S_{\sigma} |_{\dot{\epsilon}=10^{-4} \frac{1}{s}} = 0.7 \frac{N}{mm^2} \quad (6.35)$$

Die mit der Streuung (6.35) erzeugten synthetischen Meßdaten sind zusammen mit den ihnen zugrundeliegenden realen Meßdaten in Abb. 6.23 dargestellt:

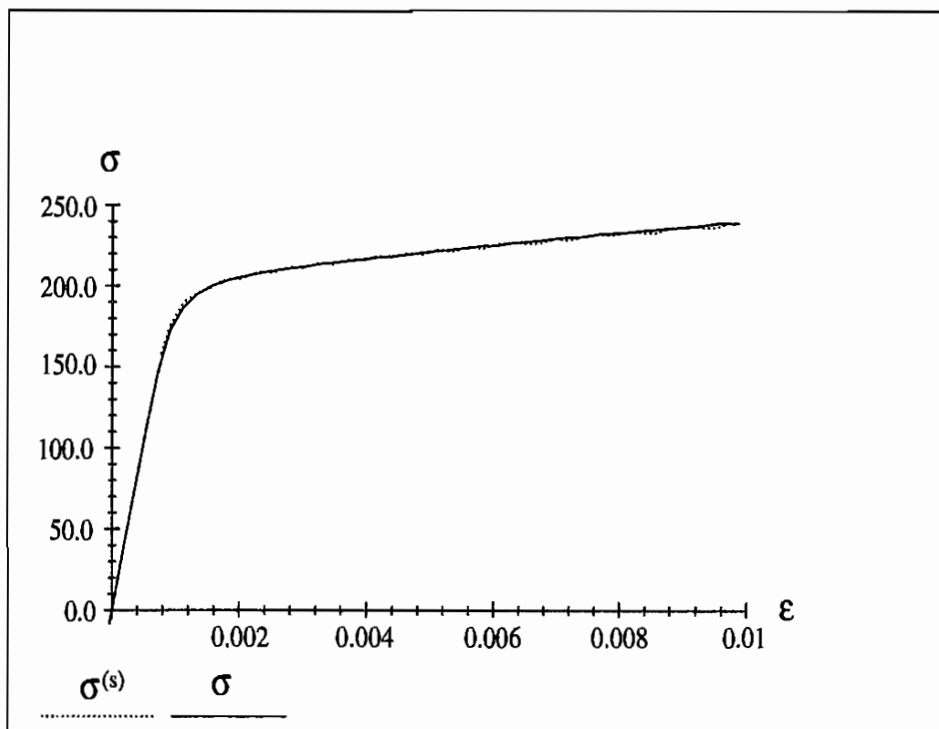


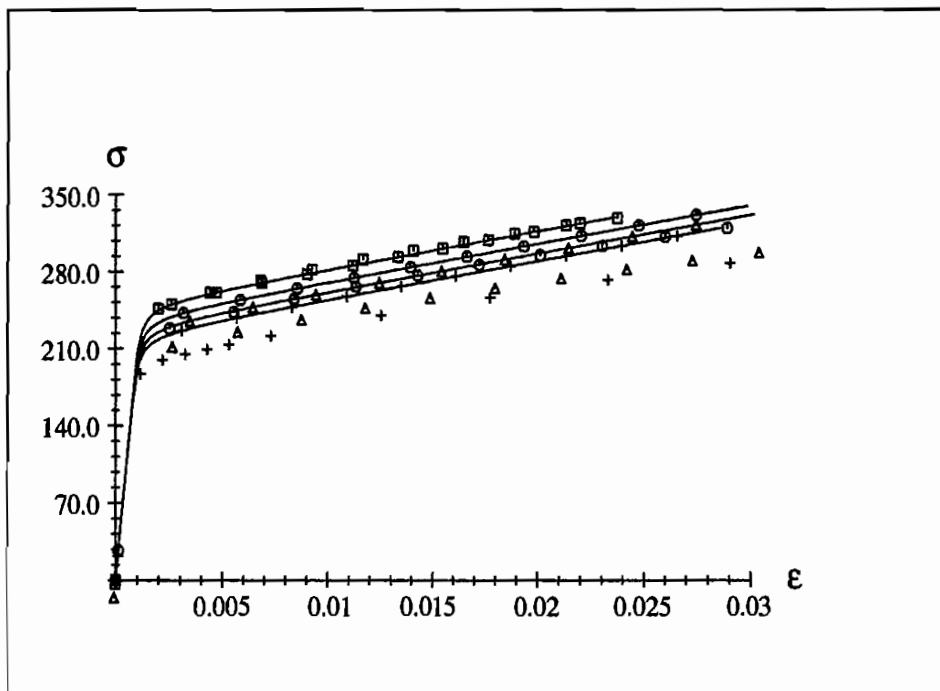
Abb. 6.23: Vergleich der simulierten Daten ( $\cdots$ ) mit den Meßwerten ( $\text{—}$ )

Zur Bestimmung der Streuung der Modellparameter wurden aufgrund der im Vergleich zu Kapitel 6.2 wesentlich größeren Rechenzeiten jeweils 10 Monte Carlo Simulationen durchgeführt. Die so erzielten Ergebnisse sind in Tabelle 6.3 aufgelistet:

Dehngeschwindigkeit $\dot{\epsilon} \left[ \frac{1}{s} \right]$	$\gamma \left[ \frac{1}{s} \right]$	$c_4 \left[ \frac{N}{mm^2} \right]$	$c_5$
$10^{-3}$	$1.0 \cdot 10^{-35}$ $\pm 2.12 \cdot 10^{-34}$	$6.95 \cdot 10^{-4}$ $\pm 8.17 \cdot 10^{-4}$	8.041 $\pm 0.199$
$10^{-4}$	$1.0 \cdot 10^{-35}$ $\pm 5.59 \cdot 10^{-34}$	$8.56 \cdot 10^{-5}$ $\pm 4.09 \cdot 10^{-4}$	7.298 $\pm 0.062$
$10^{-5}$	$9.58 \cdot 10^{-34}$ $\pm 8.6 \cdot 10^{-33}$	$3.18 \cdot 10^{-5}$ $\pm 3.89 \cdot 10^{-5}$	7.52 $\pm 1.89$

Tabelle 6.3: Abhängigkeit der Viskositätsparameter von der Dehngeschwindigkeit

Tabelle 6.3 zeigt uneinheitliche Werte für die Modellparameter bei den unterschiedlichen Geschwindigkeiten. Hinzu kommen große Streuungen der Parameter  $\gamma$  und  $c_4$ , so daß diese beiden Parameter noch mit großen Unsicherheiten behaftet sind. Die Grundproblematik bei dieser Vorgehensweise ist der *Informationsgehalt* in den Parametern; die Parameter können jeweils sehr gut den Prozeß beschreiben, aus dem sie ermittelt worden sind, jedoch sind sie nicht in der Lage, auch andere Prozesse zu erfassen.

Abb. 6.24: Anpassung an den dehnungsgesteuerten Zugversuch mit  $\dot{\epsilon} = 10^{-2} \frac{1}{s}$

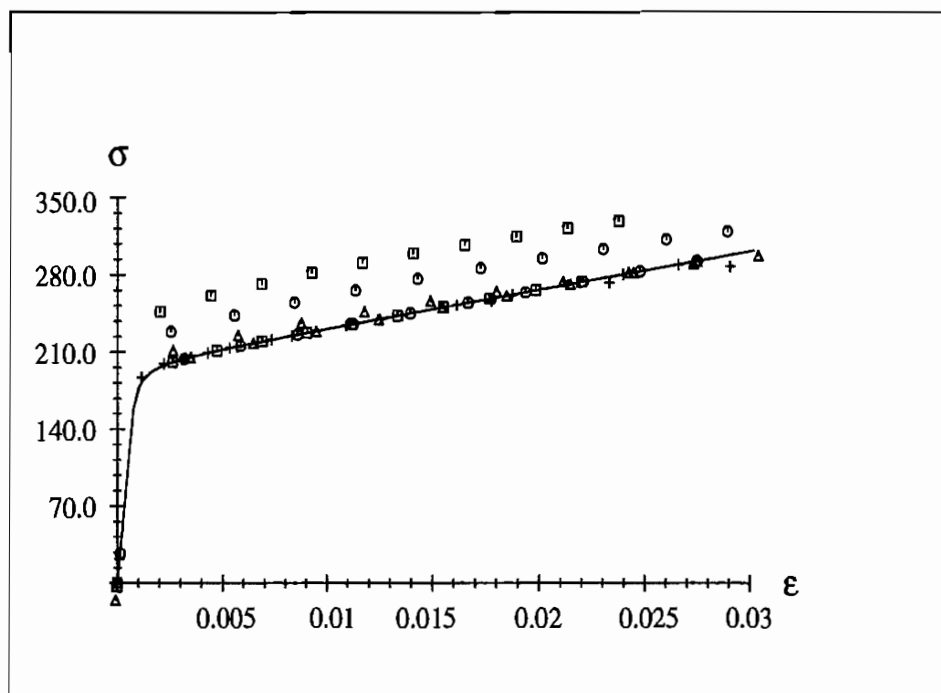


Abb. 6.25: Anpassung an den dehnungsgesteuerten Zugversuch mit  $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \frac{1}{s}$

In Abb. 6.24 wurde die Anpassung an den monotonen Zugversuch mit  $\dot{\epsilon} = 10^{-2} \frac{1}{s}$  aus Abb. 6.17 vorgenommen, welcher von dem so ermittelten Parametersatz auch optimal wiedergegeben wird. Die in der Abbildung dargestellte Simulation der anderen Zugversuche aus Abb. 6.17 schlägt jedoch fehl, da die entsprechende Information nicht mit in die Parameter eingegangen ist.

Die gleiche Situation ergibt sich für die Anpassung an die quasistatische Zugkurve aus Abb. 6.17; in diesem Fall enthalten die Parameter überhaupt keine Informationen über das viskose Verhalten des Materials, so daß eine Simulation von Zugversuchen mit höherer Dehngeschwindigkeit nicht möglich ist. Diese Ergebnisse führen unmittelbar zu der Schlußfolgerung, daß nur die gleichzeitige Anpassung an alle monotonen Zugkurven einen Parametersatz liefern kann, der überhaupt in der Lage ist, das viskose Materialverhalten zu beschreiben.

Zur Auffindung guter Startwerte zur Minimierung der Fehlerquadratsumme aus allen monotonen Zugversuchen dient, wie in Kapitel 6.2, ein Evolutionsverfahren. Die folgenden Ergebnisse wurden mit dem Programm evoC [TU94] in paralleler Version eingebettet in das Programm PVM [GBD<sup>+</sup>94] erzielt. Initialisiert wurden jeweils eine (1/1,10) - Evolutionsstrategie und eine (1+1,10) - Evolutionsstrategie, also eine Strategie mit einem Elter und zehn Nachkommen, die für jeweils 20 Generationen auf jedem der eingesetzten



Rechner innerhalb des Master-Slave-Konzeptes<sup>17</sup> (siehe Kapitel 5.2.1.5) isoliert abliefen. Bei dieser Art der Optimierung zeigte sich deutlich die Überlegenheit der ','-Strategie gegenüber der '+'-Strategie, da die erste nicht dazu neigt, in lokalen Optima zu verharren [Rec73], [Sch95] und [SHF94] (siehe Abb. 6.26).

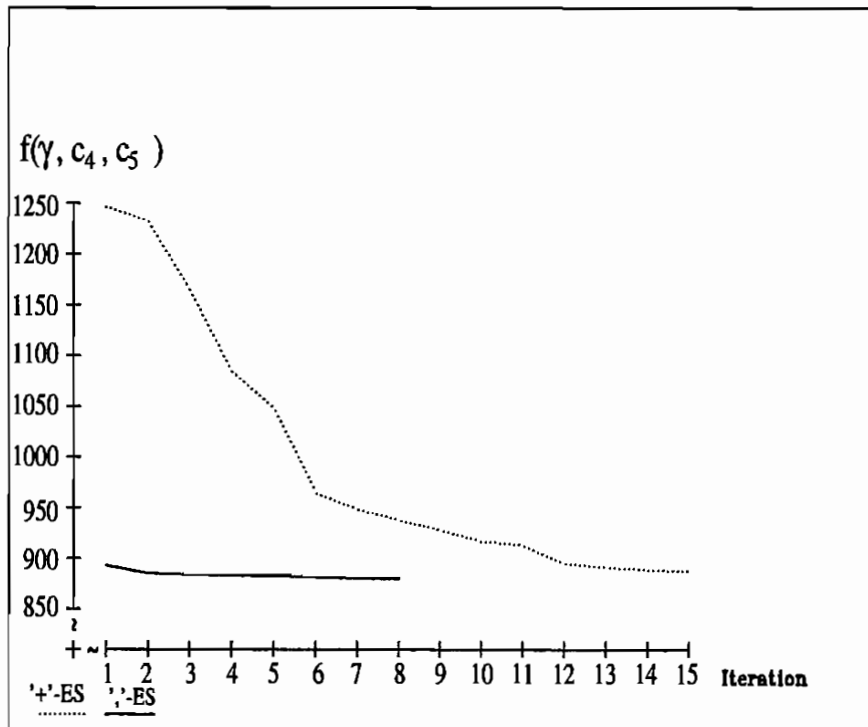


Abb. 6.26: Vergleich der '+'-Variante (···) der Evolutionsstrategie mit der ','-Variante (—)

Unter der in Abb. 6.26 angegebenen Abszissenbeschriftung 'Iteration' ist dabei die Anzahl der vom *Master-Prozeß* gefundenen Verbesserungen der Zielfunktion  $f(\gamma, c_4, c_5)$  zu verstehen. Man erkennt die wesentlich größere Geschwindigkeit der ','-Strategie.

Mit den so gefundenen Startwerten der Optimierung erfolgte die endgültige Anpassung der Parameter  $\gamma$ ,  $c_4$  und  $c_5$ . Zum Einsatz kam dabei das in Kapitel 5.2.1.4 beschriebene Optimierungsverfahren NLPQLD von *Schittkowski* [Sch81]. Das Ergebnis der Anpassung an sämtliche monotone Zugversuche aus Abb. 6.17 zeigt Abb. 6.27:

<sup>17</sup>Es wurden 12 Rechner mit dynamischer Auslastung eingesetzt

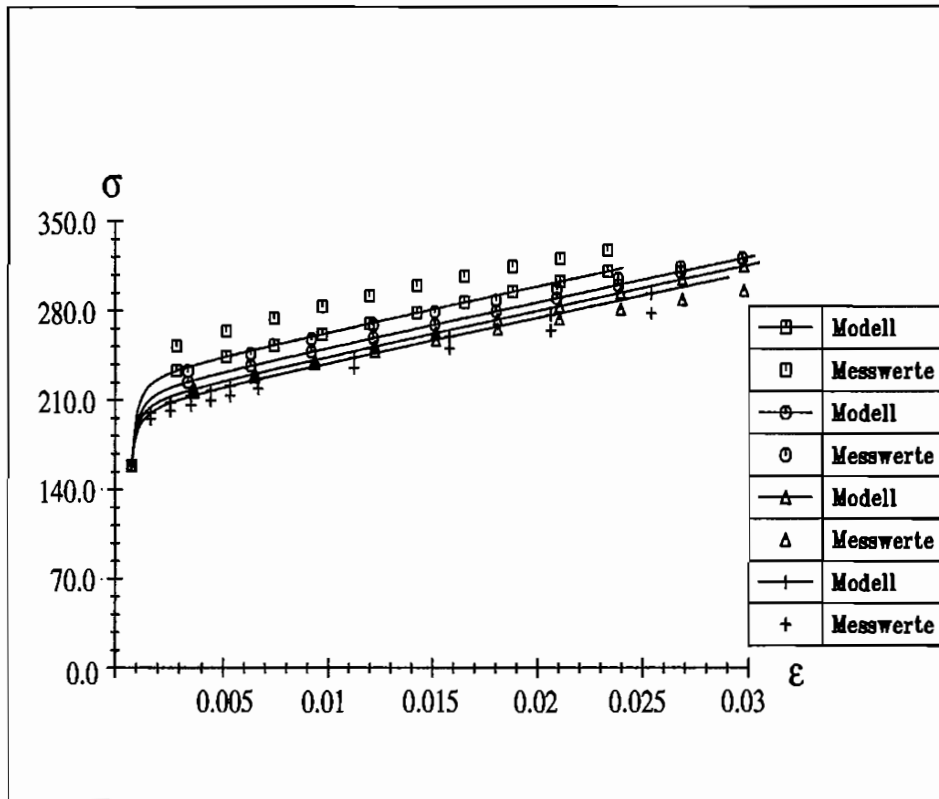


Abb. 6.27: Ergebnis der Anpassung an dehnungsgesteuerte Zugversuche

Die gesuchten Werte der Parameter  $\gamma$ ,  $c_4$  und  $c_5$  bei Raumtemperatur lauten somit:

$$\begin{aligned}
 \gamma &= 1.0 \cdot 10^{-20} \pm 5.67 \cdot 10^{-20} \frac{1}{s} \\
 c_4 &= 1.0 \cdot 10^{-4} \pm 1.34 \cdot 10^{-4} \frac{N}{mm^2} \\
 c_5 &= 4.0 \pm 0.047
 \end{aligned}
 \tag{6.36}$$

Aus der statistischen Analyse (siehe Kapitel 5.2.2) folgen die Korrelationen zwischen den Parametern:

$\rho$	$\gamma$	$c_4$	$c_5$
$\gamma$	1.0	0.99	-0.51
$c_4$	0.99	1.0	-0.46
$c_5$	-0.51	-0.46	1.0

Tabelle 6.4: Korrelationskoeffizienten

Aus Tabelle 6.4 folgt eine starke positive Korrelation zwischen den Parametern  $\gamma$  und  $c_4$ . Ebenso sind diese beiden Parameter mit starken Streuungen behaftet, so daß die bisher herangezogenen Versuche zur Bestimmung dieser Größen noch nicht ausreichen. Diese Ergebnisse decken sich mit den von *Thielecke* in [GT96] aufgezeigten Problemen bei der Anpassung des Modells von *Steck* [Ste95] an Versuche mit reinem Aluminium. Aus diesem Grunde werden im folgenden weitere Versuche in die Optimierung einbezogen. Dies sind zuallererst die in Abb. 6.18 dargestellten Kriechversuche, da Kriechen gleichsam als Synonym für viskoses Materialverhalten anzusehen ist. Ausgehend von den in (6.36) angegebenen Materialparametern wurden mit dem oben erwähnten Verfahren von *Schittkowski* die Kriechkurven aus Abb. 6.18 angepaßt; die Ergebnisse zeigt Abb. 6.28:

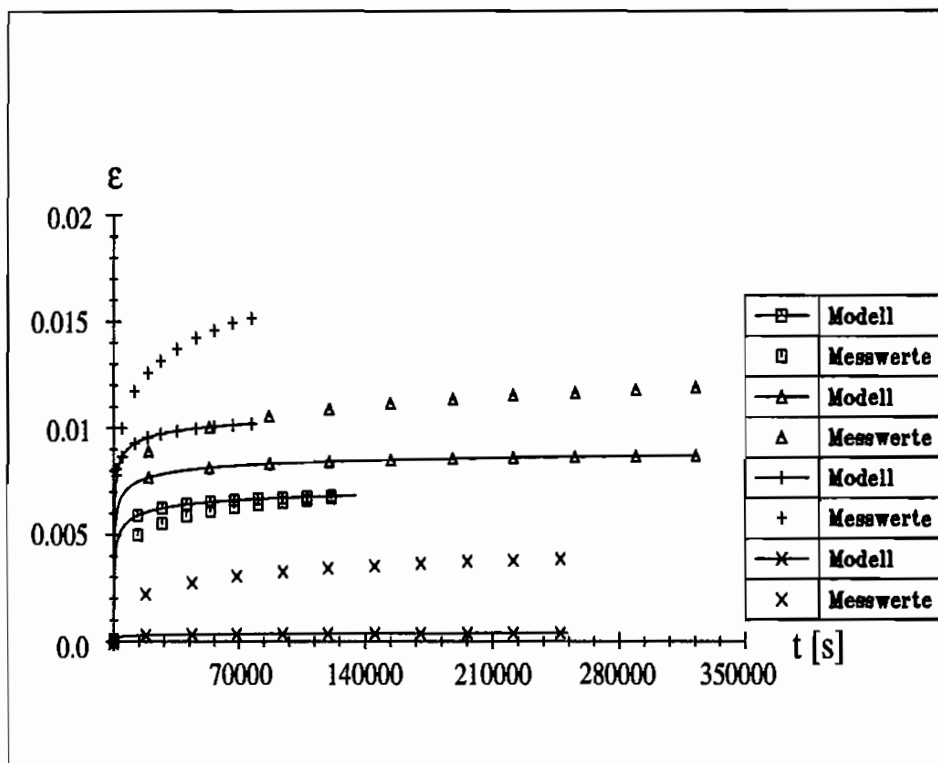


Abb. 6.28: Ergebnis der Anpassung an Kriechversuche

Aus Abb. 6.28 wird deutlich, daß die Kriechkurve mit dem niedrigsten Spannungsniveau nur sehr ungenau vom Modell erfasst wird. Die Ursache hierfür ist in dem einfachen Ansatz

für die Überspannung zu suchen; da das angegebene Spannungsniveau von  $185 \frac{N}{mm^2}$  wenig über der in Kapitel 6.1 ermittelten anfänglichen Fließgrenze des Materials liegt, kann sich in der Überspannungsfunktion (6.33) während des der Kriechkurve vorausgehenden monotonen Zugversuches nicht genügend Überspannung aufbauen, um diese Kriechkurve adäquat zu beschreiben.

Die so gefundenen Werte der Parameter  $\gamma$ ,  $c_4$  und  $c_5$  lauten:

$$\begin{aligned} \gamma &= 6.9 \cdot 10^{-22} \pm 1.3 \cdot 10^{-21} \frac{1}{s} \\ c_4 &= 1.0 \cdot 10^{-4} \pm 5.3 \cdot 10^{-5} \frac{N}{mm^2} \\ c_5 &= 3.76 \pm 0.018 \end{aligned} \quad (6.37)$$

In (6.37) zeigt sich eine signifikante Verkleinerung der Streuung der Parameter gegenüber den Werten in (6.36). Daraus folgt, daß die Hinzunahme weiterer Information in die Anpassung zu einer Verbesserung der Kenntnis der gesuchten Parameter führt. Problematisch bleibt noch die in Tabelle 6.5 zu erkennende starke positive Korrelation zwischen den Parametern  $\gamma$  und  $c_4$ .

$\rho$	$\gamma$	$c_4$	$c_5$
$\gamma$	1.0	0.99	-0.23
$c_4$	0.99	1.0	-0.12
$c_5$	-0.23	-0.12	1.0

Tabelle 6.5: Korrelationskoeffizienten

Dies deutet darauf hin, daß die bisher verwendeten Versuchstypen unter Umständen nicht dazu ausreichen, die Modellparameter entsprechend anzuregen, so daß zur Verbesserung der Kenntnis dieser Parameter weitere Versuchstypen, wie zum Beispiel Torsionsversuche an dünnwandigen Rohrproben, in das Anpassungsproblem miteinzubeziehen sind (siehe Kapitel 4).

### 6.3.2 Erweitertes INTERATOM-Modell

Das erweiterte INTERATOM-Modell (siehe Kapitel 3.3) unterscheidet bei der Beschreibung des viskosen Materialverhaltens zwischen der in Abb. 6.17 dargestellten Dehnratenabhängigkeit des Materials und Kriechprozessen (siehe Abb. 6.18). In [Rot91] sowie [BR94] werden für die Dehnratenabhängigkeit des Materials die beiden Funktionen

$$\begin{aligned} A(\Lambda, v, T) &= a_1(\Lambda, T) \cdot a_2(v, T) \\ a_1(\Lambda, T) &= \frac{1 - a_{11}(T)}{\tanh(a_{13}(T)) - 1} \cdot (\tanh(a_{12}(T) \cdot \Lambda + a_{13}(T)) - 1) + a_{11}(T) \end{aligned} \quad (6.38)$$

$$a_2(v, T) = a_{21}(T) \cdot e^{a_{22}(T) \cdot (v-v_0)^{a_{23}(T)}} + (1 - a_{21}(T)) \cdot e^{a_{24}(T) \cdot (v-v_0)^{a_{25}(T)}}$$

und

$$\Phi(\Lambda, T) = e^{d_1(T) \cdot \left(\frac{\Lambda}{\tilde{\Lambda}}\right)^{d_2(T)}} - 1 \quad (6.39)$$

angegeben. Der Ansatz (6.39) stellt analog zu (6.32) die Überspannungsfunktion im Rahmen des Überspannungskonzeptes von *Perzyna* dar. Die Größe  $\tilde{\Lambda}$  dient dazu, die Überspannung dimensionslos zu machen und wird mit  $1 \frac{N}{mm^2}$  festgelegt. Die Materialfunktion  $A(\Lambda, v, T)$  steuert im Modell die Entwicklung der quasistatischen Gleichgewichtsspannung (siehe Kapitel 3.3) und ist sowohl von der Überspannung  $\Lambda$  als auch von einem geeigneten Maß für die Geschwindigkeit des Prozesses abhängig. In dieser Arbeit wird als Maß die euklidische Norm der Rate der Deviatorspannungen verwendet:

$$v = \|\dot{\underline{\sigma}}'\|_2 := \sqrt{\sum_{i,k=1}^3 |\dot{\sigma}'_{ik}|^2} \quad (6.40)$$

Im einaxialen Fall lautet (6.40):

$$v = \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot |\dot{\sigma}| \quad (6.41)$$

Der quasistatische Grenzfall ergibt sich für  $v \rightarrow 0$ , wobei die Prozeßgeschwindigkeit jedoch nicht verschwinden darf. Aus diesem Grund wird vorab die quasistatische Geschwindigkeit

$$v_0 = 10^{-30} \frac{N}{mm^2 \cdot s} \quad (6.42)$$

gewählt. Die realistische Beschreibung von Kriechprozessen erfolgt im erweiterten INTERATOM-Modell durch eine weitere Materialfunktion  $B(\underline{\sigma}', \underline{\xi}, T)$ , für die in [Rot91] sowie [BR94] der Ansatz

$$B(\underline{\sigma}', \underline{\xi}, T) = d_3(\underline{\sigma}', T) \cdot \tanh \left( d_4(\underline{\sigma}', T) \cdot \sqrt{(\underline{\sigma}' - \underline{\xi}) : (\underline{\sigma}' - \underline{\xi})} + d_5(\underline{\sigma}', T) \right) + d_6(\underline{\sigma}', T) \quad (6.43)$$

angegeben wird. Im einaxialen Fall lautet (6.43):

$$B(\sigma, \xi, T) = d_3(\sigma, T) \cdot \tanh \left( d_4(\sigma, T) \cdot \sqrt{\frac{3}{2} \cdot \left( \frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi \right)^2} + d_5(\sigma, T) \right) + d_6(\sigma, T), \quad (6.44)$$

mit den von der Deviatorspannung abhängigen Koeffizienten:

$$\begin{aligned} d_3 &= p_{31} + p_{32} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \sigma + p_{33} \cdot \frac{2}{3} \cdot \sigma^2 \\ d_4 &= p_{41} + p_{42} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \sigma + p_{43} \cdot \frac{2}{3} \cdot \sigma^2 \\ d_5 &= p_{51} + p_{52} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \sigma + p_{53} \cdot \frac{2}{3} \cdot \sigma^2 \\ d_6 &= p_{61} + p_{62} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \sigma + p_{63} \cdot \frac{2}{3} \cdot \sigma^2 \end{aligned} \quad (6.45)$$

Das erweiterte INTERATOM-Modell besitzt damit bei konstanter Prozeßtemperatur 22 Parameter  $a_{11}$ ,  $a_{12}$ ,  $a_{13}$ ,  $a_{21}$ ,  $a_{22}$ ,  $a_{23}$ ,  $a_{24}$ ,  $a_{25}$ ,  $d_1$ ,  $d_2$ ,  $p_{31}$ ,  $p_{32}$ ,  $p_{33}$ ,  $p_{41}$ ,  $p_{42}$ ,  $p_{43}$ ,  $p_{51}$ ,  $p_{52}$ ,  $p_{53}$ ,  $p_{61}$ ,  $p_{62}$  und  $p_{63}$ , die aus den Meßwerten der in den Abb. 6.17 bis Abb. 6.20 dargestellten Versuche zu bestimmen sind. Die Anpassung erfolgte mit der in Kapitel 5.2.1 beschriebenen Fehlerquadratmethode, und zwar mit dem in Kapitel 5.2.1.4 beschriebenen Optimierungsverfahren NLPQLD von *Schittkowski* [Sch81], sowie mit dem Evolutionsverfahren evoC von *Trint* und *Utecht* [TU94].

Basierend auf den Erfahrungen aus der Anpassung des INTERATOM-Modells in Abschnitt 6.3.1 wird das erweiterte Modell von vornherein an sämtliche Versuche gleichzeitig angepaßt, wobei nach *Rott* [Rot91] zu unterscheiden ist zwischen der Anpassung an monotone Zugversuche, die in erster Linie von der Materialfunktion  $A(\Lambda, v, T)$  erfaßt werden, und der Anpassung an Kriechversuche, für welche die beiden Funktionen  $\Phi(\Lambda, T)$  und  $B(\underline{\sigma}', \underline{\xi}, T)$  eingeführt wurden.

Aus diesem Grund wird zuerst die Anpassung an die in Abb. 6.17 dargestellten monotonen Zugversuche vorgenommen. Zur Auffindung guter Startwerte zur Minimierung der Fehlerquadratsumme aus allen monotonen Zugversuchen dient, wie in Kapitel 6.3.1, das Programm evoC [TU94]. Das Ergebnis der evolutionären Suche ist in Abb. 6.29 dargestellt:

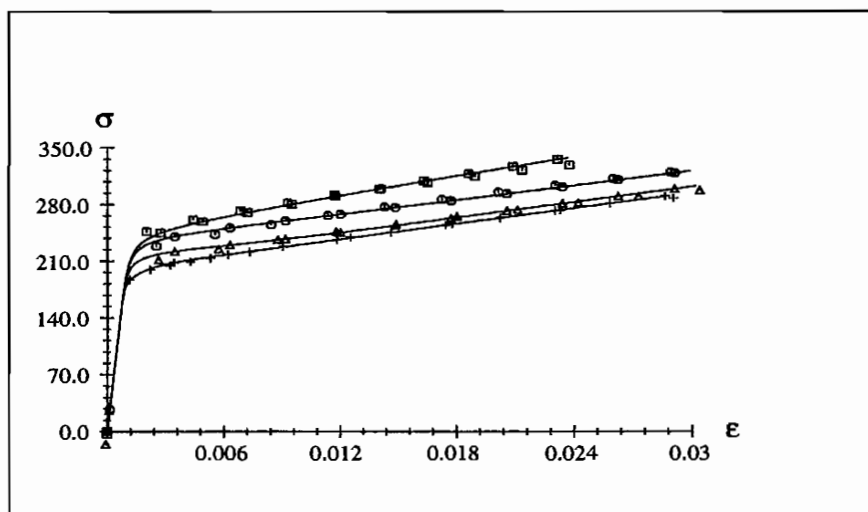


Abb. 6.29: Auffinden guter Startwerte mit der Evolutionsstrategie

Mit den so gefundenen Startwerten der Optimierung erfolgte die endgültige Anpassung der Parameter. Zum Einsatz kam dabei das in Kapitel 5.2.1.4 beschriebene Optimierungsverfahren NLPQLD von *Schittkowski* [Sch81]. Das Ergebnis zeigt Abb. 6.30:

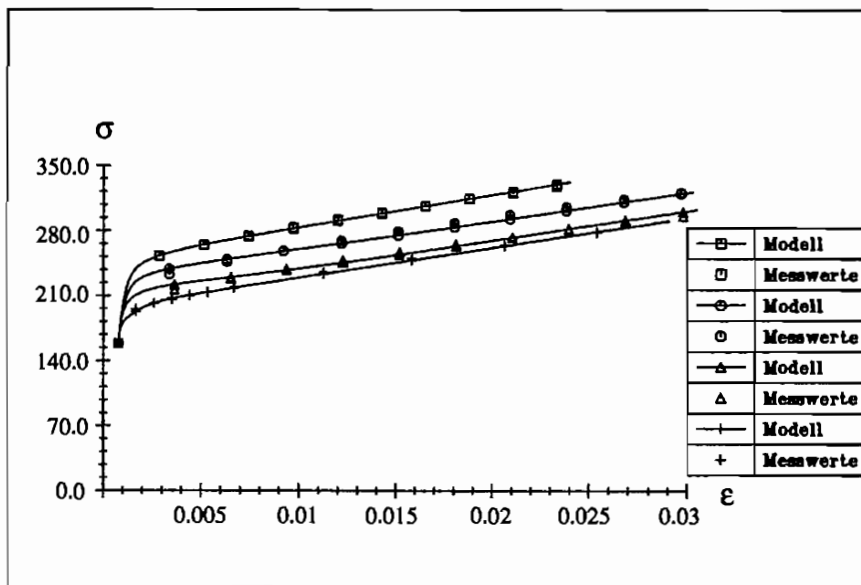


Abb. 6.30: Ergebnis der Anpassung an dehnungsgesteuerte Zugversuche

Die gesuchten Werte der Parameter  $a_{11}$ ,  $a_{12}$ ,  $a_{13}$ ,  $a_{21}$ ,  $a_{22}$ ,  $a_{23}$ ,  $a_{24}$ ,  $a_{25}$ ,  $d_1$ ,  $d_2$ ,  $p_{31}$ ,  $p_{32}$ ,  $p_{33}$ ,  $p_{41}$ ,  $p_{42}$ ,  $p_{43}$ ,  $p_{51}$ ,  $p_{52}$ ,  $p_{53}$ ,  $p_{61}$ ,  $p_{62}$  und  $p_{63}$  bei Raumtemperatur lauten somit:

$$\begin{aligned}
 a_{11} &= 1000 \pm 6628 \\
 a_{12} &= 0.027 \pm 0.005 \frac{\text{mm}^2}{\text{N}} \\
 a_{13} &= -0.1 \pm 0.18 \\
 a_{21} &= 0.008 \pm 0.105 \\
 a_{22} &= -1.56 \pm 7.65 \\
 a_{23} &= 0.067 \pm 0.238 \\
 a_{24} &= -7.66 \pm 5.87 \\
 a_{25} &= 0.1 \pm 0.13 \\
 d_1 &= 6.518 \cdot 10^{-9} \pm 2.074 \cdot 10^{-9} \\
 d_2 &= 3.01 \pm 0.12 \\
 p_{31} &= 2.68 \cdot 10^{-8} \pm 0.021 \frac{1}{\text{s}} \\
 p_{32} &= 1.72 \cdot 10^{-10} \pm 0.0013 \frac{\text{mm}^2}{\text{N} \cdot \text{s}} \\
 p_{33} &= 1.88 \cdot 10^{-15} \pm 1.65 \cdot 10^{-8} \frac{\text{mm}^4}{\text{N}^2 \cdot \text{s}} \\
 p_{41} &= 0.16 \pm 3.8 \cdot 10^{14} \frac{\text{mm}^2}{\text{N}}
 \end{aligned} \tag{6.46}$$

$$\begin{aligned}p_{42} &= 4.44 \cdot 10^{-5} \pm 1.74 \cdot 10^{11} \frac{mm^4}{N^2} \\p_{43} &= 4.26 \cdot 10^{-7} \pm 814297895 \frac{mm^6}{N^3} \\p_{51} &= -14.98 \pm 4.4 \cdot 10^{16} \\p_{52} &= -0.22 \pm 5.17 \cdot 10^{14} \frac{mm^2}{N} \\p_{53} &= -3.07 \cdot 10^{-5} \pm 9.38 \cdot 10^{10} \frac{mm^4}{N^2} \\p_{61} &= 1.7 \cdot 10^{-9} \pm 0.017 \frac{1}{s} \\p_{62} &= 3.94 \cdot 10^{-10} \pm 0.001 \frac{mm^2}{N \cdot s} \\p_{63} &= 1.63 \cdot 10^{-14} \pm 1.87 \cdot 10^{-7} \frac{mm^4}{N^2 \cdot s}\end{aligned}$$

Aus der statistischen Analyse (siehe Kapitel 5.2.2) folgen die Korrelationen zwischen den Parametern:



$\rho$	$\alpha_{11}$	$\alpha_{12}$	$\alpha_{13}$	$\alpha_{21}$	$\alpha_{22}$	$\alpha_{23}$	$\alpha_{24}$	$\alpha_{25}$	$d_1$	$d_2$	$p_{31}$	$p_{32}$	$p_{33}$	$p_{41}$	$p_{42}$	$p_{43}$	$p_{51}$	$p_{52}$	$p_{53}$	$p_{61}$	$p_{62}$	$p_{63}$
$\alpha_{11}$	1.0	0.0	0.3	-0.8	0.5	0.5	-1.0	-0.9	-0.7	0.7	0.0	-0.3	0.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.1	-0.2	-0.3
$\alpha_{12}$		1.0	-0.9	-0.2	0.4	0.4	0.1	-0.1	-0.5	0.5	-0.2	0.1	-0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.1	0.1	0.3
$\alpha_{13}$			1.0	-0.1	-0.1	-0.1	-0.3	-0.2	0.2	-0.2	0.1	-0.1	0.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.1	-0.3
$\alpha_{21}$				1.0	-0.9	-0.9	0.7	1.0	0.9	-0.9	0.1	0.2	-0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.1	0.2	0.2
$\alpha_{22}$					1.0	1.0	-0.3	-0.8	-0.8	0.9	-0.1	0.0	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.1	0.0	0.0
$\alpha_{23}$						1.0	-0.3	-0.8	-0.8	0.9	-0.2	0.0	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.1	0.0	0.0
$\alpha_{24}$							1.0	0.8	0.5	-0.5	-0.1	0.3	-0.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.1	0.3	0.3
$\alpha_{25}$								1.0	0.8	-0.8	0.0	0.2	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.1	0.2	0.2
$d_1$									1.0	-1.0	0.1	0.1	-0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.0	0.3
$d_2$										1.0	-0.1	-0.1	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.2	0.0	-0.3
$p_{31}$											1.0	-0.4	-0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	-0.4	-0.7
$p_{32}$												1.0	-0.4	0.0	0.0	-0.0	0.0	0.0	0.0	-0.4	1.0	0.2
$p_{33}$													1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.3	-0.4	-0.1
$p_{41}$														1.0	-1.0	-1.0	0.0	-1.0	-0.2	0.0	0.0	0.0
$p_{42}$															1.0	1.0	-0.4	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$p_{43}$																1.0	0.1	0.7	0.1	0.0	0.0	0.0
$p_{51}$																	1.0	-0.9	-0.3	0.0	0.0	0.0
$p_{52}$																		1.0	-0.9	0.0	0.0	0.0
$p_{53}$																			1.0	0.0	0.0	0.0
$p_{61}$																				1.0	-0.4	-0.5
$p_{62}$																					1.0	0.1
$p_{63}$																						1.0

Tabelle 6.6: Korrelationskoeffizienten

In (6.46) zeigen sich große Unsicherheiten in der Kenntnis der Parameter der Materialfunktion  $B(\underline{\sigma}', \underline{\xi}, T)$ . Dies deutet darauf hin, daß die Parameter für diese Art der Prozeßführung keine Bedeutung besitzen. Zur Verifikation dieses Sachverhaltes werden daher im folgenden die entsprechenden Parameter in der Größenordnung ihrer Streuung variiert und anschließend die monotonen Zugversuche aus Abb. 6.17 simuliert. Abb. 6.31 zeigt das Ergebnis dieser Vorgehensweise bei einer Änderung des Parameters  $p_{41}$  von  $0.16 \frac{\text{mm}^2}{\text{N}}$  auf  $10^{14} \frac{\text{mm}^2}{\text{N}}$ :

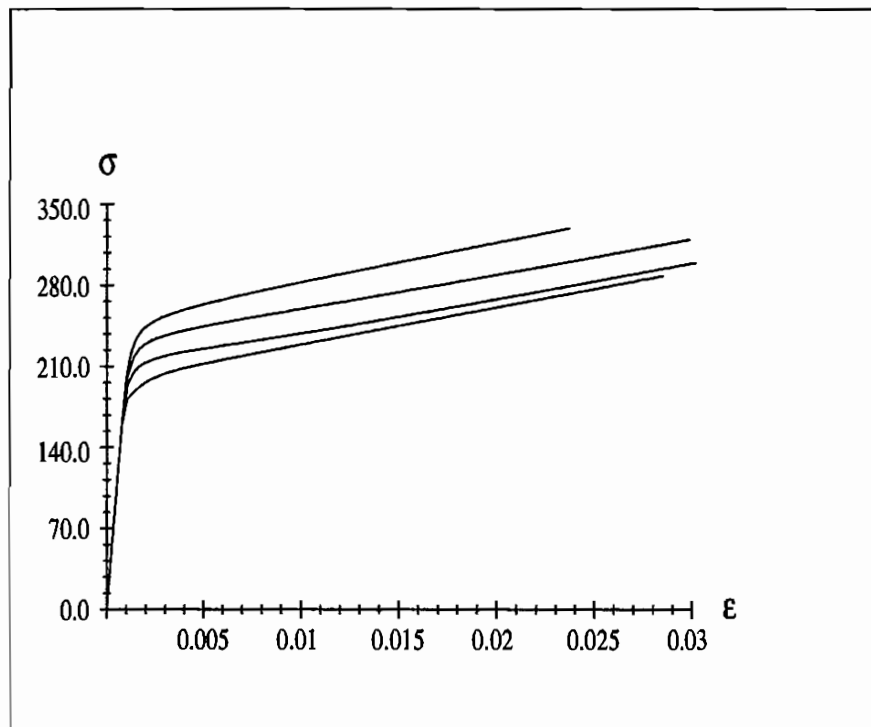


Abb. 6.31: Redundanz der Parameter der Materialfunktion  $B$  bei monotonem Zug

Wie man in Abb. 6.31 erkennt, weichen die Kurven trotz der oben beschriebenen dramatischen Variation des Parameters in  $B$  nicht von den in Abb. 6.30 dargestellten Kurven ab. Dies bestätigt die von Rott in [Rot91] getroffene Feststellung, daß die Materialfunktion  $B$  für die Beschreibung von monotonen Zugversuchen ohne Bedeutung ist<sup>18</sup>.

Die statistische Analyse der Parameter liefert also die richtigen Hinweise auf Redundanzen im Modell bei bestimmten Prozeßführungen.

In (6.46) zeigen sich weiterhin Unsicherheiten in der Kenntnis der Parameter der Materialfunktion  $A$ ; ebenso sind die Parameter sowohl untereinander als auch mit den Parametern der Überspannungsfunktion  $\Phi$  stärker korreliert. Analog zur Anpassung des INTERATOM-Modells in Abschnitt 6.3.1 wird daraus die Schlußfolgerung gezogen, daß

<sup>18</sup>Rott setzt daher die Funktion  $B$  bei der Anpassung des Modells an monotone Zugversuche zu Null

die bisher herangezogenen Versuche zur Bestimmung der Parameter nicht ausreichen.

Als weitere Versuchstypen werden daher, wie vorher, die in Abb. 6.18 dargestellten Kriechversuche herangezogen. Die Ergebnisse dieser Anpassung zeigt Abb. 6.32:

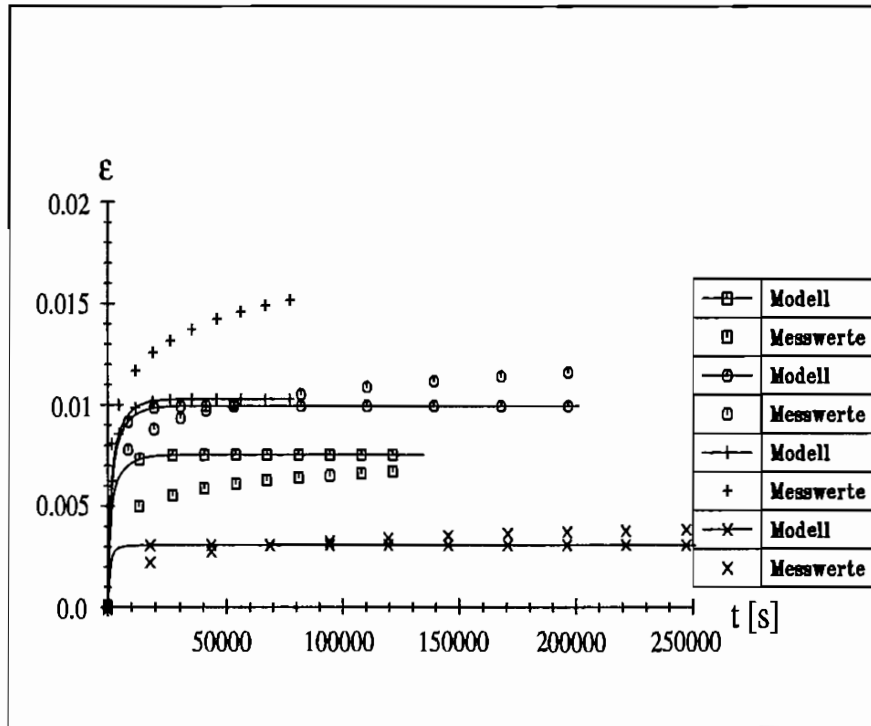


Abb. 6.32: Ergebnis der Anpassung an Kriechversuche

Aus Abb. 6.32 wird deutlich, daß vom erweiterten INTERATOM-Modell auch die Kriechkurve mit dem niedrigsten Spannungsniveau von  $185 \frac{N}{mm^2}$  erfaßt wird.

Als letztes wird das erweiterte INTERATOM-Modell an die Relaxationsversuche aus Abb. 6.19 und Abb. 6.20 angepaßt. Das Resultat ist in Abb. 6.33 dargestellt:

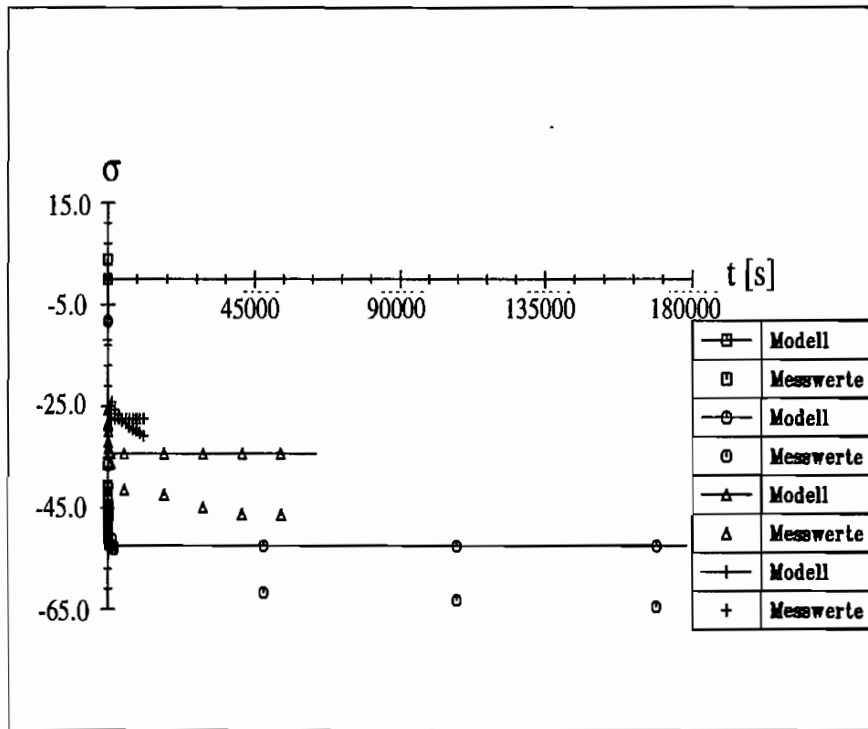


Abb. 6.33: Ergebnis der Anpassung an Relaxationsversuche

Aus Abb. 6.33 wird deutlich, daß das Relaxationsverhalten des Materials durch das erweiterte INTERATOM-Modell sehr gut erfaßt wird; alle Kurven geben das Niveau des Spannungsabfalls wieder. Bemerkenswert ist, daß die Vorgeschichte der Relaxationsversuche ebenso gut von den Parametern beschrieben wird, so daß man davon ausgehen kann, einen Parametersatz für das erweiterte INTERATOM-Modell ermittelt zu haben, der das viskose Materialverhalten von X 6 CrNi 18 11 insgesamt gut erfaßt. Diese Parameter lauten wie folgt:

$$\begin{aligned}
 a_{11} &= 171 \pm 1625 \\
 a_{12} &= 0.064 \pm 0.006 \frac{\text{mm}^2}{\text{N}} \\
 a_{13} &= -0.26 \pm 0.2 \\
 a_{21} &= 0.032 \pm 0.55 \\
 a_{22} &= -2.14 \pm 2.1 \\
 a_{23} &= 0.05 \pm 0.14 \\
 a_{24} &= -6.16 \pm 2.02 \\
 a_{25} &= 0.004 \pm 0.09 \\
 d_1 &= 8.0 \cdot 10^{-12} \pm 9.2 \cdot 10^{-13} \\
 d_2 &= 5.01 \pm 0.032
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p_{31} &= 2.8 \cdot 10^{-9} \pm 0.00025 \frac{1}{s} \\
p_{32} &= 3.3 \cdot 10^{-9} \pm 1.01 \cdot 10^{-5} \frac{mm^2}{N \cdot s} \\
p_{33} &= 3.8 \cdot 10^{-14} \pm 2.0 \cdot 10^{-9} \frac{mm^4}{N^2 \cdot s} \\
p_{41} &= 0.15 \pm 3.8 \cdot 10^{14} \frac{mm^2}{N} \\
p_{42} &= 4.45 \cdot 10^{-5} \pm 1.74 \cdot 10^{11} \frac{mm^4}{N^2} \\
p_{43} &= 4.24 \cdot 10^{-7} \pm 814297895 \frac{mm^6}{N^3} \\
p_{51} &= -14.57 \pm 9.4 \cdot 10^{15} \\
p_{52} &= -0.22 \pm 5.2 \cdot 10^{14} \frac{mm^2}{N} \\
p_{53} &= -3.1 \cdot 10^{-5} \pm 9.4 \cdot 10^{10} \frac{mm^4}{N^2} \\
p_{61} &= 0.00032 \pm 0.00049 \frac{1}{s} \\
p_{62} &= 4.9 \cdot 10^{-11} \pm 6.8 \cdot 10^{-6} \frac{mm^2}{N \cdot s} \\
p_{63} &= 4.3 \cdot 10^{-13} \pm 1.45 \cdot 10^{-8} \frac{mm^4}{N^2 \cdot s}
\end{aligned} \tag{6.47}$$

In (6.47) zeigt sich insgesamt ein gutes Bild bezüglich der Unsicherheit in der Kenntnis der Modellparameter, obwohl die Streuungen zum Teil um Zehnerpotenzen größer als die Werte sind. Hierin zeigt sich die Notwendigkeit, weitere Versuche mit in das Anpassungsproblem einzubeziehen. Deutlich verbessert gegenüber den beiden vorherigen Anpassungen ist die Kenntnis der Parameter  $d_1$  und  $d_2$  der Materialfunktion  $\Phi$ . Die Situation für die Parameter  $p_{31}$ ,  $p_{32}$ ,  $p_{33}$ ,  $p_{61}$ ,  $p_{62}$  und  $p_{63}$  der Materialfunktion  $B$  stellt sich unverändert dar. Bemerkenswert ist, daß sich die Parameter  $p_{41}$ ,  $p_{42}$ ,  $p_{43}$ ,  $p_{51}$ ,  $p_{52}$  und  $p_{53}$  so gut wie nicht geändert haben, so daß der Schluß gezogen wird, daß diese Parameter redundant sind. Die Materialfunktion  $B$  läßt sich daher vereinfachen:

$$B(\sigma, T) = d_3(\sigma, T) + d_6(\sigma, T) = d_7(\sigma, T) \tag{6.48}$$

mit:

$$d_7 = \underbrace{(p_{31} + p_{61})}_{p_{71}} + \underbrace{(p_{32} + p_{62})}_{p_{72}} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \sigma + \underbrace{(p_{33} + p_{63})}_{p_{73}} \cdot \frac{2}{3} \cdot \sigma^2 \tag{6.49}$$

Mit den Parametern des reduzierten Ansatzes ergeben sich exakt dieselben Kurven wie in Abb. 6.33, so daß sich die Reduktion als sinnvoll erweist.

Die Korrelationstabelle für den ursprünglichen Ansatz für die Materialfunktion  $B$  ist auf

der folgenden Seite dargestellt. Signifikant ist in Tabelle 6.8 die deutliche Reduktion der linearen Abhängigkeiten zwischen den Parametern der Materialfunktion  $A$  und den Parametern der Überspannungsfunktion  $\Phi$ . Hierin zeigt sich der Zugewinn an Information aus den Relaxationsversuchen.

Die Korrelationsmatrix für die Koeffizienten des reduzierten Ansatzes für die Materialfunktion  $B$  ist in Tabelle 6.7 dargestellt.

$\rho$	$a_{11}$	$a_{12}$	$a_{13}$	$a_{21}$	$a_{22}$	$a_{23}$	$a_{24}$	$a_{25}$	$d_1$	$d_2$	$p_{71}$	$p_{72}$	$p_{73}$
$a_{11}$	1.0	-0.4	0.8	0.0	0.0	0.2	0.5	-0.2	-0.6	0.0	0.3	-0.3	0.3
$a_{12}$		1.0	-0.7	-0.1	-0.1	-0.3	0.1	0.5	0.2	0.0	-0.2	0.2	-0.3
$a_{13}$			1.0	0.0	0.0	0.4	0.6	-0.3	-0.3	0.1	0.1	-0.1	0.1
$a_{21}$				1.0	1.0	-0.9	0.0	-0.9	0.0	-0.1	-0.3	0.3	-0.4
$a_{22}$					1.0	-0.9	0.0	-0.9	0.0	-0.1	-0.3	0.3	-0.4
$a_{23}$						1.0	0.0	0.7	-0.1	0.1	0.3	-0.4	0.4
$a_{24}$							1.0	0.0	-0.1	0.3	-0.2	0.2	-0.3
$a_{25}$								1.0	0.0	0.1	0.2	-0.2	0.3
$d_1$									1.0	-0.4	-0.1	0.2	-0.2
$d_2$										1.0	-0.4	0.4	-0.4
$p_{71}$											1.0	-1.0	1.0
$p_{72}$												1.0	-1.0
$p_{73}$													1.0

Tabelle 6.7: Korrelationskoeffizienten

Die Parameter  $p_{71}$ ,  $p_{72}$  und  $p_{73}$  sind nahezu unabhängig von den Parametern der anderen Materialfunktionen, jedoch zeigen sie eine lineare Abhängigkeit voneinander. Hier bedarf es weiterer Versuche, um die Abhängigkeit zu reduzieren.

$\rho$	$\alpha_{11}$	$\alpha_{12}$	$\alpha_{13}$	$\alpha_{21}$	$\alpha_{22}$	$\alpha_{23}$	$\alpha_{24}$	$\alpha_{25}$	$d_1$	$d_2$	$p_{31}$	$p_{32}$	$p_{33}$	$p_{41}$	$p_{42}$	$p_{43}$	$p_{51}$	$p_{52}$	$p_{53}$	$p_{61}$	$p_{62}$	$p_{63}$	
$\alpha_{11}$	1.0	-0.6	0.9	-1.0	0.6	0.9	0.9	1.0	0.5	-0.4	-0.1	0.2	-0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.3	0.0	0.3	
$\alpha_{12}$		1.0	-0.9	0.7	-0.9	-0.8	-0.4	-0.5	-0.6	0.5	-0.1	0.1	-0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.1
$\alpha_{13}$			1.0	-0.9	0.8	1.0	0.7	0.8	0.7	-0.6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.1	0.0	0.0	0.0
$\alpha_{21}$				1.0	-0.6	-1.0	-0.9	-1.0	-0.5	0.4	0.0	-0.2	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.3	0.0	0.0	-0.2
$\alpha_{22}$					1.0	0.8	0.2	0.4	0.7	-0.6	0.1	-0.1	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.1	0.0	0.0	-0.2
$\alpha_{23}$						1.0	0.7	0.9	0.6	-0.5	0.0	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.0	0.0	0.1
$\alpha_{24}$							1.0	1.0	0.1	-0.1	-0.1	0.3	-0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.5	0.0	0.0	0.5
$\alpha_{25}$								1.0	0.3	-0.3	-0.1	0.2	-0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.4	0.0	0.0	0.4
$d_1$									1.0	-1.0	0.2	-0.2	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.2	-0.1	-0.1	-0.3
$d_2$										1.0	-0.2	0.2	-0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.1	0.1	0.3
$p_{31}$											1.0	-0.9	0.8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.4	-0.8	-0.8
$p_{32}$												1.0	-0.8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.4	0.8	0.7	0.7
$p_{33}$													1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.2	-0.8	-0.4	-0.4
$p_{41}$														1.0	-1.0	-1.0	0.0	-1.0	-0.2	0.0	0.0	0.0	0.0
$p_{42}$															1.0	1.0	-0.4	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$p_{43}$																1.0	0.1	0.7	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0
$p_{51}$																	1.0	-0.9	-0.3	0.0	0.0	0.0	0.0
$p_{52}$																		1.0	-0.9	0.0	0.0	0.0	0.0
$p_{53}$																			1.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$p_{61}$																				1.0	-0.2	0.9	0.9
$p_{62}$																					1.0	0.2	0.2
$p_{63}$																						1.0	1.0

Tabelle 6.8: Korrelationskoeffizienten

## 6.4 Erfassung der Temperaturabhängigkeit der Modellparameter

Wie in Kapitel 3.4.1 dargelegt wurde, ist das INTERATOM-Modell auch in der Lage, Prozesse mit Temperaturentwicklung zu beschreiben. Dazu wählt man geeignete Ansätze für die Temperaturabhängigkeit sämtlicher Parameter des Modells. Die Bestimmung der Parameter dieser Ansätze ist Gegenstand des vorliegenden Kapitels.

Zur Erfassung der Temperaturabhängigkeit der Parameter des INTERATOM-Modells wird in [Bru84] der folgende Weg angegeben:

Der in den Kapiteln 6.1 bis 6.3 beschriebene Weg zur Anpassung der Modellparameter ist für dieselben Versuchstypen bei verschiedenen Temperaturniveaus zu wiederholen. Auf diese Art und Weise gewinnt man jeweils einen kompletten Parametersatz des INTERATOM-Modells bei verschiedenen Temperaturen. Anschließend läßt sich durch Wahl eines geeigneten Ansatzes die Temperaturabhängigkeit der Parameter beschreiben.

Diese Vorgehensweise ist an drei wesentliche Voraussetzungen geknüpft:

- Es ist dafür Sorge zu tragen, daß die Versuche wirklich isotherm ablaufen, d.h. so langsam, daß die bei der plastischen Verformung der Proben entstehende Wärme vollständig nach außen abgeführt wird.
- Weiterhin ist wesentlich, daß bei jedem Temperaturniveau ein vollständiger Satz Versuche vorliegt, um überhaupt genügend Information zur Bestimmung der Parameter zu besitzen.
- Entscheidend ist, daß bei jeder Anpassung große Sorgfalt darauf verwendet wird, das absolute Minimum der jeweiligen Fehlerquadratsumme zu bestimmen, damit überhaupt ein sinnvoller Vergleich der Parameter bei verschiedenen Temperaturen möglich ist.

In diesem Kapitel wird auf die in [Bru90] angegebene Anpassung des INTERATOM-Modells an Versuche mit dem austenitischen Stahl X 2 CrNiMo 18 10 zurückgegriffen, um den prinzipiellen Weg zur Ermittlung der Temperaturabhängigkeit der Parameter zu beleuchten.

In [Bru90] werden die folgenden Werte für die Parameter in Abhängigkeit von der Temperatur angegeben:



Tabelle 6.9: Elastizitätskennwerte

Temperatur $T [^{\circ}C]$	$\alpha \left[ \frac{1}{^{\circ}C} \right]$	$E \left[ \frac{N}{mm^2} \right]$	$\nu$
600	$18.7 \cdot 10^{-6}$	$1.45 \cdot 10^5$	0.3
550	$18.5 \cdot 10^{-6}$	$1.49 \cdot 10^5$	0.3
450	$18.1 \cdot 10^{-6}$	$1.57 \cdot 10^5$	0.3

Tabelle 6.10: Statische Materialkennwerte

Temperatur $T [^{\circ}C]$	$\sigma_F \left[ \frac{N}{mm^2} \right]$	$E_{t0} \left[ \frac{N}{mm^2} \right]$	$E_{t\infty} \left[ \frac{N}{mm^2} \right]$	$c_3 \left[ \frac{N}{mm^2} \right]$	$c_1 \left[ \frac{mm^2}{N} \right]$	$c_2$
600	72.6	$1.25 \cdot 10^5$	2110	139.4	$1.276 \cdot 10^{-1}$	16.2
550	74.6	$1.3 \cdot 10^5$	2125	141.75	$1.129 \cdot 10^{-1}$	18.1
450	78.7	$1.41 \cdot 10^5$	2215	147.9	$1.417 \cdot 10^{-1}$	13.4

Tabelle 6.11: Dynamische Materialkennwerte

Temperatur $T [^{\circ}C]$	$\gamma \left[ \frac{1}{s} \right]$	$c_4 \left[ \frac{N}{mm^2} \right]$	$c_5$
600	$1.0 \cdot 10^{-26}$	$7.0 \cdot 10^{-4}$	7.0
550	$8.0 \cdot 10^{-28}$	$4.0 \cdot 10^{-3}$	9.25
450	$7.0 \cdot 10^{-30}$	$1.4 \cdot 10^{-2}$	12.4

Für die funktionale Abhängigkeit der Modellparameter von der Temperatur werden in [Bru84] die Ansätze angegeben<sup>19</sup>:

$$\begin{aligned}
 E(T) &= a_1 - a_2 \cdot T \\
 \sigma_F(T) &= a_{12} \cdot E(T) = a_{12} \cdot (a_1 - a_2 \cdot T) \\
 E_{t_0}(T) &= a_{32} - a_{33} \cdot T \\
 E_{t_{\infty}}(T) &= a_{10} - a_{11} \cdot T \\
 c_3(T) &= a_{17} \cdot e^{-a_{18} \cdot T} + a_{19} - a_{20} \cdot T \\
 c_1(T) &= e^{-a_{14} - a_{13} \cdot T} \\
 c_2(T) &= e^{a_{16} - a_{15} \cdot T} \\
 \gamma(T) &= e^{-a_{22} + a_{21} \cdot T} \\
 c_4(T) &= a_{24} - a_{25} \cdot T + a_{26} \cdot T^2 \\
 c_5(T) &= a_{30} - a_{31} \cdot T
 \end{aligned} \tag{6.50}$$

Um eine lineare Least-Squares Anpassung der Parameter  $a_1$  bis  $a_{33}$  aus (6.50) an die Werte aus den Tabellen 6.9 bis 6.11 zu ermöglichen, müssen die Ansätze zum Teil umformuliert werden:

$c_3(T)$  wird vereinfacht als lineare Funktion angenommen:

$$c_3(T) = a_{19} - a_{20} \cdot T \tag{6.51}$$

Die Gleichungen für  $c_1(T)$ ,  $c_2(T)$  und  $\gamma(T)$  werden logarithmiert:

$$\begin{aligned}
 \ln(c_1(T)) &= -a_{13} \cdot T - a_{14} \\
 \ln(c_2(T)) &= -a_{15} \cdot T + a_{16} \\
 \ln(\gamma(T)) &= a_{21} \cdot T - a_{22}
 \end{aligned} \tag{6.52}$$

<sup>19</sup>Der Ansatz für  $E_{t_0}$  ist nicht in [Bru84] enthalten

Entsprechend lauten die Werte aus Tabelle 6.10 und 6.11:

Temperatur $T [^{\circ}\text{C}]$	$\ln(\gamma)$	$\ln(c_1)$	$\ln(c_2)$
600	-59.867	-2.0589	2.785
550	-62.393	-2.1813	2.896
450	-67.132	-1.954	2.595

Damit ergibt sich ein lineares Least-Squares Problem für alle zu bestimmenden Parameter. Die Koeffizienten  $a_{24}$ ,  $a_{25}$  und  $a_{26}$  des Ansatzes für  $c_4(T)$  sind durch die drei Punkte aus Tabelle 6.11 vollständig bestimmt. Für alle anderen Parameter ergibt sich ein identisches Anpassungsproblem; es sind jeweils drei Punkte  $(x_1, y_1)$ ,  $(x_2, y_2)$  und  $(x_3, y_3)$  gegeben, durch die eine Ausgleichsgerade  $y = m \cdot x + k$  gelegt werden soll. Aus der Least-Squares Schätzung folgen die gesuchten Koeffizienten:

$$m = \frac{3 \cdot (x_1 \cdot y_1 + x_2 \cdot y_2 + x_3 \cdot y_3) - (x_1 + x_2 + x_3) \cdot (y_1 + y_2 + y_3)}{3 \cdot (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) - (x_1 + x_2 + x_3)^2} \quad (6.53)$$

$$k = \frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \cdot (y_1 + y_2 + y_3) - (x_1 + x_2 + x_3) \cdot (x_1 \cdot y_1 + x_2 \cdot y_2 + x_3 \cdot y_3)}{3 \cdot (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) - (x_1 + x_2 + x_3)^2} \quad (6.54)$$

Nach Einsetzen der entsprechenden Werte aus den Tabellen 6.9 bis 6.11 erhält man für den Temperaturbereich  $450^{\circ}\text{C} \leq T \leq 600^{\circ}\text{C}$  die folgenden Modellparameter:

$$\begin{aligned}
 E(T) &= \left(193000 - 80 \cdot \frac{T}{^{\circ}\text{C}}\right) \frac{N}{\text{mm}^2} \\
 \sigma_F(T) &= \left(96.7 - 0.04 \cdot \frac{T}{^{\circ}\text{C}}\right) \frac{N}{\text{mm}^2} \\
 E_{t_0}(T) &= \left(189143 - 107 \cdot \frac{T}{^{\circ}\text{C}}\right) \frac{N}{\text{mm}^2} \\
 E_{t_{\infty}}(T) &= \left(2539 - 0.73 \cdot \frac{T}{^{\circ}\text{C}}\right) \frac{N}{\text{mm}^2} \\
 c_3(T) &= \left(173.6 - 0.057 \cdot \frac{T}{^{\circ}\text{C}}\right) \frac{N}{\text{mm}^2} \\
 c_1(T) &= \left(e^{-1.57 - 9.24 \cdot 10^{-4} \cdot \frac{T}{^{\circ}\text{C}}}\right) \frac{\text{mm}^2}{N} \\
 c_2(T) &= e^{1.95 - 1.52 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{T}{^{\circ}\text{C}}}
 \end{aligned} \quad (6.55)$$

$$\gamma(T) = \left( e^{-88.9 + 0.048 \cdot \frac{T}{^{\circ}\text{C}}} \right) \frac{1}{\text{s}}$$

$$c_4(T) = \left( 0.115 - 3.3 \cdot 10^{-4} \cdot \frac{T}{^{\circ}\text{C}} + 2.3 \cdot 10^{-7} \cdot \frac{T^2}{(^{\circ}\text{C})^2} \right) \frac{\text{N}}{\text{mm}^2}$$

$$c_5(T) = 28.41 - 0.035 \cdot \frac{T}{^{\circ}\text{C}}$$

Die Übereinstimmung der Ansätze (6.50) mit den Werten aus den Tabellen 6.9 bis 6.11 ist in den Abb. 6.34 bis Abb. 6.43 dargestellt. Es zeigt sich jeweils eine sehr gute Wiedergabe des zugrundeliegenden Trends.

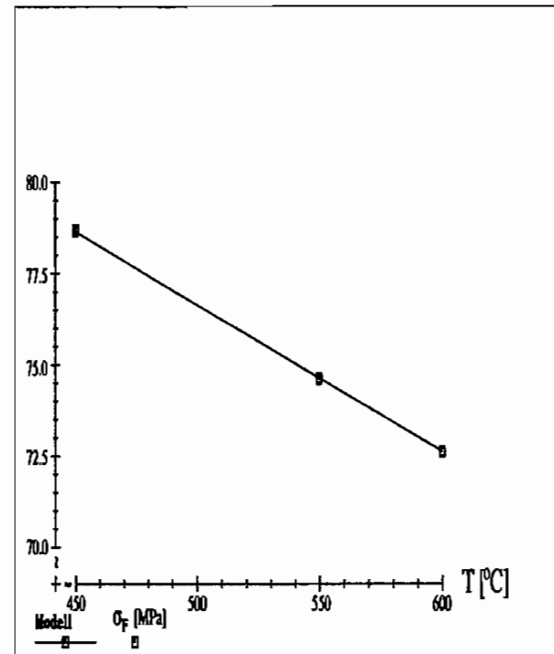
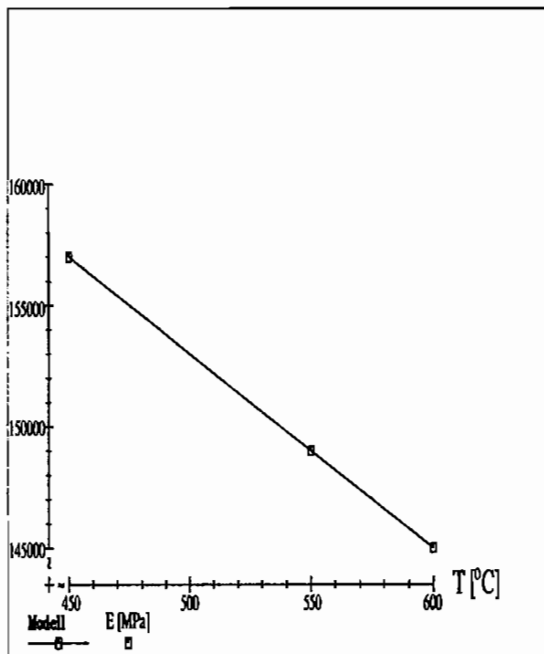


Abb. 6.34: Temperaturabhängigkeit des Elastizitätsmoduls

Abb. 6.35: Temperaturabhängigkeit der anfänglichen Fließgrenze

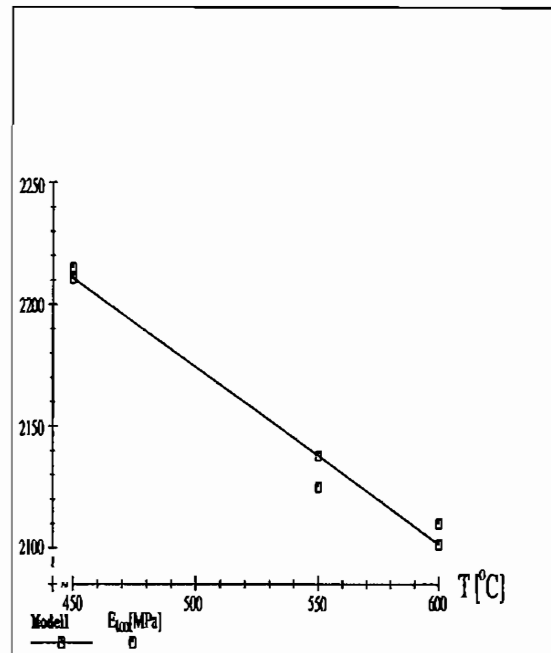
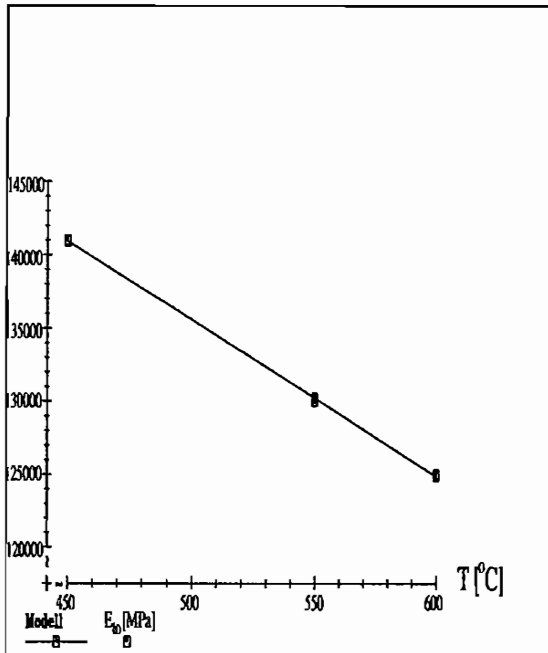


Abb. 6.36: Temperaturabhängigkeit des Tangentenmoduls  $E_{t0}$

Abb. 6.38: Temperaturabhängigkeit des Tangentenmoduls  $E_{t\infty}$

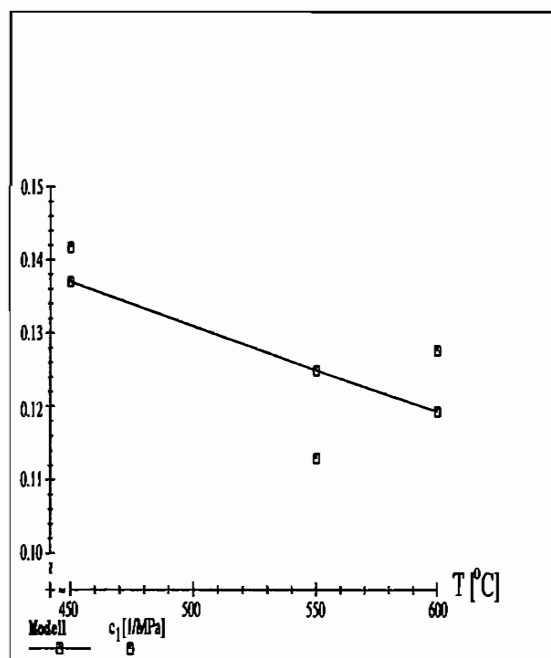
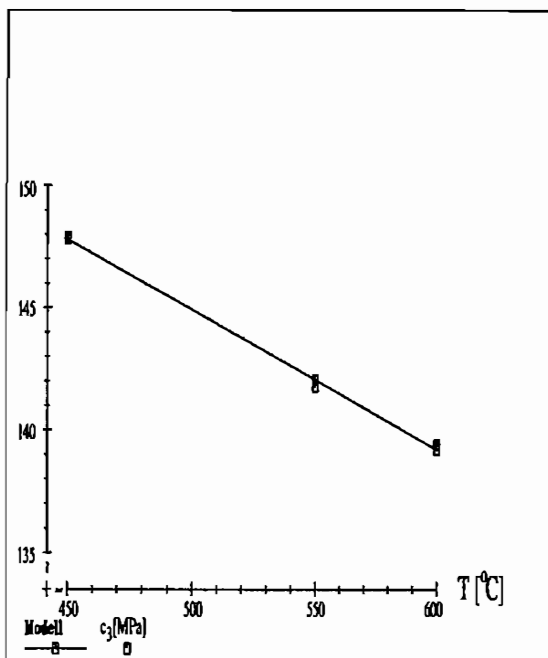


Abb. 6.37: Temperaturabhängigkeit des Ordinateabschnitts  $c_3$

Abb. 6.39: Temperaturabhängigkeit des Parameters  $c_1$

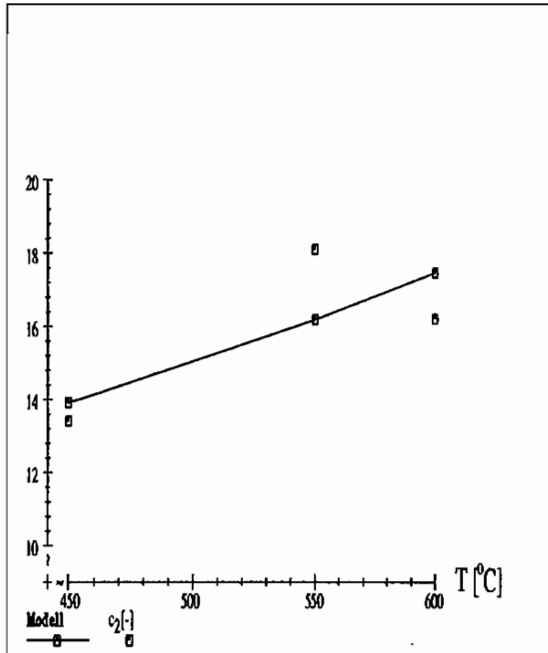


Abb. 6.40: Temperaturabhängigkeit des Parameters  $c_2$

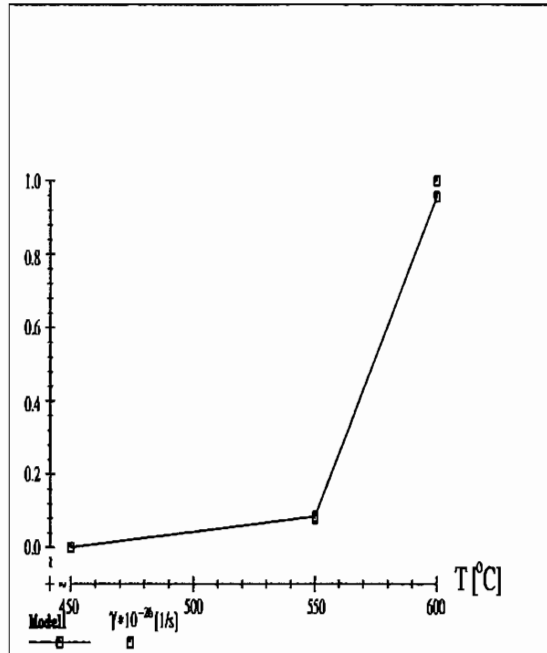


Abb. 6.42: Temperaturabhängigkeit des Parameters  $\gamma$

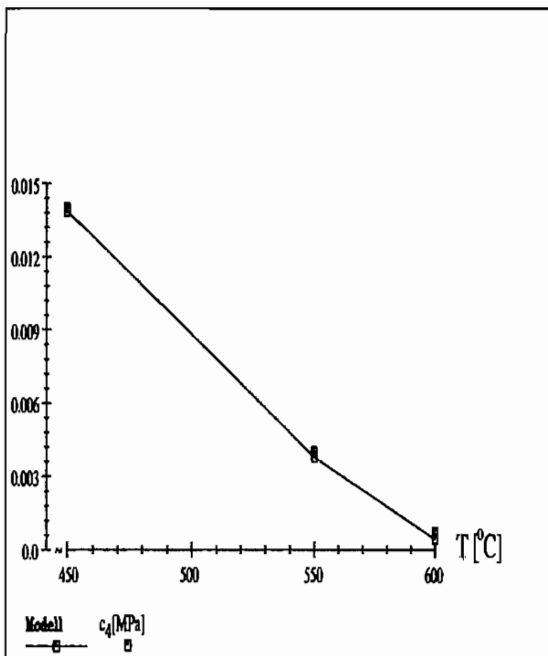


Abb. 6.41: Temperaturabhängigkeit des Parameters  $c_4$

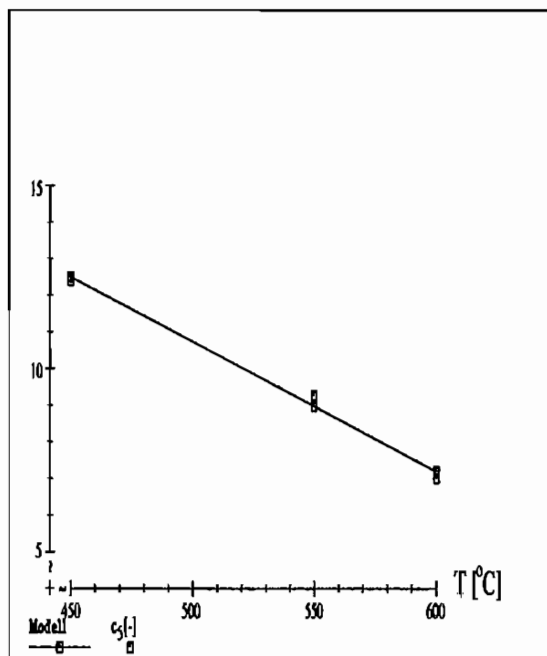


Abb. 6.43: Temperaturabhängigkeit des Parameters  $c_5$

## 7. Berechnung des Bauteilverhaltens mit der Finite-Elemente-Methode

### 7.1 Verschiebungsmethode

#### 7.1.1 Gleichgewichtsbedingungen für finite Elemente

Die Gleichgewichtsbedingungen eines Massenpunktes lauten in vektorieller Form (zentrales Kräftesystem):

$$\sum_i \vec{F}_i = 0 \quad (7.1)$$

Multipliziert man (7.1) skalar mit einem Verschiebungsvektor, so bleibt diese Beziehung gültig [BL94].

$$\sum_i \vec{F}_i \cdot \vec{u}_i = 0 \quad (7.2)$$

Der Verschiebungsvektor ist dabei nicht funktional gebunden, sondern willkürlich. Er ist auch nicht real, sondern gedacht. Die in (7.2) auftretenden Terme lassen sich als Arbeiten deuten, die die Kräfte  $\vec{F}_i$  auf den Wegen  $\vec{u}_i$  leisten.

Mit dem auf LAGRANGE zurückgehenden Begriff der "virtuellen Arbeit"

$$\bar{A} = \vec{F} \cdot \delta \vec{u} \quad (7.3)$$

wurde Gleichung (7.2) als *Prinzip der virtuellen Verrückungen* formuliert:

Notwendig und hinreichend dafür, daß sich ein Punkt unter der Wirkung angreifender Kräfte im Gleichgewicht befindet, ist, daß bei jeder beliebigen virtuellen Verrückung des Punktes die Summe der virtuellen Arbeiten der angreifenden Kräfte verschwindet:

$$\bar{A} = \sum_i \bar{A}_i = \sum_i \vec{F}_i \cdot \delta \vec{u}_i = 0 \quad (7.4)$$

Das Prinzip der virtuellen Verrückungen (7.4) ist daher den Gleichgewichtsbedingungen (7.1) äquivalent [BL94].

Das Prinzip (7.4) gilt nicht nur für den Massenpunkt, sondern allgemein für beliebige Körper. Sind die Körper deformierbar, so müssen auch *virtuelle innere Kräfte* berechnet werden [Wes95]:

$$\int_V \underline{\sigma} \cdot \delta \underline{\epsilon} dV = \int_V \vec{b} \cdot \delta \vec{u} dV + \int_A \vec{f} \cdot \delta \vec{u} dA \quad (7.5)$$

In (7.5) bezeichnet  $\delta(\cdot)$  eine virtuelle Größe, die Vektoren  $\vec{b}$  und  $\vec{f}$  die volumen- bzw. flächenhaft angreifenden Kräfte,  $\vec{u}^T = [u_x, u_y, u_z]$  die Verschiebungen,  $\underline{\epsilon}^T = [\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{zz}, \gamma_{xy}, \gamma_{yz}, \gamma_{zx}]$  die Verzerrungen und  $\underline{\sigma}^T = [\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{yz}, \sigma_{zx}]$  die Spannungen.

Die linke Seite von (7.5) ist die virtuelle innere Arbeit, die die aktuellen Spannungen entlang der virtuellen Verzerrungen leisten, die rechte Seite von (7.5) ist die virtuelle äußere Arbeit, die die aktuellen Kräfte an den virtuellen Verschiebungen leisten.

Die virtuellen Verschiebungen  $\delta\vec{u}$  in (7.5) müssen kinematisch möglich, d.h. mit den geometrischen Rand- und Übergangsbedingungen verträglich sein [BL94]. Die aktuellen Spannungen  $\underline{\sigma}$  müssen aus den Verzerrungen mit Hilfe eines *passenden Materialgesetzes* ermittelt werden.

Bei der Methode der finiten Elemente wird der kontinuierliche Körper näherungsweise dargestellt als eine Gruppierung diskreter finiter Elemente, die in den Knotenpunkten auf den Rändern der Elemente miteinander verbunden sind. Die im lokalen Koordinatensystem  $x, y, z$  gemessenen Verschiebungen  $\vec{u}^{(m)}(x, y, z)$  innerhalb des  $m$ -ten Elementes werden als Funktionen der Verschiebungen  $\hat{\vec{U}}$  der  $n$  Knotenpunkte der finiten Elemente dargestellt [Bat90]:

$$\vec{u}^{(m)}(x, y, z) = \underline{\mathbf{H}}^{(m)}(x, y, z) \cdot \hat{\vec{U}} \quad (7.6)$$

In (7.6) bezeichnet  $\underline{\mathbf{H}}^{(m)}(x, y, z)$  die *Verschiebungsinterpolationsmatrix* und  $\hat{\vec{U}}^T = [\vec{U}_1, \vec{U}_2, \dots, \vec{U}_n]$  die Verschiebungen der  $n$  Knotenpunkte der finiten Elemente mit den  $\vec{U}_i$  als Verschiebung *eines* Knotens in beliebiger Richtung. Mit der Verschiebungsannahme (7.6) können durch Differenzieren die entsprechenden Element-Verzerrungen ermittelt werden:

$$\underline{\epsilon}^{(m)}(x, y, z) = \underline{\mathbf{B}}^{(m)}(x, y, z) \cdot \hat{\vec{U}} \quad (7.7)$$

Die Matrix  $\underline{\mathbf{B}}^{(m)}(x, y, z)$  in (7.7) bezeichnet man als *Verzerrungs-Verschiebungsmatrix*. Die Spannungen  $\underline{\sigma}^{(m)}$  in einem finiten Element folgen aus den Verzerrungen  $\underline{\epsilon}^{(m)}$  durch ein geeignetes Materialgesetz. Mit der Verschiebungsannahme (7.6) und den Verzerrungen (7.7) folgt aus dem Prinzip der virtuellen Verrückungen (7.5) für eine virtuelle Einheitsverschiebung  $\delta\hat{\vec{U}} = \underline{\mathbf{I}}$  bezüglich der Knotenpunktverschiebungen der Gruppierung von  $m$  finiten Elementen [Bat90]:

$$\sum_m \int_{V^{(m)}} \underline{\mathbf{B}}^{(m)T} \cdot \underline{\sigma}^{(m)} dV = \sum_m \int_{V^{(m)}} \underline{\mathbf{H}}^{(m)T} \cdot \vec{b}^{(m)} dV + \sum_m \int_{A^{(m)}} \underline{\mathbf{H}}^{(m)T} \cdot \vec{f}^{(m)} dA \quad (7.8)$$



Mit den Abkürzungen

$$\vec{\mathbf{R}} = \sum_m \int_{V^{(m)}} \underline{\mathbf{H}}^{(m)T} \cdot \vec{\mathbf{b}}^{(m)} dV + \sum_m \int_{A^{(m)}} \underline{\mathbf{H}}^{(m)T} \cdot \vec{\mathbf{f}}^{(m)} dA \quad (7.9)$$

als Vektor der äußeren Knotenpunktkräfte und

$$\vec{\mathbf{F}} = \sum_m \int_{V^{(m)}} \underline{\mathbf{B}}^{(m)T} \cdot \underline{\boldsymbol{\sigma}}^{(m)} dV \quad (7.10)$$

als Vektor der Knotenpunktkräfte aus den Element-Spannungen können die Gleichgewichtsbedingungen für den zu untersuchenden Körper als

$$\vec{\mathbf{R}} - \vec{\mathbf{F}} = 0 \quad (7.11)$$

geschrieben werden.

### 7.1.2 Inkrementelle Formulierung

Das Grundproblem jeder *nichtlinearen Berechnung* besteht darin, zu jedem Zeitpunkt  $t$  das Gleichgewicht zwischen den äußeren Lasten und den Knotenlasten zu erreichen. Die Gleichung

$${}^t\vec{\mathbf{R}} - {}^t\vec{\mathbf{F}} = 0 \quad (7.12)$$

beschreibt diesen Zustand zum Zeitpunkt  $t$  [Bat90]. Die Beziehung (7.12) drückt das Gleichgewicht des Körpers in der augenblicklichen, deformierten Geometrie aus, wobei alle Nichtlinearitäten in Betracht zu ziehen sind.

Die Inkrementallösung geht von der Annahme aus, daß für einen bestimmten Zeitpunkt  $t$  die Lösung bekannt ist und daß sie für den Zeitpunkt  $t + \Delta t$  gesucht wird, wobei  $\Delta t$  ein passend gewählter kleiner Zuwachs der Zeit ist.

Die Gleichgewichtsbedingung (7.12) lautet zur Zeit  $t + \Delta t$ :

$${}^{t+\Delta t}\vec{\mathbf{R}} - {}^{t+\Delta t}\vec{\mathbf{F}} = 0 \quad (7.13)$$

Da die Lösung zur Zeit  $t$  bekannt ist, kann man

$${}^{t+\Delta t}\vec{\mathbf{F}} = {}^t\vec{\mathbf{F}} + \vec{\mathbf{F}} \quad (7.14)$$

schreiben, wobei  $\vec{\mathbf{F}}$  der Zuwachs der Knotenpunktkräfte ist, der dem Zuwachs der Element-Spannungen zum Zeitpunkt  $t + \Delta t$  entspricht. Dieser Vektor kann unter Verwendung einer *Tangentensteifigkeitsmatrix*  ${}^t\mathbf{K}$  angenähert werden, die den geometrischen und materiellen Bedingungen zur Zeit  $t$  entspricht:

$$\vec{\mathbf{F}} = {}^t\mathbf{K} \cdot \vec{\mathbf{U}} \quad (7.15)$$

In (7.15) bezeichnet  $\vec{U}$  den Vektor der inkrementellen Knotenpunktverschiebungen. Mit (7.14) und (7.15) folgt aus der Gleichgewichtsbedingung (7.12):

$$\underline{\mathbf{K}} \cdot \vec{U} = {}^{t+\Delta t}\vec{\mathbf{R}} - {}^t\vec{\mathbf{F}} \quad (7.16)$$

Wenn man (7.16) nach  $\vec{U}$  auflöst, ergibt sich eine Näherung für die Verschiebungen zur Zeit  $t + \Delta t$ :

$${}^{t+\Delta t}\vec{U} = {}^t\vec{U} + \vec{U} \quad (7.17)$$

Die exakten Verschiebungen zur Zeit  $t + \Delta t$  sind diejenigen Verschiebungen, die den gerade wirkenden Lasten  ${}^{t+\Delta t}\vec{\mathbf{R}}$  entsprechen. Mit (7.17) kann jedoch nur eine Näherung für  ${}^{t+\Delta t}\vec{U}$  berechnet werden, da nicht die exakte Steifigkeitsmatrix  ${}^{t+\Delta t}\underline{\mathbf{K}}$  verwendet wird. Um die Näherung für  ${}^{t+\Delta t}\vec{U}$  zu verbessern, wird das folgende *vereinfachte Newton-Raphson*-Iterationsverfahren angewendet [Bat90] (siehe Abb. 7.1):

$$\underline{\mathbf{K}} \cdot \Delta \vec{U}^{(i)} = {}^{t+\Delta t}\vec{\mathbf{R}} - {}^{t+\Delta t}\vec{\mathbf{F}}^{(i-1)} \quad (7.18)$$

$${}^{t+\Delta t}\vec{U}^{(i)} = {}^{t+\Delta t}\vec{U}^{(i-1)} + \Delta \vec{U}^{(i)}$$

für  $i = 1, 2, 3, \dots$  mit den Anfangsbedingungen:

$${}^{t+\Delta t}\vec{\mathbf{F}}^{(0)} = {}^t\vec{\mathbf{F}} \quad (7.19)$$

$${}^{t+\Delta t}\vec{U}^{(0)} = {}^t\vec{U}$$

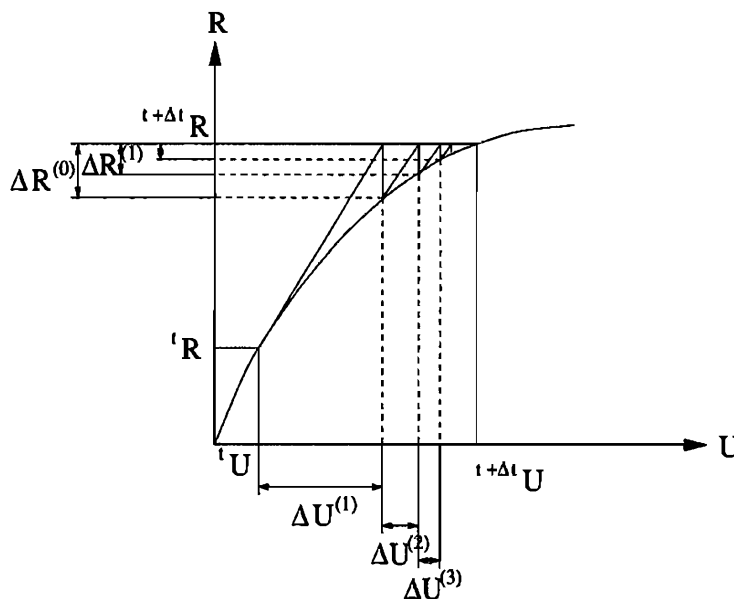


Abb. 7.1: Schema der Newton-Raphson-Iteration

In jedem Iterationsschritt wird näherungsweise, aber von Schritt zu Schritt immer besser, der Lastvektor  ${}^{t+\Delta t}\vec{\mathbf{R}}$  berechnet. Dieser liefert einen immer kleiner werdenden Verschiebungszuwachs. Die Iteration wird solange fortgesetzt, bis der nicht ausbalancierte Lastvektor  $\Delta\vec{\mathbf{R}}^{(i-1)}$  oder die Verschiebungsinkremente  $\Delta\vec{\mathbf{U}}^{(i)}$  hinreichend klein sind. Eine größere Konvergenzgeschwindigkeit der Iteration erhält man, wenn man statt der Tangentensteifigkeitsmatrix  ${}^t\mathbf{K}$  jeweils die aktuelle Steifigkeitsmatrix  ${}^{t+\Delta t}\mathbf{K}^{(i-1)}$  verwendet. Die aktuelle Steifigkeitsmatrix muß allerdings in jedem Iterationsschritt neu berechnet werden. Diese Berechnung erhöht den Aufwand beträchtlich.

### 7.1.3 Verwendung von Materialgleichungen

Im Rahmen der inkrementellen Formulierung geht man von der Annahme aus, daß für einen bestimmten Zeitpunkt  $t$  die Spannungsverteilung bekannt ist und daß sie für den Zeitpunkt  $t + \Delta t$  gesucht wird, wobei  $\Delta t$  ein passend gewählter kleiner Zuwachs der Zeit ist. Verlangt wird daher in jedem Zeitschritt  $\Delta t$  die Berechnung des Spannungszuwachses  $\Delta\boldsymbol{\sigma}$  zu einem gegebenen Dehnungsinkrement  $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$ , welches aus den vorgegebenen Verschiebungen folgt.

In Index-Schreibweise lautet das Schema zur Berechnung der aktuellen Spannungen [MAR94]:

$$\Delta\sigma_{ij} = C_{ijrs} \cdot \underbrace{(\Delta\varepsilon_{rs} - \Delta\varepsilon_{rs}^{plast.})}_{=\Delta\varepsilon_{rs}^{plast.}} \quad (7.20)$$

$${}^{t+\Delta t}\sigma_{ij} = {}^t\sigma_{ij} + \Delta\sigma_{ij}$$

In (7.20) bezeichnet  $\underline{\mathbf{C}}$  die *inkrementelle Elastizitätsmatrix* des Materials. Die hochgestellten Indices *elast.* und *plast.* kennzeichnen die *elastischen* bzw. *plastischen* Anteile des Dehnungsinkrementes  $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$ . Beispiele für Elastizitätsmatrizen finden sich für die verschiedensten Anwendungsfälle in [AA94].

Aufgabe des *Stoffgesetzes* ist es, zu einem gegebenen Zeitschritt  $\Delta t$  und zu einem gegebenen Dehnungsinkrement  $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$  das inelastische Dehnungsinkrement  $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^{plast.}$  zu liefern. Durch die Formulierung (7.20) ist es möglich, sehr allgemeine Stoffgesetze für verschiedenste Anwendungsfälle zu verwenden.

Bei Verwendung eines elastisch-plastischen bzw. elastisch-viskoplastischen Materialgesetzes ist zu beachten, daß bei der Berechnung der aktuellen Spannungen die *Fließgrenze* des Materials im Rahmen der zugrundegelegten Fließtheorie eingehalten wird. Hat man beispielsweise einen elastischen Spannungszustand  ${}^t\boldsymbol{\sigma}$  zum Zeitpunkt  $t$  und berechnet mit dem Stoffgesetz einen Spannungszuwachs  $\Delta\boldsymbol{\sigma}$ , so daß die aktuelle Spannung  ${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma}$  jenseits der Fließgrenze des Materials liegt, muß man den Zeitschritt  $\Delta t$  aufteilen:

$$\Delta t = \Delta t^{elast.} + \Delta t^{plast.} \quad (7.21)$$

In (7.21) bezeichnet  $\Delta t^{elast.}$  den Anteil des Zeitschrittes, für den die aktuelle Fließgrenze des Materials mit einem elastischen Schritt exakt erreicht wird.

Die Aufgabe besteht dann darin, für ein gegebenes elastisches Stoffgesetz die Größe dieses Zeitschrittes zu bestimmen. Bei Verwendung des *hypoelastischen* Stoffgesetzes (3.21) erhält man den Zeitschritt  $\Delta t^{elast.}$  durch Berechnung des Spannungszustandes

$${}^{t+\Delta t^{elast.}}\underline{\sigma} = {}^t\underline{\sigma} + 2 \cdot G \cdot \left( \underline{\dot{\epsilon}} + \frac{\nu}{1-2\nu} \cdot Sp(\underline{\dot{\epsilon}}) \cdot \underline{\mathbf{1}} \right) \cdot \Delta t^{elast.} \quad (7.22)$$

und anschließendem Einsetzen in das zugrundegelegte Fließgesetz als einfache *Nullstellensuche* des Fließgesetzes als Funktion des elastischen Zeitschrittes  $\Delta t^{elast.}$ . Die Nullstellensuche kann hierbei mit einem einfachen Verfahren, beispielsweise einem *Bisektionsverfahren*[Bra90], erfolgen.

### 7.1.4 Isoparametrische Finite-Element-Matrizen

Der Grundgedanke für die Formulierung von isoparametrischen Elementen ist es, die Verbindung zwischen den Elementverschiebungen  $\vec{u}^{(m)}(x, y, z)$  und den Elementknotenpunktverschiebungen  $\hat{U}$  direkt zu erreichen und damit die Berechnung der Verschiebungsinterpolationsmatrix  $\underline{H}^{(m)}(x, y, z)$  zu vermeiden. Dies geschieht durch Verwendung von Interpolationsfunktionen, die auch *Formfunktionen* genannt werden. Damit werden die Elementmatrizen auf direktem Weg gewonnen.

#### 7.1.4.1 Elemente für Kontinua

Die Koordinateninterpolationen für ein allgemeines dreidimensionales Element sind [Bat90]:

$$\begin{aligned} x &= \sum_{i=1}^q h_i \cdot x_i \\ y &= \sum_{i=1}^q h_i \cdot y_i \\ z &= \sum_{i=1}^q h_i \cdot z_i \end{aligned} \quad (7.23)$$

In (7.23) bezeichnen  $x, y, z$  die globalen Koordinaten in einem beliebigen Punkt des Elementes und  $x_i, y_i, z_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, q$  die Koordinaten der  $q$  Elementknoten. Die Interpolationsfunktionen  $h_i$  sind definiert im natürlichen Koordinatensystem des Elementes, das die Komponenten  $r, s, t$  hat, die jeweils von  $-1$  bis  $+1$  laufen können (siehe Abb. 7.2).

Die *Fundamenteigenschaft* der Interpolationsfunktionen  $h_i$  ist, daß sie im natürlichen Koordinatensystem  $r, s, t$  am Knoten  $i$  den Wert 1 und an allen anderen Knoten den Wert 0 haben.

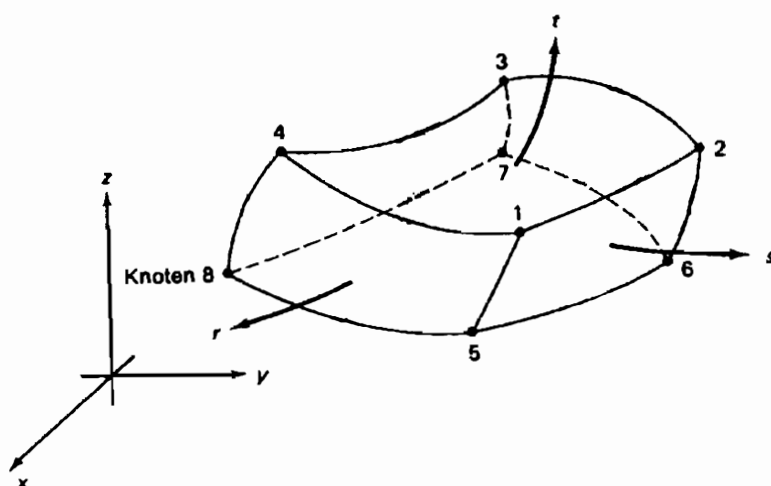


Abb. 7.2: Isoparametrisches 8-Knoten Volumenelement

Für das isoparametrische 8-Knoten Volumenelement aus Abb. 7.2 ergeben sich die Formfunktionen [MAR94]:

$$\begin{aligned}
 h_1 &= \frac{1}{8} \cdot (1+r) \cdot (1+s) \cdot (1+t) \\
 h_2 &= \frac{1}{8} \cdot (1-r) \cdot (1+s) \cdot (1+t) \\
 &\vdots \\
 h_8 &= \frac{1}{8} \cdot (1+r) \cdot (1-s) \cdot (1-t)
 \end{aligned} \tag{7.24}$$

Bei der isoparametrischen Formulierung werden die Element-Verschiebungen in der gleichen Weise wie die Geometrie interpoliert, d.h. es werden analog zu (7.23) die Beziehungen:

$$\begin{aligned}
 u &= \sum_{i=1}^q h_i \cdot u_i \\
 v &= \sum_{i=1}^q h_i \cdot v_i \\
 w &= \sum_{i=1}^q h_i \cdot w_i
 \end{aligned} \tag{7.25}$$

verwendet. In (7.25) bezeichnen  $u, v, w$  die lokalen Element-Verschiebungen in einem beliebigen Punkt des Elementes und  $u_i, v_i, w_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, q$  die entsprechenden Elementverschiebungen in den  $q$  Elementknoten. Es wird also angenommen, daß jeder Knotenpunktcoordinate, die zur Beschreibung der Geometrie des Elementes erforderlich ist, eine

Knotenpunktverschiebung entspricht.

Zur Berechnung der Steifigkeitsmatrix eines Elementes ermittelt man zuerst die Verzerrungs-

Verschiebungsmatrix  $\underline{\mathbf{B}}^{(m)}(x, y, z)$ . Da die Element-Verschiebungen (7.25) im natürlichen Koordinatensystem des Elementes definiert sind, werden die Ableitungen nach  $x, y, z$  durch die Ableitungen nach  $r, s, t$  ausgedrückt. Dies geschieht durch den *Jacobischen Operator*  $\underline{\mathbf{J}}$ :

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial s} \\ \frac{\partial}{\partial t} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial s} \\ \frac{\partial x}{\partial t} & \frac{\partial y}{\partial t} & \frac{\partial z}{\partial t} \end{bmatrix}}_{\underline{\mathbf{J}}} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (7.26)$$

Die Jacobi-Matrix  $\underline{\mathbf{J}}$  gewinnt man dabei durch Differentiation von (7.23) mit den Formfunktionen (7.24). (7.26) läßt sich invertieren, wenn die Elemente nicht zu stark verzerrt sind [Bat90]. Daraus folgen die Ableitungen der Elementverschiebungen  $u, v, w$  nach den lokalen Koordinaten  $x, y, z$ :

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial v}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} = \underline{\mathbf{J}}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial r} & \frac{\partial v}{\partial r} & \frac{\partial w}{\partial r} \\ \frac{\partial u}{\partial s} & \frac{\partial v}{\partial s} & \frac{\partial w}{\partial s} \\ \frac{\partial u}{\partial t} & \frac{\partial v}{\partial t} & \frac{\partial w}{\partial t} \end{bmatrix} \quad (7.27)$$

Mit (7.27) läßt sich die Verzerrungs-Verschiebungsmatrix  $\underline{\mathbf{B}}^{(m)}(x, y, z)$  berechnen. Daraus folgt die auf die lokalen Element-Freiheitsgrade bezogene Element-Steifigkeitsmatrix:

$$\underline{\mathbf{K}}^{(m)} = \int_t \int_s \int_r \underline{\mathbf{B}}^{(m)T} \cdot \underline{\mathbf{C}}^{(m)} \cdot \underline{\mathbf{B}}^{(m)} \cdot \det[\underline{\mathbf{J}}] \, drdsdt \quad (7.28)$$

Um den Rechenaufwand zu reduzieren, wird das Integral (7.28) numerisch ausgewertet, beispielsweise durch *Gauß-Quadratur* [Bra90]. Die numerische Integration der Matrix  $\underline{\mathbf{K}}^{(m)}$  erfolgt dabei analog zum eindimensionalen Fall elementweise.

Die Berechnung des Lastvektors  $\vec{\mathbf{R}}$  erfolgt, ebenfalls zur Reduktion des Rechenaufwandes, durch numerische Integration der Volumen- bzw. Flächenintegrale in (7.9).

## 7.2 Beispiele

Die folgenden Beispielrechnungen sind sämtlich mit dem kommerziellen Finite-Elemente Programm MARC [MAR94] durchgeführt worden. Zu diesem Zweck wurde das in Kap. 3 vorgestellte INTERATOM-Modell in das Programm MARC implementiert<sup>1</sup>.

Als Schnittstelle zum Einbau beliebiger Stoffgesetze gemäß (7.20) dient dabei die Benutzer-Unterroutine UVSCPL [MAR94]. Sie erlaubt die Berechnung der aktuellen Spannungen gemäß (7.20) zu einer vorgegebenen inkrementellen Elastizitätsmatrix  $\underline{C}$  und einem vorgegebenen Dehnungsinkrement  $\Delta \underline{\epsilon}$ . Das benutzereigene Programm muß dazu in der Lage sein, durch Zeitintegration der konstitutiven Gleichungen (siehe Kap. 5.1.1) am Ende eines Zeitinkrementes das erforderliche inelastische Dehnungsinkrement  $\Delta \underline{\epsilon}^{plast.}$  zur Verfügung zu stellen. Zur Sicherstellung der Stabilität der Integration wurde dazu ein implizites Verfahren, die Trapezregel (siehe Kap. 5.1.1), gewählt.

Weiterhin ist in der Routine zu gewährleisten, daß die aktuelle Fließgrenze des Materials innerhalb einer vorgegebenen Genauigkeit auf jedem inelastischen Lastpfad eingehalten wird. Dazu diente die in (7.21) und (7.22) beschriebene Vorgehensweise.

Die Erstellung der Finite-Elemente-Netze mit den in Abb. 7.2 dargestellten isoparametrischen 8-Knoten-Elementen erfolgte mit dem kommerziellen Praeprozessor MENTAT [MAR94]. Die Berechnung der Steifigkeitsmatrizen (7.28) der Elemente sowie der Lastvektoren (7.9) und die anschließende Newton-Raphson-Iteration (7.18) wurde vom Hauptprogramm MARC übernommen.

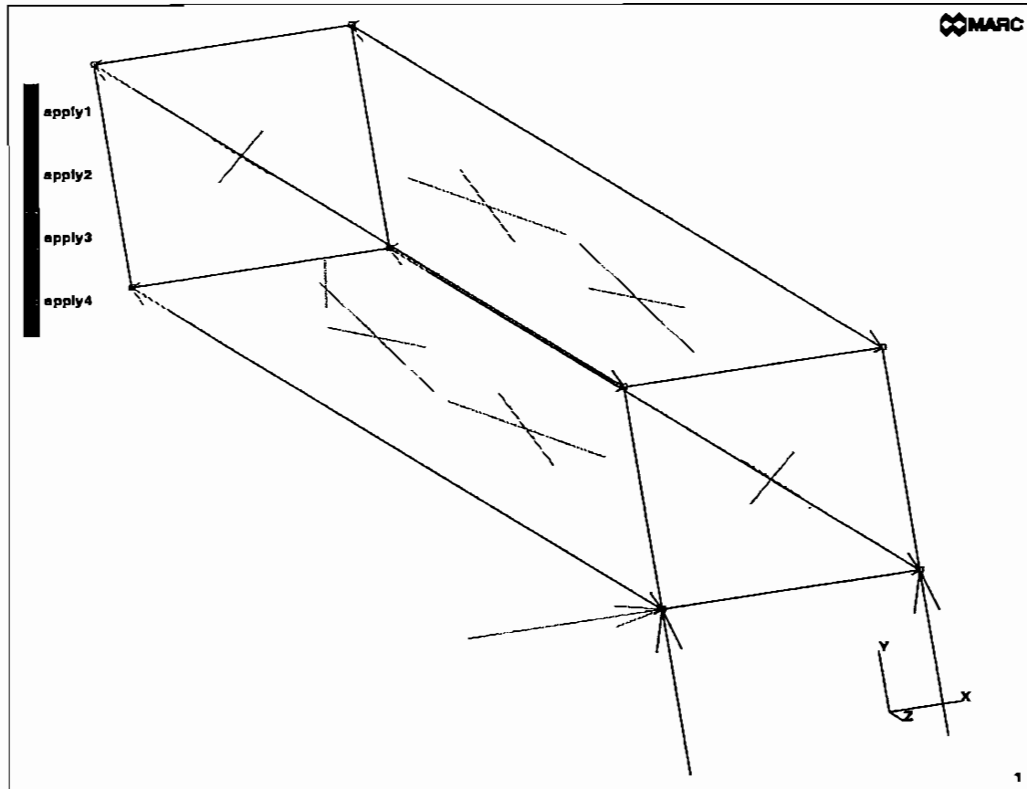
### 7.2.1 Isoparametrisches 8-Knoten Element unter zyklischer Belastung

Das erste Beispiel dient in erster Linie zur Verifikation der Implementierung des INTERATOM-Modells in das Programm MARC. Zu diesem Zweck wurde ein einzelnes 8-Knoten-Element gewählt und einer zyklischen, weggesteuerten Belastung unterworfen, so daß der sich einstellende Spannungszustand homogen bleibt.

Dadurch erhält man prinzipiell dieselben Ergebnisse wie bei den Verifikationsrechnungen in Kap. 3.2. Die Güte der Übereinstimmung zwischen der FE-Rechnung und der reinen Zeitintegration des INTERATOM-Modells in Kap. 3.2 verifiziert die Implementierung.

---

<sup>1</sup>Zu Details der Implementierung zeitunabhängiger Plastizitätsmodelle in Finite-Elemente Programme siehe z.B. [KK76]



**Abb. 7.3:** Isoparametrisches 8-Knoten-Element

In Abb. 7.3 dargestellt ist das isoparametrische 8-Knoten-Element mit den vorgegebenen Verschiebungen. Das Element hat die Abmaße  $10\text{mm} \cdot 10\text{mm} \cdot 100\text{mm}$ . Vorgeschrieben sind auf dem rechten Rand die Verschiebungen in  $x, y, z$ -Richtung ohne Behinderung der Querkontraktion des Elementes, so daß keine Spannungskomponenten aus Zwängung entstehen können. Auf dem linken Rand sind die Verschiebungen in  $z$ -Richtung vorgeschrieben, und zwar gemäß des Lastpfades in Abb. 7.4.



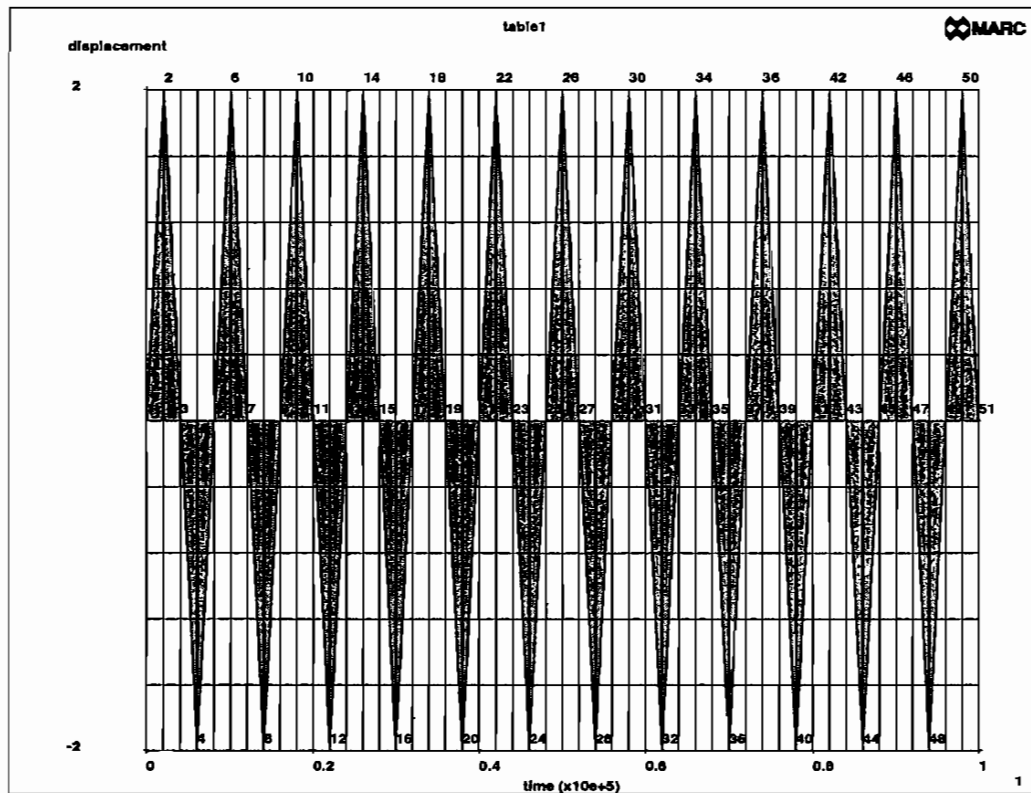


Abb. 7.4: Lastpfad

Aus den Abmaßen des Elementes folgt unmittelbar eine maximale Dehnung während der Belastung von  $\varepsilon_{\max} = 2\%$ . Die Dehngeschwindigkeit im Zyklus beträgt  $\dot{\varepsilon} = 10^{-5} \frac{1}{s}$ .

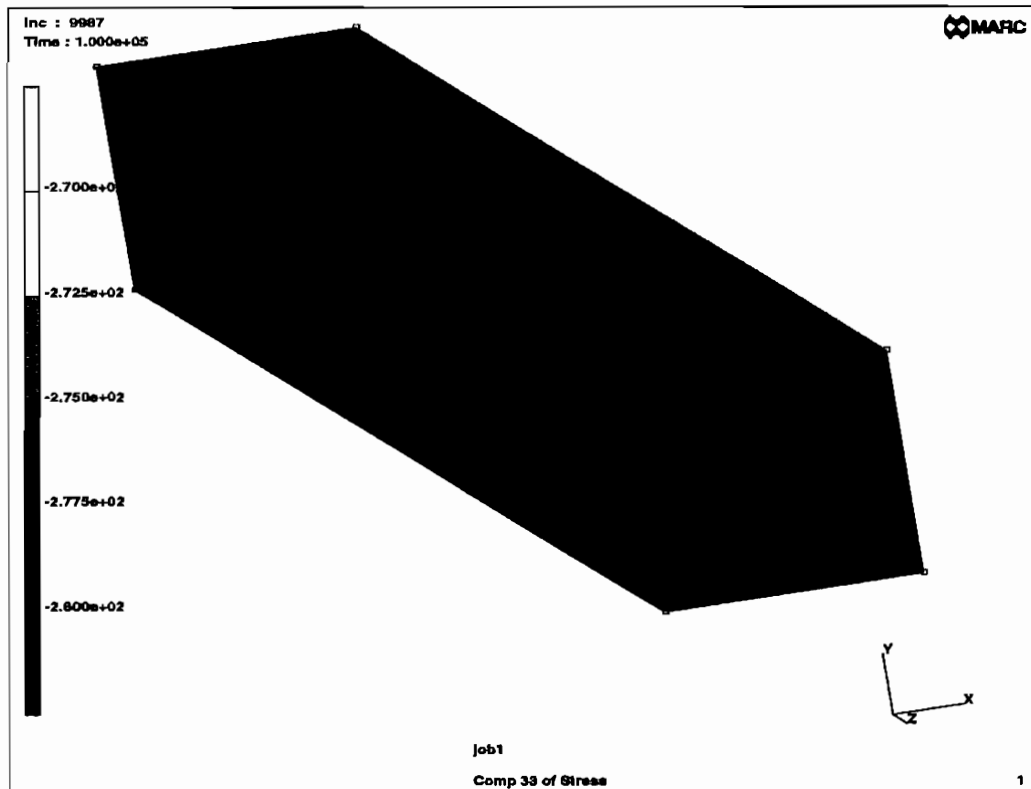


Abb. 7.5: Normalspannungsverteilung im Element

Am Ende der Belastung erhält man eine Normalspannungsverteilung im Element gemäß Abb. 7.5. Es zeigt sich eine homogene Spannungsverteilung, wie sie aus den vorgegebenen Randbedingungen folgen muß. In Abb. 7.6 ist die Verteilung der Verfestigungsvariablen  $\kappa$  des INTERATOM-Modells dargestellt, hier zeigt sich ebenfalls eine homogene Verteilung.

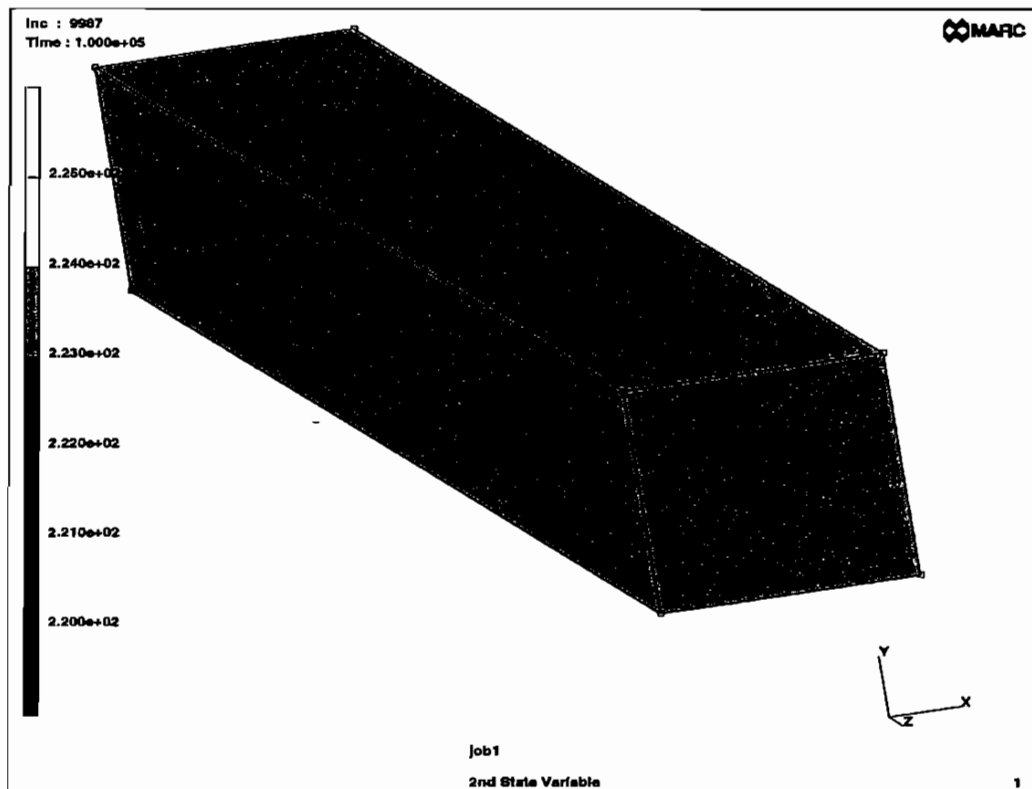
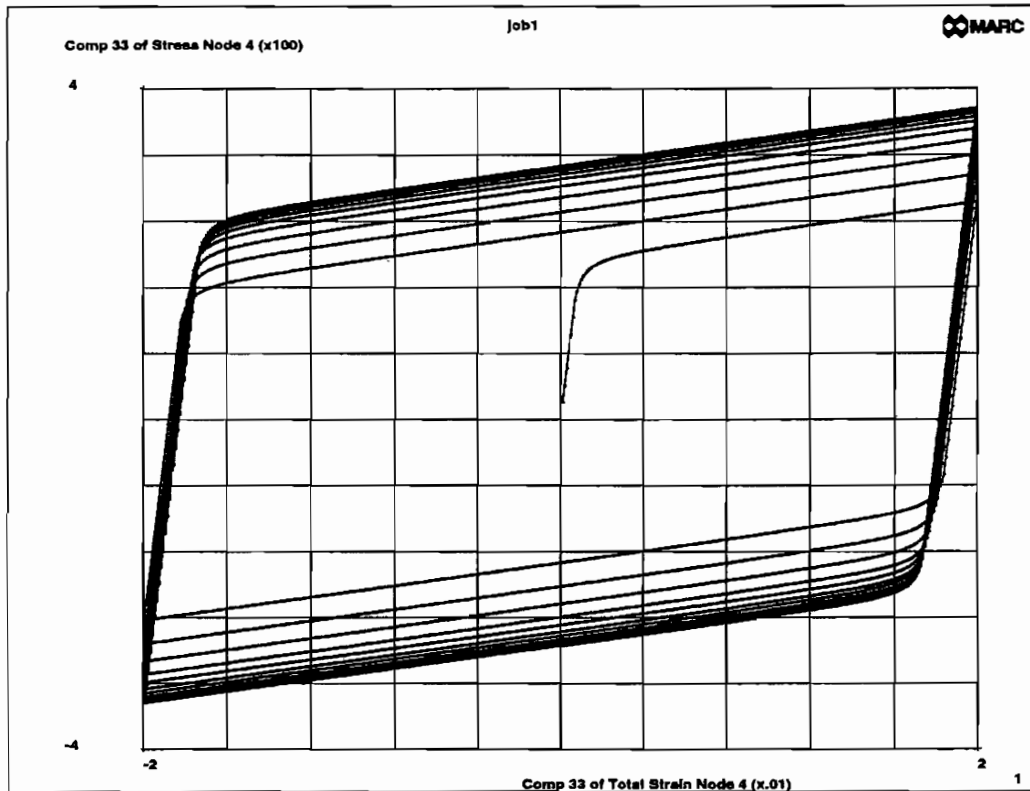


Abb. 7.6: Isotrope Verfestigung im Element

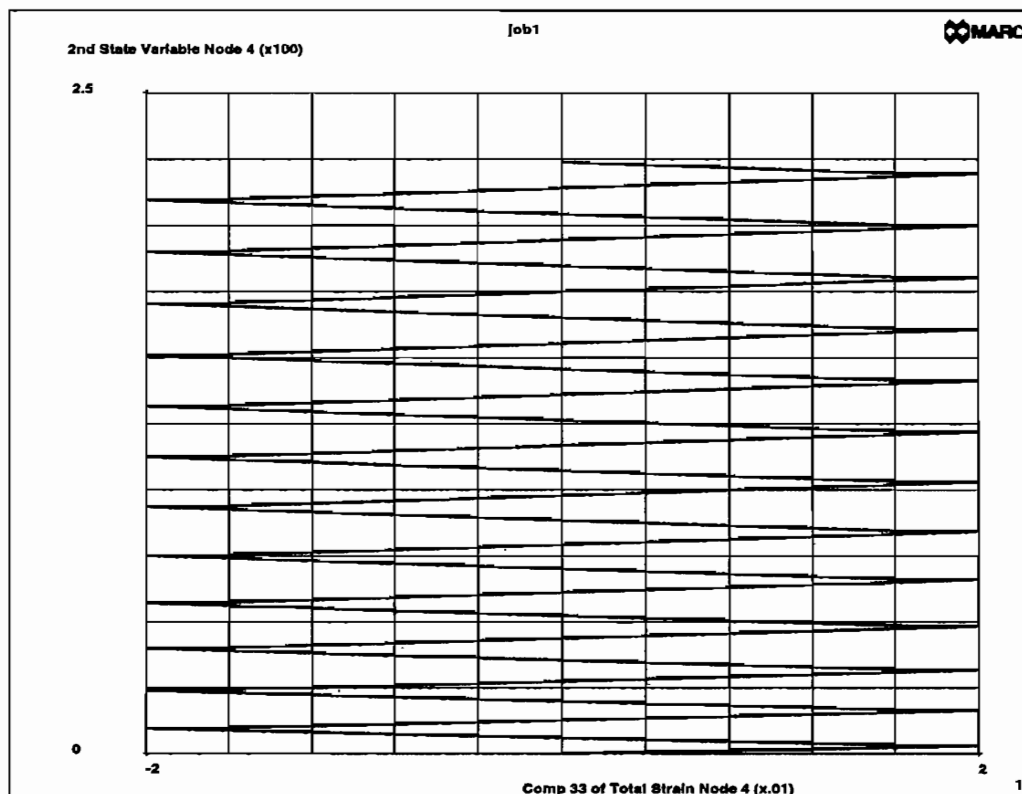
Zur Überprüfung der Übereinstimmung der FE-Rechnung mit der reinen Stoffgesetz-Integration aus Kap. 3.2 ist in Abb. 7.7 die Entwicklung der Normalspannung in einem Knoten während der zyklischen Belastung aufgetragen. Da die Verteilung der Spannung homogen ist, gilt Abb. 7.7 für alle Knoten des Elementes.



**Abb. 7.7:** Entwicklung der Normalspannung während der Belastung

In Abb. 7.7 erkennt man die ausgezeichnete Übereinstimmung der Kurve mit der in Abb. 3.4 dargestellten zyklischen Verfestigung. Ebenso zu beachten ist die sehr gute Erfassung der aktuellen Fließgrenze des Materials. Dies zeigt die Güte der in (7.21) und (7.22) beschriebenen Vorgehensweise.

Als letztes ist die Entwicklung der isotropen Verfestigungsvariablen  $\kappa$  zu überprüfen. Diese wird wieder an einem Knoten aufgenommen, der wegen der Homogenität für alle Knoten gilt.



**Abb. 7.8:** Entwicklung der isotropen Verfestigungsvariablen  $\kappa$

In Abb. 7.8 zeigt sich wiederum eine ausgezeichnete Übereinstimmung der Kurve mit der in Abb. 3.6 dargestellten Entwicklung der Verfestigung, so daß insgesamt die Implementierung des INTERATOM-Modells in das kommerzielle FE-Programm MARC verifiziert ist.

### 7.2.2 Zugprobe in Anlehnung an DIN 50125

Das im folgenden beschriebene Beispiel diente in Kap. 4.1 zur Rechtfertigung der einaxialen Vorgehensweise zur Identifikation der Modellparameter des INTERATOM-Modells. Die grundsätzliche Voraussetzung einer solchen Vorgehensweise ist die Homogenität der Spannungs-/Dehnungszustände im Meßbereich. Liefert die Finite-Elemente-Analyse eine inhomogene Verteilung der Meßwerte, so muß ein anderes Vorgehen zur Ermittlung der Modellparameter gewählt werden [ADF<sup>+</sup>96].

Eine homogene Spannungsverteilung kann man beispielsweise in schlanken Zugstäben oder in dünnwandigen Rohren erwarten. Aus diesem Grund sind von *Wichtmann* [Wic96] Zugproben in Anlehnung an die DIN 50125, Form C, verwendet worden. Die numerische Simulation einer solchen Probe im Zugversuch zeigt die Notwendigkeit der Verwendung externer Wegaufnehmer zur Messung der Verlängerung der Probe, wie sie von *Westerhoff* [Wes95] benutzt wurden. Eine andere Möglichkeit der Erfassung von Inhomogenitäten im Meßbereich stellt die Ermittlung von Korrekturfaktoren dar; diese Vorgehensweise ist in [Wic96] beschrieben.

Die Geometrie der Zugprobe ist in Abb. 7.9 dargestellt.

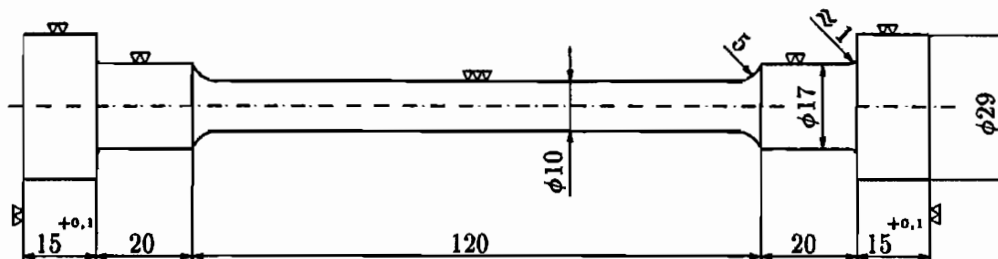


Abb. 7.9: Geometrie der Zugprobe (aus [Wic96])

Die Probe nach Abb. 7.9 besteht aus Einspannköpfen zur Fixierung der Probe in der Prüfmaschine sowie aus der eigentlichen Rundprobe zur Messung der plastischen Verformung im Zugversuch. Die folgenden Bilder verdeutlichen die homogene Spannungsverteilung im Mittelstück der Probe, so daß die von *Westerhoff* [Wes95] ermittelten Meßwerte hinreichend repräsentativ für das Verhalten des Materials sind.

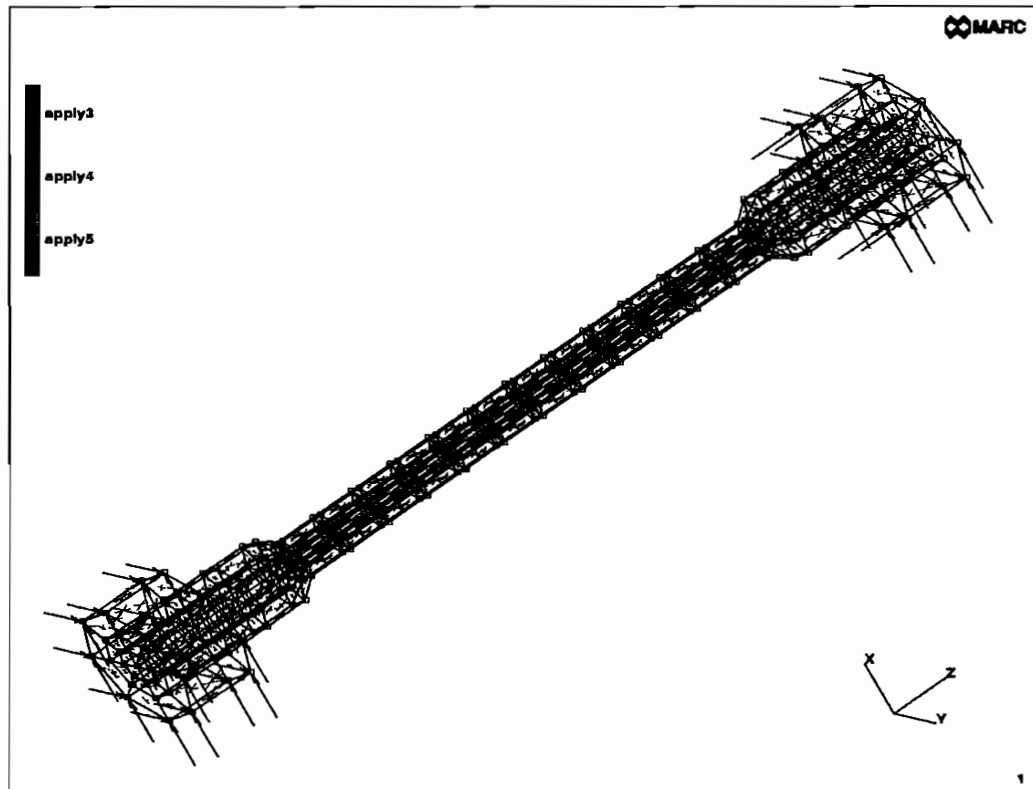


Abb. 7.10: FE-Diskretisierung der Zugprobe

In Abb. 7.10 dargestellt ist die Diskretisierung der Zugprobe aus Abb. 7.9 mit anfänglich 256 isoparametrischen 8-Knoten-Volumenelementen. Die Diskretisierung wurde noch verfeinert, so daß die im folgenden präsentierten Ergebnisse mit 2048 Elementen ermittelt wurden. Zur realistischen Erfassung der Einspannung der Probe in die Prüfmaschine gemäß Abb. 4.2 ist zu berücksichtigen, daß die Einspannköpfe der Probe durch die Vorspannung der Schrauben der Halterung fixiert werden und daß entsprechend das Material in der Mitte der Köpfe frei fließen kann. Aus diesem Grund werden nur an den Randknoten der Köpfe die Verschiebungen in  $x, y$ -Richtung vorgeschrieben. Ebenso wird die Last, also die Verschiebung in  $z$ -Richtung, nur an den Knoten auf der Innenseite der Köpfe

vorgeschrieben.

Die Belastung erfolgt mit einer Dehngeschwindigkeit von  $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \frac{1}{s}$ . Im Mittelstück der Probe ergibt sich eine maximale Dehnung während der Belastung von  $\epsilon_{\max} = 2\%$ .

Am Ende der Belastung erhält man eine Normalspannungsverteilung in der Probe gemäß Abb. 7.11. Man erkennt eine homogene Spannungsverteilung in der Probenmitte, so daß in diesem Bereich aufgenommene Meßwerte die Voraussetzung der einaxialen Anpassung gemäß Kap. 4.1.2 erfüllen.

Im Übergang zu den Einspannköpfen zeigt sich eine stark inhomogene Spannungsverteilung. In den Köpfen selbst ist die Spannung homogen, bis auf den Bereich in der Mitte der Köpfe, der durch Einzug des Materials während des Zugversuches Zugspannungen aufweist. Dies verdeutlicht die oben erwähnte Einspannsituation.

Ein Fließen des Materials findet nur in der Probenmitte statt, dies wird deutlich an der Darstellung der Verteilung der isotropen Verfestigung in der Probe in Abb. 7.11.



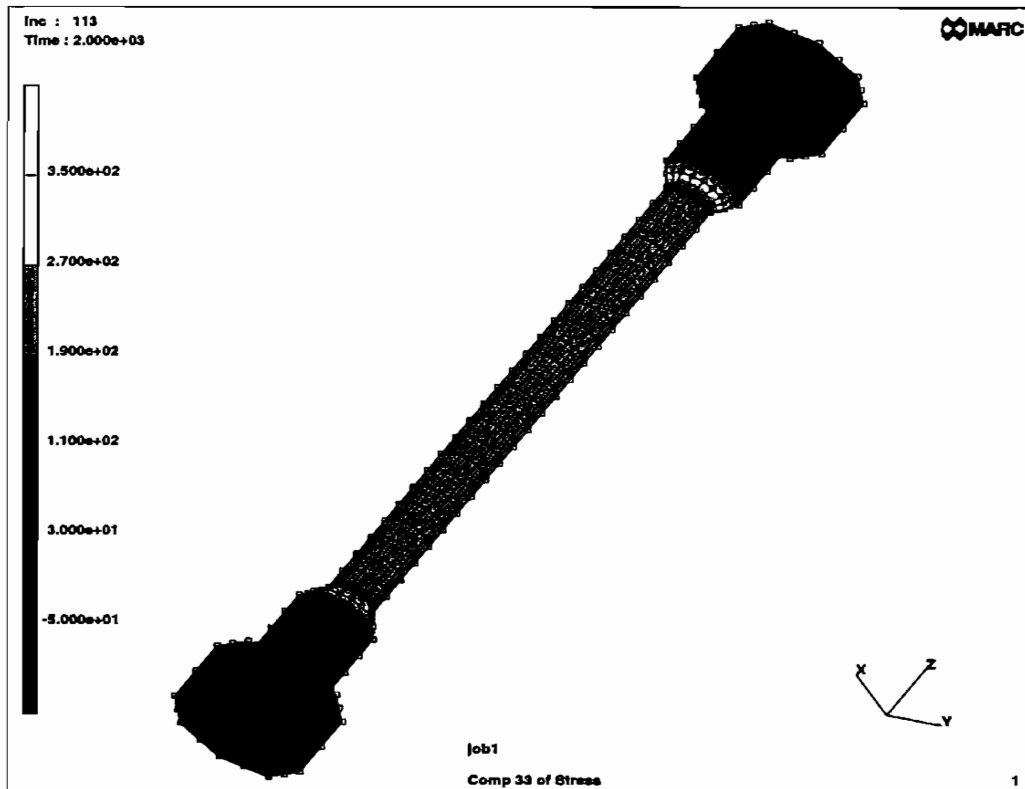
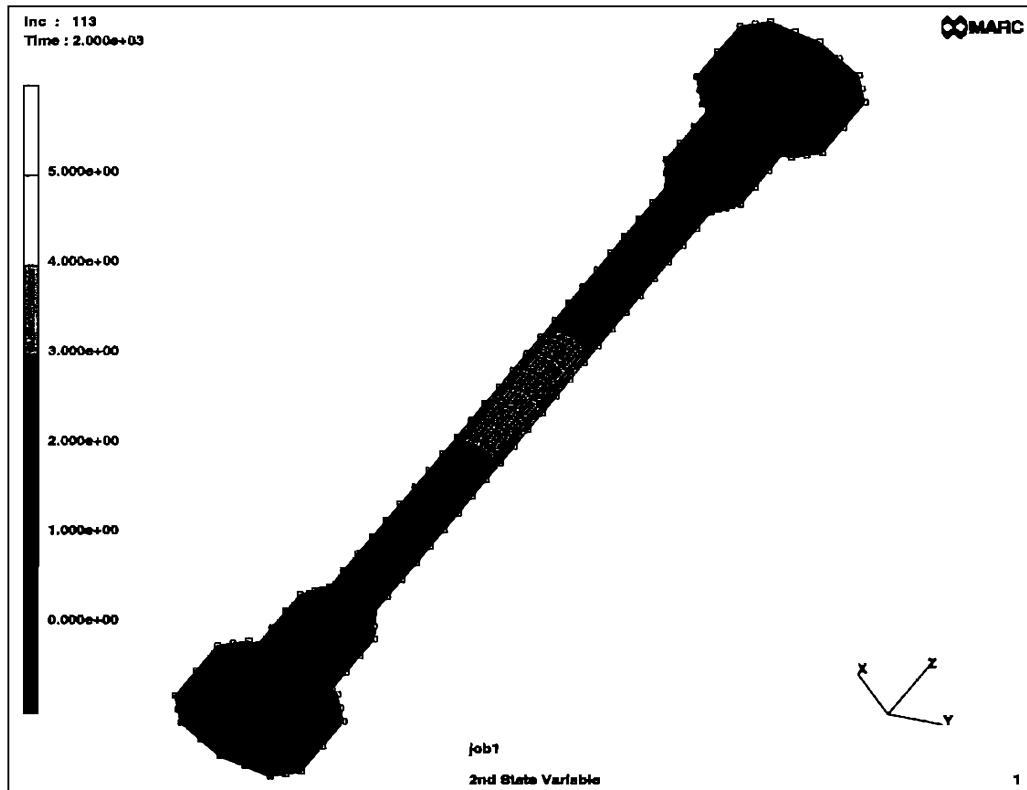


Abb. 7.11: Normalspannungen in der Probe

In Abb. 7.11 zeigt sich, daß die Einspannköpfe während des gesamten Zugversuches rein elastisch bleiben, so daß ihre elastische Verformung bei einer Bestimmung der Verlängerung der Probe aus der Verschiebung der Einspannungen das Meßergebnis stark beeinträchtigen würde. Dies verifiziert den von Westerhoff [Wes95] gewählten Weg zur Bestimmung der Meßwerte.



**Abb. 7.12:** Isotrope Verfestigung in der Probe

Zum Vergleich mit den in Kap. 6.2 vorgestellten monotonen Spannungs-Dehnungskurven ist in Abb. 7.13 der Verlauf der Normalspannung über der Dehnung in der Probenmitte aufgetragen. Aufgrund der Homogenität lassen sich dieselben Kurven durch reine Zeitintegration des Stoffgesetzes bereitstellen. Der Vergleich mit den Verifikationsrechnungen in Kap. 3.2 zeigt entsprechend eine ausgezeichnete Übereinstimmung.

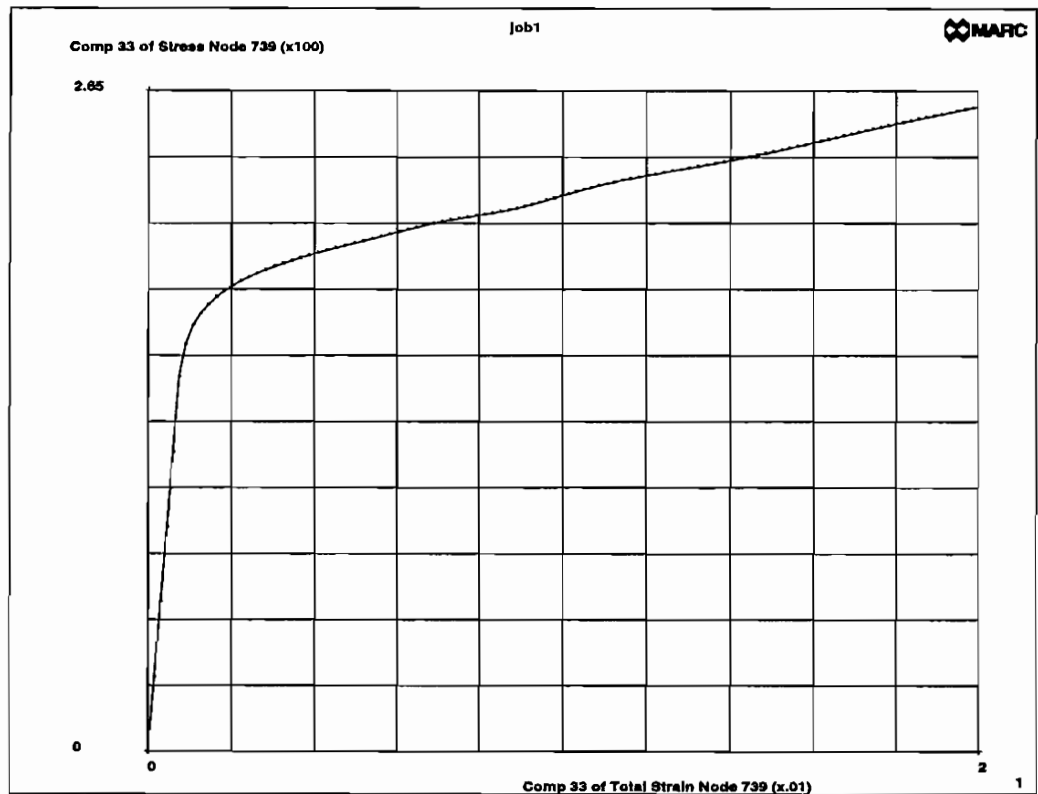


Abb. 7.13: Normalspannungsverlauf im homogenen Bereich der Probe

## 8. Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurden die Parameter vereinheitlichter Werkstoffmodelle mit der Fehlerquadratmethode aus den Daten von Grundlagenexperimenten geschätzt. Zum Einsatz kamen stochastische und deterministische Optimierungsverfahren. Dabei lieferten die stochastischen Algorithmen die Vorgaben für die deterministische Optimierung. Die stochastischen Verfahren wurden basierend auf dem master-slave-Konzept parallelisiert. Dadurch ließ sich die Anzahl der Zielfunktionsaufrufe, und damit die Chance, das globale Optimum zu finden, um ein vielfaches erhöhen. Aufgrund der stark unterschiedlichen Größenordnung der Parameter, die sich noch dazu im Verlauf der Anpassung stark ändern kann, ließen sich beide Verfahrenstypen -deterministische und stochastische- nur durch den Einbau einer dynamischen Skalierung erfolgreich anwenden. Ebenso erforderte die Sensitivitätsanalyse der Parameter eine Berücksichtigung der Größenordnungsproblematik. Es zeigte sich, daß das Optimierungsproblem der Parameter durch die Kombination von deterministischer und stochastischer Vorgehensweise erfolgreich zu lösen ist.

Ein Schwerpunkt der Arbeit bestand in der Bereitstellung der numerischen Vergleichswerte zur Optimierung. Dabei zeigte sich anhand von ausgewählten Beispielen, daß explizite Verfahren, unabhängig von ihrer Genauigkeit, aufgrund der numerischen Steifheit der konstitutiven Gleichungen nicht dazu in der Lage sind, die konstitutiven Gleichungen über einen weiten Bereich des Parameterraumes und mit vertretbaren Rechenzeiten stabil zu integrieren. Ein Einsatz dieser Verfahren würde aber auch die Sensitivitätsanalyse der Parameter zerstören, so daß sich die Notwendigkeit ergab, implizite Verfahren zur Integration der konstitutiven Gleichungen zu verwenden. Diese Verfahren erlaubten eine weite Variation der Modellparameter bei großen Zeitschrittweiten ohne numerische Probleme, so daß sich die oben genannten Optimierungsverfahren erfolgreich anwenden ließen.

Eine Anpassung der Modellparameter an Versuche ist erst vollständig, wenn man den Einfluß der Meßfehler auf die Kenntnis der Parameter kennt. Daher bestand ein weiterer wesentlicher Punkt der Arbeit darin, diese Unsicherheiten abzuschätzen. Zum Einsatz kamen dabei sowohl die aus der Least-Squares Anpassung folgende Kovarianzmatrix als auch simulierte Meßdaten, die die statistische Grundlage für die Berechnung der Vertrauensbereiche der Parameter lieferten. Durch die statistische Analyse wurden lineare Abhängigkeiten zwischen den Modellparametern aufgedeckt, die sich durch die Hinzunahme weiterer Experimente in den Anpassungsprozeß reduzieren ließen. Ebenso ließen sich die Streuungen der Modellparameter verkleinern. Dadurch ließen sich Parametersätze erzielen, mit denen eine Prognose des Deformationsverhaltens realer Bauteile möglich ist.

Zur konkreten Vorhersage des Deformationsverhaltens komplexer Strukturen dient in dieser Arbeit die Finite-Elemente-Methode. Um die Anwendbarkeit der Werkstoffmodelle für die Praxis zu dokumentieren, wurde auf ein kommerzielles Finite-Elemente-Programm mit

weiter Verbreitung in der Industrie zurückgegriffen. Um auch bei komplexen Strukturen kurze Rechenzeiten zu ermöglichen, was große Zeitschrittweiten voraussetzt, wurde zur Integration der konstitutiven Gleichungen wiederum ein implizites Verfahren eingesetzt. Der Vergleich der Finite-Elemente-Berechnungen mit Verifikationsrechnungen zeigt die Güte der Prognosen.

Die statistische Analyse der Modellparameter zeigt deutlich Schwächen in der Formulierung der Materialfunktionen auf. Daher wurde die im erweiterten INTERATOM-Modell enthaltene Materialfunktion  $B$ , welche das Kriechverhalten des Modells steuert, neu formuliert. Da die Korrelationen zwischen den Modellparametern gezielte Hinweise auf Verbesserungen geben, steht mit dem in dieser Arbeit aufgezeigten Weg zur Identifikation der Parameter ein adäquates Handwerkszeug zur Verfügung, mit dem in vertretbarer Zeit durch -unter Umständen mehrmalige- Umformulierung der Materialfunktionen und anschließende Neuanpassung der Materialparameter eine geeignete Modellformulierung gefunden werden kann.

Eine weitere starke Verkleinerung der Rechenzeiten bei der Anpassung der Parameter läßt sich durch eine stärkere Ausnutzung der im Anpassungsprozeß enthaltenen parallelen Abläufe erzielen. So bietet insbesondere die Sensitivitätsanalyse der Modellparameter eine Parallelisierungsmöglichkeit innerhalb des master-slave-Konzeptes, so daß sich unter Einsatz des bewährten PVM-Systems die vorhandene Rechnerkapazität voll ausschöpfen läßt. Ebenso läßt sich die Berechnung von Konfidenzintervallen mit Hilfe simulierter Meßdaten hervorragend auf der Basis des master-slave-Konzeptes parallelisieren, wodurch innerhalb sehr kurzer Rechenzeiten eine breite statistische Grundlage für die Parameter geschaffen werden kann.

Aufgrund der statistischen Analyse der Materialparameter erscheint es angebracht, eine Reihe von weiteren Grundlagenexperimenten mit dem Probenmaterial durchzuführen. Als Beispiel sei hier die Torsionsbelastung dünnwandiger Hohlzylinderproben genannt. Die so gewonnenen Meßdaten lassen sich in das Least-Squares Problem miteinbeziehen, so daß man insgesamt zu besser durch Meßinformationen abgestützten Parametern gelangt, was sich in einer deutlichen Verkleinerung der Standardabweichungen und Korrelationen der Parameter äußern sollte.

Ein wesentlicher Aspekt der Anpassungsproblematik ist der Vergleich zwischen den aus homogenen Versuchen gewonnen Parametern und den bei gleichem Probenmaterial durch inhomogene Versuche identifizierten Parametern; zum einen sollte es mit den auf den beiden unterschiedlichen Wegen gewonnenen Parametersätzen möglich sein, die Deformation der jeweils anderen Proben zu simulieren, zum anderen sollten sich die Parameter bei einer erfolgreichen Anpassung nicht allzusehr voneinander unterscheiden. Im Falle, daß es eine eindeutige Lösung des Identifikationsproblems gibt, sollte sich dieser Parametersatz auf beiden Wegen finden lassen. Da ein derartiger Vergleich bisher nicht veröffentlicht worden ist, läßt sich über die Eignung der beiden oben genannten Wege zur Identifikation der Modellparameter keine Aussage treffen.

## A. Jacobi-Matrizen

Das vorliegende Kapitel enthält die zu den nichtlinearen Gleichungssystemen (5.9) gehörenden Jacobi-Matrizen des INTERATOM-Modells gemäß (5.11) für die in dieser Arbeit beschriebenen Lastfälle.

### A.1 Einaxiale Stoffgesetzformulierungen

#### A.1.1 Elastisch-plastisches Dgl.-System

Elastisch-plastisches Dgl.-System nach Gleichung (3.61):

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} \sigma \\ \varepsilon \\ \xi \\ \kappa \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

$$J_{11} = 1$$

$$J_{12} = 0$$

$$J_{13} = 0$$

$$J_{14} = -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \dot{\varepsilon} \cdot \frac{\partial E_t(\kappa)}{\partial \kappa}$$

$$J_{21} = 0$$

$$J_{22} = 1$$

$$J_{23} = 0$$

$$J_{24} = 0$$

$$J_{31} = 0$$

$$J_{32} = 0$$

$$J_{33} = 1$$

$$J_{34} = -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \dot{\varepsilon} \cdot \left[ \frac{\partial c(\kappa)}{\partial \kappa} \cdot \left( 1 - \frac{E_t(\kappa)}{E} \right) + c(\kappa) \cdot \left( -\frac{1}{E} \cdot \frac{\partial E_t(\kappa)}{\partial \kappa} \right) \right]$$

$$J_{41} = 0$$

$$J_{42} = 0$$

$$J_{43} = 0$$

$$J_{44} = 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot \dot{\varepsilon} \cdot \left[ \frac{\frac{3}{2} \cdot \frac{\partial g(\kappa)}{\partial \kappa}}{2 \cdot \sqrt{\frac{3}{2} \cdot g(\kappa)}} \cdot \left( 1 - \frac{E_t(\kappa)}{E} \right) + \sqrt{\frac{3}{2} \cdot g(\kappa)} \cdot \left( -\frac{1}{E} \cdot \frac{\partial E_t(\kappa)}{\partial \kappa} \right) \right]$$

(A.2)

Ableitung der Materialfunktion  $g(\kappa)$  nach Gleichung (3.45):

$$\frac{\partial g(\kappa)}{\partial \kappa} = \frac{2}{3} \cdot \sigma_F^2 \cdot c_1 \cdot (c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa} \quad (\text{A.3})$$

Ableitung der Materialfunktion  $c(\kappa)$  nach Gleichung (3.46):

$$\frac{\partial c(\kappa)}{\partial \kappa} = \frac{1}{3} \cdot \sigma_F^2 \cdot c_1^2 \cdot (c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa} + \frac{\frac{2}{3} \cdot \frac{\partial E_t(\kappa)}{\partial \kappa}}{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)^2} \quad (\text{A.4})$$

Ableitung des Tangentenmoduls  $E_t = E_t(\varepsilon(\Delta(\kappa)))$  mit der Kettenregel:

$$\frac{\partial E_t(\varepsilon(\Delta(\kappa)))}{\partial \kappa} = \frac{\partial E_t(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \cdot \frac{\partial \varepsilon(\Delta)}{\partial \Delta} \cdot \frac{\partial \Delta(\kappa)}{\partial \kappa} \quad (\text{A.5})$$

Ableitung der Materialfunktion  $\Delta(\kappa)$  nach Gleichung (3.48):

$$\frac{\partial \Delta(\kappa)}{\partial \kappa} = \frac{p}{\sqrt{-(c_2 - 1) \cdot e^{-c_1 \cdot \kappa} + c_2}} \quad (\text{A.6})$$

Ableitung der Materialfunktion  $\varepsilon(\Delta)$  nach Gleichung (3.53):

$$\frac{\partial \varepsilon(\Delta)}{\partial \Delta} = -\frac{1}{2 \cdot \sigma_F \cdot \left(\frac{a}{E} - 1\right)} + \frac{\frac{\left(\frac{b}{E} - d + \frac{\Delta}{\sigma_F}\right)}{2 \cdot \sigma_F \cdot \left(\frac{a}{E} - 1\right)^2} - \frac{d}{\sigma_F \cdot \left(\frac{a}{E} - 1\right)}}{2 \cdot \sqrt{\frac{\left(\frac{b}{E} - d + \frac{\Delta}{\sigma_F}\right)^2}{4 \cdot \left(\frac{a}{E} - 1\right)^2} - \frac{\left(\frac{\varepsilon}{E} + \frac{\Delta \cdot d}{\sigma_F}\right)}{\frac{a}{E} - 1}}} \quad (\text{A.7})$$

Ableitung der Materialfunktion  $E_t(\varepsilon)$  nach Gleichung (3.54):

$$\frac{\partial E_t(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \frac{2 \cdot (d \cdot (a \cdot d - b) + c)}{(\varepsilon + d)^3} \quad (\text{A.8})$$

### A.1.2 Elastisch-viskoplastisches Dgl.-System

Elastisch-viskoplastisches Dgl.-System nach Gleichung (3.79):

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} \sigma^* \\ \varepsilon \\ \xi \\ \kappa \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

Transformation der Spannung  $\sigma$ :

$$\begin{aligned} \sigma^* &= \sigma - E \cdot \varepsilon \\ \dot{\sigma}^* &= \dot{\sigma} - E \cdot \dot{\varepsilon} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned}
J_{11} &= 1 + \frac{\Delta t_n}{2} \cdot E \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \sigma^*} \\
J_{12} &= \frac{\Delta t_n}{2} \cdot E \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \varepsilon} \\
J_{13} &= \frac{\Delta t_n}{2} \cdot E \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \xi} \\
J_{14} &= \frac{\Delta t_n}{2} \cdot E \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \kappa} \\
J_{21} &= 0 \\
J_{22} &= 1 \\
J_{23} &= 0 \\
J_{24} &= 0 \\
J_{31} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot c(\kappa) \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \sigma^*} \\
J_{32} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot c(\kappa) \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \varepsilon} \\
J_{33} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot c(\kappa) \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \xi} \\
J_{34} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \left[ \frac{\partial c(\kappa)}{\partial \kappa} \cdot \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa) + c(\kappa) \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \kappa} \right] \\
J_{41} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{g(\kappa)} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \sigma^*} \\
J_{42} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{g(\kappa)} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \varepsilon} \\
J_{43} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{g(\kappa)} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \xi} \\
J_{44} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{\frac{\partial g(\kappa)}{\partial \kappa}}{2 \cdot \sqrt{g(\kappa)}} \cdot \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa) + \sqrt{g(\kappa)} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \kappa} \right]
\end{aligned} \tag{A.11}$$

Ableitung der Materialfunktion  $\Phi(\Lambda) = \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)$  nach Gleichung (3.76):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \sigma^*} &= 2 \cdot \gamma \cdot \frac{\frac{\partial \Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \sigma^*}}{E} \cdot \left( 1 + \frac{\Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{c_4} \right)^{c_5} \\
&\quad + 2 \cdot \gamma \cdot \frac{\Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{E} \cdot c_5 \cdot \left( 1 + \frac{\Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{c_4} \right)^{c_5-1} \cdot \frac{\partial \Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \sigma^*} \\
\frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \varepsilon} &= 2 \cdot \gamma \cdot \frac{\frac{\partial \Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \varepsilon}}{E} \cdot \left( 1 + \frac{\Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{c_4} \right)^{c_5}
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& + 2 \cdot \gamma \cdot \frac{\Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{E} \cdot c_5 \cdot \left(1 + \frac{\Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{c_4}\right)^{c_5-1} \cdot \frac{\frac{\partial \Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \varepsilon}}{c_4} \\
\frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \xi} & = 2 \cdot \gamma \cdot \frac{\frac{\partial \Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \xi}}{E} \cdot \left(1 + \frac{\Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{c_4}\right)^{c_5} \quad (\text{A.12}) \\
& + 2 \cdot \gamma \cdot \frac{\Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{E} \cdot c_5 \cdot \left(1 + \frac{\Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{c_4}\right)^{c_5-1} \cdot \frac{\frac{\partial \Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \xi}}{c_4} \\
\frac{\partial \Phi(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \kappa} & = 2 \cdot \gamma \cdot \frac{\frac{\partial \Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \kappa}}{E} \cdot \left(1 + \frac{\Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{c_4}\right)^{c_5} \\
& + 2 \cdot \gamma \cdot \frac{\Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{E} \cdot c_5 \cdot \left(1 + \frac{\Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{c_4}\right)^{c_5-1} \cdot \frac{\frac{\partial \Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \kappa}}{c_4}
\end{aligned}$$

Ableitung der verallgemeinerten Überspannung  $\Lambda$  nach Gleichung (3.79):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \sigma^*} & = \frac{\frac{2}{3} \cdot \left(\sigma - \frac{3}{2} \cdot \xi\right)}{\sqrt{\left(\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi\right) \cdot \left(\sigma - \frac{3}{2} \cdot \xi\right)}} \\
\frac{\partial \Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \varepsilon} & = \frac{\frac{2}{3} \cdot E \cdot \left(\sigma - \frac{3}{2} \cdot \xi\right)}{\sqrt{\left(\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi\right) \cdot \left(\sigma - \frac{3}{2} \cdot \xi\right)}} \\
\frac{\partial \Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \xi} & = \frac{-\left(\sigma - \frac{3}{2} \cdot \xi\right)}{\sqrt{\left(\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi\right) \cdot \left(\sigma - \frac{3}{2} \cdot \xi\right)}} \quad (\text{A.13}) \\
\frac{\partial \Lambda(\sigma^*, \varepsilon, \xi, \kappa)}{\partial \kappa} & = -\frac{\frac{\partial g(\kappa)}{\partial \kappa}}{2 \cdot \sqrt{g(\kappa)}}
\end{aligned}$$

Elastisch-viskoplastisches Dgl.-System nach Gleichung (3.90):

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} \sigma \\ \bar{\sigma} \\ \xi \\ \kappa \end{pmatrix} \quad (\text{A.14})$$

Im folgenden werden die Abkürzungen

$$\begin{aligned}
f_1 & = \dot{\varepsilon} - \frac{B \cdot \left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Phi \\
f_2 & = 1 + A \cdot \frac{(E - E_t)}{E_t} \\
f_3 & = E \cdot \frac{\partial A}{\partial \kappa} + A^2 \cdot \left(\frac{E}{E_t}\right)^2 \cdot \frac{\partial E_t}{\partial \kappa}
\end{aligned}$$

verwendet.

$$\begin{aligned}
 J_{11} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{E \cdot \left( -\frac{(1-\frac{E_t}{E})}{E_t} \cdot \left( \frac{\partial B}{\partial \sigma} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + B \right) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} \right)}{f_2} - \frac{E \cdot f_1 \cdot \frac{\partial A}{\partial \sigma} \cdot \frac{(E-E_t)}{E_t}}{(f_2)^2} \right] \\
 J_{12} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{\frac{B \cdot (E-E_t)}{E_t}}{f_2} - \frac{E \cdot f_1 \cdot \frac{\partial A}{\partial \bar{\sigma}} \cdot \frac{(E-E_t)}{E_t}}{(f_2)^2} \right] \\
 J_{13} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{E \cdot \left( -\frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot \frac{(1-\frac{E_t}{E})}{E_t} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right)}{f_2} - \frac{E \cdot f_1 \cdot \frac{\partial A}{\partial \xi} \cdot \frac{(E-E_t)}{E_t}}{(f_2)^2} \right] \\
 J_{14} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{E \cdot \left( \frac{B \cdot \frac{\partial E_t}{\partial \kappa}}{E_t^2} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} \right)}{f_2} - \frac{E \cdot f_1 \cdot \frac{\frac{\partial A}{\partial \kappa} \cdot (E-E_t) - A \cdot \frac{\partial E_t}{\partial \kappa} \cdot \frac{E}{E_t}}{E_t}}{(f_2)^2} \right] \\
 J_{21} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{E \cdot \left( -\frac{(1-\frac{E_t}{E})}{E_t} \cdot \left( \frac{\partial B}{\partial \sigma} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + B \right) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} \right) \cdot A}{f_2} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{E \cdot f_1 \cdot \frac{\partial A}{\partial \sigma}}{(f_2)^2} + \frac{\partial B}{\partial \sigma} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + B \right] \\
 J_{22} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{E \cdot \left( \frac{B \cdot (1-\frac{E_t}{E})}{E_t} \right) \cdot A}{f_2} + \frac{E \cdot f_1 \cdot \frac{\partial A}{\partial \bar{\sigma}}}{(f_2)^2} \right] \\
 J_{23} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{E \cdot \left( -\frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot \frac{(1-\frac{E_t}{E})}{E_t} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right) \cdot A}{f_2} + \frac{E \cdot f_1 \cdot \frac{\partial A}{\partial \xi}}{(f_2)^2} + \frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \right] \\
 J_{24} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{E \cdot \left( B \cdot \frac{\frac{\partial E_t}{\partial \kappa}}{E_t^2} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} \right) \cdot A}{f_2} + \frac{f_3 \cdot f_1}{(f_2)^2} \right] \\
 J_{31} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot c(\kappa) \cdot \frac{(1-\frac{E_t}{E})}{E_t} \cdot \left[ \frac{E \cdot \left( -\frac{(1-\frac{E_t}{E})}{E_t} \cdot \left( \frac{\partial B}{\partial \sigma} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) - B \right) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} \right) \cdot A}{f_2} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{E \cdot f_1 \cdot \frac{\partial A}{\partial \sigma}}{(f_2)^2} + \frac{\partial B}{\partial \sigma} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + B \right] \tag{A.15} \\
 J_{32} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot c(\kappa) \cdot \frac{(1-\frac{E_t}{E})}{E_t} \cdot \left[ \frac{E \cdot \left( \frac{B \cdot (1-\frac{E_t}{E})}{E_t} \right) \cdot A}{f_2} + \frac{E \cdot f_1 \cdot \frac{\partial A}{\partial \bar{\sigma}}}{(f_2)^2} - B \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_{33} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot c(\kappa) \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot \left[ \frac{E \cdot \left(-\frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \xi}\right) \cdot A}{f_2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{E \cdot f_1 \cdot \frac{\partial A}{\partial \xi}}{(f_2)^2} + \frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \right] \\
J_{34} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \left( \frac{E \cdot f_1 \cdot A}{f_2} + B \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \right) \cdot \left( \frac{\partial c(\kappa)}{\partial \kappa} \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} - c(\kappa) \cdot \frac{\frac{\partial E_t}{\partial \kappa}}{E_t^2} \right) \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{f_3 \cdot f_1}{(f_2)^2} + \frac{E \cdot \left( B \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \cdot \frac{\frac{\partial E_t}{\partial \kappa}}{E_t^2} - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \kappa} \right) \cdot A}{f_2} \right) \cdot c(\kappa) \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \right] \\
J_{41} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot \left[ \frac{E \cdot \left(-\frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot \left(\frac{\partial B}{\partial \sigma} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) - B\right) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma}\right) \cdot A}{f_2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{E \cdot f_1 \cdot \frac{\partial A}{\partial \sigma}}{(f_2)^2} + \frac{\partial B}{\partial \sigma} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + B \right] \\
J_{42} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot \left[ \frac{E \cdot \left(\frac{B \cdot \left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t}\right) \cdot A}{f_2} + \frac{E \cdot f_1 \cdot \frac{\partial A}{\partial \sigma}}{(f_2)^2} - B \right] \\
J_{43} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot \left[ \frac{E \cdot \left(-\frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \xi}\right) \cdot A}{f_2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{E \cdot f_1 \cdot \frac{\partial A}{\partial \xi}}{(f_2)^2} + \frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \right] \\
J_{44} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \left( \frac{E \cdot f_1 \cdot A}{f_2} + B \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \right) \cdot \left( \frac{\frac{3}{4} \cdot \frac{\partial g(\kappa)}{\partial \kappa}}{\sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa)} \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} - \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \frac{\frac{\partial E_t}{\partial \kappa}}{E_t^2} \right) \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{f_3 \cdot f_1}{(f_2)^2} + \frac{E \cdot \left( B \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \cdot \frac{\frac{\partial E_t}{\partial \kappa}}{E_t^2} - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \kappa} \right) \cdot A}{f_2} \right) \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \right]
\end{aligned}$$

Ableitung der Materialfunktion  $B(\sigma, \xi)$  nach Gleichung (6.44):

$$\frac{\partial B(\sigma, \xi)}{\partial \sigma} = \frac{\partial d_3}{\partial \sigma} \cdot \tanh \left( d_4 \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot \left( \frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi \right)^2 + d_5 \right)$$

$$\begin{aligned}
& + d_3 \cdot \frac{\frac{\partial d_4}{\partial \sigma} \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi\right)^2 + d_4 \cdot \frac{\left(\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi\right)}{\sqrt{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi\right)^2} + \frac{\partial d_5}{\partial \sigma}}{\left(\cosh \left(d_4 \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi\right)^2 + d_5\right)\right)^2} + \frac{\partial d_6}{\partial \sigma} \\
\frac{\partial d_3(\sigma)}{\partial \sigma} &= p_{32} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} + p_{33} \cdot \frac{4}{3} \cdot \sigma \\
\frac{\partial d_4(\sigma)}{\partial \sigma} &= p_{42} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} + p_{43} \cdot \frac{4}{3} \cdot \sigma \\
\frac{\partial d_5(\sigma)}{\partial \sigma} &= p_{52} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} + p_{53} \cdot \frac{4}{3} \cdot \sigma \\
\frac{\partial d_6(\sigma)}{\partial \sigma} &= p_{62} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} + p_{63} \cdot \frac{4}{3} \cdot \sigma \\
\frac{\partial B(\sigma, \xi)}{\partial \xi} &= d_3 \cdot \frac{d_4 \cdot \frac{\left(\frac{3}{2} \cdot \xi - \sigma\right)}{\sqrt{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi\right)^2}}{\left(\cosh \left(d_4 \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi\right)^2 + d_5\right)\right)^2}
\end{aligned} \tag{A.16}$$

Ableitung der Überspannungsfunktion  $\Phi(\Lambda) = \Phi(\sigma, \xi, \kappa)$  nach Gleichung (6.39):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \sigma} &= \frac{\left(\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi\right)}{\bar{\Lambda} \cdot \left(\Lambda + \sqrt{g}\right)} \cdot d_1 \cdot d_2 \cdot \left(\frac{\Lambda}{\bar{\Lambda}}\right)^{(d_2-1)} \cdot e^{d_1 \cdot \left(\frac{\Lambda}{\bar{\Lambda}}\right)^{d_2}} \\
\frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \xi} &= \frac{\left(\frac{3}{2} \cdot \xi - \sigma\right)}{\bar{\Lambda} \cdot \left(\Lambda + \sqrt{g}\right)} \cdot d_1 \cdot d_2 \cdot \left(\frac{\Lambda}{\bar{\Lambda}}\right)^{(d_2-1)} \cdot e^{d_1 \cdot \left(\frac{\Lambda}{\bar{\Lambda}}\right)^{d_2}} \\
\frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \kappa} &= \frac{-\frac{\partial g}{\partial \kappa}}{2 \cdot \bar{\Lambda} \cdot \sqrt{g}} \cdot d_1 \cdot d_2 \cdot \left(\frac{\Lambda}{\bar{\Lambda}}\right)^{(d_2-1)} \cdot e^{d_1 \cdot \left(\frac{\Lambda}{\bar{\Lambda}}\right)^{d_2}}
\end{aligned} \tag{A.17}$$

Im folgenden werden die Abkürzungen

$$\begin{aligned}
f_4 &= a_1(\Lambda) \cdot \left(a_{21} \cdot a_{22} \cdot a_{23} \cdot (v - v_0)^{(a_{23}-1)} \cdot e^{a_{22} \cdot (v-v_0)^{a_{23}}} \right. \\
&\quad \left. + (1 - a_{21}) \cdot a_{24} \cdot a_{25} \cdot (v - v_0)^{(a_{25}-1)} \cdot e^{a_{24} \cdot (v-v_0)^{a_{25}}}\right) \\
f_5 &= \frac{E}{1 + \frac{A \cdot (E - E_t)}{E_t}} \\
f_6 &= \frac{E \cdot \frac{(E_t - E)}{E_t}}{\left(1 + \frac{A \cdot (E - E_t)}{E_t}\right)^2}
\end{aligned}$$

verwendet.

Ableitung der Materialfunktion  $A(\Lambda, v) = A(\sigma, \bar{\sigma}, \xi, \kappa)$  nach Gleichung (6.38):

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial A(\sigma, \bar{\sigma}, \xi, \kappa)}{\partial \sigma} &= \frac{\frac{\partial a_1(\Lambda)}{\partial \sigma} \cdot a_2(v) + f_4 \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot f_5 \cdot \left( -\frac{(1-\frac{E_t}{E})}{E_t} \cdot \left( \frac{\partial B}{\partial \sigma} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + B \right) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} \right)}{1 - f_4 \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot f_6 \cdot f_1} \\
 \frac{\partial a_1(\Lambda)}{\partial \sigma} &= \frac{1 - a_{11}}{\tanh(a_{13}) - 1} \cdot \frac{a_{12} \cdot \frac{(\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi)}{\sqrt{\frac{3}{2} \cdot (\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi)^2}}}{(\cosh(a_{12} \cdot \Lambda + a_{13}))^2} \\
 \frac{\partial A(\sigma, \bar{\sigma}, \xi, \kappa)}{\partial \bar{\sigma}} &= \frac{f_4 \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot f_5 \cdot B \cdot \frac{(1-\frac{E_t}{E})}{E_t}}{1 - f_4 \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot f_6 \cdot f_1} \\
 \frac{\partial A(\sigma, \bar{\sigma}, \xi, \kappa)}{\partial \xi} &= \frac{\frac{\partial a_1(\Lambda)}{\partial \xi} \cdot a_2(v) + f_4 \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot f_5 \cdot \left( -\frac{(1-\frac{E_t}{E})}{E_t} \cdot \frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right)}{1 - f_4 \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot f_6 \cdot f_1} \quad (\text{A.18}) \\
 \frac{\partial a_1(\Lambda)}{\partial \xi} &= \frac{1 - a_{11}}{\tanh(a_{13}) - 1} \cdot \frac{a_{12} \cdot \frac{(\frac{3}{2} \cdot \xi - \sigma)}{\sqrt{\frac{3}{2} \cdot (\frac{2}{3} \cdot \sigma - \xi)^2}}}{(\cosh(a_{12} \cdot \Lambda + a_{13}))^2} \\
 \frac{\partial A(\sigma, \bar{\sigma}, \xi, \kappa)}{\partial \kappa} &= \frac{\frac{\partial a_1(\Lambda)}{\partial \kappa} \cdot a_2(v) + f_4 \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \left[ \frac{A \cdot \left( \frac{E}{E_t} \right)^2 \cdot \frac{\partial E_t}{\partial \kappa}}{1 + \frac{A \cdot (E - E_t)}{E_t}} f_1 + f_5 \cdot \left( B \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \cdot \frac{\partial E_t}{E_t^2} - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \kappa} \right) \right]}{1 - f_4 \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot f_6 \cdot f_1} \\
 \frac{\partial a_1(\Lambda)}{\partial \kappa} &= \frac{1 - a_{11}}{\tanh(a_{13}) - 1} \cdot \frac{a_{12} \cdot \frac{\frac{\partial a}{\partial \kappa}}{2 \cdot \sqrt{g}}}{(\cosh(a_{12} \cdot \Lambda + a_{13}))^2}
 \end{aligned}$$

### A.1.3 Dgl.-System für Kriechprozesse

Dgl.-System für Kriechprozesse nach Gleichung (3.92):

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \xi \\ \kappa \end{pmatrix} \quad (\text{A.19})$$

$$\begin{aligned}
 J_{11} &= 1 \\
 J_{12} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \xi} \\
 J_{13} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \kappa}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_{21} &= 0 \\
J_{22} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot c(\kappa) \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \xi} \\
J_{23} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \left[ \frac{\partial c(\kappa)}{\partial \kappa} \cdot \Phi(\sigma, \xi, \kappa) + c(\kappa) \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \kappa} \right] \\
J_{31} &= 0 \\
J_{32} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{g(\kappa)} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \xi} \\
J_{33} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{\frac{\partial g(\kappa)}{\partial \kappa}}{2 \cdot \sqrt{g(\kappa)}} \cdot \Phi(\sigma, \xi, \kappa) + \sqrt{g(\kappa)} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \kappa} \right]
\end{aligned} \tag{A.20}$$

Dgl.-System für Kriechprozesse nach Gleichung (3.93):

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \bar{\sigma} \\ \xi \\ \kappa \end{pmatrix} \tag{A.21}$$

$$\begin{aligned}
J_{11} &= 1 \\
J_{12} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ -\frac{B \cdot \left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \right] \\
J_{13} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right] \\
J_{14} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ -B \cdot \frac{\frac{\partial E_t}{\partial \kappa}}{E_t^2} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \kappa} \right] \\
J_{21} &= 0 \\
J_{22} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot [-B] \\
J_{23} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \right] \\
J_{24} &= 0 \\
J_{31} &= 0 \\
J_{32} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ -c(\kappa) \cdot \frac{B \cdot \left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \right] \\
J_{33} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ c(\kappa) \cdot \frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \right]
\end{aligned} \tag{A.22}$$

$$\begin{aligned}
J_{34} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ B \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \cdot \left( \frac{\partial c(\kappa)}{\partial \kappa} \cdot \frac{(1 - \frac{E_t}{E})}{E_t} - \frac{\frac{\partial E_t}{\partial \kappa}}{E_t^2} \cdot c(\kappa) \right) \right] \\
J_{41} &= 0 \\
J_{42} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ -\sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \frac{B \cdot (1 - \frac{E_t}{E})}{E_t} \right] \\
J_{43} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot \frac{(1 - \frac{E_t}{E})}{E_t} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \right] \\
J_{44} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ B \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \cdot \left( \frac{\frac{3}{4} \cdot \frac{\partial g(\kappa)}{\partial \kappa}}{\sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa)} \cdot \frac{(1 - \frac{E_t}{E})}{E_t} - \frac{\frac{\partial E_t}{\partial \kappa}}{E_t^2} \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \right) \right]
\end{aligned}$$

#### A.1.4 Dgl.-System für Relaxationsprozesse

Dgl.-System für Relaxationsprozesse nach Gleichung (3.94):

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} \sigma \\ \xi \\ \kappa \end{pmatrix} \tag{A.23}$$

$$\begin{aligned}
J_{11} &= 1 + \frac{\Delta t_n}{2} \cdot E \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \sigma} \\
J_{12} &= \frac{\Delta t_n}{2} \cdot E \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \xi} \\
J_{13} &= \frac{\Delta t_n}{2} \cdot E \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \kappa} \\
J_{21} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot c(\kappa) \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \sigma} \\
J_{22} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot c(\kappa) \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \xi} \\
J_{23} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \left[ \frac{\partial c(\kappa)}{\partial \kappa} \cdot \Phi(\sigma, \xi, \kappa) + c(\kappa) \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \kappa} \right] \\
J_{31} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{g(\kappa)} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \sigma} \\
J_{32} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \sqrt{g(\kappa)} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \xi} \\
J_{33} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{\frac{\partial g(\kappa)}{\partial \kappa}}{2 \cdot \sqrt{g(\kappa)}} \cdot \Phi(\sigma, \xi, \kappa) + \sqrt{g(\kappa)} \cdot \frac{\partial \Phi(\sigma, \xi, \kappa)}{\partial \kappa} \right]
\end{aligned} \tag{A.24}$$

Dgl.-System für Relaxationsprozesse nach Gleichung (3.95):

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} \sigma \\ \bar{\sigma} \\ \xi \\ \kappa \end{pmatrix} \quad (\text{A.25})$$

$$\begin{aligned} J_{11} &= 1 + \frac{\Delta t_n}{2} \cdot E \cdot \left[ \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot \left(\frac{\partial B}{\partial \sigma} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + B\right) + \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} \right] \\ J_{12} &= \frac{\Delta t_n}{2} \cdot E \cdot \left[ -\frac{B \cdot \left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \right] \\ J_{13} &= \frac{\Delta t_n}{2} \cdot E \cdot \left[ \frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right] \\ J_{14} &= \frac{\Delta t_n}{2} \cdot E \cdot \left[ -B \cdot \frac{\frac{\partial E_t}{\partial \kappa}}{E_t^2} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \kappa} \right] \\ J_{21} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{\partial B}{\partial \sigma} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + B \right] \\ J_{22} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot [-B] \\ J_{23} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \right] \\ J_{24} &= 0 \\ J_{31} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ c(\kappa) \cdot \left(\frac{\partial B}{\partial \sigma} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + B\right) \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \right] \\ J_{32} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ -c(\kappa) \cdot \frac{B \cdot \left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \right] \\ J_{33} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ c(\kappa) \cdot \frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \right] \\ J_{34} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ B \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \cdot \left( \frac{\partial c(\kappa)}{\partial \kappa} \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} - \frac{\frac{\partial E_t}{\partial \kappa}}{E_t^2} \cdot c(\kappa) \right) \right] \\ J_{41} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \left(\frac{\partial B}{\partial \sigma} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) + B\right) \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \right] \\ J_{42} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ -\sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \frac{B \cdot \left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$



$$\begin{aligned}
 J_{43} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \cdot \frac{\partial B}{\partial \xi} \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \right] \\
 J_{44} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot \left[ B \cdot (\sigma - \bar{\sigma}) \cdot \left( \frac{\frac{3}{4} \cdot \frac{\partial g(\kappa)}{\partial \kappa}}{\sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa)} \cdot \frac{\left(1 - \frac{E_t}{E}\right)}{E_t} - \frac{\frac{\partial E_t}{\partial \kappa}}{E_t^2} \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot g(\kappa) \right) \right]
 \end{aligned}$$

## A.2 Dreidimensionale Stoffgesetzformulierungen

### A.2.1 Elastisch-plastisches Dgl.-System

Elastisch-plastisches Dgl.-System nach Gleichung (3.41):

$$\vec{y}^T = (\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}, \xi_{11}, \xi_{22}, \xi_{33}, \xi_{12}, \xi_{13}, \xi_{23}, \kappa) \quad (\text{A.27})$$

Im folgenden werden die Abkürzungen

$$\begin{aligned} f_7 &= \left(1 - \frac{1}{3} \cdot \frac{E_t(\kappa)}{E} \cdot (1 - 2 \cdot \nu)\right) \\ f_8 &= (\sigma'_{11} - \xi_{11})^2 + (\sigma'_{22} - \xi_{22})^2 + (\sigma'_{33} - \xi_{33})^2 \\ &\quad + 2 \cdot \left((\sigma'_{12} - \xi_{12})^2 + (\sigma'_{13} - \xi_{13})^2 + (\sigma'_{23} - \xi_{23})^2\right) \\ f_9 &= \dot{\epsilon}_{11} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) + \dot{\epsilon}_{22} \cdot (\sigma'_{22} - \xi_{22}) + \dot{\epsilon}_{33} \cdot (\sigma'_{33} - \xi_{33}) \\ &\quad + 2 \cdot (\dot{\epsilon}_{12} \cdot (\sigma'_{12} - \xi_{12}) + \dot{\epsilon}_{13} \cdot (\sigma'_{13} - \xi_{13}) + \dot{\epsilon}_{23} \cdot (\sigma'_{23} - \xi_{23})) \\ f &= f(\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}, \xi_{11}, \xi_{22}, \xi_{33}, \xi_{12}, \xi_{13}, \xi_{23}, \kappa, \dot{\epsilon}_{11}, \dot{\epsilon}_{22}, \dot{\epsilon}_{33}, \dot{\epsilon}_{12}, \dot{\epsilon}_{13}, \dot{\epsilon}_{23}) \\ &= \frac{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{f_7} \cdot \frac{f_9}{f_8} \end{aligned}$$

verwendet.

Es werden nur die wichtigsten Teile der Jacobi-Matrix dargestellt. Die anderen Ableitungen ergeben sich völlig analog, so daß sie keiner weiteren Erläuterung bedürfen.

$$\begin{aligned} J_{11} &= 1 - \frac{\Delta t_n}{2} \cdot \frac{E}{1 + \nu} \cdot \left[ -\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \sigma_{11}} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) - \frac{2}{3} \cdot f(\cdot) \right] \\ J_{12} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \frac{E}{1 + \nu} \cdot \left[ -\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \sigma_{22}} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) + \frac{1}{3} \cdot f(\cdot) \right] \\ J_{13} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \frac{E}{1 + \nu} \cdot \left[ -\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \sigma_{33}} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) + \frac{1}{3} \cdot f(\cdot) \right] \\ J_{14} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \frac{E}{1 + \nu} \cdot \left[ -\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \sigma_{12}} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) \right] \\ J_{15} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \frac{E}{1 + \nu} \cdot \left[ -\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \sigma_{13}} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) \right] \\ J_{16} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \frac{E}{1 + \nu} \cdot \left[ -\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \sigma_{23}} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) \right] \\ J_{17} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \frac{E}{1 + \nu} \cdot \left[ -\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \xi_{11}} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) + f(\cdot) \right] \\ J_{18} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \frac{E}{1 + \nu} \cdot \left[ -\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \xi_{22}} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

$$\begin{aligned}
 J_{19} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \frac{E}{1+\nu} \cdot \left[ -\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \xi_{33}} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) \right] \\
 J_{110} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \frac{E}{1+\nu} \cdot \left[ -\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \xi_{12}} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) \right] \\
 J_{111} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \frac{E}{1+\nu} \cdot \left[ -\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \xi_{13}} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) \right] \\
 J_{112} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \frac{E}{1+\nu} \cdot \left[ -\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \xi_{23}} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) \right] \\
 J_{113} &= -\frac{\Delta t_n}{2} \cdot \frac{E}{1+\nu} \cdot \left[ -\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \kappa} \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f(\cdot)}{\partial \sigma_{11}} &= \frac{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{f_7} \cdot \frac{\frac{1}{3} \cdot (2 \cdot \dot{\epsilon}_{11} - \dot{\epsilon}_{22} - \dot{\epsilon}_{33}) \cdot f_8 - f_9 \cdot \frac{2}{3} (2 \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11}) - (\sigma'_{22} - \xi_{22}) - (\sigma'_{33} - \xi_{33}))}{f_8^2}} \\
 \frac{\partial f(\cdot)}{\partial \sigma_{22}} &= \frac{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{f_7} \cdot \frac{\frac{1}{3} \cdot (2 \cdot \dot{\epsilon}_{22} - \dot{\epsilon}_{11} - \dot{\epsilon}_{33}) \cdot f_8 - f_9 \cdot \frac{2}{3} (2 \cdot (\sigma'_{22} - \xi_{22}) - (\sigma'_{11} - \xi_{11}) - (\sigma'_{33} - \xi_{33}))}{f_8^2}} \\
 \frac{\partial f(\cdot)}{\partial \sigma_{33}} &= \frac{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{f_7} \cdot \frac{\frac{1}{3} \cdot (2 \cdot \dot{\epsilon}_{33} - \dot{\epsilon}_{11} - \dot{\epsilon}_{22}) \cdot f_8 - f_9 \cdot \frac{2}{3} (2 \cdot (\sigma'_{33} - \xi_{33}) - (\sigma'_{11} - \xi_{11}) - (\sigma'_{22} - \xi_{22}))}{f_8^2}} \\
 \frac{\partial f(\cdot)}{\partial \sigma_{12}} &= \frac{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{f_7} \cdot \frac{2 \cdot \dot{\epsilon}_{12} \cdot f_8 - f_9 \cdot 4 \cdot (\sigma_{12} - \xi_{12})}{f_8^2} \\
 \frac{\partial f(\cdot)}{\partial \sigma_{13}} &= \frac{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{f_7} \cdot \frac{2 \cdot \dot{\epsilon}_{13} \cdot f_8 - f_9 \cdot 4 \cdot (\sigma_{13} - \xi_{13})}{f_8^2} \\
 \frac{\partial f(\cdot)}{\partial \sigma_{23}} &= \frac{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{f_7} \cdot \frac{2 \cdot \dot{\epsilon}_{23} \cdot f_8 - f_9 \cdot 4 \cdot (\sigma_{23} - \xi_{23})}{f_8^2} \\
 \frac{\partial f(\cdot)}{\partial \xi_{11}} &= \frac{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{f_7} \cdot \frac{(-\dot{\epsilon}_{11}) \cdot f_8 + f_9 \cdot 2 \cdot (\sigma'_{11} - \xi_{11})}{f_8^2} \\
 \frac{\partial f(\cdot)}{\partial \xi_{22}} &= \frac{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{f_7} \cdot \frac{(-\dot{\epsilon}_{22}) \cdot f_8 + f_9 \cdot 2 \cdot (\sigma'_{22} - \xi_{22})}{f_8^2} \\
 \frac{\partial f(\cdot)}{\partial \xi_{33}} &= \frac{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{f_7} \cdot \frac{(-\dot{\epsilon}_{33}) \cdot f_8 + f_9 \cdot 2 \cdot (\sigma'_{33} - \xi_{33})}{f_8^2} \\
 \frac{\partial f(\cdot)}{\partial \xi_{12}} &= \frac{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{f_7} \cdot \frac{(-2 \cdot \dot{\epsilon}_{12}) \cdot f_8 + f_9 \cdot 4 \cdot (\sigma_{12} - \xi_{12})}{f_8^2} \\
 \frac{\partial f(\cdot)}{\partial \xi_{13}} &= \frac{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{f_7} \cdot \frac{(-2 \cdot \dot{\epsilon}_{13}) \cdot f_8 + f_9 \cdot 4 \cdot (\sigma_{13} - \xi_{13})}{f_8^2} \\
 \frac{\partial f(\cdot)}{\partial \xi_{23}} &= \frac{\left(1 - \frac{E_t(\kappa)}{E}\right)}{f_7} \cdot \frac{(-2 \cdot \dot{\epsilon}_{23}) \cdot f_8 + f_9 \cdot 4 \cdot (\sigma_{23} - \xi_{23})}{f_8^2}
 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial f(\cdot)}{\partial \kappa} = \frac{\left(-\frac{2}{3} \cdot \frac{\frac{\partial E_1(\kappa)}{\partial \kappa}}{E} \cdot (1 + \nu)\right)}{f_7^2} \cdot \frac{f_9}{f_8}$$

## Literaturverzeichnis

- [AA94] J. Altenbach and H. Altenbach. *Einführung in die Kontinuumsmechanik*. B. G. Teubner, Stuttgart, 1994.
- [ADF<sup>+</sup>96] K. Andresen, S. Dannemeyer, H. Friebe, R. Mahnken, R. Ritter, and E. Stein. Parameteridentifikation für ein plastisches Stoffgesetz mit FE-Methoden und Rasterverfahren. *Bauingenieur*, 71:21–31, 1996.
- [Bat90] K.-J. Bathe. *Finite-Elemente-Methoden*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1990.
- [Ber82] D. P. Bertsekas. Projected Newton Methods for Optimization Problems with Simple Constraints. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 20:221–246, 1982.
- [Ber93] M. Bergmann. *Lösung von Optimierungsproblemen mit parallelisierten Evolutionsalgorithmen*, pages 15–27. Number 93-75 in Berichte aus dem Institut für Statik der Technischen Universität Braunschweig. Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. H. Duddeck and Prof. Dr.-Ing. H. Ahrens, 1993.
- [BK87] W. Beitz and K.-H. Küttner, editors. *Dubbel, Taschenbuch für den Maschinenbau, 16. Auflage*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1987.
- [BL94] O. Bruhns and Th. Lehmann. *Elemente der Mechanik*. Vieweg-Verlag, Braunschweig, Wiesbaden, 1994.
- [BP87] O.T. Bruhns and M. Pitzer. Constitutive Modelling in the Range of Inelastic Deformations - Evaluation of Parameters. In P. White, editor, *Constitutive Modelling in the Range of Inelastic Deformations - Uniaxial Evaluations*, GEC Report. GEC Research Ltd., August 1987.
- [BR94] O. T. Bruhns and U. Rott. A Viscoplastic Model with a Smooth Transition to describe Rate-Independent Plasticity. *International Journal of Plasticity*, 10:347–362, 1994.
- [Bra66] D. Braess. Über Dämpfung bei Minimalisierungsverfahren. *Computing*, 1:264–272, 1966.
- [Bra70] D. Braess. Eine Möglichkeit zur Konvergenzbeschleunigung bei Iterationsverfahren für bestimmte nichtlineare Probleme. *Numerische Mathematik*, 14:468–475, 1970.

- [Bra76] D. Braess. *SQUFIT (Square - Fit) ein Programm zur nichtlinearen Anpassung von Meßdaten nach der Methode der kleinsten Quadrate*. Bericht, Lehrstuhl Numerische Mathematik, Ruhr-Universität Bochum, 1976.
- [Bra90] D. Braess. *Numerische Mathematik für Ingenieure, Ausarbeitung einer Vorlesung für Bauingenieure und Maschinenbauer*. Ruhr-Universität Bochum, Fakultät für Mathematik, 1990.
- [Bra92] H. Braasch. *Ein Konzept zur Fortentwicklung und Anwendung viskoplastischer Werkstoffmodelle*, volume 92-71 of *Berichte aus dem Institut für Statik der Technischen Universität Braunschweig*. Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. H. Duddeck, Prof. Dr.-Ing. H. Ahrens, 1992.
- [Bra93] H. Braasch. *Erfassung streuenden Materialverhaltens in Werkstoffmodellen*, pages 1–14. Number 93-75 in *Berichte aus dem Institut für Statik der Technischen Universität Braunschweig*. Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. H. Duddeck and Prof. Dr.-Ing. H. Ahrens, 1993.
- [Bru84] O.T. Bruhns. The INTERATOM (IA) Modell. In O.T. Bruhns, editor, *Constitutive Modelling in the Range of Inelastic Deformations - A State of the Arts Report*, pages 33–63. INTERATOM, 1984.
- [Bru89] O.T. Bruhns. *MECHANIK I, Statik starrer Körper*. Lehrstuhl für Technische Mechanik, Ruhr-Universität Bochum, 1989.
- [Bru90] O.T. Bruhns. Private Mitteilung. Juni 1990.
- [Bru92] O.T. Bruhns. *Kontinuumsmechanik, Einführung in die Beschreibung inelastischen Materialverhaltens*. Lehrstuhl für Technische Mechanik, Ruhr-Universität Bochum, 1992.
- [Bru93] O. T. Bruhns. Neue Materialgleichungen der Plastomechanik. *ZAMM*, 73:T6–T19, 1993.
- [BT89] D. P. Bertsekas and J. N. Tsitsiklis. *Parallel and Distributed Computation*. Prentice-Hall International, Inc., 1989.
- [Cha83] J. L. Chaboche. On the Constitutive Equations of Materials under Monotonic or Cyclic Loadings. *Rech. Aérosp.*, 5:31–42, 1983.
- [CK86] D. Cordts and F. G. Kollmann. An Implicit Time Integration Scheme for Inelastic Constitutive Equations with Internal State Variables. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 23:533–554, 1986.
- [CW66] Collatz and Wetterling. *Optimierungsaufgaben*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1966.

- [Dom87] W. Domke. *Werkstoffkunde und Werkstoffprüfung, 10., verbesserte Auflage*. Girardet, Düsseldorf, 1987.
- [DS83] J.E. Dennis and R.B. Schnabel. *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1983.
- [Fos96] B. Fosså. *Ein Beitrag zur Fließflächenmessung bei vorgedehnten Stählen*, volume 105 of *Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik*. Ruhr-Universität Bochum, Oktober 1996.
- [GBD<sup>+</sup>94] A. Geist, A. Beguelin, J. Dongarra, W. Jiang, R. Mancheck, and V. Sunderam. *PVM: Parallel Virtual Machine, A User's Guide and Tutorial for Networked Parallel Computing*. The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1994.
- [Gol89] D. E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1989.
- [Gre90] J. J. Grefenstette. *A User's Guide to GENESIS Version 5.0*. Navy Center for Applied Research in Artificial Intelligence, Washington, D.C., 1990.
- [GT93] Ch. Großmann and J. Terno. *Numerik der Optimierung*. Mathematik. Teubner Studienbücher, Stuttgart, 1993.
- [GT96] R. Gerdes and F. Thielecke. Micromechanical Development and Identification of a Stochastic Constitutive Model. *zur Veröffentlichung eingereicht: ZAMM*, 1996.
- [Hau96] P. Haupt. Konzepte der Materialtheorie. *TECHNISCHE MECHANIK*, 16(1):13–22, 1996.
- [HG72] Heinhold and Gaede. *Ingenieur-Statistik*. R. Oldenbourg Verlag, München, Wien, 1972.
- [HK87] G. Hartmann and F. G. Kollmann. A Computational Comparison of the Inelastic Constitutive Models of Hart and Miller. *Acta Mechanica*, 69:139–165, 1987.
- [HK95] P. Haupt and M. Kamlah. Representation of Cyclic Hardening and Softening Properties using Continuous Variables. *International Journal of Plasticity*, 11(3):267–291, 1995.
- [HW91] E. Hornbogen and H. Warlimont. *Metallkunde, Aufbau und Eigenschaften von Metallen und Legierungen*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1991.
- [Kik93] U. Kikillus. *Ein Beitrag zum zyklischen Kriechverhalten von CK 15*, volume 84 of *Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik*. Ruhr-Universität Bochum, Mai 1993.

- [KK76] R. G. Krieg and S. W. Key. Implementation of a Time Independent Plasticity Theory into Structural Computer Programs. In J. A. Stricklin and K. J. Saszlski, editors, *Constitutive Equations in Viscoplasticity: Computational and Engineering Aspects*, volume AMD-20. ASME, 1976.
- [KMK95] R. Kreißig, D. Michael, and S. Kretzschmar. *Einsatz massiv paralleler FEM-Software bei der Parameteridentifikation inelastischer Deformationsgesetze*, volume 5 of *Workshop: Numerische Methoden der Plastomechanik*, pages 125–138. Institut für Mechanik der Universität Hannover, Juni 1995.
- [Kö94] J. Körber. *Ein verallgemeinertes Finite-Element-Verfahren mit asymptotischer Stabilisierung angewendet auf viskoplastische Materialmodelle*, volume 88 of *Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik*. Ruhr-Universität Bochum, April 1994.
- [Kol86] F. G. Kollmann. Time Integration of Stiff Constitutive Equations. In G. Yagawa and S. N. Atluri, editors, *Computational Mechanics '86, Theory and Applications*, volume 1 of *Proceedings of the International Conference on Computational Mechanics, May 25-29, Tokyo*, pages 17–24, 1986.
- [Kre96] R. Kreißig. Parameteridentifikation inelastischer Deformationsgesetze. *TECHNISCHE MECHANIK*, 16(1):97–106, 1996.
- [Kun94] R. Kunkel. *Versuche zur Identifikation der Materialparameter des viskoplastischen orthotropen Modells von Choi und Krempl am einkristallinen Werkstoff SRR99*, pages 22–25. Number 93 in *Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik*. Institut für Mechanik der Ruhr-Universität Bochum, Dezember 1994.
- [Kun95] R. Kunkel. *Qualitativer und quantitativer Vergleich verschiedener Anpassungsverfahren zur Bestimmung der Parameter vereinheitlichter Werkstoffmodelle*, volume 5 of *Workshop: Numerische Methoden der Plastomechanik*, pages 153–168. Institut für Mechanik der Universität Hannover, Juni 1995.
- [Las95] A. Lassota. *Effiziente Optimierung von Materialparametern für Konstitutive Modelle in Paralleler Ausführung*, volume 5 of *Workshop: Numerische Methoden der Plastomechanik*, pages 169–184. Institut für Mechanik der Universität Hannover, Juni 1995.
- [Leh89] Th. Lehmann. On the balance of energy and entropy at inelastic deformations of solid bodies. *European journal of mechanics. A/Solids*, 8(3):235–251, 1989.
- [Mah92] R. Mahnken. *Duale Methoden für nichtlineare Optimierungsprobleme in der Strukturmechanik*, volume F 92/3 of *Forschungs- und Seminarberichte aus dem Bereich der Mechanik der Universität Hannover*. Prof. Dr.-Ing. E. Stein, April 1992.



- [MAR94] MARC Analysis Research Corporation, Palo Alto, California. *MARC User's Manuals*, 1994.
- [MH89] D. Müller and G. Hartmann. Identification of Material Parameters for Inelastic Constitutive Models Using Principles of Biologic Evolution. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 111:299–305, Juli 1989.
- [Mit95] M. Mittelbach. *Simulation des Deformations- und Schädigungsverhaltens beim Stoßversuch mit einem Kontinuums-Damage-Modell*, volume 100 of *Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik*. Ruhr-Universität Bochum, Dezember 1995.
- [MS94a] R. Mahnken and E. Stein. Gradient-based methods for parameter identification of viscoplastic materials. In H. D. Bui and M. Tanaka, editors, *Inverse Problems in Engineering Mechanics*. A. A. Balkema, 1994.
- [MS94b] R. Mahnken and E. Stein. The Parameter-identification for visco-plastic models via finite-element-methods and gradient-methods. *Modelling and simulation in material sciences and engineering*, 2:597–616, 1994.
- [OGH94] A. Ostermeier, A. Gawelczyk, and N. Hansen. Step-size Adaptation Based on a Non-local Use of Selection Information. In Y. Davidor, H.-P. Schwefel, and R. Männer, editors, *Proceedings of the Third Conference on Parallel Problem Solving from Nature - PPSN III*, Jerusalem, Springer-Verlag, 1994.
- [Pr"88] H.-P. Prüfer. *Parameteroptimierung, Ein Werkzeug des rechnerunterstützten Konstruierens*. Ruhr-Universität Bochum, Institut für Konstruktionstechnik, 1988.
- [PTVF92] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery. *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1992.
- [Rec73] I. Rechenberg. *Evolutionsstrategie: Optimierung technischer Systeme nach den Prinzipien der biologischen Evolution*. Frommann-Holzboog, Stuttgart, 1973.
- [Rot91] U. Rott. *Ein neues Konzept zur Berechnung viskoplastischer Strukturen*, volume 76 of *Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik*. Ruhr-Universität Bochum, April 1991.
- [RSW96] P. Rentrop, K. Strehmel, and R. Weiner. Ein Überblick über Einschrittverfahren zur numerischen Integration in der technischen Simulation. *GAMM-Mitteilungen*, 19(1):9–43, 1996.
- [Sch81] K. Schittkowski. The Nonlinear Programming Method of Wilson, Han and Powell with an Augmented Lagrangian Type Line Search Function. *Numerische Mathematik*, 38:83–114, 1981.

- [Sch91] W. Schatt, editor. *Einführung in die Werkstoffwissenschaft*. Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1991.
- [Sch95] H.-P. Schwefel. *Evolution and Optimum Seeking*. A Wiley-Interscience Publication, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1995.
- [SHB94] H.-P. Schwefel, U. Hammel, and T. Bäck. Evolutionäre Algorithmen: Optimieren nach dem Vorbild der biologischen Evolution. *Der GMD-Spiegel*, 2(1):49–58, 1994.
- [SHF94] E. Schöneburg, F. Heinzmann, and S. Feddersen. *Genetische Algorithmen und Evolutionsstrategien: Eine Einführung in Theorie und Praxis der simulierten Evolution*. Addison-Wesley, Bonn, Paris, 1994.
- [SS94] B. Schinke and J. Schwertel. Bestimmung der Parameter viskoplastischer Werkstoffmodelle. *ZAMM*, 74(4):233–235, 1994.
- [Ste67] G. W. Stewart. A Modification of Davidon's Minimization Method to Accept Difference Approximations of Derivatives. *Journal of the Association for Computing Machinery*, 14(1):72–83, 1967.
- [Ste95] E. Steck. Zur Berücksichtigung von Vorgängen im Mikrobereich metallischer Werkstoffe bei der Entwicklung von Stoffmodellen. *ZAMM*, 75(5):331–341, 1995.
- [SW89] E. Stein and P. Wriggers. "Computational Mechanics" bei Festkörpern und Ingenieursstrukturen unter Verwendung von Finite-Element-Methoden. *GAMM-Mitteilungsheft*, 1:3–39, 1989.
- [Tar87] A. Tarantola. *Inverse Problem Theory, Methods for Data Fitting and Model Parameter Estimation*. Elsevier, Amsterdam-Oxford-New York, 1987.
- [TBA86] J. N. Tsitsiklis, D. P. Bertsekas, and M. Athans. Distributed Asynchronous Deterministic and Stochastic Gradient Optimization Algorithms. *IEEE Transactions on Automatic Control*, AC-31(9):803–812, September 1986.
- [Thi95] F. Thielecke. Gradientenverfahren contra stochastische Suchstrategien bei der Identifizierung von Werkstoffparametern. *ZAMM*, 75:S211–S212, 1995.
- [Thi96] F. Thielecke. Ein Mehrzielansatz zur Parameteridentifizierung von viskoplastischen Werkstoffmodellen. *zur Veröffentlichung eingereicht: ZAMM*, 1996.
- [Tsa96] Ch. Tsakmakis. Formulation of viscoplasticity laws using overstresses. *Acta Mechanica*, 115:179–202, 1996.
- [TU94] K. Trint and U. Utecht. *evoC 2.0 user manual*. technical university of berlin, department of bionics and evolution techniques, 1994.

- 
- [Weg92] C. W. Wegst. *Stahlschlüssel*. Verlag Stahlschlüssel Wegst GmbH, Marbach, 1992.
- [Weg96] K. Wegener. Metallphysik und Stoffmodellierung. *TECHNISCHE MECHANIK*, 16(1):23–38, 1996.
- [Wes95] B. Westerhoff. *Eine Untersuchung zum geschwindigkeitsabhängigen Verhalten von Stahl*, volume 99 of *Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik*. Ruhr-Universität Bochum, Juli 1995.
- [Wic96] A. Wichtmann. *Entwicklung eines thermodynamisch konsistenten Stoffgesetzes zur Beschreibung der Reckalterung*, volume 104 of *Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik*. Ruhr-Universität Bochum, August 1996.

## Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik

- Nr. 1     Theodor Lehmann:  
Große elasto-plastische Formänderungen
- Nr. 2     Bogdan Raniecki/Klaus Thermann:  
Infinitesimal Thermoplasticity and Kinematics of Finite Elastic-Plastic Deformations.  
Basic Concepts
- Nr. 3     Wolfgang Krings:  
Beitrag zur Finiten Element Methode bei linearem, viskoelastischem Stoffverhalten
- Nr. 4     Burkhard Lücke:  
Theoretische und experimentelle Untersuchung der zyklischen elastoplastischen  
Blechbiegung bei endlichen Verzerrungen
- Nr. 5     Knut Schwarze:  
Einfluß von Querschnittsverformungen bei dünnwandigen Stäben mit stetig gekrümmter  
Profilmittellinie
- Nr. 6     Hubert Sommer:  
Ein Beitrag zur Theorie des ebenen elastischen Verzerrungszustandes bei endlichen  
Formänderungen
- Nr. 7     H. Stumpf/F. J. Biehl:  
Die Methode der orthogonalen Projektionen und ihre Anwendungen zur Berechnung  
orthotroper Platten
- Nr. 8     Albert Meyers:  
Ein Beitrag zum optimalen Entwurf von schnelllaufenden Zentrifugenschalen
- Nr. 9     Berend Fischer:  
Zur zyklischen, elastoplastischen Beanspruchung eines dickwandigen Zylinders bei  
endlichen Verzerrungen
- Nr. 10    Wojciech Pietraszkiewicz:  
Introduction to the Non-Linear Theory of Shells
- Nr. 11    Wilfried Ullenboom:  
Optimierung von Stäben unter nichtperiodischer dynamischer Belastung
- Nr. 12    Jürgen Güldenpfennig:  
Anwendung eines Modells der Vielkristallplastizität auf ein Problem gekoppelter  
elastoplastischer Wellen
- Nr. 13    Pawel Rafalski:  
Minimum Principles in Plasticity
- Nr. 14    Peter Hilgers:  
Der Einsatz eines Mikrorechners zur hybriden Optimierung und Schwingungsanalyse
- Nr. 15    Hans-Albert Lauer:  
Optimierung von Stäben unter dynamischer periodischer Beanspruchung bei Beachtung  
von Spannungsrestriktionen
- Nr. 16    Martin Fritz:  
Berechnung der Auflagerkräfte und der Muskelkräfte des Menschen bei ebenen  
Bewegungen aufgrund von kinematographischen Aufnahmen
- Nr. 17    H. Stumpf/F. J. Biehl:  
Approximations and Error Estimates in Eigenvalue Problems of Elastic Systems with  
Application to Eigenvibrations of Orthotropic Plates

- Nr. 18 Uwe Kohlberg:  
Variational Principles and their Numerical Application to Geometrically Nonlinear v. Karman Plates
- Nr. 19 Heinz Antes:  
Über Fehler und Möglichkeiten ihrer Abschätzung bei numerischen Berechnungen von Schalenträgwerken
- Nr. 20 Czeslaw Wozniak:  
Large Deformations of Elastic and Non-Elastic Plates, Shells and Rods
- Nr. 21 Maria K. Duszek:  
Problems of Geometrically Non-Linear Theory of Plasticity
- Nr. 22 Burkhard von Bredow:  
Optimierung von Stäben unter stochastischer Erregung
- Nr. 23 Jürgen Preuss:  
Optimaler Entwurf von Tragwerken mit Hilfe der Mehrzielmethode
- Nr. 24 Ekkehard Großmann:  
Kovarianzanalyse mechanischer Zufallsschwingungen bei Darstellung der mehrfachkorrelierten Erregungen durch stochastische Differentialgleichungen
- Nr. 25 Dieter Weichert:  
Variational Formulation and Solution of Boundary-Value Problems in the Theory of Plasticity and Application to Plate Problems
- Nr. 26 Wojciech Pietraszkiewicz:  
On Consistent Approximations in the Geometrically Non-Linear Theory of Shells
- Nr. 27 Georg Zander:  
Zur Bestimmung von Verzweigungslasten dünnwandiger Kreiszyylinder unter kombinierter Längs- und Torsionslast
- Nr. 28 Pawel Rafalski:  
An Alternative Approach to the Elastic-Viscoplastic Initial-Boundary Value Problem
- Nr. 29 Heinrich Oeynhausen:  
Verzweigungslasten elastoplastisch deformierter, dickwandiger Kreiszyylinder unter Innendruck und Axialkraft
- Nr. 30 F.-J. Biehl:  
Zweiseitige Eingrenzung von Feldgrößen beim einseitigen Kontaktproblem
- Nr. 31 Maria K. Duszek:  
Foundations of the Non-Linear Plastic Shell Theory
- Nr. 32 Reinhard Piltner:  
Spezielle finite Elemente mit Löchern, Ecken und Rissen unter Verwendung von analytischen Teillösungen
- Nr. 33 Petrisor Mazilu:  
Variationsprinzip der Thermoplastizität  
I. Wärmeausbreitung und Plastizität
- Nr. 34 Helmut Stumpf:  
Unified Operator Description, Nonlinear Buckling and Post-Buckling Analysis of Thin Elastic Shells
- Nr. 35 Bernd Kaempfer:  
Ein Extremal-Variationsprinzip für die instationäre Wärmeleitung mit einer Anwendung auf thermoelastische Probleme unter Verwendung der finiten Elemente

- Nr. 36     Alfred Kraft:  
Zum methodischen Entwurf mechanischer Systeme im Hinblick auf optimales Schwingungsverhalten
- Nr. 37     Petrisor Mazilu:  
Variationsprinzip der Thermoplastizität  
II. Gekoppelte thermomechanische Prozesse
- Nr. 38     Klaus-Detlef Mickley:  
Punktweise Eingrenzung von Feldgrößen in der Elastomechanik und ihre numerische Realisierung mit Fundamental-Splinefunktionen
- Nr. 39     Lutz-Peter Nolte:  
Beitrag zur Herleitung und vergleichende Untersuchung geometrisch nichtlinearer Schalentheorien unter Berücksichtigung großer Rotationen
- Nr. 40     Ulrich Blix:  
Zur Berechnung der Einschnürung von Zugstäben unter Berücksichtigung thermischer Einflüsse mit Hilfe der Finite-Element-Methode
- Nr. 41     Peter Becker:  
Zur Berechnung von Schallfeldern mit Elementmethoden
- Nr. 42     Dietmar Bouchard:  
Entwicklung und Anwendung eines an die Diskrete-Fourier-Transformation angepaßten direkten Algorithmus zur Bestimmung der modalen Parameter linearer Schwingungssysteme
- Nr. 43     Uwe Zdebel:  
Theoretische und experimentelle Untersuchungen zu einem thermo-plastischen Stoffgesetz
- Nr. 44     Jan Kubik:  
Thermodiffusion Flows in a Solid with a Dominant Constituent
- Nr.45     Horst J. Klepp:  
Über die Gleichgewichtslagen und Gleichgewichtsbereiche nichtlinearer autonomer Systeme
- Nr. 46     J. Makowsky/L.-P. Nolte/H. Stumpf:  
Finite In-Plane Deformations of Flexible Rods - Insight into Nonlinear Shell Problems
- Nr. 47     Franz Karl Labisch:  
Grundlagen einer Analyse mehrdeutiger Lösungen nichtlinearer Randwertprobleme der Elastostatik mit Hilfe von Variationsverfahren
- Nr. 48     J. Chroscielewski/L.-P. Nolte:  
Strategien zur Lösung nichtlinearer Probleme der Strukturmechanik und ihre modulare Aufbereitung im Konzept MESY
- Nr. 49     Karl-Heinz Bürger:  
Gewichtsoptimierung rotationssymmetrischer Platten unter instationärer Erregung
- Nr. 50     Ulrich Schmid:  
Zur Berechnung des plastischen Setzens von Schraubenfedern
- Nr. 51     Jörg Frischbier:  
Theorie der Stoßbelastung orthotroper Platten und ihr experimentelle Überprüfung am Beispiel einer unidirektional verstärkten CFK-Verbundplatte
- Nr. 52     W. Tampczynski:  
Strain history effect in cyclic plasticity

- Nr. 53 Dieter Weichert:  
Zum Problem geometrischer Nichtlinearitäten in der Plastizitätstheorie
- Nr. 54 Heinz Antes/Thomas Meise/Thomas Wiebe:  
Wellenausbreitung in akustischen Medien  
Randelement-Prozeduren im 2-D Frequenzraum und im 3-D Zeitbereich
- Nr. 55 Wojciech Pietraszkiewicz:  
Geometrically non-linear theories of thin elastic shells
- Nr. 56 Jerzy Makowski/Helmut Stumpf:  
Finite strain theory of rods
- Nr. 57 Andreas Pape:  
Zur Beschreibung des transienten und stationären Verfestigungsverhaltens von Stahl mit Hilfe eines nichtlinearen Grenzflächenmodells
- Nr. 58 Johannes Groß-Weege:  
Zum Einspielverhalten von Flächentragwerken
- Nr. 59 Peihua LIU:  
Optimierung von Kreisplatten unter dynamischer nicht rotationssymmetrischer Last
- Nr. 60 Reinhard Schmidt:  
Die Anwendung von Zustandsbeobachtern zur Schwingungsüberwachung und Schadensfrüherkennung auf mechanische Konstruktionen
- Nr. 61 Martin Pitzer:  
Vergleich einiger FE-Formulierungen auf der Basis eines inelastischen Stoffgesetzes
- Nr. 62 Jerzy Makowski/Helmut Stumpf:  
Geometric structure of fully nonlinear and linearized Cosserat type shell theory
- Nr. 63 O. T. Bruhns:  
Große plastische Formänderungen - Bad Honnef 1988
- Nr. 64 Khanh Chau Le/Helmut Stumpf/Dieter Weichert:  
Variational principles of fracture mechanics
- Nr. 65 Guido Obermüller:  
Ein Beitrag zur Strukturoptimierung unter stochastischen Lasten
- Nr. 66 Herbert Diehl:  
Ein Materialmodell zur Berechnung von Hochgeschwindigkeitsdeformationen metallischer Werkstoffe unter besonderer Berücksichtigung der Schädigung durch Scherbänder
- Nr. 67 Michael Geis:  
Zur Berechnung ebener, elastodynamischer Rißprobleme mit der Randelementmethode
- Nr. 68 Günter Renker:  
Zur Identifikation nichtlinearer strukturmechanischer Systeme
- Nr. 69 Berthold Schieck:  
Große elastische Dehnungen in Schalen aus hyperelastischen inkompressiblen Materialien
- Nr. 70 Frank Szepan:  
Ein elastisch-viskoplastisches Stoffgesetz zur Beschreibung großer Formänderungen unter Berücksichtigung der thermomechanischen Kopplung
- Nr. 71 Christian Scholz:  
Ein Beitrag zur Gestaltoptimierung druckbelasteter Rotationsschalen

- Nr. 72 J. Badur/H. Stumpf:  
On the influence of E. and F. Cosserat on modern continuum mechanics and field theory
- Nr. 73 Werner Fornefeld:  
Zur Parameteridentifikation und Berechnung von Hochgeschwindigkeitsdeformationen metallischer Werkstoffe anhand eines Kontinuums-Damage-Modells
- Nr. 74 J. Saczuk/H. Stumpf:  
On statical shakedown theorems for non-linear problems
- Nr. 75 Andreas Feldmüller:  
Ein thermoplastisches Stoffgesetz isotrop geschädigter Kontinua
- Nr. 76 Ulfert Rott:  
Ein neues Konzept zur Berechnung viskoplastischer Strukturen
- Nr. 77 Thomas Heinrich Pingel:  
Beitrag zur Herleitung und numerischen Realisierung eines mathematischen Modells der menschlichen Wirbelsäule
- Nr. 78 O. T. Bruhns:  
Große plastische Formänderungen - Bad Honnef 1991
- Nr. 79 J. Makowski/J. Chrosielewski/H. Stumpf:  
Computational Analysis of Shells Undergoing Large Elastic Deformation  
Part I: Theoretical Foundations
- Nr. 80 J. Chrosielewski/J. Makowski/H. Stumpf:  
Computational Analysis of Shells Undergoing Large Elastic Deformation  
Part II: Finite Element Implementation
- Nr. 81 R. H. Frania/H. Waller:  
Entwicklung und Anwendung spezieller finiter Elemente für Kerbspannungsprobleme im Maschinenbau
- Nr. 82 B. Bischoff-Beiermann:  
Zur selbstkonsistenten Berechnung von Eigenspannungen in polykristallinem Eis unter Berücksichtigung der Monokristallanisotropie
- Nr. 83 J. Pohé:  
Ein Beitrag zur Stoffgesetzentwicklung für polykristallines Eis
- Nr. 84 U. Kikillus:  
Ein Beitrag zum zyklischen Kriechverhalten von Ck 15
- Nr. 85 T. Guo:  
Untersuchung des singulären Rißspitzenfeldes bei stationärem Rißwachstum in verfestigendem Material
- Nr. 86 Achim Menne:  
Identifikation der dynamischen Eigenschaften von hydrodynamischen Wandlern
- Nr. 87 Uwe Folchert:  
Identifikation der dynamischen Eigenschaften Hydrodynamischer Kupplungen
- Nr. 88 Jörg Körber:  
Ein verallgemeinertes Finite-Element-Verfahren mit asymptotischer Stabilisierung angewendet auf viskoplastische Materialmodelle
- Nr. 89 Peer Schießbe:  
ein Beitrag zur Berechnung des Deformationsverhaltens anisotrop geschädigter Kontinua unter Berücksichtigung der thermoplastischen Kopplung



- Nr. 90      Egbert Schopphoff:  
Dreidimensionale mechanische Analyse der menschlichen Wirbelsäule
- Nr. 91      Christoph Beerens:  
Zur Modellierung nichtlinearer Dämpfungsphänomene in der Strukturmechanik
- Nr. 92      K. C. Le/H. Stumpf:  
Finite elastoplasticity with microstructure
- Nr. 93      O. T. Bruhns:  
Große plastische Formänderungen - Bad Honnef 1994
- Nr. 94      Armin Lenzen:  
Untersuchung von dynamischen Systemen mit der Singulärwertzerlegung - Erfassung von Strukturveränderungen
- Nr. 95      J. Makowski/H. Stumpf:  
Mechanics of Irregular Shell Structures
- Nr. 96      J. Chroscielewski/J. Makowski/H. Stumpf:  
Finite Elements for Irregular Nonlinear Shells
- Nr. 97      W. Krings/A. Lenzen/u. a.:  
Festschrift zum 60. Geburtstag von Heinz Waller
- Nr. 98      Ralf Podleschny:  
Untersuchung zum Instabilitätsverhalten scherbeanspruchter Risse
- Nr. 99      Bernd Westerhoff:  
Eine Untersuchung zum geschwindigkeitsabhängigen Verhalten von Stahl
- Nr. 100     Marc Mittelbach:  
Simulation des Deformations- und Schädigungsverhaltens beim Stoßversuch mit einem Kontinuums-Damage-Modell
- Nr. 101     Ulrich Hoppe:  
Über grundlegende Konzepte der nichtlinearen Kontinuumsmechanik und Schalentheorie
- Nr. 102     Marcus Otto:  
Erweiterung des Kaustikenverfahrens zur Analyse räumlicher Spannungskonzentrationen
- Nr. 103     Horst Lanzerath:  
Zur Modalanalyse unter Verwendung der Randelementemethode
- Nr. 104     Andreas Wichtmann:  
Entwicklung eines thermodynamisch konsistenten Stoffgesetzes zur Beschreibung der Reckalterung
- Nr. 105     Bjørn Fosså:  
Ein Beitrag zur Fließflächenmessung bei vorgedehnten Stählen
- Nr. 106     Khanh Chau Le:  
Kontinuumsmechanisches Modellieren von Medien mit veränderlicher Mikrostruktur
- Nr. 107     Holger Behrens:  
Nichtlineare Modellierung und Identifikation hydrodynamischer Kupplungen mit allgemeinen diskreten Modellansätzen
- Nr. 108     Johannes Moosheimer:  
Gesteuerte Schwingungsdämpfung mit Elektrorheologischen Fluiden
- Nr. 109     Dirk Klaus Anding:  
Zur simultanen Bestimmung materialabhängiger Koeffizienten inelastischer Stoffgesetze



**Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik  
RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM  
Nr. 109**