Theorie und Numerik zur Berechnung und Optimierung von Strukturen aus isotropen, hyperelastischen Materialien

Vom Fachbereich Bauingenieur– und Vermessungswesen
der Universität Hannover
zur Erlangung des Grades

Doktor–Ingenieur

genehmigte Dissertation

von

Dipl.–Ing. Franz–Joseph Barthold, M.Sc.

Hauptreferent:	Prof. Dr.-Ing. E. Stein
Korreferenten:	Prof. Dr.-Ing. E. Ramm
	Dr. rer. nat. Dr.-Ing. habil. D. Bischoff

Tag der Einreichung: 12. Oktober 1992
Tag der mündlichen Prüfung: 29. Januar 1993

Herausgeber:
Prof. Dr.-Ing. E. Stein

Organisation und Verwaltung:

Dr.–Ing. habil. W. Wagner
Institut für Baumechanik
und Numerische Mechanik
Universität Hannover
Appelstr. 9 A
30167 Hannover
Tel.: 0511/762-3369
Fax.: 0511/762-5496

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird eine kontinuumsmechanische Theorie sowie ein geeigneter Algorithmus zur Behandlung von Formoptimierungs- und Identifikationsaufgaben isotroper, hyperelastische Materialien unter großen Deformationen angegeben.

Im ersten Teil wird nach der Darstellung der kontinuumsmechanischen Grundlagen eine eigenvektorfreie Formulierung der Spannungs- und Materialtensoren der betrachteten Materialklasse für die Abhängigkeit der Formänderungsenergie von den Eigenwerten (z.B. Ogden-Material) hergeleitet. Damit ist eine einheitliche Formulierung der Spannungs- und Materialtensoren aller Spannungszustände für kompressible und inkompressible Materialien bzgl. einer Berechnung in den Größen der Referenz- bzw. der Momentankonfiguration gelungen.

Durch die systematische Erweiterung der kontinuumsmechanischen Grundlagen um die Abhängigkeit vom Design wird im zweiten Teil die Optimale Formgebung als Teilgebiet der Kontinuumsmechanik vorgestellt. Die funktionalen Abhängigkeiten der kontinuumsmechanischen Feldgrößen führen aufgrund der vergleichbaren mathematischen Struktur zu Aussagen, die den bekannten Beziehungen der Zeitableitung äquivalent sind. Aus dieser Ähnlichkeit folgt, daß gerade in der Sensitivitätsanalyse dem Materialtensor eine große Bedeutung zukommt.

Die Konzepte einer systematischen algorithmischen Realisation dieser kontinuumsmechanisch formulierten Strukturoptimierung für das FE-Forschungsprogrammpaket INA-OPT (INelastisc Analysis and OPTimization) werden im dritten Teil vorgestellt. Anhand einiger Beispiele wird gezeigt, daß die vollständige analytische Sensitivitätsanalyse nichtlinearer strukturmechanischer Probleme effektiv realisiert werden kann.

Abstract

A continuum mechanical theory and an efficient algorithm for solving structural optimization as well as identifikation problems for isotropic, hyperelastic materials with large deformations is proposed.

After introducing the continuum mechanical notation a formulation of stresses and elastic moduli for strain energy functions depending on the eigenvalues (e.g. Ogden' s material law) without needing the eigenvectors is derived. Using this result, a uniform representation of the stresses and elastic moduli for all stress states of compressible as well as incompressible materials is given.

In a second part, a systematical extension of the classical continuum mechanical theory by introducing design dependencies establishes structural optimization as a part of continuum mechanics. Since the continuum mechanical functions have the same mathematical structure, similar formulae can be derived for linarization in time and in design. Therefore, the tensor of elastic moduli is crucial for a correct sensitivity analysis.

The concepts leading to a systematical implementation of the theoretical results into the finite element based research analysis tool INA-OPT (INelastisc Analysis and OPTimization) are outlined in a third part. The efficiency of the fully analytical formulated sensitivity analysis for nonlinear problems with large deformations is shown for some examples.

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner fünfjährigen Tätigkeit am Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik der Universität Hannover.

Meinem geschätzten akademischen Lehrer, Herrn Prof. Dr.-Ing. E. Stein, danke ich herzlich für die Anregung zu dieser Arbeit, sein förderndes wissenschaftliches Interesse, die Schaffung geeigneter Rahmenbedingungen in personeller und materieller Hinsicht, die gewährten Freiheiten und die Übernahme des Hauptreferates.

Mein Dank gilt weiterhin Herrn Prof. Dr.-Ing. E. Ramm und Herrn Dr.-Ing. habil. D. Bischoff für ihr stetes Interesse am Fortgang der Arbeit, ihre wertvollen Anregungen und Hinweise sowie die Übernahme der Korreferate.

Allen Mitarbeitern des Instituts für Baumechanik und Numerische Mechanik, insbesondere meinen Kollegen Dr.-Ing. A. Becker und Dipl.-Ing. A. Falk, danke ich, die durch ihre freundschaftliche Zusammenarbeit, ihre wertvollen Ratschläge und hilfreichen Diskussionen wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gebührt meiner Frau Silke, meinen Kindern und allen denen, die mir die familiären Voraussetzungen für den erfolgreichen Abschluß der Promotion geschaffen haben.

Hannover, im Dezember 1993 — Franz–Joseph Barthold

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Tafelverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Problemstellung

Die Konstruktion von Bauwerken zur sinnvollen Nutzung bei möglichst optimaler Erfüllung selbstgestellter Ziele und unter Beachtung zahlreicher Vorgaben und Zwangsbedingungen stellt die ureigenste Aufgabenstellung im Ingenieurwesen dar. In der Geschichte des Bauwesens wurden die zur optimalen Gestaltung eines Bauwerkes notwendigen Eigenschaften und Fähigkeiten in der Erfahrung der Baumeister vereinigt.

Durch die Entwicklung der numerischen Methoden, die zunächst die Berechnung des Strukturverhaltens wesentlich vereinfachte, ergab sich auch die Möglichkeit einer mathematischen Beschreibung und algorithmischen Umsetzung der komplexen Ingenieuraufgabe durch eine Optimierungsaufgabe und die zugehörigen Algorithmen.

Zur mathematischen Darstellung sind die gewünschten Ziele durch die sogenannte *Zielfunktion* f und die vorhandenen Beschränkungen durch die *Nebenbedingungen* g_j zu beschreiben. Als wesentliche veränderbare Größen der Konstruktion sind die *Designvariablen* s_i festzulegen.

In der algorithmischen Umsetzung des Arbeitsablaufes sind den Tätigkeiten

Konstruieren – Berechnen – Bewerten – Verbessern

die folgenden numerischen Hilfsmittel zugeordnet.

Die Konstruktion eines Bauteils erfolgt heutzutage in effizienter Form mit den numerischen Werkzeugen des *Computer Aided Geometric Design* (CAGD), die bei richtigem Einsatz und strukturierter Organisation die Grundlage jedes weiteren Arbeitsschrittes bis zur Fertigung darstellen sollte.

Hieran schließt sich die numerische Berechnung mit der *Finite-Elemente-Methode* (FEM) bzw. der *Rand-Elemente-Methode* (BEM) an. Einen wesentlichen Aspekt stellt beim Einsatz der numerischen Näherungsverfahren die problemgerechte Diskretisierung der realen Struktur dar, die durch den Einsatz von Verfeinerungsstrategien auf der Grundlage von A-priori-Kriterien und A-posteriori-Kriterien unterstützt wird. Weiterhin ist durch den Fortschritt insbesondere der numerischen Methoden in der Mechanik die Erfassung komplexer Phänomene z.B. beim globalen und lokalen Stabilitätsverhalten, beim Materialverhalten und in der Kopplung mechanisch-thermomechanischen Verhaltens möglich.

Die berechneten Ergebnisse der Strukturanalyse sind einer kritischen Bewertung zu unterziehen, wobei vor allem die Aussagekraft des gewählten Modells zu beurteilen ist. Innerhalb des numerischen Modells ist die Güte der Berechnung mit den oben erwähnten Adaptionskriterien zu gewährleisten.

Für die Verbesserung der Konstruktion hinsichtlich der gesetzten Ziele und unter Beachtung der vorgegebenen Beschränkungen ist die Empfindlichkeit der Struktur (Sensitivität) bei Veränderungen zu beurteilen. Hierfür steht dem Ingenieur im Rahmen einer numerischen Behandlung das Hilfsmittel der *Sensitivitätsanalyse* zur Verfügung, die auf der Grundlage der geometrischen Beschreibung der Struktur (CAGD) und der numerischen Berechnung (FEM) das Änderungsverhalten quantifiziert.

Nach der Beurteilung des Änderungsverhaltens und seiner quantitativen Angabe durch die Sensitivitätsanalyse ist die sinnvolle Änderung der Struktur zu ermitteln, die innerhalb der durch die Problemstellung gegebenen Freiheiten die optimale Lösung liefert. Zur Behandlung dieser Teilaufgabe werden die Algorithmen der *mathematischen Optimierung* eingesetzt, die aus den Werten der Zielfunktion und den Nebenbedingungen sowie der Angabe der Gradienten und der zweiten Ableitungen (Sensitivität) einen verbesserten Lösungsvorschlag liefern.

Der Einsatz von *Expertensystemen* für die Gesamtaufgabe bzw. für Teilbereiche kann den Ingenieur weiterhin von der Bearbeitung zahlreicher standardisierter Entscheidungsprozeße entlasten.

Die dargestellten Algorithmen für die

- *Konstruktion: Computer Aided Geometric Design*
- *Berechnung: Finite-Elemente-Methode*
- *Bewertung: Sensitivitätsanalyse*
- *Verbesserung: Mathematische Optimierung*

sowie der Einsatz von Expertensystemen sollen und können den Ingenieur bei der Lösung der Ingenieuraufgabe durch die schnelle und effiziente Bearbeitung letztlich trivialer Arbeitsschritte behilflich sein, so daß er sich intensiver den eigentlichen, nicht algorithmierbaren Aufgaben widmen kann. Hierbei ist insbesondere die Modellbildung (auch der Teilmodelle für die einzelnen Algorithmen) und die kritische Kontrolle der durch den Algorithmus gelieferten Ergebnisse zu erwähnen.

In dem Maße, wie der Ingenieur triviale Aufgaben zur Arbeitsentlastung an den Algorithmus abtreten möchte, steigt die Menge der im Algorithmus zu verarbeitenden Informationen und damit die Komplexität eines *Gesamtalgorithmus Optimale Formgebung.*

Die sich zwangsläufig ergebene Notwendigkeit der Berücksichtigung und Kopplung mehrerer, bisher nicht miteinander in Beziehung stehender Einzelmodelle führte dazu, daß sich zahlreiche Philosophien zur algorithmischen Behandlung und softwaretechnischen Umsetzung der Strukturoptimierung entwickelten. Die Standpunkte sind wesentlich durch die unterschiedlichen Zielsetzungen, Arbeitsbedingungen und der Struktur vorhandener Softwarelösungen bei den Teilaufgaben geprägt. Für die Entscheidungsfindung ist dabei der finanzielle und zeitliche Aufwand einer exakten Abbildung theoretischer Beziehungen für die eigene Optimierungsaufgabe mit der erforderlichen Genauigkeit und der Notwendigkeit einer schnellen und effektiven Problemlösung innerhalb der bestehenden Struktur in Beziehung zu setzen.

Für die Behandlung der Strukturoptimierung in Teilbereichen der Industrie ist der Einsatz numerischer und semianalytischer Verfahren zur Ermittlung der Sensitivitäten weit fortgeschritten. Der wesentliche Vorteil dieser Vorgehensweise besteht darin, daß vorhandene Softwarepakete für die Geometriebeschreibung und die Strukturanalyse ohne genaue Kenntnis der internen Arbeitsweisen verwendet werden können. Durch den Einsatz numerischer Differentiationstechniken werden hierbei bezüglich der Genauigkeit der Sensitivitätsanalyse und der effektiven numerischen Behandlung Einschränkungen gemacht. Der Einsatz dieser Methoden erfordert eine erhöhte Rechenzeit, die in der Regel in der industriellen Anwendung zur Verfügung gestellt werden kann.

Demgegenüber wird in der Forschung vermehrt auf die exakte Abbildung der theoretischen Zusammenhänge in einer eigenen für die Optimierungsaufgabe zusammengestellten Softwareumgebung Wert gelegt. Den sich hieraus ergebenen Vorteilen steht der enorme Aufwand einer völlig neu zu erstellenden, modular strukturierten softwaretechnischen Lösung gegenüber. Aus diesem Grund sind zur Zeit noch Abstriche bei der Funktionalität der Einzelbausteine und bei der Einsatzfähigkeit auf große praxisrelevante Problemstellungen der Industrie zu machen. Es ist zu erwarten, daß sich aus der Entwicklungsarbeit der Forschungsinstitute auf dem Gebiet integrierter Softwarelösungen, die auf der Grundlage einer exakten Abbildung der Theorie basieren, in Zukunft Daten- und Programmkonzeptionen entstehen, die von der Industrie und den kommerziellen Softwareherstellern in den nächsten (Software-) Generationen berücksichtigt werden.

1.2 Aufgabenstellung und Ziele dieser Arbeit

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Berechnung und Optimierung von Strukturen aus isotropen, hyperelastischen Materialien, deren bedeutendsten Vertreter das „Neo-Hooke-Material“, das „Mooney-Rivlin-Material“ und die Klasse der „Ogden-Materialien“ sind. Diese Materialien werden insbesondere zur Modellierung gummiartigen Materialverhaltens z.B. in der Reifenmechanik und bei der Untersuchung technischer Gummiprodukte eingesetzt, wobei vielfach Dehnungen von 200% bis 300% auftreten. Eine Darstellung des Stands der Forschung auf dem Gebiet der numerischen Modellierung gummiartigen Materialverhaltens wird in Abschnitt 3.1.4 gegeben.

Das Verhalten einer Struktur aus hyperelastischem Material wird neben der Geometrie der unbelasteten Ausgangsform auch von den Materialparametern beeinflußt, die für den großen Dehnungsbereich eine realistische, gleich gute Beschreibung der Materialeigenschaften des Gummis liefern müssen. Um den Einfluß sowohl unterschiedlicher geometrischer Formen als auch unterschiedlichen Materialverhaltens beschreiben zu können, ist die Sensitivität bezüglich einer Änderung der Geometrie als auch der Änderung der Materialparameter anzugeben.

Die Problematik der Aufgabenstellung „Berechnung und Optimierung von Strukturen aus isotropen, hyperelastischen Materialien“ und damit die Zielsetzung dieser Arbeit besteht in der

- Herleitung einer numerisch effizienten Methodik zur strukturmechanischen Berechnung der Materialien,
- der Herleitung der Sensitivitäten bezüglich Änderung der Geometrie und der Materialparameter sowie der
- Konzeption und Implementation eines effizienten Gesamtalgorithmus zur numerischen Behandlung der Optimierungsaufgaben.

Bei der Behandlung soll besonderer Wert auf die Herleitung der Strukturanalyse als auch der Sensitivitätsanalyse aus den kontinuumsmechanischen Beziehungen Wert gelegt werden. Die sich hieraus ergebenden Resultate sollen in vollständig analytischer Form in ein integriertes Programmkonzept eingebunden und softwaretechnisch realisiert werden.

1.3 Umfang dieser Arbeit

In Kapitel 2 werden die **kontinuumsmechanischen Grundlagen** für den späteren Gebrauch bei der Herleitung der Spannungs- und Materialtensoren in Kapitel 3 und für die Sensitivitätsanalyse in Kapitel 5 aufbereitet. Hierbei ist besonders die Beschreibung der materiellen Körper und ihrer Konfigurationen durch die konvektiven Koordinaten, d.h. die Darstellung als differenzierbare Mannigfaltigkeiten, wesentliche Voraussetzung für die in Kapitel 5 eingeführte Parametrisierung der Optimierungsaufgabe.

Die Berechnung der Sensitivität des Strukturverhaltens erfordert zunächst eine eingehende Analyse und Problembeschreibung des zugrundeliegenden Materialverhaltens. Hierzu werden in Kapitel 3 für eine Beschreibung in den Größen der Referenzkonfiguration die **Spannungs- und Materialtensoren** isotroper, hyperelastischer Materialien angegeben.

Als Ausgangspunkt der Betrachtung wird das isotrope, hyperelastische Materialgesetz in der allgemeingültigen Darstellung der Formänderungsenergiefunktion W als Funktion der Invarianten $\mathrm{I}, \mathrm{I\!I}, \mathrm{I\!I\!I}$ bzw. der Eigenwerte $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$, d.h.

$$W = \hat{W}(\mathrm{I}, \mathrm{I\!I}, \mathrm{I\!I\!I}) = \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$$

vorausgesetzt. Es sollen für die Beschreibungsmöglichkeiten keine Einschränkungen vorgenommen werden, so daß zur erfolgreichen Behandlung der Vielfalt möglicher Erscheinungsformen ein Konzept zur strukturierten, modularen Beschreibung erarbeitet werden muß. Als Eingangsgröße ist dabei nur die Angabe der Formänderungsenergiefunktion W und der zugehörigen Ableitungen nach den Invarianten für die funktionale

Abhängigkeit $W = \hat{W}(\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III})$ bzw. nach den Eigenwerten für die funktionale Abhängigkeit $W = \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ vorzusehen. Wesentlich ist bei dem vorgeschlagenen Vorgehen der vollständige Verzicht auf die Berechnung der Eigenvektoren der Verzerrungs- und Spannungstensoren.

Neben der Darstellung kompressibler, quasi-inkompressibler und exakt-inkompressibler Materialien im allgemeinen dreidimensionalen Spannungs- und Verzerrungszustand (mit den Sonderfällen des ebenen und rotationssymmetrischen Verzerrungszustandes) erfolgt die Angabe der Spannungs- und Materialtensoren für den ebenen Spannungszustand. Die Sonderfälle zweifach bzw. dreifach zusammenfallender Eigenwerte für das in den Eigenwerten formulierte Ogden-Materialgesetz werden nach Durchführung eines Grenzwertprozeßes explizit angegeben. Die entsprechenden Gleichungen für die Darstellung der Spannungs- und Materialtensoren in den Größen der Momentankonfiguration finden sich im Anhang.

In Kapitel 4 wird die **Finite-Elemente-Formulierung** zur numerischen Beschreibung hyperelastischer Materialien kurz dargestellt. Die Grundlagen der Finite-Elemente-Methode werden vorausgesetzt, so daß nur einige Angaben zur Bereitstellung des Residuums und der tangentialen Steifigkeitsmatrix für die Verschiebungsmethode bzw. eine gemischte Variationsformulierung zur Behandlung quasi-inkompressibler Materialien gemacht werden.

Nach der Darstellung der Grundlagen der Strukturanalyse, der Angabe der Spannungs- und Materialtensoren und der schwachen Form des Gleichgewichts sowie der notwendigen Diskretisierung wird in Kapitel 5 die **Sensitivitätsanalyse** beschrieben.

Den Ausgangspunkt der weiteren Untersuchungen bildet dabei die in Abschnitt 5.1 dargestellten **kontinuumsmechanischen Grundlagen der Strukturoptimierung**. Hierbei ist zunächst die Beschreibung der Geometrie um die Abhängigkeit von der Designvariablen zu erweitern, aus der sich die Folgerungen für die Deformation und die Spannungen ergeben.

Die Abhängigkeit einer strukturmechanischen Größe von der Designvariablen ist sowohl durch die variationelle als auch durch die diskrete Sensitivitätsanalyse zu beschreiben. Bei der Anwendung der **variationellen Sensitivitätsanalyse** (Abschnitt 5.2) auf das hyperelastische Materialverhalten werden die Spannungs- und Verzerrungstensoren nach der Designvariablen abgeleitet, so daß sich kontinuierliche Aussagen für die Empfindlichkeit der Struktur bei Änderung der Designvariablen ergeben. Diese kontinuierlichen Aussagen müssen anschließend konsistent zum numerischen Näherungsverfahren diskretisiert werden.

Demgegenüber erfolgt in der **diskreten Sensitivitätsanalyse** (Abschnitt 5.3) die Berechnung der Empfindlichkeit für die bereits diskretisierten algebraischen Gleichungen der Finite-Elemente-Methode. Hierbei ist die erfolgreiche Strukturierung des Problems und die Umsetzung in modulare Bausteine wesentlich für die Durchführbarkeit dieser Vorgehensweise.

Beide Methoden der Sensitivitätsanalyse sind für die beschriebenen Darstellungsarten hyperelastischen Materialverhaltens implementiert worden, wobei die Angabe der Sensitivität der Formänderungsenergie sowie die Sensitivität der ersten Ableitung als Schnittstelle zur Implementation weiterer Materialgesetze für die Optimierung genügt.

Die Aufgabenstellung „Strukturoptimierung“ erfordert in der softwaretechnischen Realisation die Kopplung von Algorithmen zur Geometriebeschreibung (CAGD), Finite-Elemente-Berechnung (FEM), der Sensitivitätsanalyse und der Mathematischen Optimierung. Die Komplexität der Bearbeitung wird durch den Anspruch einer vollständig analytischen Bereitstellung der Sensitivitäten noch erhöht. Ein **Gesamtkonzept Optimale Formgebung**, das wesentlich auf den bisher dargestellten kontinuumsmechanischen Grundlagen basiert, wird in Kapitel 6 angegeben und ist im Forschungsprogrammpaket INA–OPT (INelastic Analysis and OPTimization) realisiert worden.

Die **Beispiele** (Kapitel 7) zeigen an einigen ausgewählten Problemstellungen die Leistungsfähigkeit der auf den theoretischen Beziehungen basierenden und vollständig analytisch vorgenommenen Sensitivitätsanalyse für isotrope, hyperelastische Materialien sowie der softwaretechnisch umgesetzten Gesamtkonzeption Optimale Formgebung. Zunächst wurde die **Gewichtsminimierung** einer Scheibe mit Loch unter großen elastischen Deformationen und einzuhaltenden Nebenbedingungen für die deformierte Struktur durchgeführt. Darüberhinaus konnte der entwickelte Gesamtalgorithmus zur Lösung **inverser Probleme** eingesetzt werden, wie sie die Identifikation von Materialparameter und Geometrie aus dem Deformationsverhalten der Struktur darstellt. Anschließend zeigt die **praxisrelevante Formoptimierung** einer S2-Normprobe nach DIN die Einsatzmöglichkeiten zur Beschränkung auftretender Spannungsspitzen. Die Lösung dieser Aufgabe ist für die Konstruktion geeigneter Proben zum Nachweis der Materialeigenschaften in der Materialprüfung interessant. Zum Abschluß wurde am Beispiel der **Reifenkonstruktion** exemplarisch aufgezeigt, wie in der industriellen Praxis ein Konstruktionsprozeß durch den Einsatz von Optimierungssoftware geeignet unterstützt werden kann.

Im Anhang wird zum einen die Darstellung der **Spannungs- und Materialtensoren** durch die Angabe der Beziehungen bzgl. der Größen der **Momentankonfiguration** vervollständigt (Anhang A). Weiterhin finden sich Angaben zur Struktur der Implementation der Spannungs- und Materialtensoren (Anhang B). Eine Zusammenstellung der eingeführten Notation in Anhang C soll dem Leser die Beschäftigung mit der vorliegenden Arbeit erleichtern.

Kapitel 2

Kontinuumsmechanische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die für die kontinuumsmechanische Theorie isotroper, hyperelastischer Materialien relevanten Begriffe und Beziehungen kurz angegeben. Ausführliche Darstellungen finden sich z.B. in *Truesdell, Noll* [103], *Malvern* [58] und *Marsden, Hughes* [59]. Die Grundlagen der Elastizitätstheorie sind u. a. in *Stein, Barthold* [95] aufbereitet worden. Die Beschreibung der Abhängigkeit kontinuumsmechanischer Größen von der gewählten Geometrie eines betrachteten Körpers, d.h. von den Designvariablen, wird in Kapitel 5 vorgenommen.

2.1 Kinematik

2.1.1 Der materielle Körper und seine Lage im Raum

Der materielle Körper $\mathcal{B}$ unserer Betrachtung besteht aus einer zusammenhängenden Menge materieller Punkte $\mathcal{M}$. Die Raum aller möglichen materiellen Körper $\mathcal{B}$ wird mit B bezeichnet, d.h. $\mathcal{B} \in B$. Zu jedem Zeitpunkt t aus dem Raum der betrachteten Zeitpunkte T_t werden die materiellen Punkte mittels der Abbildung χ bijektiv und stetig auf die Raumpunkte $\mathcal{P}$ des dreidimensionalen euklidischen Punktraumes $\mathbb{E}^3$ abgebildet. Bezüglich einer raumfesten kartesischen Basis $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ zum Zeitpunkt t erhalten wir die Darstellung der Lage des materiellen Punktes $\mathcal{M}$ über den Ortsvektor $\mathbf{x} = x^k \mathbf{e}_k$ zum Raumpunkt $\mathcal{P} \in \mathbb{E}^3$, d.h. es gilt

$$\boxed{\chi : \begin{cases} \mathcal{B} \times \mathbb{R} & \rightarrow \quad \mathbb{R}^3 \\ (\mathcal{M}, t) & \mapsto \quad \mathbf{x} = \chi(\mathcal{M}, t). \end{cases}} \tag{2.1}$$

Zu der Referenzzeit $t = t_\circ$ nimmt der unverformte, unbelastete und spannungsfreie materielle Körper dabei die Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ = \chi(\mathcal{B}, t_\circ) =: \chi_\circ(\mathcal{B})$ ein. Bezüglich der raumfesten kartesischen Basis $\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2, \mathbf{E}_3$ zur Referenzzeit $t_\circ$ gilt für die Lage des materiellen Punktes $\mathbf{X} = X^A \mathbf{E}_A$. Die Koordinaten X^A heißen materielle oder Lagrangesche Koordinaten. Die Größen der Referenzkonfiguration werden im weiteren mit Großbuchstaben bezeichnet.

Zur aktuellen Zeit $t > t_\circ$ nimmt der verformte materielle Körper die Momentankonfiguration $\mathbf{B}_t = \chi(\mathcal{B}, t) =: \chi_t(\mathcal{B})$ ein. Für die materiellen Punkte gilt dann bzgl. der gewählten Basis die Darstellung über den Ortsvektor $\mathbf{x} = x^k \mathbf{e}_k$. Die Koordinaten x^k heißen räumliche oder Eulersche Koordinaten. Die Größen der Momentankonfiguration werden mit Kleinbuchstaben bezeichnet.

Die Bewegung des materiellen Körpers von der Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ$ zum Referenzzeitpunkt $t_\circ$ zur Momentankonfiguration $\mathbf{B}_t$ der aktuellen Zeit t kann durch die Abbildung

$$\boxed{\Phi_{t,t_\circ} : \begin{cases} \mathbf{B}_\circ & \to \quad \mathbf{B}_t \\ \mathbf{X} & \mapsto \quad \mathbf{x} = \Phi_{t,t_\circ}(\mathbf{X}) := \left[\chi_t \circ \{\chi_\circ\}^{-1}\right](\mathbf{X}) \end{cases}} \tag{2.2}$$

dargestellt werden. Dabei ist die Abbildung $\Phi_{t,t_\circ}$ stetig differenzierbar und für jeden beliebigen und dann festgewählten Zeitpunkt t bijektiv. Zur Vereinfachung der Notation wird Φ stets ohne Indizes geschrieben. Weiterhin wird die Übereinstimmung der kartesischen Basisvektoren der Referenz- und Momentankonfiguration vorausgesetzt, d.h. $\mathbf{E}_i = \mathbf{e}_i$.

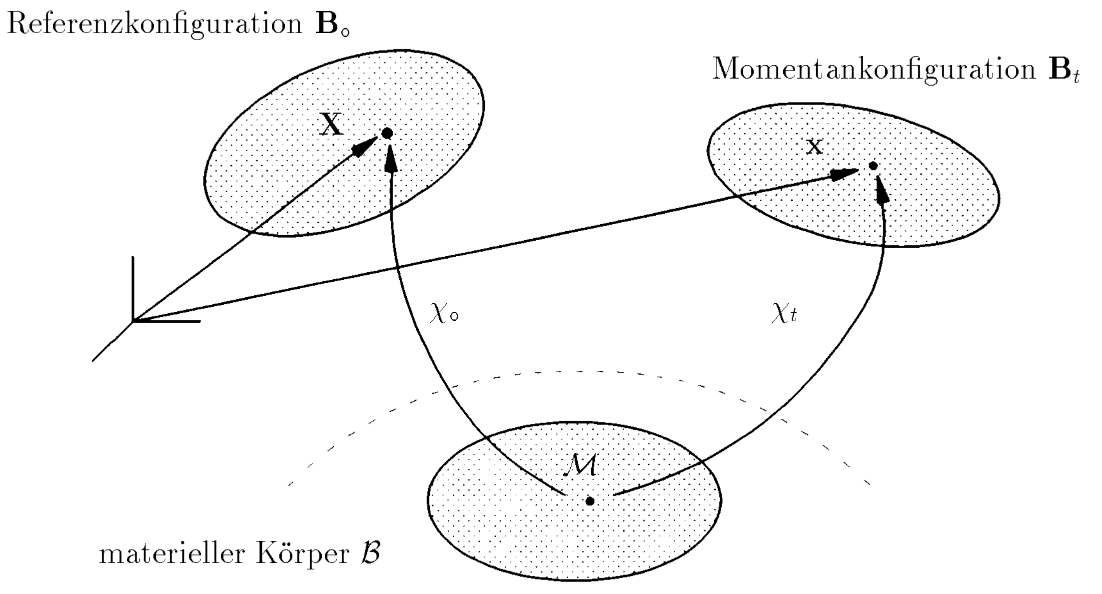

Abbildung 2.1: Abbildung χ des materiellen Körpers $\mathcal{B}$ auf die Referenz- und Momentankonfiguration $\mathbf{B}_\circ$ bzw. $\mathbf{B}_t$

Die Beschreibung des kontinuumsmechanischen Problems kann vollständig in der Referenzbeschreibung, d.h. in Abhängigkeit der Lage $\mathbf{X}$ des materiellen Punktes $\mathcal{M}$ zur Referenzzeit $t_\circ$ erfolgen. Für die theoretische und numerische Behandlung der Abhängigkeit des materiellen Körpers und damit der Konfigurationen von einer Designvariablen s ist die Beschränkung der Betrachtung auf die Deformation eines gegebenen Körpers zwischen Referenz- und Momentankonfiguration nicht ausreichend. Vielmehr ist die eindeutige Beschreibung der materiellen Punkte $\mathcal{M}$ und des materiellen Körpers $\mathcal{B}$ für die weitere Untersuchung in Kapitel 5 wichtig.

Zu diesem Zweck erfolgt die Einführung konvektiver Koordinaten $\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3$ mit denen der materielle Punkt $\mathcal{M}$ eindeutig beschrieben werden kann. Somit wird eine von der Designvariable s unabhängige Parametrisierung des materiellen Körpers vorgenommen. Dabei wird der Parameterraum

$$T_\Theta := [0,1]^3 \subset I\!R^3 \tag{2.3}$$

der konvektiven Koordinaten $\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3$ mit Hilfe der Abbildung

$$\boxed{\omega : \begin{cases} T_\Theta & \rightarrow & B \\ (\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3) & \mapsto & \mathcal{M} = \omega(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3) \end{cases}} \tag{2.4}$$

in den Raum $B := \{\mathcal{B} | \mathcal{B} = \omega(T_\Theta)\}$ der materiellen Körper $\mathcal{B} = \omega(T_\Theta)$ abgebildet.

Mit der Abbildung χ der materiellen Punkte auf die Raumpunkte ergibt sich durch Abbildungskomposition die Darstellung der Raumpunkte durch die konvektiven Koordinaten $(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3) \in T_\Theta$ und der Zeit $t \in T_t = I\!R$

$$\boxed{\psi : \begin{cases} T_\Theta \times T_t & \rightarrow & I\!R^3 \\ (\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t) & \mapsto & \mathbf{x} = \psi(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t). \end{cases}} \tag{2.5}$$

Damit können die kartesischen Koordinaten X^A bzw. x^i über die Abbildung ψ durch die konvektiven Koordinaten beschrieben werden, d.h. es gilt

$$X^A = \hat{X}^A(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3) \qquad \text{bzw.} \qquad x^i = \hat{x}^i(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t). \tag{2.6}$$

Die Beziehung zwischen den Koordinaten $\left\{X^A\right\}$ bzw. $\{x^i\}$ und $\left\{\Theta^B\right\}$ sei bei festgehaltener Zeit t bijektiv und beliebig oft stetig differenzierbar.

Den konvektiven Koordinaten Θ^B sind die kovarianten, konvektiven Basisvektoren

$$\boxed{\mathbf{G}_B := \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \Theta^B} = \frac{\partial X^A}{\partial \Theta^B}\, \mathbf{E}_A \qquad \text{und} \qquad \mathbf{g}_j := \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \Theta^j} = \frac{\partial x^i}{\partial \Theta^j}\, \mathbf{e}_i} \tag{2.7}$$

der Referenz- bzw. der Momentankonfiguration zugeordnet. Weiterhin treten die kontravarianten Basisvektoren $\{\mathbf{G}^1, \mathbf{G}^2, \mathbf{G}^3\}$ bzw. $\{\mathbf{g}^1, \mathbf{g}^2, \mathbf{g}^3\}$ auf, die z.B. für die Referenzkonfiguration über die ko- bzw. kontravarianten Metrikkoeffizienten $G_{AB} = \mathbf{G}_A \cdot \mathbf{G}_B$ mit $G_{AB}\, G^{BC} = \delta_A^C$ und $\mathbf{G}^A = G^{AB}\, \mathbf{G}_B$ berechnet werden können. Man beachte, daß die Metriktensoren mit $\mathbf{G}$ und $\mathbf{g}$, d.h. mit dem gleichen Buchstaben, jedoch ohne Indizes, bezeichnet werden, d.h. es gilt

$$\mathbf{1} = \mathbf{G}_i \otimes \mathbf{G}^i, \quad \mathbf{G} = G_{ij}\, \mathbf{G}^i \otimes \mathbf{G}^j \quad \text{und} \quad \mathbf{G}^{-1} = G^{ij}\, \mathbf{G}_i \otimes \mathbf{G}_j, \tag{2.8}$$

$$\mathbf{1} = \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}^i, \quad \mathbf{g} = g_{ij}\, \mathbf{g}^i \otimes \mathbf{g}^j \quad \text{und} \quad \mathbf{g}^{-1} = g^{ij}\, \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j. \tag{2.9}$$

Für die numerische Berechnung ist die Darstellung der Bewegung eines deformierbaren Körpers über das Verschiebungsfeld $\mathbf{u} := \mathbf{x} - \mathbf{X}$ mit der funktionalen Abhängigkeit

$$\mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, t) = \check{\mathbf{u}}(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t) \tag{2.10}$$

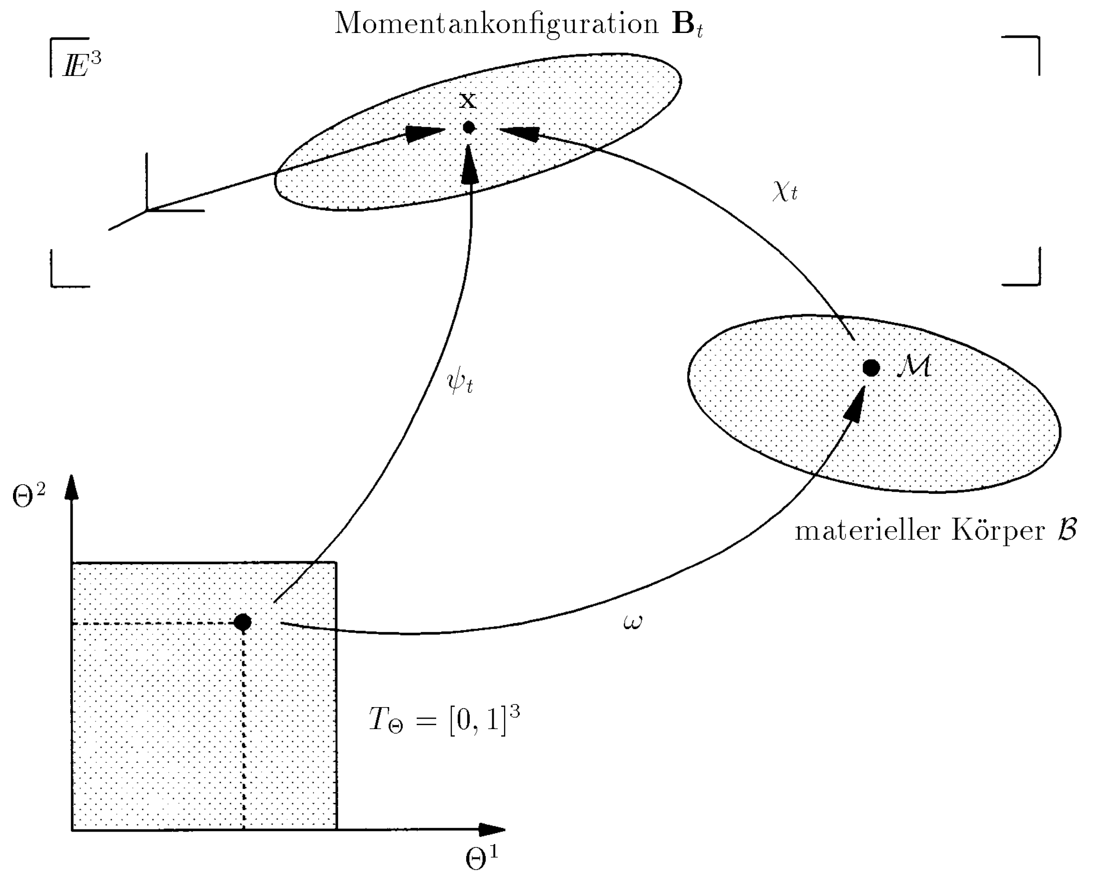

Abbildung 2.2: Beschreibung der Lage des materiellen Körpers bei Einführung konvektiver Koordinaten $\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3$

zwischen der verformten und unverformten Konfiguration bedeutsam.

Als weitere Möglichkeit zur Beschreibung der Lage materieller Körper im Raum wird z.B. in *Marsden, Hughes* [59] das Konzept der *differenzierbaren Mannigfaltigkeit* benutzt, das die Grundlage für genauere theoretische Untersuchungen bildet. Hierbei wird die Konfiguration des Körpers stückweise, d.h. durch eine endliche Anzahl hinreichend oft stetig differenzierbarer lokaler Abbildungen eines Koordinatensystems $\left\{Z^B\right\}$ auf die kartesischen Koordinaten $\left\{X^A\right\}$, beschrieben. Diese Tatsache wird in Kapitel 6 nochmals aufgegriffen.

Die Abhängigkeit der geometrischen und damit aller weiteren kontinuumsmechanischen Größen von der gewählten Geometrie, d.h. von der Designvariablen s, wird in Kapitel 5 dargestellt. Dabei werden die oben definierten Abbildungen ω, ψ und Φ um die Abhängigkeit von der Designvariablen erweitert. Zur Vermeidung unnötiger zusätzlicher Bezeichnungen werden diese modifizierten Abbildungen wieder mit den hier gewohnten griechischen Buchstaben benannt. Im weiteren Verlauf dieses Kapitels und der Kapitel 3 und 4 ist die Berücksichtigung der Abhängigkeit von der Designvariablen s nicht erforderlich.

2.1.2 Der materielle Deformationsgradient und die Verzerrungsmaße

Die Beschreibung der bei der Abbildung Φ auftretenden Deformation und Veränderung des materiellen Körpers erfolgt mit Hilfe des materiellen Deformationsgradienten

$$\boxed{\mathbf{F} := \operatorname{Grad}\mathbf{x} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial X^A} \otimes \mathbf{E}^A = \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{G}^i\,,} \tag{2.11}$$

dessen Determinante $J := \det \mathbf{F}$ aus physikalischen Gründen stets positiv sein muß. Mit dem materiellen Verschiebungsgradienten $\mathbf{H} := \operatorname{Grad}\mathbf{u}$ ergibt sich die Beziehung $\mathbf{F} = \operatorname{Grad}\mathbf{x} = \operatorname{Grad}(\mathbf{X}+\mathbf{u}) = \mathbf{1} + \mathbf{H}$.

Wichtig für die Analyse des Deformationszustandes ist die polare Zerlegung des materiellen Deformationsgradienten in den eigentlich orthogonalen Drehtensor $\mathbf{R}$ und die positiv definiten, symmetrischen Strecktensoren $\mathbf{U}$ bzw. $\mathbf{V}$ in der Form

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R}. \tag{2.12}$$

Aus der Beobachtung, daß der materielle Deformationsgradient für Starrkörperbewegungen nicht verschwindet und zudem noch richtungsabhängig ist, wird die Wahl geeigneterer Verzerrungsmaße erforderlich. Zunächst wird durch die Definition des materiellen Rechts-Cauchy-Green-Tensors $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T\mathbf{F} = \mathbf{U}^2$ bzw. des räumlichen Links-Cauchy-Green-Tensors $\mathbf{b} = \mathbf{F}\mathbf{F}^T = \mathbf{V}^2$ der Anteil der orthogonalen Transformation eliminiert. Die Spektralzerlegung von $\mathbf{C}$ (und $\mathbf{b}$) ist aufgrund der Symmetrie möglich und kann mit Hilfe der Invarianten

$$\begin{aligned}
\mathrm{I}_{\mathbf{C}} &= \operatorname{tr}\mathbf{C} = C_{AA} = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2\,,\\
\mathrm{II}_{\mathbf{C}} &= \frac{1}{2}\left[(\operatorname{tr}\mathbf{C})^2 - \operatorname{tr}\mathbf{C}^2\right]\\
&= \frac{1}{2}\left[C_{AA}\,C_{BB} - C_{AB}\,C_{AB}\right]\\
&= \lambda_1^2\,\lambda_2^2 + \lambda_2^2\,\lambda_3^2 + \lambda_3^2\,\lambda_1^2\\
\text{und}\qquad \mathrm{III}_{\mathbf{C}} &= \det\mathbf{C} = e_{ABC}\,C_{A1}C_{B2}C_{C3} = \lambda_1^2\,\lambda_2^2\,\lambda_3^2
\end{aligned} \tag{2.13}$$

über die Lösung der charakteristischen Gleichung

$$\det(\mathbf{C} - \lambda^2\,\mathbf{1}) = 0 \tag{2.14}$$

bestimmt werden. Die Invarianten von $\mathbf{C}$ werden künftig mit $\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}$ bzw. mit $\mathrm{I}_1, \mathrm{I}_2, \mathrm{I}_3$ bezeichnet. Weiterhin wird die Notation $i_{\mathbf{C}} := \{\mathrm{I}_{\mathbf{C}}, \mathrm{II}_{\mathbf{C}}, \mathrm{III}_{\mathbf{C}}\}$ benutzt. Aus dem zugehörigen charakteristischen Polynom

$$\lambda^6 - \mathrm{I}_{\mathbf{C}}\lambda^4 + \mathrm{II}_{\mathbf{C}}\lambda^2 - \mathrm{III}_{\mathbf{C}} = 0 \tag{2.15}$$

können die reellen Eigenwerte $\lambda_1^2, \lambda_2^2, \lambda_3^2$ von $\mathbf{C}$ und damit auch die reellen Eigenwerte $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ von $\mathbf{U}$ bestimmt werden. Die Hauptachsenrichtungen $\mathbf{N}_1, \mathbf{N}_2, \mathbf{N}_3$ von $\mathbf{U}$ bzw.

von $\mathbf{C}$ sind paarweise orthogonal. Hieraus ergeben sich somit die wichtigen Spektraldarstellungen

$$\mathbf{U} = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i \quad \text{und} \quad \mathbf{C} = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i^2 \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i. \tag{2.16}$$

Analog erhalten wir die Spektraldarstellung des Links-Streck-Tensors $\mathbf{V}$ bzw. des Links-Cauchy-Green-Tensors $\mathbf{b}$ in der Form

$$\mathbf{V} = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{b} = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i^2 \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i. \tag{2.17}$$

Hierbei bezeichnen $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3$ die paarweise orthogonalen Eigenvektoren von $\mathbf{V}$ bzw. von $\mathbf{b}$. Man beachte, daß die Invarianten des Rechts- und Links-Cauchy-Green-Tensors $\mathbf{C}$ und $\mathbf{b}$ gleich sind, d.h. es gilt $\mathrm{I}_{\mathbf{C}} = \mathrm{I}_{\mathbf{b}}$, $\mathrm{II}_{\mathbf{C}} = \mathrm{II}_{\mathbf{b}}$ und $\mathrm{III}_{\mathbf{C}} = \mathrm{III}_{\mathbf{b}}$.

Eine ganze Klasse von materiellen Verzerrungstensoren kann mit Hilfe der Spektralzerlegung in der Form

$$\mathbf{E}_m(\mathbf{U}) := \begin{cases} \frac{1}{m}(\mathbf{U}^m - \mathbf{1}) & \text{für } m \neq 0 \\ \ln\, \mathbf{U} & \text{für } m = 0 \end{cases} \tag{2.18}$$

konstruiert werden, siehe z.B. *Ogden* [69, Ch. 2.2.7]. Den bedeutendsten Vertreter erhalten wir hieraus für $m = 2$ mit dem Greenschen Verzerrungstensor

$$\mathbf{E} := \mathbf{E}_2 = \frac{1}{2}\left\{\mathbf{F}^T\mathbf{F} - \mathbf{1}\right\} = \frac{1}{2}\left\{\mathbf{C} - \mathbf{1}\right\} = \frac{1}{2}\left\{\mathbf{H} + \mathbf{H}^T + \mathbf{H}^T\mathbf{H}\right\}, \tag{2.19}$$

der sich auch aus der Differenz der Quadrate der Linienelemente zwischen der verformten Momentankonfiguration und der unverformten Referenzkonfiguration ergibt.

Für die Behandlung inkompressibler Ogden-Materialien ist die multiplikative Zerlegung des materiellen Deformationsgradienten in volumetrische und isochore Anteile in der Form

$$\mathbf{F} = J^{\frac{1}{3}}\, \overline{\mathbf{F}} = (J^{\frac{1}{3}}\, \mathbf{1})\, \overline{\mathbf{F}} \tag{2.20}$$

wichtig. Hierin ist $\overline{\mathbf{F}} := J^{-\frac{1}{3}}\, \mathbf{F}$ der materielle Deformationsgradient einer isochoren Deformation und $J^{\frac{1}{3}}\, \mathbf{1}$ stellt eine reine Volumendehnung dar. Betrachten wir die zu $\overline{\mathbf{F}}$ zugehörige polare Zerlegung $\overline{\mathbf{F}} = \overline{\mathbf{R}}\, \overline{\mathbf{U}}$, so gilt für die Eigenwerte $\overline{\lambda}_i$ die Beziehung

$$\overline{\lambda}_i = J^{-\frac{1}{3}}\, \lambda_i, \tag{2.21}$$

wobei λ_i $(i = 1, 2, 3)$ die aus Gleichung (2.15) berechneten Eigenwerte von $\mathbf{U}$ sind. Damit erhalten wir die Inkompressibilitätsbeziehung

$$\overline{\lambda}_1 \cdot \overline{\lambda}_2 \cdot \overline{\lambda}_3 = 1. \tag{2.22}$$

Für die Untersuchung inkompressibler Materialien werden die zugehörigen geometrischen Größen, welche die obige Inkompressibilitätsbedingung erfüllen, mit dem übergesetzten Querstrich bezeichnet. Weitere kinematische Beziehungen werden nach Bedarf eingeführt.

2.2 Bilanzgleichungen

Die globalen und lokalen Formulierungen der Erhaltungssätze der Masse, der Bewegungsgröße und des Drehimpulses sollen an dieser Stelle kurz eingeführt werden. Die Aussagen der Erhaltungssätze gelten für jeden beliebigen materiellen Körper bzw. Teilkörper $\mathbf{B}_t$ mit zugehöriger Oberfläche $\partial\mathbf{B}_t$.

2.2.1 Massenbilanz

Unter Voraussetzung der Existenz einer Massendichte $\rho = \hat{\rho}(\mathbf{x})$ ist die Gesamtmasse eines materiellen Körpers durch

$$m := \int_{\mathbf{B}_t} dm = \int_{\mathbf{B}_t} \rho \; dv \tag{2.23}$$

gegeben. Der Satz von der Erhaltung der Masse besagt, daß sich die Masse m des materiellen Körpers $\mathcal{B}$ während des Deformationsprozesses nicht ändert. Hieraus ergeben sich für jeden Punkt $\mathbf{x} \in \mathbf{B}_t$ die lokalen Ausssagen

$$\rho_\circ = \rho \det \mathbf{F} \qquad \text{und} \qquad \dot{\rho} + \rho \; \operatorname{div} \dot{\mathbf{x}} = 0. \tag{2.24}$$

2.2.2 Impulsbilanz

Die globale Kräftegleichgewichtsbedingung ist mit dem Erhaltungssatz von der Bewegungsgröße

$$\mathbf{I} := \int_{\mathbf{B}_t} \rho \, \dot{\mathbf{x}} \, dv \tag{2.25}$$

eines materiellen Körpers gegeben, der besagt, daß die zeitliche Änderung der Bewegungsgröße $\mathbf{I}$ gleich der resultierenden Kraft der von außen auf den Körper einwirkenden Kräfte ist. Mit der auf den Körper einwirkenden massenbezogenen Beschleunigung $\overline{\mathbf{k}} = \hat{\overline{\mathbf{k}}}(\mathbf{x})$ und den flächenhaft verteilten eingeprägten Spannungen $\overline{\mathbf{t}} = \hat{\overline{\mathbf{t}}}(\mathbf{x})$ ergibt sich mit Berücksichtigung der Massenerhaltung die Aussage

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathbf{B}_t} \rho \; \dot{\mathbf{x}} \; dv = \int_{\mathbf{B}_t} \rho \; \ddot{\mathbf{x}} \; dv = \int_{\mathbf{B}_t} \rho \; \overline{\mathbf{k}} \; dv + \int_{\partial\mathbf{B}_t} \overline{\mathbf{t}} \; da. \tag{2.26}$$

Diese Beziehung kann auch bezüglich der Referenzkonfiguration und für den statischen Fall hergeleitet werden. Der Übergang von der globalen Kräftegleichgewichtsbedingung zu den zugehörigen lokalen Gleichgewichtsbedingungen ist erst nach Einführung der Spannungstensoren möglich.

2.2.3 Spannungstensoren

Der Spannungsvektor $\mathbf{t}$ in einem Punkt $\mathbf{x}$ der Oberfläche $\partial\mathbf{B}_t$ der Momentankonfiguration $\mathbf{B}_t$ ist durch den Grenzwert

$$\mathbf{t} := \lim_{\Delta a \to 0} \frac{\Delta \mathbf{f}}{\Delta a} = \frac{d\mathbf{f}}{da} \tag{2.27}$$

einer Kraft $\Delta\mathbf{f}$ bezogen auf ein Flächenelement Δa definiert. Mit den Aussagen des Cauchy-Postulats, des Cauchy-Fundamentallemmas und des Cauchy-Theorems, die sich alle auf die globalen Kräftegleichgewichtsbedingungen stützen (siehe z.B. [95]), kann die Abhängigkeit des Spannungsvektors $\mathbf{t}$ an einem Ort $\mathbf{x}$ zu einer Zeit t genauer in der Form

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, t, \mathbf{n}) = \mathbf{T}(\mathbf{x}, t)\mathbf{n} \tag{2.28}$$

beschrieben werden. Hierbei stellt $\mathbf{T}(\mathbf{x}, t)$ den Cauchyschen Spannungstensor und $\mathbf{n}$ den äußeren Normalenvektor an die Oberfläche $\partial\mathbf{B}_t$ im Punkt $\mathbf{x}$ dar. Für die numerische Umsetzung der kontinuumsmechanischen Grundlagen ist der 1. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor, definiert durch

$$\mathbf{P} := \det\mathbf{F}\ \mathbf{T}\ \mathbf{F}^{-T}, \tag{2.29}$$

und der 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor, definiert durch

$$\mathbf{S} := \mathbf{F}^{-1}\mathbf{P} = \det\mathbf{F}\ \mathbf{F}^{-1}\ \mathbf{T}\mathbf{F}^{-T}, \tag{2.30}$$

von zentraler Bedeutung. Weiterhin wird der Kirchhoff-Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$ in der Form

$$\boldsymbol{\tau} := J\ \mathbf{T} = \mathbf{F}\ \mathbf{S}\ \mathbf{F}^T \tag{2.31}$$

eingeführt. Während der 1. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor $\mathbf{P}$ die Normale $\mathbf{N}$ an die Referenzkonfiguration im Punkt $\mathbf{X}$ auf den Spannungsvektor $\mathbf{t}_\circ$ der Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ$ gemäß der linearen Beziehung

$$\mathbf{t}_\circ(\mathbf{X}, t, \mathbf{N}) = \mathbf{P}(\mathbf{X}, t)\mathbf{N} \tag{2.32}$$

abbildet und somit eine eindeutige physikalische Bedeutung besitzt, ist der 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor eine reine Rechengröße ohne physikalische Interpretation. Die Bedeutung des 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensors liegt in seiner Symmetrieeigenschaft (siehe unten), in seinem vollständigen Bezug auf die Größen der Referenzkonfiguration und in der Tatsache, daß er mit der zeitlichen Ableitung des Greenschen Verzerrungstensors $\mathbf{E}$ eine arbeitskonforme Paarung zur Bestimmung der inneren Spannungsleistung bildet.

2.2.4 Die dynamischen Feldgleichungen

Nach Einführung des Cauchyschen Spannungstensors $\mathbf{T}$ kann mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes aus der globalen Kräftegleichgewichtsbedingung (2.26) die 1. Cauchysche Bewegungsgleichung oder auch dynamische Feldgleichung in räumlicher Darstellung

$$\operatorname{div}\mathbf{T} + \rho\,(\overline{\mathbf{k}} - \ddot{\mathbf{x}}) = \mathbf{0} \tag{2.33}$$

hergeleitet werden, die für jeden Punkt $\mathbf{x} \in \mathbf{B}_t$ erfüllt sein muß. Die Transformation auf Größen der Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ$ liefert für jeden Punkt $\mathbf{X} \in \mathbf{B}_\circ$ die dynamischen Feldgleichungen in der materieller Form

$$\operatorname{Div}\mathbf{P} + \rho_\circ(\overline{\mathbf{k}}_\circ - \ddot{\mathbf{x}}) = \mathbf{0} \quad \text{bzw.} \quad \operatorname{Div}(\mathbf{F}\mathbf{S}) + \rho_\circ(\overline{\mathbf{k}}_\circ - \ddot{\mathbf{x}}) = \mathbf{0} \tag{2.34}$$

für die Piola-Kirchhoff-Spannungstensoren $\mathbf{P}$ bzw. $\mathbf{S}$.

2.2.5 Drehimpulsbilanz

Die globale Momentengleichgewichtsbedingung ist mit dem Erhaltungssatz des Drehimpulses

$$\mathbf{L} := \int_{\mathbf{B}_t} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_\circ) \times \rho \, \dot{\mathbf{x}} \, dv. \tag{2.35}$$

eines materiellen Körpers gegeben, der besagt, daß die zeitliche Änderung des Drehimpulses $\mathbf{L}$ gleich dem resultierenden Moment der von außen auf den Körper einwirkenden Kräfte ist. Mit den oben benannten äußeren Kräften auf den materiellen Körper und der Definition $\mathbf{r} := \mathbf{x} - \mathbf{x}_\circ$, wobei $\mathbf{x}_\circ$ den Bezugspunkt des Momentengleichgewichtes bezeichnet, erhalten wir

$$\frac{D\mathbf{L}}{Dt} = \frac{D}{Dt} \int_{\mathbf{B}_t} \rho \, \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{x}} \, dv = \int_{\mathbf{B}_t} \mathbf{r} \times \rho \, \overline{\mathbf{k}} \, dv + \int_{\partial \mathbf{B}_t} \mathbf{r} \times \overline{\mathbf{t}} \, da. \tag{2.36}$$

Mit Berücksichtigung der Massenerhaltung und der lokalen Form des Kräftegleichgewichtes ergibt sich aus der lokalen Momentengleichgewichtsbedingung $\mathbf{1} \times \mathbf{T} = \mathbf{0}$ für jeden Punkt $\mathbf{x} \in \mathbf{B}_t$ die Symmetrie des Cauchyschen Spannungstensors

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T. \tag{2.37}$$

Hieraus folgt mit der Definition (2.30) des 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensors $\mathbf{S}$ die Symmetrieeigenschaft

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^T, \tag{2.38}$$

während für den 1. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor die Darstellung

$$\mathbf{P}\,\mathbf{F}^T = \left\{ \mathbf{P}\,\mathbf{F}^T \right\}^T \tag{2.39}$$

gilt.

2.3 Zeitableitung kontinuumsmechanischer Größen

Die materielle Zeitableitung kontinuumsmechanischer Größen wird zur Beschreibung der Zuwächse der Spannung in einem materiellen Punkt benötigt.

2.3.1 Die Pull-Back- und Push-Forward-Operation

Für die Behandlung physikalischer Größen spielen die Transformationsbeziehungen zwischen den dualen Darstellungsweisen bzgl. der Größen der Referenz- bzw. Momentankonfiguration eine wesentliche Rolle. Eine umfassende Darstellung der sogenannten *Pull-Back-* und *Push-Forward-Operation* findet man in *Marsden, Hughes* [59] sowie ausführliche Darlegungen und Beispiele in *Wriggers* [108] und *Miehe* [60].

Mit Hilfe der Darstellung des materiellen Deformationsgradienten in den konvektiven Basisvektoren der Referenz- bzw. Momentankonfiguration nach

$$\mathbf{F} = \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{G}^i, \quad \mathbf{F}^T = \mathbf{G}^i \otimes \mathbf{g}_i, \quad \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{G}_i \otimes \mathbf{g}^i \quad \text{und} \quad \mathbf{F}^{-T} = \mathbf{g}^i \otimes \mathbf{G}_i \tag{2.40}$$

sowie der Transformationsbeziehungen der Basisvektoren

$$\mathbf{g}_i = \mathbf{F}\,\mathbf{G}_i \qquad \text{und} \qquad \mathbf{g}^i = \mathbf{F}^{-T}\,\mathbf{G}^i \tag{2.41}$$

sind die obigen Operationen wie folgt definiert:

- Pull-Back-Operation Φ^*:
  Zurückziehen des Bezugs von Vektor- und Tensorkomponenten von Basen der Momentankonfiguration $\mathbf{B}_t$ auf Basen der Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ$, z.B. gilt für einen kontravarianten Tensor $\mathbf{a} = a^i\,\mathbf{g}_i$ der Momentankonfiguration

$$\mathbf{A} = \Phi^*(\mathbf{a}) = \mathbf{F}^{-1}\,\mathbf{a} = (\mathbf{G}_l \otimes \mathbf{g}^l)\,(a^i\mathbf{g}_i) = a^i\mathbf{G}_i.$$

- Push-Forward-Operation Φ_*:
  Vorschieben des Komponentenbezugs von Basen der Referenzkonfiguration auf Basen der Momentankonfiguration, z.B. gilt für einen kovarianten Tensor mit $\mathbf{B} = B_{ij}\mathbf{G}^i \otimes \mathbf{G}^j$ die Beziehung

$$\begin{aligned} \mathbf{b} = \Phi_*(\mathbf{B}) &= \mathbf{F}^{-T}\,\mathbf{B}\,\mathbf{F}^{-1} \\ &= (\mathbf{g}^l \otimes \mathbf{G}_l)\,(B_{ij}\mathbf{G}^i \otimes \mathbf{G}^j)\,(\mathbf{G}_m \otimes \mathbf{g}^m) \\ &= B_{ij}\mathbf{g}^i \otimes \mathbf{g}^j. \end{aligned}$$

Die Pull-Back- und Push-Forward-Operationen bewirken somit einen Wechsel der Tensorbasen bei gleichbleibenden Tensorkomponenten. $\mathbf{A}$ und $\mathbf{a}$ bzw. $\mathbf{B}$ und $\mathbf{b}$ sind duale Vektoren und Tensoren bezüglich der Referenz- und Momentankonfiguration, die durch geometrisch sinnvolle Transformationen verknüpt sind. Als Beispiel sei die Beziehung zwischen dem Rechts-Cauchy-Green-Tensor $\mathbf{C}$ und dem Metriktensor $\mathbf{g}$ der Momentankonfiguration

$$\mathbf{C} = \Phi^*(\mathbf{g}) \qquad \text{und} \qquad \mathbf{g} = \Phi_*(\mathbf{C})$$

angegeben.

2.3.2 Die Lie-Ableitung

Der räumliche Geschwindigkeitsgradient $\mathbf{l}$ sowie die räumliche Verzerrungsgeschwindigkeit $\mathbf{d}$, definiert durch

$$\mathbf{l} := \dot{\mathbf{F}}\,\mathbf{F}^{-1} \qquad \text{und} \qquad \mathbf{d} := \frac{1}{2}\left\{\mathbf{l} + \mathbf{l}^T\right\} = \frac{1}{2}\,\mathbf{F}^{-T}\,\dot{\mathbf{C}}\,\mathbf{F}^{-1}, \tag{2.42}$$

bilden die geometrische Grundlage der materiellen Zeitableitung.

Wesentlicher Bestandteil der materiellen Zeitableitung räumlicher Größen ist die *Lie-Ableitung*, die als relative Zeitableitung räumlicher Größen interpretiert werden kann. Eine Darstellung der Grundlagen findet sich bei *Marsden, Hughes* [59], Erläuterungen und Beispiele z.B. bei *Wriggers* [108] und *Miehe* [60]. Auf der Grundlage der Formulierung

$$\boxed{L_{\mathbf{v}}\,(\mathbf{t}) = \Phi_*\left[\frac{d}{dt}\,\Phi^*(\mathbf{t})\right]} \tag{2.43}$$

der Lie-Ableitung eines räumlichen Vektorfeldes $\mathbf{t}$ mit Hilfe der Pull-Back- und Push-Forward-Operationen ergeben sich die folgenden Berechnungsschritte (siehe z.B. *Miehe* [60]):

1. Pull-Back der räumlichen Größe von der Momentankonfiguration auf die Referenzkonfiguration.
2. Zeitableitung der so erzeugten dualen materiellen Größe.
3. Push-Forward der abgeleiteten materiellen Größe von der Referenzkonfiguration auf die Momentankonfiguration.

Hierbei ist $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}}$ die zeitliche Ableitung der Deformation Φ. Als wichtige, im weiteren benutzte Beziehungen, ergeben sich

$$L_{\mathbf{v}}\,(\mathbf{g}) = 2\,\mathbf{d}, \tag{2.44}$$

$$L_{\mathbf{v}}\,(\boldsymbol{\tau}) = \dot{\boldsymbol{\tau}} - \mathbf{l}\,\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}\,\mathbf{l} = \mathbf{F}\,\dot{\mathbf{S}}\,\mathbf{F}^T. \tag{2.45}$$

$$L_{\mathbf{v}}\,(\mathbf{T}) = \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{l}\,\mathbf{T} - \mathbf{T}\,\mathbf{l} + \operatorname{tr}\mathbf{d}\;\mathbf{T} = \frac{1}{J}\,\mathbf{F}\,\dot{\mathbf{S}}\,\mathbf{F}^T. \tag{2.46}$$

2.3.3 Die Doyle-Ericksen Formeln

Es wird die Existenz einer Formänderungsenergiefunktion

$$W = \rho_\circ\,\Psi \tag{2.47}$$

mit der freien Helmholtzenergie Ψ, wie sie für die im folgenden Abschnitt eingeführten isotropen, hyperelastischen Materialien gegeben ist, vorausgesetzt. Die Dichte $\rho_\circ$ ist von der Deformation unabhängig. In diesem Fall lassen sich die Spannungen und die Spannungszuwächse in materieller und räumlicher Darstellung mit Hilfe der Doyle-Ericksen-Formeln leicht berechnen, siehe *Doyle, Ericksen* [33], *Simo, Marsden* [89], [90] und die Zusammenstellung der Beziehungen in *Müller-Hoeppe* [64]. Für die Spannungstensoren erhält man somit

$$\mathbf{T} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} \mathbf{F}^T = \frac{1}{J} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \mathbf{F}^T = \frac{2}{J} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{g}} = 2\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{g}}, \tag{2.48}$$

$$\boldsymbol{\tau} = 2 \frac{\partial W}{\partial \mathbf{g}} = 2\rho_\circ \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{g}}, \tag{2.49}$$

$$\mathbf{P} = \rho_\circ \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}, \tag{2.50}$$

$$\mathbf{S} = \rho_\circ \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{E}} = 2\rho_\circ \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{C}} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{E}} = 2 \frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}}. \tag{2.51}$$

Für die Spannungszuwächse in der materiellen Darstellung gilt dann

$$\dot{\mathbf{S}} = \mathbb{C} : \dot{\mathbf{C}} \tag{2.52}$$

mit dem Materialtensor $\mathbb{C}$ der Referenzkonfiguration

$$\mathbb{C} = 2 \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{C}} = 4 \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{C}\, \partial \mathbf{C}}. \tag{2.53}$$

Analog ergibt sich für die Momentankonfiguration

$$L_{\mathbf{v}}(\boldsymbol{\tau}) = J\, \mathbb{c} : \frac{1}{2} L_{\mathbf{v}}(\mathbf{g}) = J\, \mathbb{c} : \mathbf{d} \tag{2.54}$$

mit dem räumlichen Materialtensor $\mathbb{c}$ nach

$$\mathbb{c} = \frac{2}{J} \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial \mathbf{g}} = 4\, \rho \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{g}\, \partial \mathbf{g}} = \frac{4}{J} \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{g}\, \partial \mathbf{g}}. \tag{2.55}$$

Damit können die Spannungs- und Materialtensoren der Momentankonfiguration ohne Rückgriff auf die komplexen Umrechnungen der materiellen Beziehungen mit Hilfe der Pull-Back- und Push-Forward-Operationen angegeben werden.

Der Materialtensor $\mathbb{C}$ der Referenzkonfiguration besitzt bezüglich des kartesischen Koordinatensystems $\{\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2, \mathbf{E}_3\}$ die Darstellung

$$\mathbb{C} = \mathbb{C}^{IKLM}\, \mathbf{E}_I \otimes \mathbf{E}_K \otimes \mathbf{E}_L \otimes \mathbf{E}_M, \tag{2.56}$$

wobei die Koeffizienten $\mathbb{C}^{IKLM}$ durch die Beziehung

$$\mathbb{C}^{IKLM} = 4 \frac{\partial^2 W}{\partial C_{IK}\, \partial C_{LM}} \tag{2.57}$$

berechnet werden. Der räumliche Materialtensor $\mathbb{c}$ besitzt bezüglich des kartesischen Koordinatensystems $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ die Darstellung

$$\mathbb{c} = \mathbb{c}^{iklm}\, \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \otimes \mathbf{e}_m. \tag{2.58}$$

Die Beziehung zwischen den Materialtensoren $\mathbb{C}$ der Referenzkonfiguration und $\mathbb{c}$ der Momentankonfiguration ist durch die Rücktransformation der Anwendung des räumlichen Materialtensors $\mathbb{c}$ auf einen beliebigen räumlichen Tensors $\mathbf{a}$ gegeben (siehe z.B. *Truesdell, Noll* [103]), d.h. es gilt

$$\mathbb{c} : \mathbf{a} = \frac{1}{J} \mathbf{F} \left[\mathbb{C} : \left(\mathbf{F}^T \mathbf{a}\, \mathbf{F} \right) \right] \mathbf{F}^T. \tag{2.59}$$

In Indexschreibweise bezogen auf die obigen kartesischen Basen gilt

$$\mathbb{c}^{iklm} = \frac{1}{J} F^i_I\, F^k_K\, F^l_L\, F^m_M\, \mathbb{C}^{IKLM}. \tag{2.60}$$

2.4 Materialgesetze

Im Rahmen dieser Arbeit werden homogene, isotrope, hyperelastische Materialien betrachtet, deren Darstellungsformen im weiteren kurz angegeben werden.

2.4.1 Darstellung isotroper, hyperelastischer Materialien

Die konstitutive Beziehung homogener, elastischer Materialien ist in der Form

$$\mathbf{T} = \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{F}) \tag{2.61}$$

gegeben. Der schrittweise Übergang von der allgemeinen Materialtheorie zum elastischen Werkstoffgesetz, das nur vom aktuellen Deformationszustand des Körpers und nicht von der Geschichte der Deformation bzw. der Temperatur oder der Zeit abhängt, ist z.B. in *Stein, Barthold* [95] dargelegt worden.

Weiterhin existiere eine Formänderungsenergiefunktion

$$W_{ges} = \int\limits_{\mathbf{B}_\circ} \hat{W}(\mathbf{F})\,dV = \int\limits_{\mathbf{B}_\circ} \rho_\circ \hat{\Psi}(\mathbf{F})\,dV = \int\limits_{\mathbf{B}_t} \rho_\circ \hat{\Psi}(\mathbf{F}) J^{-1}\,dv = \int\limits_{\mathbf{B}_t} \rho \hat{\Psi}(\mathbf{F})\,dv \tag{2.62}$$

mit der Beziehung

$$\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{F}) = \frac{\partial \hat{W}}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}) = \rho_\circ \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}) \qquad \forall\, \mathbf{F} \tag{2.63}$$

nach *Doyle, Ericksen* [33], deren physikalische Bedeutung aus der Betrachtung des elastischen Materials im Rahmen der thermodynamischen Materialtheorie erklärt werden kann, siehe *Truesdell, Noll* [103]. An dieser Stelle soll ausschließlich ein isothermer Prozeßverlauf vorausgesetzt werden, wobei dann die sogenannte Helmholtzenergie bzw. freie Energie Ψ mit $W = \rho_\circ \Psi$ eine Potentialfunktion ist.

Die angegebenen Formen des Werkstoffgesetzes bzw. der zugehörigen Formänderungsenergiefunktion können durch die wichtigen Prinzipien der materiellen Objektivität und der materiellen Symmetrie, d.h. in diesem Fall der Isotropie, weiter eingeschränkt werden, siehe z.B. *Truesdell, Noll* [103], *Ciarlet* [28]. Demnach gilt mit dem Darstellungssatz von *Rivlin* und *Ericksen* [78] die Aussage:

Die konstitutive Gleichung für den Cauchyschen Spannungstensor eines isotropen, elastischen Materials genügt dem Prinzip der materiellen Objektivität, d.h. es gilt

$$\hat{\mathbf{T}}(\mathbf{QF}) = \mathbf{Q}\,\hat{\mathbf{T}}(\mathbf{F})\,\mathbf{Q}^T \quad \textit{und} \quad \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{FQ}) = \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{F}) \quad \forall\,\mathbf{F},\,\forall\,\mathbf{Q},$$

dann und nur dann, wenn die konstitutive Beziehung für den Cauchyschen Spannungstensor die Form

$$\hat{\mathbf{T}}(\mathbf{F}) = \tilde{\mathbf{T}}(\mathbf{F}\mathbf{F}^T) \qquad \forall\,\mathbf{F} \tag{2.64}$$

mit

$$\tilde{\mathbf{T}}(\mathbf{b}) = \beta_\circ(i_\mathbf{b})\mathbf{1} + \beta_1(i_\mathbf{b})\mathbf{b} + \beta_2(i_\mathbf{b})\mathbf{b}^2 \tag{2.65}$$

besitzt. Hierin stellen $i_\mathbf{b}$ die Invarianten $\mathrm{I}_\mathbf{b}, \mathrm{II}_\mathbf{b}, \mathrm{III}_\mathbf{b}$ des Links-Cauchy-Green-Tensor $\mathbf{b} = \mathbf{F}\mathbf{F}^T$ dar und $\beta_\circ, \beta_1, \beta_2$ seien stetige Funktionen der Invarianten.

Diese Aussage kann ebenfalls für den 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor formuliert werden, d.h. es gilt:

> *Die konstitutive Gleichung für den 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor eines isotropen, elastischen Materials genügt dem Prinzip der materiellen Objektivität dann und nur dann, wenn die konstitutive Beziehung für den 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor die Form*
>
> $$\hat{\mathbf{S}}(\mathbf{F}) = \tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{F}^T\mathbf{F}) = \tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{C}) \tag{2.66}$$
>
> *mit*
>
> $$\tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{C}) = \gamma_\circ(i_\mathbf{C})\mathbf{1} + \gamma_1(i_\mathbf{C})\,\mathbf{C} + \gamma_2(i_\mathbf{C})\mathbf{C}^2 \tag{2.67}$$
>
> *besitzt.*

In analoger Form gilt für die Formänderungsenergiefunktion W, siehe *Ciarlet* [28, Theorem 4.4-1]:

> *Die (spezifische) Formänderungsenergiefunktion $W = \hat{W}(\mathbf{F})$ eines isotropen, hyperelastischen Materials genügt dem Prinzip der materiellen Objektivität genau dann, wenn eine Funktion $\check{W}(i_\mathbf{C}) = \check{W}(i_\mathbf{b})$ der Invarianten existiert, so daß*
>
> $$W = \hat{W}(\mathbf{F}) = \check{W}(i_\mathbf{C}) = \check{W}(i_\mathbf{b}) \tag{2.68}$$
>
> *für alle materiellen Deformationsgradienten* $\mathbf{F}$ *gilt.*

2.4.2 Die vollständige Form der Formänderungsenergiefunktion

Im weiteren sei die Formänderungsenergiefunktion unendlich oft stetig differenzierbar, so daß sie sich als Potenzreihenentwicklung nach $\mathrm{I} - 3$, $\mathrm{II} - 3$ und $\mathrm{III} - 1$ in der Form

$$W = \check{W}(\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}) = \sum_{p,q,r=0}^{\infty} c_{p,q,r}(\mathrm{I} - 3)^p(\mathrm{II} - 3)^q(\mathrm{III} - 1)^r \tag{2.69}$$

ergibt, siehe z.B. *Ogden* [69]. Mit dem Zusammenhang zwischen den Invarianten $\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}$ und den Eigenwerten $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ des Links- bzw. Rechts-Streck-Tensors $\mathbf{V}$ bzw. $\mathbf{U}$ nach Gleichung (2.13) kann durch Ausmultiplikation hierfür die Form

$$\begin{aligned} W &= \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) \\ &= \sum_{p,q,r=0}^{\infty} a_{p,q,r} \left\{ \left[\lambda_1^p(\lambda_2^q + \lambda_3^q) + \lambda_2^p(\lambda_3^q + \lambda_1^q) + \lambda_3^p(\lambda_1^q + \lambda_2^q) \right] (\lambda_1\lambda_2\lambda_3)^r - 6 \right\} \end{aligned} \tag{2.70}$$

angegeben werden. Die Konstanten $c_{p,q,r}$ bzw. $a_{p,q,r}$ sind dabei von der Deformation unabhängig.

Für inkompressible Materialien, deren geometrische Größen vereinbarungsgemäß mit einem Querstrich versehen werden, gilt die Inkompressibilitätsbedingung $\overline{\lambda}_1 \cdot \overline{\lambda}_2 \cdot \overline{\lambda}_3 = 1$ bzw. $\overline{\mathrm{III}} = 1$. Damit können die obigen Formen vereinfacht werden, d.h. es gilt

$$\overline{W} = \check{\overline{W}}(\overline{\mathrm{I}}, \overline{\mathrm{II}}) = \sum_{p,q=0}^{\infty} c_{p,q} (\overline{\mathrm{I}} - 3)^p (\overline{\mathrm{II}} - 3)^q \tag{2.71}$$

bzw. in Abhängigkeit der Eigenwerte

$$\overline{W} = \tilde{\overline{W}}(\overline{\lambda}_1, \overline{\lambda}_2, \overline{\lambda}_3) = \sum_{p,q=0}^{\infty} a_{p,q} \left[\overline{\lambda}_1^p (\overline{\lambda}_2^q + \overline{\lambda}_3^q) + \overline{\lambda}_2^p (\overline{\lambda}_3^q + \overline{\lambda}_1^q) + \overline{\lambda}_3^p (\overline{\lambda}_1^q + \overline{\lambda}_2^q) - 6 \right] . \tag{2.72}$$

Die allgemeingültige Darstellung isotroper, hyperelastischer Materialien muß im Punkt $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = (1, 1, 1)$ bzw. $(\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}) = (3, 3, 1)$ konsistent zur klassischen, linearisierten Form des Werkstoffgesetzes, d.h. dem Hookeschen Gesetz und der zugehörigen Formänderungsenergie

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\,\mu\,\boldsymbol{\epsilon} + \lambda\ \mathrm{tr}\,\boldsymbol{\epsilon}\,\mathbf{1} \qquad \text{und} \qquad W = \mu\ \left(\mathrm{tr}\,\boldsymbol{\epsilon}^2\right) + \frac{1}{2}\lambda\ (\mathrm{tr}\,\boldsymbol{\epsilon})^2$$

sein. Hierin stellen $\boldsymbol{\sigma}$ den linearisierten Spannungstensor, $\boldsymbol{\epsilon}$ den linearisierten Greenschen Verzerrungstensor und λ, μ die Lamé-Konstanten dar. Die Anforderungen an die Formänderungsenergiefunktion sind in *Ogden* [69, S. 348f] zusammengefaßt.

2.4.3 Das Ogden–Material

Aus der oben angegebenen exakten Darstellungsform einer unendlich oft differenzierbaren Formänderungsenergiefunktion $W = \check{W}(\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}) = \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ kann die Klasse der Ogden–Materialien eingeführt werden, siehe z.B. *Ogden* [66], [67] und [69]. Die zentrale Annahme spielt dabei die Valanis–Landel–Hypothese, *Valanis, Landel* [104], nach der, durch hinreichend genaue Versuche an gummiartigen Materialien verifiziert, die Separabilität der Formänderungsenergiefunktion in der Form

$$\tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \tilde{w}(\lambda_1) + \tilde{w}(\lambda_2) + \tilde{w}(\lambda_3) \tag{2.73}$$

vorausgesetzt wird. Mit dieser Annahme können die Beziehungen (2.69) bis (2.72) modifiziert werden. Für kompressible Materialien gilt demnach

$$W = \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \sum_{p=1}^{N} \frac{\mu_p}{\alpha_p} \left\{ \lambda_1^{\alpha_p} + \lambda_2^{\alpha_p} + \lambda_3^{\alpha_p} \right\} + g(J), \tag{2.74}$$

während für inkompressible Materialien mit $\overline{\lambda}_1 \cdot \overline{\lambda}_2 \cdot \overline{\lambda}_3 = 1$ die Form

$$\overline{W} = \tilde{\overline{W}}(\overline{\lambda}_1, \overline{\lambda}_2, \overline{\lambda}_3) = \sum_{p=1}^{N} \frac{\mu_p}{\alpha_p} \left\{ \overline{\lambda}_1^{\alpha_p} + \overline{\lambda}_2^{\alpha_p} + \overline{\lambda}_3^{\alpha_p} \right\} \tag{2.75}$$

gilt. Aus dem Übergang zur klassischen Theorie ergibt sich mit dem Schubmodul μ für die Materialparameter μ_p und α_p die Bedingung

$$\sum_{p=1}^{N} \mu_p\ \alpha_p = 2\mu. \tag{2.76}$$

2.4.4 Einige Modelle für gummiartige Materialien in Abhängigkeit der Invarianten

Neben dem Ogden-Material sind im Verlauf der Entwicklung von Materialgesetzen für gummiartige Werkstoffe etliche Modelle für kompressibles bzw. inkompressibles Verhalten entwickelt worden, von denen einige kurz vorgestellt werden sollen:

- inkompressibles *Neo-Hooke* Material nach *Treloar* [102]
$$W = \check{W}(\mathrm{I}) = \frac{1}{2}\mu\,(\mathrm{I} - 3),$$
- inkompressibles *Mooney–Rivlin* Material, siehe *Mooney* [62], *Rivlin* [77] und *Rivlin, Saunders* [79]
$$W = \check{W}(\mathrm{I}) = C_{01}\,(\mathrm{I} - 3) + C_{01}\,(\mathrm{II} - 3),$$
- kompressibles *Neo–Hooke* Material nach *Blatz, Ko* [18]
$$W = \check{W}(\mathrm{I}) = \frac{1}{2}\mu\,(\mathrm{I} - 3) + U(J) \quad \text{mit} \quad U(J) = \frac{\mu}{\beta}(J^{-\beta} - 1) \quad \text{und} \quad \beta = \frac{2\nu}{1 - 2\nu},$$
- kompressibles *Neo–Hooke* Material nach *Simo, Pister* [92]
$$W = \check{W}(\mathrm{I}) = \frac{1}{2}\mu\,(\mathrm{I} - 3) + U(J) \quad \text{mit} \quad U(J) = \frac{\lambda}{2}(\ln J)^2 - \mu \ln J,$$
- kompressibles *Mooney–Rivlin* Material nach *Ciarlet, Geymonat* [27]
$$W = \check{W}(\mathrm{I}) = a\,(\mathrm{I} - 3) + b\,(\mathrm{II} - 3) + U(J)$$
mit $U(J) = c\,J^2 - d\,\ln J$ und den positiven Konstanten $a, b, c, d > 0$.

2.4.5 Formulierung der Formänderungsenergiefunktion für die numerische Berechnung

In den Abschnitten 2.4.2 bis 2.4.4 sind Formänderungsenergiefunktionen sowohl der Invarianten als auch der Eigenwerte für kompressible und inkompressible Materialien vorgestellt worden. Für die numerische Behandlung wird dabei im folgenden stets der funktionale Zusammenhang der Formänderungsenergie von den Invarianten in der Form

$$\boxed{W = \check{W}(\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}) = \check{\overline{W}}(\overline{\mathrm{I}}, \overline{\mathrm{II}}) + U(J)} \tag{2.77}$$

bzw. in Abhängigkeit von den Eigenwerten in der Form

$$\boxed{W = \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \tilde{\overline{W}}(\overline{\lambda}_1, \overline{\lambda}_2, \overline{\lambda}_3) + U(J)} \tag{2.78}$$

vorausgesetzt. Für die Behandlung inkompressibler und quasi-inkompressibler Materialien ist die Aufspaltung der Formänderungsenergie in den Anteil $\overline{W} = \check{\overline{W}}(\overline{\mathrm{I}}, \overline{\mathrm{II}})$ der Invarianten $\overline{\mathrm{I}}, \overline{\mathrm{II}}$ des modifizierten Rechts- bzw. Links-Cauchy-Green-Tensors $\overline{\mathbf{C}} = J^{-2/3}\mathbf{C}$ (bzw. $\overline{\mathbf{b}} = J^{-2/3}\mathbf{b}$) für den deviatorischen Anteil der Formänderungsenergie und $U = \hat{U}(J)$ für den volumetrischen Anteil sinnvoll.

2.5 Energie- und Variationsformulierungen

2.5.1 Die schwache Form des Gleichgewichts

Die materielle Darstellung der schwachen Form des Gleichgewichts wird aus der materiellen Form (2.34) der dynamischen Feldgleichungen durch Skalarmultiplikation mit einer vektorwertigen Testfunktion $\boldsymbol{\eta}$ und anschließender Integration über die Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ$ gewonnen und lautet

$$G = \int_{\mathbf{B}_\circ} \operatorname{Div} \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dV + \int_{\mathbf{B}_\circ} \rho_\circ \, (\overline{\mathbf{k}} - \ddot{\mathbf{x}}) \cdot \boldsymbol{\eta} \, dV = 0. \tag{2.79}$$

Mit Berücksichtigung der Spannungsrandbedingungen $\mathbf{PN} = \overline{\mathbf{t}}_\circ$ auf dem Randbereich $\partial \mathbf{B}_{\circ\sigma}$, der Verschiebungsrandbedingungen $\mathbf{u} = \overline{\mathbf{u}}$ auf $\partial \mathbf{B}_{\circ u}$ und dem Gaußschen Integralsatz ergibt sich bei Vernachlässigung der dynamischen Anteile die schwache Form des (statischen) Gleichgewichts in der Darstellung

$$\boxed{G = \int_{\mathbf{B}_\circ} \mathbf{P} : \operatorname{Grad} \boldsymbol{\eta} \, dV - \int_{\mathbf{B}_\circ} \rho_\circ \, \overline{\mathbf{k}}_\circ \cdot \boldsymbol{\eta} \, dV - \int_{\partial \mathbf{B}_{\circ\sigma}} \overline{\mathbf{t}}_\circ \cdot \boldsymbol{\eta} \, dA = 0.} \tag{2.80}$$

Eine analoge Aussage bezogen auf die Momentankonfiguration lautet

$$\boxed{g = \int_{\mathbf{B}_t} \mathbf{T} : \operatorname{grad} \boldsymbol{\eta} \, dv - \int_{\mathbf{B}_t} \rho \, \overline{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dv - \int_{\partial \mathbf{B}_{t\sigma}} \overline{\mathbf{t}} \cdot \boldsymbol{\eta} \, da = 0.} \tag{2.81}$$

Im weiteren wird neben der Existenz einer Formänderungsenergiefunktion $W = \hat{W}(\Phi)$ der Deformation Φ auch die Existenz eines Potentials der äußeren Belastungen

$$\Pi_a = \hat{\Pi}_a(\Phi) = - \int_{\mathbf{B}_\circ} \rho_\circ \, \overline{\mathbf{k}}_\circ \cdot \Phi \, dV - \int_{\partial \mathbf{B}_{\circ\sigma}} \overline{\mathbf{t}}_\circ \cdot \Phi \, dA \tag{2.82}$$

angenommen, deren 1. Variation sich zu

$$\overline{D\Pi_a} \cdot \boldsymbol{\eta} = - \int_{\mathbf{B}_\circ} \rho_\circ \, \overline{\mathbf{k}}_\circ \cdot \boldsymbol{\eta} \, dV - \int_{\partial \mathbf{B}_{\circ\sigma}} \overline{\mathbf{t}}_\circ \cdot \boldsymbol{\eta} \, dA \tag{2.83}$$

ergibt. Damit erhält man für das Gesamtpotential der Deformation Φ das Stationaritätsproblem

$$\boxed{\Pi = \hat{\Pi}(\Phi) = \int_{\mathbf{B}_\circ} \hat{W}(\Phi) \, dV + \hat{\Pi}_a(\Phi) \to \operatorname*{stat}_{\Phi}} \tag{2.84}$$

und die 1. Variation von Π führt wieder auf die Aussage der schwachen Form des Gleichgewichts nach Gleichung (2.80).

2.5.2 Berücksichtigung der Inkompressibilitätsbedingung

Für die Berechnung quasi-inkompressibler Materialien ist es sinnvoll, die in Abschnitt 2.1 eingeführte multiplikative Zerlegung (2.20) des materiellen Deformationsgradienten in einen volumetrischen und einen isochoren Anteil vorzunehmen. Damit kann die Formänderungsenergie W nach (2.77) additiv in einen isochoren Anteil $\overline{W}$ und einen volumetrischen Anteil U zerlegt werden. Wird dabei für den volumetrischen Anteil der Deformation eine zweite unabhängige Feldgröße θ eingeführt, so gilt

$$\mathbf{F} = \theta^{\frac{1}{3}}\,\overline{\mathbf{F}}. \tag{2.85}$$

Dabei muß die Nebenbedingung

$$J - \theta = 0 \tag{2.86}$$

zwischen den unabhängigen Feldgrößen Φ (mit $J = \det \mathbf{F} = \det \operatorname{Grad} \Phi$) und θ für alle materiellen Punkte erfüllt sein. Zur Berücksichtigung der Nebenbedingung wird diese mit einem Lagrange-Parameter p multipliziert und dem Energiefunktional (2.83) hinzugefügt. Der zusätzlich eingeführte Lagrange-Parameter p für jeden materiellen Punkt stellt den konstanten hydrostatischen Druck dar und ist die dritte unabhängige Feldgröße.

Für das resultierende Lagrangefunktional Π_L, das einen Spezialfall des 3-Feld Hu-Washizu-Funktionals darstellt, gilt mit dem Potential Π_a der äußeren Kräfte nach (2.82)

$$\boxed{\Pi_L = \hat{\Pi}_L(\Phi, \theta, p) = \int\limits_{\mathbf{B}_\circ} \hat{\overline{W}}(\Phi, \theta)\; dV + \int\limits_{\mathbf{B}_\circ} p(J - \theta)\; dV + \Pi_a.} \tag{2.87}$$

Das Lagrangefunktional Π_L nimmt damit einen stationären Wert nur bei Erfüllung der Nebenbedingung (2.86) an.

Die notwendigen Bedingungen für die Stationarität des erweiterten Funktionals Π_L können mit den Testfunktionen $\boldsymbol{\eta}$ für die Verschiebungen in der Form

$$\boxed{g_1 = \int\limits_{\mathbf{B}_\circ} \operatorname{dev} \boldsymbol{\tau} : \operatorname{grad} \boldsymbol{\eta} + p\, J\, \operatorname{div} \boldsymbol{\eta}\; dV - \int\limits_{\mathbf{B}_\circ} \rho_\circ\, \overline{\mathbf{k}}_\circ \cdot \boldsymbol{\eta}\; dV - \int\limits_{\partial \mathbf{B}_{\circ\sigma}} \overline{\mathbf{t}}_\circ \cdot \boldsymbol{\eta}\; dA = 0} \tag{2.88}$$

sowie κ für die Volumenänderung und ζ für den Druck in der Form

$$g_2 = \int\limits_{\mathbf{B}_\circ} \left(-p + \frac{1}{3}\theta^{-1} \operatorname{tr} \boldsymbol{\tau}\right) \cdot \kappa\; dV = 0 \tag{2.89}$$

$$g_3 = \int\limits_{\mathbf{B}_\circ} (J - \theta\,) \cdot \zeta\; dV = 0. \tag{2.90}$$

angegeben werden.

Die Ableitung dieser Beziehungen und eine Erläuterung der Bedeutung des vorliegenden Lagrangefunktionals ist in *Simo, Taylor, Pister* [91] vorgenommen worden. Für die Anwendung auf hyperelastische Materialien siehe auch *Simo, Taylor* [88], *Wriggers* [108] und *Müller-Hoeppe* [64].

2.6 Linearisierung der Variationsformulierungen

2.6.1 Linearisierung der schwachen Form des Gleichgewichts

Mit der schwachen Form des Gleichgewichts (2.80) bzw. den Gleichungen (2.88) bis (2.90) sind die notwendigen Bedingungen für die Stationarität des Energiefunktionals Π bzw. des Lagrangefunktionals Π_L gegeben. Für die numerische Berechnung mit Hilfe des Newton-Verfahrens und für weitergehende theoretische Untersuchungen, z.B. die Sensitivitätsanalyse, ist die Kenntnis der exakten Linearisierung der obigen Beziehungen von großer Bedeutung. Die Grundlagen der Linearisierung kontinuumsmechanischer Größen finden sich z.B. in den Arbeiten von *Marsden, Hughes* [59, Ch. 4], *Hughes, Pister* [53], *Wriggers* [108], *Miehe* [60] und sind vom Autor in *Stein, Barthold* [95] aufbereitet worden.

Für die Linearisierung einer vektor- oder tensorwertigen Größe $\mathbf{A}$ gilt die Beziehung

$$\mathrm{Lin}\,[\mathbf{A}]_{\overline{\mathbf{x}},\mathbf{u}} = \overline{\mathbf{A}} + \overline{\mathbf{D}\mathbf{A}} \cdot \mathbf{u} = \overline{\mathbf{A}} + \frac{d}{d\varepsilon}\,\left[\mathbf{A}(\overline{\mathbf{x}} + \varepsilon\mathbf{u})\right]_{\varepsilon=0}, \tag{2.91}$$

wobei die Berechnung über die Richtungsableitung der Funktion $\mathbf{A}$ an der Stelle $\overline{\mathbf{x}}$ in Richtung $\mathbf{u}$ vorgenommen wird. In diesem Abschnitt werden die Werte der kontinuumsmechanischen Größen an der Stelle $\overline{\mathbf{x}}$, an der die Linearisierung vorgenommen wird, durch einen Querstrich gekennzeichnet.

Damit kann die Linearisierung der schwachen Form des Gleichgewichts in der Darstellung in den Größen der Referenzkonfiguration nach (2.80) in der Form

$$\mathrm{Lin}\,[G]_{\mathbf{u}} = \overline{G} + \overline{\mathbf{D}G} \cdot \mathbf{u}$$

mit

$$\overline{\mathbf{D}G} \cdot \mathbf{u} = \int\limits_{\mathbf{B}_\circ} \left\{ \mathrm{Grad}\,\mathbf{u}\,\overline{\mathbf{S}} + \overline{\mathbf{F}}\,\overline{\mathbb{C}}\,\left[\overline{\mathbf{F}}^T\ \mathrm{Grad}\,\mathbf{u} + \mathrm{Grad}^T\,\mathbf{u}\,\overline{\mathbf{F}}\right]\right\} : \mathrm{Grad}\,\boldsymbol{\eta}\; dV. \tag{2.92}$$

angegeben werden. Dabei werden deformationsunabhängige äußere Kräfte vorausgesetzt. Analog ergibt sich bei einer Transformation auf die Größen der Momentankonfiguration bzw. durch Linearisierung der Beziehung (2.81) die Aussage

$$\mathrm{Lin}\,[g]_{\mathbf{u}} = \overline{g} + \overline{\mathbf{D}g} \cdot \mathbf{u}$$

mit

$$\overline{\mathbf{D}g} \cdot \mathbf{u} = \int\limits_{\mathbf{B}_t} \left\{ \mathrm{grad}^T\,\boldsymbol{\eta} : \overline{\mathbf{T}}\,\mathrm{grad}^T\,\mathbf{u} + \mathrm{grad}^T\,\boldsymbol{\eta} : \overline{\mathbb{c}} : \mathrm{grad}^s\,\mathbf{u}\right\}\; dv. \tag{2.93}$$

Hierin stellt $\mathrm{grad}^s\,\mathbf{u}$ den symmetrischen Anteil des räumlichen Verschiebungsgradienten dar. Ein Beweis dieser Darstellung findet sich z.B. in *Müller-Hoeppe* [64].

2.6.2 Die Linearisierung der Variationsformulierung für Inkompressibilität

Ebenfalls wird bei der Betrachtung inkompressibler Materialien, für die das Lagrangefunktional Π_L eingeführt wurde, die Linearisierung der Beziehungen (2.88) bis (2.90) angeben. Hierzu sind in diesem Fall die Richtungsableitungen an der Stelle $\left(\overline{\Phi}, \overline{\theta}, \overline{p}\right)$ in Richtung von $(\mathbf{u}, d, \vartheta)$ zu berechnen, die zu einem symmetrischen Tangenteoperator führen. Auf den Beweis sei verzichtet, siehe z.B. *Müller-Hoeppe* [64].

Für die Richtungsableitung der Bedingung g_1 gilt dann

$$\begin{aligned}
\overline{\mathbf{D}g_1} \cdot \mathbf{u} &= \int_{\mathbf{B}_\circ} \operatorname{tr}\left[\operatorname{grad}\boldsymbol{\eta}\left(\operatorname{dev}\boldsymbol{\tau} + J\,p\,\mathbf{g}^{-1}\right)\operatorname{grad}\mathbf{u}\right]\,dV \\
&+ \int_{\mathbf{B}_\circ} \left(\operatorname{grad}^T\boldsymbol{\eta} : J\,\mathbb{c}^D : \operatorname{grad}^s\mathbf{u} + \operatorname{div}\boldsymbol{\eta}\,p\,J\operatorname{div}\mathbf{u}\right)\,dV, \qquad (2.94) \\
\overline{Dg_1} \cdot d &= \int_{\mathbf{B}_\circ} \operatorname{div}\boldsymbol{\eta}\,J\,d\,dV, \qquad (2.95) \\
\overline{Dg_1} \cdot \vartheta &= 0, \qquad (2.96)
\end{aligned}$$

wobei $\mathbb{c}^D$ den deviatorischen Anteil des räumlichen Materialtensors $\mathbb{c}$ bezeichnet. In analoger Weise ergibt sich für die Richtungsableitung der Bedingung g_2 mit der Notation p' für die Ableitung des hydrostatischen Drucks p aus dem Kugeltensoranteil der Spannungen die Darstellung

$$\begin{aligned}
\overline{\mathbf{D}g_2} \cdot \mathbf{u} &= 0, \qquad (2.97) \\
\overline{Dg_2} \cdot d &= -\int_{\mathbf{B}_\circ} \zeta\,d\,dV, \qquad (2.98) \\
\overline{Dg_2} \cdot \vartheta &= \int_{\mathbf{B}_\circ} \zeta\,p'\,\vartheta\,dV; \qquad (2.99)
\end{aligned}$$

bzw. für die Bedingung g_3

$$\begin{aligned}
\overline{\mathbf{D}g_3} \cdot \mathbf{u} &= \int_{\mathbf{B}_\circ} \kappa\,(J\ \operatorname{div}\mathbf{u})\,dV, \qquad (2.100) \\
\overline{Dg_3} \cdot d &= 0, \qquad (2.101) \\
\overline{Dg_3} \cdot \vartheta &= -\int_{\mathbf{B}_\circ} \kappa\,\vartheta\,dV. \qquad (2.102)
\end{aligned}$$

Die Umsetzung dieser kontinuumsmechanischen Formulierung in die diskrete Form der Finite-Elemente-Methode erfolgt in Kapitel 4.

Kapitel 3

Spannungs- und Materialtensoren isotroper, hyperelastischer Materialien

Die Spannungs- und Materialtensoren hyperelastischer Materialien sollen in diesem Kapitel in einheitlicher Darstellungsweise für die in Kapitel 5 folgende Sensitivitätsanalyse aufbereitet werden. Dabei werden die folgenden Punkte behandelt.

Tafel 3.1: Umfang der Behandlung hyperelastischer Materialien

- Wahl unterschiedlicher Betrachtungsweisen
  - Beschreibung in den Größen der Referenzkonfiguration,
  - Beschreibung in den Größen der Momentankonfiguration.
- Wahl unterschiedlicher geometrischer Größen zur Darstellung.
- Betrachtung unterschiedlicher Verzerrungs- und Spannungszustände
  - allgemeiner dreidimensionaler Verzerrungszustand,
  - ebener Spannungszustand.
- Behandlung homogener, isotroper, hyperelastischer Materialien mit und ohne Nebenbedingungen, d.h. von
  - kompressiblen Materialien,
  - quasi-inkompressiblen Materialien und
  - inkompressiblen Materialien.
- Darstellung der Formänderungsenergie als Funktion
  - der Invarianten, d.h. $W = \check{W}(\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III})$,
  - der Eigenwerte, d.h. $W = \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$.

3.1 Prinzipieller Ablauf der Berechnung der Spannungs- und Materialtensoren

3.1.1 Grundlagen

Die (volumenspezifische) Formänderungsenergiefunktion $W = \rho_\circ \Psi$ nach Gleichung (2.62) erfüllt die Voraussetzungen der Doyle-Ericksen-Formeln (siehe Abschnitt 2.3), nach der sich bei isothermen Prozessen die Spannungs- und Materialtensoren aus der Ableitung der Formänderungsenergie W nach den Verzerrungstensoren herleiten lassen. Im Abschnitt 2.3 sind einige Beziehungen für unterschiedliche geometrischen Größen angegeben worden. Für die weiteren Untersuchungen wird die Berechnung des 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensors $\mathbf{S}$ und des zugehörigen Materialtensors $\mathbb{C}$ in der Form

$$\boxed{\mathbf{S} = 2\,\frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} \qquad \text{und} \qquad \mathbb{C} = 2\,\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{C}} = 4\,\frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{C}\,\partial \mathbf{C}}} \tag{3.1}$$

vorgenommen. Für den Cauchyschen Spannungstensor $\mathbf{T}$ und den räumlichen Materialtensor $\mathbb{c}$ gelten mit dem Metriktensor $\mathbf{g}$ der deformierten Konfiguration die Beziehungen

$$\boxed{\mathbf{T} = \frac{2}{J}\,\frac{\partial W}{\partial \mathbf{g}} \qquad \text{und} \qquad \mathbb{c} = \frac{4}{J}\,\frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{g}\,\partial \mathbf{g}}.} \tag{3.2}$$

Für den Fall isotroper, hyperelastischer Materialien hat *Miehe* [61] neben der bereits bekannten Darstellung des Cauchyschen Spannungstensors über die Ableitung der Formänderungsenergie W nach dem Links-Cauchy-Green-Tensor $\mathbf{b}$ auch eine analoge Darstellung für den räumlichen Materialtensor $\mathbb{c}$ angegeben, d.h. es gilt

$$\boxed{\mathbf{T} = \frac{2}{J}\,\mathbf{b}\,\frac{\partial W}{\partial \mathbf{b}} \qquad \text{und} \qquad \mathbb{c} = \frac{4}{J}\,\mathbf{b}\,\frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{b}\,\partial \mathbf{b}}\,\mathbf{b}.} \tag{3.3}$$

Die angegebenen Beziehungen für die Spannungs- und die Materialtensoren müssen für die Darstellung hyperelastischer, isotroper Materialien nach Abschnitt 2.4.2, für die Klasse der Ogden-Materialien nach Abschnitt 2.4.3 bzw. für die Materialmodelle nach Abschnitt 2.4.4 aufbereitet werden. Der Umfang der Behandlung ist in der Tafel 3.1 aufgeführt.

Wesentlich hierbei ist die Wahl einer Darstellungsweise, die sowohl für die Abhängigkeit der Formänderungsenergie von den Invarianten nach (2.77) als auch für die Abhängigkeit von den Eigenwerten nach (2.78) geeignet ist. Dabei ist die Wahl der funktionalen Abhängigkeit der Formänderungsenergie (von den Invarianten bzw. von den Eigenwerten) strikt von der Wahl der geometrischen Größen zu trennen. Diese Unabhängigkeit spiegelt sich in dem modularen Aufbau der Berechnung wieder, der wesentlich für die spätere Sensitivitätsanalyse ist.

Zur Verdeutlichung der eigenen Vorgehensweise in Abschnitt 3.1.6 sollen zunächst Bemerkungen zur Wahl der Betrachtungsweise und zu den Besonderheiten der funktionalen Abhängigkeit der Formänderungsenergie von den Invarianten bzw. von den Eigenwerten gemacht werden. Hierzu wird beispielhaft der Ablauf der Berechnung zur Herleitung des 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensors $\mathbf{S}$ und des zugehörigen Materialtensors $\mathbb{C}$ eines kompressiblen, homogenen, isotropen, hyperelastischen Materials aufgezeigt. Die Spannungs- und Verzerrungstensoren werden in diesem Fall gemäß (3.1) durch die Ableitungen der Formänderungsenergie W nach dem Rechts-Cauchy-Green-Tensor $\mathbf{C}$ ermittelt. Die Berechnung in den Größen der Momentankonfiguration wird in analoger Weise ohne prinzipielle Änderungen durchgeführt und in Anhang A zusammengefaßt.

3.1.2 Lösungsstrategien aus der Literatur

In der Literatur sind zahlreiche Lösungsstrategien für unterschiedliche Aspekte der Berechnung hyperelastischer Materialien vorgeschlagen worden. Hierbei sind neben den klassischen Arbeiten von *Mooney* [62], *Rivlin* [77] insbesondere die grundlegenden Darstellungen von *Ogden* in [66], [67], [68] zu nennen.

Für die numerische Umsetzung mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode (siehe Kapitel 4) und die Wahl einer geeigneten Elementformulierung insbesondere für quasi-inkompressible Materialien sei auf die Arbeiten von *van den Bogert* [106], [105], [107], *Sussmann, Bathe* [97] und insbesondere auf *Simo, Taylor* [88] verwiesen. In der Arbeit von *Duffett, Reddy* [34] wird die numerische Berechnung der Spannungs- und Materialtensoren entsprechend der theoretischen Darstellung auf der Grundlage der Eigenvektoren beschrieben, siehe die Arbeiten von *Ogden*. Für die Herleitung der Materialmatrizen eines inkompressiblen Ogden-Materials für den ebenen Spannungszustand bei einer Beschreibung in den Größen der Referenzkonfiguration siehe *Gruttmann, Taylor* [46].

3.1.3 Wahl der Betrachtungsweise und der Basistensoren

Bei der Untersuchung kontinuumsmechanischer Probleme ist zunächst die Wahl der angemessenen Betrachtungsweise, d.h. Darstellung bezogen auf die Größen der Referenzkonfiguration bzw. auf Größen der Momentankonfiguration, zu treffen. Darüberhinaus ist durch die unterschiedliche Wahl der Verzerrungstensoren innerhalb der gewählten Betrachtungsweise eine große Vielfalt der Darstellung der Ergebnisse möglich.

Betrachten wir die zum charakteristischen Polynom (2.15) zugehörige Aussage des Cayley-Hamilton-Theorems, nach dem ein Tensor seiner eigenen charakteristischen Gleichung genügt, d.h. in diesem Fall

$$\mathbf{C}^3 - \mathrm{I}_{\mathbf{C}}\,\mathbf{C}^2 + \mathrm{II}_{\mathbf{C}}\,\mathbf{C} - \mathrm{III}_{\mathbf{C}}\,\mathbf{1} = \mathbf{0},$$

so ergibt sich die Folgerung, daß infolge der Isotropie sämtliche Spannungen sich in einer dreidimensionalen tensoriellen Basis $\underline{\mathbf{Z}}$ der Referenzkonfiguration, z.B.

$$\underline{\mathbf{Z}}^T := \{\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \mathbf{Z}_3\} := \{\mathbf{1}, \mathbf{C}, \mathbf{C}^{-1}\},$$

ausdrücken lassen. Nach der Wahl dieser Basis $\underline{\mathbf{Z}}$ ergeben sich die Folgerungen für die Darstellung des Materialtensors und für den Fall eines inkompressiblen Materials automatisch. Für die Berechnung des Materialtensors $\mathbb{C}$ z.B. nach (3.1) sind weiterhin die vierstufigen Tensoren der Ableitung der gewählten Basistensoren $\mathbf{Z}_i$ nach $\mathbf{C}$ bereitzustellen, d.h. von

$$\mathbb{Z}_i := \frac{\partial \mathbf{Z}_i}{\partial \mathbf{C}}.$$

3.1.4 Die Formänderungsenergiefunktion in Abhängigkeit der Invarianten

Als Ausgangspunkt der Betrachtungen in diesem Abschnitt sei die Formänderungsenergie, z.B. nach Gleichung (2.77), als Funktion der Invarianten des Rechts-Cauchy-Green-Tensors $\mathbf{C}$ gegeben, d.h.

$$W = \check{W}(\mathrm{I}_{\mathbf{C}}, \mathrm{II}_{\mathbf{C}}, \mathrm{III}_{\mathbf{C}}). \tag{3.4}$$

Da voraussetzungsgemäß die funktionale Beziehung bekannt und beliebig oft differenzierbar ist, ist eine sofortige Ermittlung der ersten und zweiten partiellen Ableitung von W nach den Invarianten möglich. Im weiteren wird in den Formeln zur Vereinfachung der Schreibarbeit nicht mehr zwischen dem Wert W und der Abbildungsvorschrift $\check{W}$ der Formänderungsenergie unterschieden. Weiterhin soll vereinfachend die Schreibweise

$$W_{,i} := \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i} \quad \text{bzw.} \quad W_{,ij} := \frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_i \partial \mathrm{I}_j} \tag{3.5}$$

eingeführt werden, die ausschließlich für die Ableitung der Formänderungsenergie nach den Invarianten benutzt wird.

Dann ergibt sich der 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor **S** nach (3.1) zu

$$\boxed{\mathbf{S} = 2\frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} = 2\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i}\cdot\frac{\partial \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{C}},} \tag{3.6}$$

während durch eine weitere Ableitung dieser Beziehung der Materialtensor berechnet wird, d.h.

$$\mathbb{C} = 2\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{C}} = 4\frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{C}\partial \mathbf{C}} = 4\frac{\partial}{\partial \mathbf{C}}\left[\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i}\cdot\frac{\partial \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{C}}\right]. \tag{3.7}$$

Mit der Rechenregel

$$\frac{\partial(\alpha\mathbf{A})}{\partial \mathbf{C}} = \mathbf{A}\otimes\frac{\partial \alpha}{\partial \mathbf{C}} + \alpha\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \mathbf{C}}, \tag{3.8}$$

siehe z.B. *de Boer* [29], erhält man

$$\begin{aligned}\mathbb{C} &= 4\sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{C}}\otimes\left\{\frac{\partial}{\partial \mathbf{C}}\left(\frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i}\right)\right\} + \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i}\cdot\frac{\partial}{\partial \mathbf{C}}\left(\frac{\partial \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{C}}\right)\right]\\ &= 4\sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{C}}\otimes\left\{\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial \mathrm{I}_j}\left(\frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i}\right)\cdot\frac{\partial \mathrm{I}_j}{\partial \mathbf{C}}\right\} + \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i}\cdot\frac{\partial^2 \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{C}\partial \mathbf{C}}\right]\end{aligned}$$

und damit

$$\boxed{\mathbb{C} = 4\sum_{i=1}^{3}\left[\sum_{j=1}^{3}\left\{\frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_i\partial \mathrm{I}_j}\cdot\frac{\partial \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{C}}\otimes\frac{\partial \mathrm{I}_j}{\partial \mathbf{C}}\right\} + \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i}\cdot\frac{\partial^2 \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{C}\partial \mathbf{C}}\right].} \tag{3.9}$$

Der Vorteil der Beschreibung der Formänderungsenergie als Funktion der Invarianten liegt darin, daß die auftretenden Ableitungen der Invarianten nach den Verzerrungstensoren, in diesem Fall $\frac{\partial \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{C}}$ und $\frac{\partial^2 \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{C}\partial \mathbf{C}}$, für alle Werte der Invarianten bekannt sind, siehe z.B. *Truesdell, Noll* [103] und die Abschnitte 3.2.2 und 3.2.3. Weiterhin kann diese Formulierung einfach für die Berechnung inkompressibler Materialien mit $\mathrm{III} = 1$ erweitert werden. Nachteilig ist jedoch, daß die Entwicklung und Darstellung einer geeigneten Formänderungsenergiefunktion für ein vorliegendes Material einfacher als Funktion der physikalisch als Hauptdehnungen interpretierbaren Eigenwerte aufzustellen ist.

Für die Darstellung des Cauchyschen Spannungstensors **T** bezüglich der Größen der Momentankonfiguration gilt mit Gleichung (3.2)

$$\boxed{\mathbf{T} = \frac{2}{J}\,\frac{\partial W}{\partial \mathbf{g}} = \frac{2}{J}\,\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i}\cdot\frac{\partial \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{g}}} \tag{3.10}$$

und für den räumlichen Materialtensor $\mathbb{c}$ folgt

$$\boxed{\mathbb{c} = \frac{4}{J}\,\sum_{i=1}^{3}\left[\sum_{j=1}^{3}\left\{\frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_i\partial \mathrm{I}_j}\cdot\frac{\partial \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{g}}\otimes\frac{\partial \mathrm{I}_j}{\partial \mathbf{g}}\right\} + \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i}\cdot\frac{\partial^2 \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{g}\partial \mathbf{g}}\right].} \tag{3.11}$$

3.1.5 Die Formänderungsenergiefunktion in Abhängigkeit der Eigenwerte

Als Ausgangspunkt der Betrachtungen in diesem Abschnitt sei die Formänderungsenergie, z.B. nach Gleichung (2.78), als Funktion der Eigenwerte des Rechts-Streck-Tensors $\mathbf{U}$ gegeben, d.h.

$$W = \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3). \tag{3.12}$$

Da voraussetzungsgemäß die funktionale Beziehung bekannt und beliebig oft differenzierbar ist, ist eine sofortige Ermittlung der ersten und zweiten partiellen Ableitung von W nach den Eigenwerten möglich.

Damit folgt für den 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor $\mathbf{S}$ nach (3.1) die Darstellung

$$\boxed{\mathbf{S} = 2\frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} = 2\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \cdot \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathbf{C}}.} \tag{3.13}$$

Weiterhin ergibt sich für den Materialtensor $\mathbb{C}$ die Beziehung

$$\mathbb{C} = 2\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{C}} = 4\frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{C}\partial \mathbf{C}} = 4\frac{\partial}{\partial \mathbf{C}}\left[\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \cdot \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathbf{C}}\right], \tag{3.14}$$

die sich mit der Rechenregel (3.8) in die Form

$$\begin{aligned} \mathbb{C} &= 4\sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathbf{C}} \otimes \left\{\frac{\partial}{\partial \mathbf{C}}\left(\frac{\partial W}{\partial \lambda_i}\right)\right\} + \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{C}}\left(\frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathbf{C}}\right)\right] \\ &= 4\sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathbf{C}} \otimes \left\{\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial \lambda_j}\left(\frac{\partial W}{\partial \lambda_i}\right) \cdot \frac{\partial \lambda_j}{\partial \mathbf{C}}\right\} + \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \cdot \frac{\partial^2 \lambda_i}{\partial \mathbf{C}\partial \mathbf{C}}\right] \end{aligned}$$

und damit in

$$\boxed{\mathbb{C} = 4\sum_{i=1}^{3}\left[\sum_{j=1}^{3}\left\{\frac{\partial^2 W}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \cdot \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathbf{C}} \otimes \frac{\partial \lambda_j}{\partial \mathbf{C}}\right\} + \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \cdot \frac{\partial^2 \lambda_i}{\partial \mathbf{C}\partial \mathbf{C}}\right]} \tag{3.15}$$

überführen läßt. Analoge Darstellungsformen gelten ebenfalls für den Cauchyschen Spannungstensor $\mathbf{T}$ und den zugehörigen räumlichen Materialtensor $\mathbbm{c}$.

Der wesentliche Nachteil, der mit der Formulierung der Formänderungsenergiefunktion in Abhängigkeit der Eigenwerte, z.B. der Klasse der Ogden-Materialien, gegeben ist, besteht in der Berechnung der Ableitung der Eigenwerte nach den Invarianten, d.h. von $\dfrac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_k}$, die für die Bereitstellung der Ableitungen $\dfrac{\partial \lambda_i}{\partial \mathbf{C}}$ und $\dfrac{\partial^2 \lambda_i}{\partial \mathbf{C}\partial \mathbf{C}}$ benötigt wird. Insbesondere ergeben sich Schwierigkeiten für die Formulierung der Spannungs- und Materialtensoren für biaxiale und hydrostatische Spannungszustände. Diese Schwierigkeiten übertragen sich auch auf die Formulierung inkompressibler Materialien mit $\overline{\lambda}_1 \cdot \overline{\lambda}_2 \cdot \overline{\lambda}_3 = 1$.

3.1.6 Erläuterung der eigenen Vorgehensweise

Die Betrachtung der Vor- und Nachteile der geschilderten Berechnungsstrategien, verbunden mit dem Zwang der Erstellung eines übersichtlich strukturierten, modularen und flexiblen Berechnungsverfahrens für die Spannungs- und Materialtensoren für beliebige Materialien der Form (2.77) bzw. (2.78) führen zu dem folgenden Lösungskonzept.

Tafel 3.2: Konzept der numerischen Berechnung hyperelastischer Materialien

1. Festlegung der Betrachtungsweise, d.h. in diesem Fall die Beschreibung mittels der Größen der Referenzkonfiguration.

2. Wahl der tensoriellen Basis $\underline{\mathbf{Z}}$ zur Darstellung der Ergebnisse, z.B.

$$\underline{\mathbf{Z}}^T := \{\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \mathbf{Z}_3\} := \{\mathbf{1}, \mathbf{C}, \mathbf{C}^{-1}\} \qquad \text{in der Referenzkonfiguration.}$$

3. Berechnung der Ableitung der tensoriellen Basis $\underline{\mathbf{Z}}$ nach $\mathbf{C}$.

4. Berechnung der Ableitung der Formänderungsenergie nach den Invarianten.

   (a) Formänderungsenergie als <u>Funktion der Invarianten</u> nach (2.77)

   - Direkte Ableitung der funktionalen Beziehung nach den Invarianten.

   (b) Formänderungsenergie als <u>Funktion der Eigenwerte</u> nach (2.78)

   - Ableitung der Formänderungsenergie durch Berücksichtigung der impliziten Abhängigkeit von den Invarianten (siehe Abschnitt 3.4), d.h.
   $$\frac{\partial \tilde{W}(\hat{\lambda}_s(\mathrm{I}_t))}{\partial \mathrm{I}_i} \qquad \text{und} \qquad \frac{\partial^2 \tilde{W}(\hat{\lambda}_s(\mathrm{I}_t))}{\partial \mathrm{I}_i \partial \mathrm{I}_j}.$$
   - Bei Formänderungsenergiefunktionen der Eigenwerte werden für die Sonderfälle der biaxialen und hydrostatischen Spannungszustände die Ableitungen nach den Invarianten in expliziter Form angegeben, siehe die Abschnitte 3.5 und 3.6.

5. Bestimmung der Koeffizienten α_i und β_{ij} für die Darstellung der Spannungs- und Materialtensoren aus den Gleichungen (3.6) und (3.9), d.h. mittels der Ableitungen der Formänderungsenergie nach den Invarianten.

6. Zusammenbau der Spannungs- und Materialtensoren aus den Koeffizienten α_i und β_{ij} und der tensoriellen Basis in der Form

$$\mathbf{S} = 2\sum_{i=1}^{3} \alpha_i\, \mathbf{Z}_i \qquad \text{bzw.} \qquad \mathbb{C} = 4\sum_{i=1}^{3}\left[\sum_{j=1}^{3}\{\beta_{ij}\,\mathbf{Z}_i \otimes \mathbf{Z}_j\} + \alpha_i\,\frac{\partial \mathbf{Z}_i}{\partial \mathbf{C}}\right].$$

Die Besonderheit des eigenen Vorgehens wird zunächst in Abschnitt 3.2 am Beispiel der materiellen Formulierung in den Größen der Referenzkonfiguration erläutert.

3.2 Spannungs- und Materialtensoren für kompressible Materialien

In diesem Abschnitt wird für kompressible Materialien unter der Voraussetzung eines beliebigen dreidimensionalen Verzerrungszustandes die gewählte Vorgehensweise am Beispiel der Beschreibung in den Größen der Referenzkonfiguration, d.h. des 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensors $\mathbf{S}$ und des zugehörigen Materialtensors $\mathbb{C}$, erläutert. Die Formulierungen für den ebenen und den axialsymmetrischen Verzerrungszustand sind hierin als Sonderfälle enthalten. Die Darstellung der Spannungs- und Materialtensoren bei kompressiblen Materialien für den ebenen Spannungszustand geschieht in Abschnitt 3.4. Für die entsprechende Formulierung in den Größen der Momentankonfiguration siehe Anhang A.

3.2.1 Basistensoren $\mathbf{Z}_i$ und deren Ableitung nach C

Nach den Bemerkungen des Abschnittes 3.1.3 wird der Raum der möglichen Spannungstensoren von einer dreidimensionalen Basis aufgespannt. Für die Beschreibung bezüglich der Referenzkonfiguration gilt z.B.

$$\underline{\mathbf{Z}}^T := \{\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \mathbf{Z}_3\} := \{\mathbf{1}, \mathbf{C}, \mathbf{C}^{-1}\}. \tag{3.16}$$

Für die Bestimmung der zweiten Ableitung der Invarianten nach dem Verzerrungstensor (hier $\mathbf{C}$) sind die Ableitungen der Basistensoren $\mathbf{Z}_m$ nach dem Verzerrungstensor erforderlich, siehe auch Gleichung (3.23). Mit der obigen Wahl der Basis $\underline{\mathbf{Z}}_1$ ergibt sich durch Ausführung der Differentiation

$$\mathbb{Z}_1 := \frac{\partial \mathbf{Z}_1}{\partial \mathbf{C}} = \frac{\partial \mathbf{1}}{\partial \mathbf{C}} = \mathbb{O}, \tag{3.17}$$

$$\mathbb{Z}_2 := \frac{\partial \mathbf{Z}_2}{\partial \mathbf{C}} = \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{C}} = \mathbb{1}_{\mathbf{G}^{-1}}, \tag{3.18}$$

$$\mathbb{Z}_3 := \frac{\partial \mathbf{Z}_3}{\partial \mathbf{C}} = \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} = -\mathbb{1}_{\mathbf{C}^{-1}}. \tag{3.19}$$

Die Ableitungen der Basistensoren $\mathbf{Z}_m$ sind dabei Tensoren vierter Stufe. Hierbei stellen $\mathbb{1}$ bzw. $\mathbb{O}$ den vierstufigen Einheits- bzw. Nulltensor dar. Die genauere Herleitung ist im Anhang B zu finden.

3.2.2 Ableitung der Invarianten nach C

Für die Berechnung der Spannungs- und Materialtensoren nach (3.6) bzw. (3.9) werden die Ableitungen der Invarianten nach den Verzerrungstensoren benötigt, siehe *Truesdell, Noll* [103], d.h. es gilt z.B. für die Ableitung der Invarianten des Rechts-Cauchy-Green-Tensors $\mathrm{I}_{\mathbf{C}}, \mathrm{II}_{\mathbf{C}}, \mathrm{III}_{\mathbf{C}}$ nach dem Rechts-Cauchy-Green-Tensor $\mathbf{C}$ für eine Darstellung mittels der in Gleichung (3.16) definierten Basis $\underline{\mathbf{Z}}$

$$\boxed{\frac{\partial \mathrm{I}}{\partial \mathbf{C}} = \mathbf{1}, \qquad \frac{\partial \mathrm{II}}{\partial \mathbf{C}} = \mathrm{I}\,\mathbf{1} - \mathbf{C} \qquad \text{und} \qquad \frac{\partial \mathrm{III}}{\partial \mathbf{C}} = \mathrm{III}\,\mathbf{C}^{-1}.} \tag{3.20}$$

Dieser Zusammenhang kann mit der Matrix

$$\underline{A} = (A_{im}) := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \mathrm{I} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & \mathrm{III} \end{pmatrix} \tag{3.21}$$

in der Form

$$\boxed{\frac{\partial \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{C}} = \sum_{m=1}^{3} A_{im}\, \mathbf{Z}_m .} \tag{3.22}$$

bzgl. der freigewählten tensoriellen Basis $\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \mathbf{Z}_3$ dargestellt werden.

Für die Bestimmung des Materialtensors $\mathbb{C}$ nach Gleichung (3.9) ist die zweite Ableitung der Invarianten nach $\mathbf{C}$ zu berechnen. Nachdem die erste Ableitung der Invarianten in Gleichung (3.22) angegeben wurde, ergibt sich durch erneute Differentiation

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{C}} \left[\sum_{m=1}^{3} A_{im}\, \mathbf{Z}_m \right] = \sum_{m=1}^{3} \left[\frac{\partial A_{im}}{\partial \mathbf{C}} \otimes \mathbf{Z}_m + A_{im} \frac{\partial \mathbf{Z}_m}{\partial \mathbf{C}} \right] \\ &= \sum_{m=1}^{3} \left[\left\{ \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial A_{im}}{\partial \mathrm{I}_k} \frac{\partial \mathrm{I}_k}{\partial \mathbf{C}} \right\} \otimes \mathbf{Z}_m + A_{im} \frac{\partial \mathbf{Z}_m}{\partial \mathbf{C}} \right] \end{aligned}$$

und damit

$$\boxed{\frac{\partial^2 \mathrm{I}_i}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}} = \sum_{m=1}^{3} \left[\sum_{k=1}^{3} \sum_{l=1}^{3} \left\{ \frac{\partial A_{im}}{\partial \mathrm{I}_k} A_{kl} \mathbf{Z}_l \otimes \mathbf{Z}_m \right\} + A_{im} \frac{\partial \mathbf{Z}_m}{\partial \mathbf{C}} \right].} \tag{3.23}$$

3.2.3 Berechnung der Ableitung der Formänderungsenergie nach den Invarianten

Die mit dieser Darstellung vorgeschlagene Berechnung hyperelastischer Materialien basiert wesentlich auf der Berechnung der Ableitungen der gegebenen Formänderungsenergie nach den Invarianten. Ist die Formänderungsenergie als Funktion der Invarianten nach (2.77) bekannt, d.h. gilt

$$W = \check{W}(\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}),$$

so ergeben sich die benötigten Ableitungen durch direktes Differenzieren der funktionalen Beziehung.

Ist dagegen die Formänderungsenergie als Funktion der Eigenwerte gegeben, d.h. gilt nach (2.78)

$$W = \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3),$$

so ist zur Berechnung der Ableitungen der implizite Zusammenhang der Eigenwerte von den Invarianten über die charakteristische Gleichung zu verwenden. Für kompressible Materialien sind die unterschiedlichen Fälle in der folgenden Tafel aufgeführt.

Tafel 3.3: Ableitung der Formänderungsenergie W nach den Invarianten $\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}$

Eingang: Gegeben seien die Invarianten $\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}$ und die Genauigkeit ϵ für die Fallunterscheidung der Eigenwerte.

1. Berechnung der Eigenwerte λ_i durch Lösung der charakteristischen Gleichung (2.14)
$$\lambda^6 - \mathrm{I}\lambda^4 + \mathrm{II}\lambda^2 - \mathrm{III} = 0.$$
2. Fallunterscheidung für die weitere Behandlung:
   (a) Allgemein: Für $|\lambda_i - \lambda_k| > \epsilon$ für alle $i, k \in \{1, 2, 3\}$ mit $i \neq k$ weiter mit Tafel 3.9 auf Seite 52.
   (b) Equi-biaxial: Für $|\lambda_i - \lambda_k| \leq \epsilon$ für ein $i, k \in \{1, 2, 3\}$ mit $i \neq k$ weiter mit Tafel 3.10 auf Seite 57.
   (c) Hydrostatisch: Für $|\lambda_i - \lambda_k| \leq \epsilon$ für alle $i, k \in \{1, 2, 3\}$ mit $i \neq k$ weiter mit Tafel 3.11 auf Seite 58.

Ausgang: Ableitung der Formänderungsenergiefunktion der Eigenwerte nach den Invarianten.

3.2.4 Darstellung der Spannungs- und Materialtensoren

Für den 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor eines kompressiblen, hyperelastischen Materials gilt die Gleichung (3.6), die unter Benutzung der Summenkonvention, der Schreibweise (3.5) und der Darstellung (3.22) der Ableitung der Invarianten nach $\mathbf{C}$ bezüglich der in Gleichung (3.16) definierten tensoriellen Basis $\mathbf{Z}_m$ durch Einführung der Koeffizienten α_m gemäß

$$\boxed{\alpha_m := W_{,i}\; A_{im}} \tag{3.24}$$

in der Form

$$\boxed{\mathbf{S} = 2\,\alpha_m\; \mathbf{Z}_m} \tag{3.25}$$

dargestellt werden kann.

Entsprechend ergibt sich für den Materialtensor $\mathbb{C}$ nach Gleichung (3.9) durch Einführung der Koeffizienten β_{lm} des Anteils der dyadischen Produkte $\mathbf{Z}_l \otimes \mathbf{Z}_m$ der Basistensoren am Materialtensor $\mathbb{C}$ gemäß

$$\boxed{\beta_{lm} := A_{il}\; W_{,ij}\; A_{jm} + W_{,i}\; \frac{\partial A_{im}}{\partial \mathrm{I}_k} A_{kl}.} \tag{3.26}$$

und den obigen Ergebnissen die Darstellung

$$\boxed{\mathbb{C} = 4\;\beta_{lm}\;\mathbf{Z}_l \otimes \mathbf{Z}_m + 4\;\alpha_m\;\frac{\partial \mathbf{Z}_m}{\partial \mathbf{C}}.} \tag{3.27}$$

3.2.5 Zusammenfassung der Berechnung

Die Ergebnisse für die Berechnung kompressibler, hyperelastischer Materialien sind in der nachfolgenden Tafel zusammengefaßt.

Tafel 3.4: Spannungs- und Materialtensoren kompressibler Materialien

1. Bestimme die tensorielle Basis

$$\underline{\mathbf{Z}}^T := \{\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \mathbf{Z}_3\} := \{\mathbf{1}, \mathbf{C}, \mathbf{C}^{-1}\}$$

   isotroper, hyperelastischer Materialien in der Referenzkonfiguration und bilde die Ableitung der Basis nach $\mathbf{C}$ in der Form

$$\frac{\partial \mathbf{1}}{\partial \mathbf{C}} = \mathbb{O}, \qquad \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{C}} = \mathbb{I}_{\mathbf{G}^{-1}} \qquad \text{und} \qquad \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} = -\mathbb{I}_{\mathbf{C}^{-1}}.$$

2. Bestimme die Koeffizientenmatrix $\underline{A}$ für die Darstellung der Ableitung der Invarianten nach $\mathbf{C}$ bezüglich der gewählten Basis, d.h.

$$\underline{A} = (A_{im}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \mathrm{I} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & \mathrm{III} \end{pmatrix}.$$

3. Berechne die Ableitungen der Formänderungsenergie nach den Invarianten

$$W_{,i} = \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i} \quad \text{und} \quad W_{,ij} = \frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_i \partial \mathrm{I}_j}$$

   für die unterschiedlichen Formen der Formänderungsenergiefunktion. Für weitere Bemerkungen siehe hierzu Tafel 3.3.

4. Berechne die Koeffizienten α_i und β_{ij} in der Form

$$\alpha_m = W_{,i}\, A_{im} \qquad \text{und} \qquad \beta_{lm} = A_{il}\, W_{,ij}\, A_{jm} + W_{,i}\, \frac{\partial A_{im}}{\partial \mathrm{I}_k} A_{kl}$$

5. Bestimme den 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor $\mathbf{S}$ und den zugehörigen Materialtensor $\mathbb{C}$ in der Form

$$\mathbf{S} = 2\, \alpha_m\, \mathbf{Z}_m \qquad \text{und} \qquad \mathbb{C} = 4\, \beta_{lm}\, \mathbf{Z}_l \otimes \mathbf{Z}_m + 4\, \alpha_m\, \frac{\partial \mathbf{Z}_m}{\partial \mathbf{C}}.$$

3.3 Spannungs- und Materialtensoren für inkompressible Materialien

In diesem Abschnitt wird entsprechend dem vorangegangenen Abschnitt die Vorgehensweise für inkompressible Materialien erläutert. Die Darstellung der Spannungs- und Materialtensoren für den ebenen Spannungszustand geschieht in Abschnitt 3.5.

3.3.1 Problemstellung

Für inkompressible Materialien nach (2.77), d.h. es gilt

$$W = \check{W}(\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}) = \overline{\check{W}}(\bar{\mathrm{I}}, \bar{\mathrm{II}}) + U(J),$$

ist der isochore Anteil $\overline{W}$ der Formänderungsenergiefunktion W nur von den Invarianten $\bar{\mathrm{I}}$ und $\bar{\mathrm{II}}$ abhängig. Der volumetrische Anteil ist durch den Anteil $U = \hat{U}(J)$ gegeben. Analog zur Definition (3.5) wird die Schreibweise

$$\overline{W}_{,i} := \frac{\partial \overline{W}}{\partial \bar{\mathrm{I}}_i} \quad \text{bzw.} \quad \overline{W}_{,ij} := \frac{\partial^2 \overline{W}}{\partial \bar{\mathrm{I}}_i \partial \bar{\mathrm{I}}_j} \tag{3.28}$$

eingeführt. Aus der obigen Darstellung der Formänderungsenergie ergibt sich für die Herleitung der Spannungen nach Gleichung (3.1) die Aufteilung

$$\mathbf{S} = 2\frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} = 2\frac{\partial \overline{\check{W}}(\bar{\mathrm{I}}, \bar{\mathrm{II}})}{\partial \mathbf{C}} + 2\frac{\partial \hat{U}(J)}{\partial \mathbf{C}} =: \mathbf{S}^D + \mathbf{S}^K \tag{3.29}$$

des Spannungstensors in einen deviatorischen und einen volumetrischen Anteil. Analog ergibt sich für den Materialtensor $\mathbb{C}$ die Beziehung

$$\mathbb{C} = 4\frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}} = 4\frac{\partial^2 \overline{\check{W}}(\bar{\mathrm{I}}, \bar{\mathrm{II}})}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}} + 4\frac{\partial^2 \hat{U}(J)}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}} =: \mathbb{C}^D + \mathbb{C}^K. \tag{3.30}$$

Für inkompressible Materialien (bzw. für eine Formulierung mit Hilfe der multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten nach (2.20)) sind die Ableitungen der modifizierten Invarianten $\bar{\mathrm{I}}$ und $\bar{\mathrm{II}}$ nach $\mathbf{C}$ bereitzustellen. In diesem Fall sind die modifizierten Größen $\bar{\mathrm{I}}$ bzw. $\bar{\mathrm{II}}$ die Invarianten des modifizierten Tensors $\overline{\mathbf{C}} = J^{-2/3}\mathbf{C}$, d.h. mit Hilfe der Kettenregel folgt nunmehr

$$\boxed{\frac{\partial \bar{\mathrm{I}}_i}{\partial \mathbf{C}} = \frac{\partial \bar{\mathrm{I}}_i}{\partial \overline{\mathbf{C}}} \cdot \frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}}\,.} \tag{3.31}$$

3.3.2 Basistensoren $\overline{\mathbf{Z}}_i$ und deren Ableitung nach C

Für die Betrachtung inkompressibler Materialien werden zunächst in Anlehnung an die Berechnung kompressibler Materialien und unter Berücksichtigung der multiplikativen Zerlegung die Basistensoren

$$\underline{\overline{\mathbf{Z}}}^T := \{\overline{\mathbf{Z}}_1, \overline{\mathbf{Z}}_2, \overline{\mathbf{Z}}_3\} := \{\mathbf{1}, \overline{\mathbf{C}}, \overline{\mathbf{C}}^{-1}\} \tag{3.32}$$

eingeführt. Aus dem zweiten Faktor der Gleichung (3.31) ergibt sich mit $\overline{\mathbf{C}} = J^{-2/3}\mathbf{C}$ und

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{C}}\left[J^{-2/3}\mathbf{C}\right] = J^{-2/3}\,\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{C}} + \mathbf{C} \otimes \frac{\partial J^{-2/3}}{\partial \mathbf{C}} = J^{-2/3}\,\mathbb{1}_{\mathbf{G}^{-1}} + \mathbf{C} \otimes \left(-\frac{1}{3}\,J^{-2/3}\,\mathbf{C}^{-1}\right)$$

der vierstufige deviatorische Projektionstensor $\mathbb{P}$ in der Form

$$\boxed{\mathbb{P} := \frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} = J^{-2/3}\,\left(\mathbb{1}_{\mathbf{G}^{-1}} - \frac{1}{3}\,\mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1}\right).} \tag{3.33}$$

Aus der Anwendung von $\mathbb{P}$ auf die Tensoren $\mathbf{1}$ und $\overline{\mathbf{C}}$ berechnen sich die modifizierten Basistensoren $\overline{\mathbf{Z}}_1$ und $\overline{\mathbf{Z}}_2$ zu

$$\boxed{\overline{\mathbf{Z}}_1 := \mathbf{1} : \mathbb{P} = \operatorname{dev}\overline{\mathbf{C}}\;\mathbf{C}^{-1} \quad \text{und} \quad \overline{\mathbf{Z}}_2 := \overline{\mathbf{C}} : \mathbb{P} = \operatorname{dev}\overline{\mathbf{C}}^2\;\mathbf{C}^{-1},} \tag{3.34}$$

während sich aus der Anwendung von $\mathbb{P}$ auf $\overline{\mathbf{C}}^{-1}$ der Nulltensor ergibt, d.h.

$$\overline{\mathbf{C}}^{-1}\;\mathbb{P} = \overline{\mathbf{C}}^{-1}\;\left\{J^{-2/3}\,\left(\mathbb{1}_{\mathbf{G}^{-1}} - \frac{1}{3}\,\mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1}\right)\right\} = \mathbf{0}. \tag{3.35}$$

In den obigen Formeln bezeichnet $\operatorname{dev}\overline{\mathbf{C}}$ den deviatorischen Anteil von $\overline{\mathbf{C}}$, d.h. es gilt

$$\operatorname{dev}\mathbf{C} = \mathbf{C} - \frac{1}{3}\operatorname{tr}\mathbf{C}\;\mathbf{1} \qquad \text{und} \qquad \operatorname{dev}\overline{\mathbf{C}} = J^{-2/3}\;\operatorname{dev}\mathbf{C}. \tag{3.36}$$

Für die noch herzuleitende Gleichung (3.41) zur Bestimmung der zweiten Ableitung der Invarianten nach dem Verzerrungstensor (hier $\mathbf{C}$) wird die Ableitung der Basistensoren $\overline{\mathbf{Z}}_m$ nach dem Verzerrungstensor erforderlich. Mit der Wahl der Basis nach (3.34) ergibt sich durch Ausführung der Differentiation

$$\begin{aligned}
\overline{\mathbb{Z}}_1 := \frac{\partial \overline{\mathbf{Z}}_1}{\partial \mathbf{C}} &= \frac{1}{3}\overline{\mathrm{I}}\left\{\mathbb{1}_{\mathbf{C}^{-1}} - \frac{1}{3}\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1}\right\} \\
&- \frac{1}{3}\left\{\left(\operatorname{dev}\overline{\mathbf{C}}\;\mathbf{C}^{-1}\right) \otimes \mathbf{C}^{-1} + \mathbf{C}^{-1} \otimes \left(\operatorname{dev}\overline{\mathbf{C}}\;\mathbf{C}^{-1}\right)\right\} && (3.37) \\
\overline{\mathbb{Z}}_2 := \frac{\partial \overline{\mathbf{Z}}_2}{\partial \mathbf{C}} &= \frac{1}{3}\operatorname{tr}\overline{\mathbf{C}}^2\;\mathbb{1}_{\mathbf{C}^{-1}} + J^{-4/3}\;\mathbb{1}_{\mathbf{G}^{-1}} - \frac{2}{9}\operatorname{tr}\overline{\mathbf{C}}^2\;\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} \\
&- \frac{2}{3}\left\{\left(\operatorname{dev}\overline{\mathbf{C}}^2\;\mathbf{C}^{-1}\right) \otimes \mathbf{C}^{-1} + \mathbf{C}^{-1} \otimes \left(\operatorname{dev}\overline{\mathbf{C}}^2\;\mathbf{C}^{-1}\right)\right\}. && (3.38)
\end{aligned}$$

Die genauere Herleitung ist im Anhang B zu finden.

3.3.3 Ableitung der modifizierten Invarianten nach C

Die Ableitung der modifizierten Invarianten $\overline{\mathrm{I}}, \overline{\mathrm{II}}$ nach dem modifizierten Verzerrungstensor $\overline{\mathbf{C}}$ ergibt analog zur Gleichung (3.20) die Beziehungen

$$\boxed{\frac{\partial \overline{\mathrm{I}}}{\partial \overline{\mathbf{C}}} = \mathbf{1} \qquad \text{und} \qquad \frac{\partial \overline{\mathrm{II}}}{\partial \overline{\mathbf{C}}} = \overline{\mathrm{I}}\;\mathbf{1} - \overline{\mathbf{C}}.} \tag{3.39}$$

Durch die oben beschriebene Anwendung des Projektionstensors $\mathbb{P}$ auf die Basistensoren kann zusammenfassend für Gleichung (3.31) die Beziehung

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial \overline{\mathrm{I}}}{\partial \mathbf{C}} \\ \dfrac{\partial \overline{\mathrm{II}}}{\partial \mathbf{C}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \overline{\mathrm{I}} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \operatorname{dev} \overline{\mathbf{C}}\ \mathbf{C}^{-1} \\ \operatorname{dev} \overline{\mathbf{C}}^2\ \mathbf{C}^{-1} \end{pmatrix},$$

bzw. in der Form

$$\boxed{\frac{\partial \overline{\mathrm{I}}_i}{\partial \mathbf{C}} = \sum_{m=1}^{2} \overline{A}_{im}\ \overline{\mathbf{Z}}_m,} \tag{3.40}$$

hergeleitet werden, wobei hieraus die Definition der Matrix $\underline{\overline{A}} := \left(\overline{A}_{im}\right)$ und der Matrix $\underline{\overline{\mathbf{Z}}}$ der modifizierten Basistensoren deutlich wird. Bemerkenswert ist, daß sich beim Übergang vom kompressiblen Material zum deviatorischen Anteil $\overline{W}$ des inkompressiblen Material durch die zusätzlich wirksame Inkompressibilitätsbedingung $\overline{\lambda}_1 \cdot \overline{\lambda}_2 \cdot \overline{\lambda}_3 = 1$ die Dimension des betrachteten Raumes der Verzerrungstensoren reduziert wird. Somit spannen im Fall eines inkompressiblen, hyperelastischen Materials die beiden modifizierten Basistensoren $\overline{\mathbf{Z}}_1 = \operatorname{dev} \overline{\mathbf{C}}\ \mathbf{C}^{-1}$ und $\overline{\mathbf{Z}}_2 = \operatorname{dev} \overline{\mathbf{C}}^2\ \mathbf{C}^{-1}$ den betrachteten Raum des Anteils von $\overline{W}$ auf. Für die numerische Realisation bedeutet dies, daß die Summationsschleifen nur noch über zwei (modifizierte) Summanden laufen.

Für die zweite Ableitung der Invarianten $\overline{\mathrm{I}}_i$ nach $\mathbf{C}$ ergibt sich entsprechend aus (3.23) die modifizierte Beziehung

$$\boxed{\frac{\partial^2 \overline{\mathrm{I}}_i}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}} = \sum_{m=1}^{2} \left[\sum_{k=1}^{2} \sum_{l=1}^{2} \left\{ \frac{\partial \overline{A}_{im}}{\partial \overline{\mathrm{I}}_k} \overline{A}_{kl} \overline{\mathbf{Z}}_l \otimes \overline{\mathbf{Z}}_m \right\} + \overline{A}_{im} \frac{\partial \overline{\mathbf{Z}}_m}{\partial \mathbf{C}} \right].} \tag{3.41}$$

3.3.4 Darstellung der deviatorischen Anteile der Spannungs- und Materialtensoren

Die deviatorischen Anteile $\mathbf{S}^D$ am Spannungstensor ergeben sich nach (3.29) zu

$$\mathbf{S}^D = 2 \frac{\partial \check{\overline{W}}(\overline{\mathrm{I}}, \overline{\mathrm{II}})}{\partial \mathbf{C}} = 2 \sum_{i=1}^{2} \frac{\partial \overline{W}}{\partial \overline{\mathrm{I}}_i} \cdot \frac{\partial \overline{\mathrm{I}}_i}{\partial \mathbf{C}} \tag{3.42}$$

und können mit der Notation (3.28), den Basistensoren $\overline{\mathbf{Z}}_i$ nach (3.34) und der Ableitung der Invarianten $\overline{\mathrm{I}}_i$ nach $\mathbf{C}$ gemäß Gleichung (3.40) durch Einführung der Koeffizienten

$$\boxed{\overline{\alpha}_m := \overline{W}_{,i}\ \overline{A}_{im}} \tag{3.43}$$

in der Form

$$\boxed{\mathbf{S}^D = 2\,\overline{\alpha}_m\ \overline{\mathbf{Z}}_m} \tag{3.44}$$

dargestellt werden.

Für den deviatorischen Anteil $\mathbb{C}^D$ am Materialtensor gilt mit (3.30) und den oben ermittelten Teilergebnissen die Beziehung

$$\begin{aligned}\mathbb{C}^D = 4\frac{\partial^2 \check{\overline{W}}(\overline{\mathrm{I}},\overline{\mathrm{II}})}{\partial\mathbf{C}\partial\mathbf{C}} &= 4\sum_{i=1}^{2}\left[\sum_{j=1}^{2}\left\{\frac{\partial^2\overline{W}}{\partial\overline{\mathrm{I}}_i\partial\overline{\mathrm{I}}_j}\cdot\frac{\partial\overline{\mathrm{I}}_i}{\partial\mathbf{C}}\otimes\frac{\partial\overline{\mathrm{I}}_j}{\partial\mathbf{C}}\right\}+\frac{\partial\overline{W}}{\partial\overline{\mathrm{I}}_i}\cdot\frac{\partial^2\overline{\mathrm{I}}_i}{\partial\mathbf{C}\partial\mathbf{C}}\right]\\ &= 4\left\{\overline{A}_{il}\,\overline{W}_{,ij}\,\overline{A}_{jm}+\overline{W}_{,i}\,\frac{\partial\overline{A}_{im}}{\partial\overline{\mathrm{I}}_k}\overline{A}_{kl}\right\}\overline{\mathbf{Z}}_l\otimes\overline{\mathbf{Z}}_m+4\,\overline{W}_{,i}\,\overline{A}_{im}\frac{\partial\overline{\mathbf{Z}}_m}{\partial\mathbf{C}},\end{aligned}$$

die durch Einführung der Koeffizienten

$$\boxed{\overline{\beta}_{lm} = \overline{A}_{il}\,\overline{W}_{,ij}\,\overline{A}_{jm}+\overline{W}_{,i}\,\frac{\partial\overline{A}_{im}}{\partial\overline{\mathrm{I}}_k}\overline{A}_{kl}} \tag{3.45}$$

in der Form

$$\boxed{\mathbb{C}^D = 4\,\overline{\beta}_{lm}\,\overline{\mathbf{Z}}_l\otimes\overline{\mathbf{Z}}_m+4\,\overline{\alpha}_m\,\frac{\partial\overline{\mathbf{Z}}_m}{\partial\mathbf{C}}.} \tag{3.46}$$

dargestellt werden kann.

3.3.5 Darstellung der volumetrischen Anteile der Spannungs- und Materialtensoren

Für die erste Ableitung der Funktion $U = \hat{U}(J)$ nach $\mathbf{C}$ ergibt sich mit

$$J^2 = \mathrm{III}_{\mathbf{C}} \qquad \text{und} \qquad \frac{\partial J}{\partial\mathbf{C}} = \frac{\partial J}{\partial\mathrm{III}}\,\frac{\partial\mathrm{III}}{\partial\mathbf{C}} = \frac{1}{2J}\,\mathrm{III}\mathbf{C}^{-1} = \frac{1}{2}J\mathbf{C}^{-1}$$

durch Anwendung der Kettenregel und mit der Schreibweise $U' = \dfrac{\partial U}{\partial J}$ die Beziehung

$$\frac{\partial U}{\partial\mathbf{C}} = \frac{1}{2}J\,U'\,\mathbf{C}^{-1}.$$

Für die zweite Ableitung folgt hieraus

$$\frac{\partial^2 U}{\partial\mathbf{C}\partial\mathbf{C}} = -\frac{1}{2}J\,U'\,\mathbb{1}_{\mathbf{C}^{-1}}+\frac{1}{4}J\,[J\,U']'\,\mathbf{C}^{-1}\otimes\mathbf{C}^{-1}.$$

Damit folgt für den volumetrischen Anteil des Spannungstensors

$$\boxed{\mathbf{S}^K = 2\,\frac{\partial\hat{U}(J)}{\partial\mathbf{C}} = J\,U'\,\mathbf{C}} \tag{3.47}$$

und für den Anteil am Materialtensor gilt

$$\boxed{\mathbb{C}^K = 4\,\frac{\partial^2 U}{\partial\mathbf{C}\partial\mathbf{C}} = -2\,J\,U'\,\mathbb{1}_{\mathbf{C}^{-1}}+J\,[J\,U']'\,\mathbf{C}^{-1}\otimes\mathbf{C}^{-1}.} \tag{3.48}$$

3.3.6 Zusammenfassung der Berechnung

Die Ergebnisse für die Berechnung inkompressibler hyperelastischer Materialien sind in den nachfolgenden Tafeln zusammengefaßt.

Tafel 3.5: Deviatorischer Anteil der Spannungs- und Materialtensoren inkompressibler Materialien

1. Bestimme die tensorielle Basis

$$\overline{\mathbf{Z}}_1 = \operatorname{dev} \overline{\mathbf{C}}\, \mathbf{C}^{-1} \qquad \text{und} \qquad \overline{\mathbf{Z}}_2 = \operatorname{dev} \overline{\mathbf{C}}^2\, \mathbf{C}^{-1}$$

   und bilde die Ableitung der Basis nach $\mathbf{C}$ in der Form

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{\mathbf{Z}}_1}{\partial \mathbf{C}} &= \frac{1}{3}\bar{\mathrm{I}} \left\{ \mathbb{1}_{\mathbf{C}^{-1}} - \frac{1}{3}\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} \right\} \\ &- \frac{1}{3}\left\{ \overline{\mathbf{Z}}_1 \otimes \mathbf{C}^{-1} + \mathbf{C}^{-1} \otimes \overline{\mathbf{Z}}_1 \right\} \\ \frac{\partial \overline{\mathbf{Z}}_2}{\partial \mathbf{C}} &= \frac{1}{3}\operatorname{tr} \overline{\mathbf{C}}^2\, \mathbb{1}_{\mathbf{C}^{-1}} + J^{-4/3}\, \mathbb{1}_{\mathbf{G}^{-1}} - \frac{2}{9}\operatorname{tr} \overline{\mathbf{C}}^2\, \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} \\ &- \frac{2}{3}\left\{ \overline{\mathbf{Z}}_2 \otimes \mathbf{C}^{-1} + \mathbf{C}^{-1} \otimes \overline{\mathbf{Z}}_2 \right\} \end{aligned}$$

2. Bestimme die Koeffizientenmatrix $\underline{\overline{A}}$ für die Darstellung der Ableitung der modifizierten Invarianten nach $\mathbf{C}$ bezüglich der gewählten Basis, d.h.

$$\underline{\overline{A}} = \left(\overline{A}_{im}\right) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \bar{\mathrm{I}} & -1 \end{pmatrix}.$$

3. Berechne die Ableitungen des deviatorischen Anteils $\overline{W}$ an der Formänderungsenergie W nach den modifizierten Invarianten

$$\overline{W}_{,i} = \frac{\partial \overline{W}}{\partial \bar{\mathrm{I}}_i} \quad \text{und} \quad \overline{W}_{,ij} = \frac{\partial^2 \overline{W}}{\partial \bar{\mathrm{I}}_i \partial \bar{\mathrm{I}}_j}$$

   für die unterschiedlichen Formen der Formänderungsenergiefunktion. Für weitere Bemerkungen siehe hierzu Tafel 3.3.

4. Berechne die Koeffizienten $\overline{\alpha}_i$ und $\overline{\beta}_{ij}$ in der Form

$$\overline{\alpha}_m = \overline{W}_{,i}\, \overline{A}_{im} \qquad \text{und} \qquad \overline{\beta}_{lm} = \overline{A}_{il}\, \overline{W}_{,ij}\, \overline{A}_{jm} + \overline{W}_{,i}\, \frac{\partial \overline{A}_{im}}{\partial \bar{\mathrm{I}}_k} \overline{A}_{kl}$$

5. Bestimme die deviatorischen Anteile $\mathbf{S}^D$ und $\mathbb{C}^D$ in der Form

$$\mathbf{S}^D = 2\,\overline{\alpha}_m\, \overline{\mathbf{Z}}_m \qquad \text{und} \qquad \mathbb{C}^D = 4\,\overline{\beta}_{lm}\, \overline{\mathbf{Z}}_l \otimes \overline{\mathbf{Z}}_m + 4\,\overline{\alpha}_m\, \frac{\partial \overline{\mathbf{Z}}_m}{\partial \mathbf{C}}.$$

Tafel 3.6: Vollständige Spannungs- und Materialtensoren inkompressibler Materialien

1. Bestimme die volumetrischen Anteile $\mathbf{S}^K$ am 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor und $\mathbb{C}^K$ am zugehörigen Materialtensor in der Form

$$\mathbf{S}^K = 2\frac{\partial \hat{U}(J)}{\partial \mathbf{C}} = J\,U'\,\mathbf{C}^{-1} \qquad \text{und} \qquad \mathbb{C}^K = -2J\,U'\,\mathbb{I}_{\mathbf{C}^{-1}} + [J\,U']'\,\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1}.$$

2. Bestimme die deviatorischen Anteile $\mathbf{S}^D$ am 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor und $\mathbb{C}^D$ am zugehörigen Materialtensor gemäß Tafel 3.5 in der Form

$$\mathbf{S}^D = 2\,\overline{\alpha}_m\,\overline{\mathbf{Z}}_m \qquad \text{und} \qquad \mathbb{C}^D = 4\,\overline{\beta}_{lm}\,\overline{\mathbf{Z}}_l \otimes \overline{\mathbf{Z}}_m + 4\,\overline{\alpha}_m\,\frac{\partial \overline{\mathbf{Z}}_m}{\partial \mathbf{C}}.$$

3. Bestimme die vollständigen Spannungs- und Materialtensoren durch Addition der volumetrischen und deviatorischen Anteile, d.h.

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^K + \mathbf{S}^D \qquad \text{und} \qquad \mathbb{C} = \mathbb{C}^K + \mathbb{C}^D.$$

3.4 Der ebene Spannungszustand bei kompressiblen Materialien

3.4.1 Grundlage der Berechnung

Für den ebenen Spannungszustand gelten gegenüber dem allgemeinen dreidimensionalen Spannungs- und Verzerrungszustand die Beziehungen

$$S_{13} = S_{23} = S_{33} = 0 \quad \text{und} \quad C_{13} = C_{23} = 0 \quad \text{jedoch} \quad C_{33} \neq 0 \tag{3.49}$$

für die Komponenten des 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensors $\mathbf{S}$ bzw. des Rechts-Cauchy-Green-Tensors $\mathbf{C}$. Für die Anteile der Tensoren in der von den Vektoren $\mathbf{e}_1$ und $\mathbf{e}_2$ des kartesischen Koordinatensystems aufgespannten Scheibenmittelfläche wird die Notation

$$\mathbf{S}_{esz} := \sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2} S_{ij}\,\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \qquad \text{bzw.} \qquad \mathbf{C}_{esz} := \sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2} C_{ij}\,\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \tag{3.50}$$

eingeführt. Die Komponenten C_{11}, C_{22} und C_{12} von $\mathbf{C}_{esz}$ werden für den Fall des ebenen Spannungszustandes aus dem zweidimensionalen Verschiebungszustand

$$\mathbf{u}_{esz} := \sum_{i=1}^{2} u_i\,\mathbf{e}_i \tag{3.51}$$

berechnet. Die Verzerrung C_{33} senkrecht zur Scheibenmittelfläche kann aus der Bedingung $S_{33} = 0$ ermittelt werden und ist eine nichtlineare Funktion der Anteile C_{11}, C_{22} und C_{12} von $\mathbf{C}_{esz}$, d.h.

$$C_{33} = \hat{C}_{33}(\mathbf{C}_{esz}), \tag{3.52}$$

die nur in ausgewählten Sonderfällen explizit nach C_{33} aufgelöst werden kann. Die Berechnung basiert wesentlich auf der Entkopplung der Verzerrung C_{33} senkrecht zur Scheibenmittelfläche vom Verzerrungsanteil $\mathbf{C}_{esz}$ in der Scheibenmittelfläche. Für die Behandlung gekrümmter Flächentragwerke ergibt sich die gewünschte Entkopplung bei Einführung eines kartesischen Koordinatensystems, dessen ersten zwei Basisvektoren die Tangentialebene an die Scheibenmittelfläche im betrachteten Punkt aufspannen.

Die Berechnung kompressibler Materialien im ebenen Spannungszustand basiert auf den Ergebnissen des Abschnitts 3.2 für kompressible Materialien im allgemeinen dreidimensionalen Verzerrungszustand, die in der Tafel 3.3 zusammengefaßt sind.

3.4.2 Die Berechnung der Dickenänderung

Für kompressible, hyperelastische Materialien mit $0 \leq \nu < 0.5$, wobei ν die Querkontraktionszahl der linearisierten Theorie darstellt, muß die Dickenänderung und damit C_{33} nach Berechnung der Anteile $\mathbf{C}_{esz}$ aus dem Verschiebungszustand $\mathbf{u}_{esz}$ aus der nichtlinearen Gleichung

$$S_{33} = \hat{S}_{33}(C_{33}) = 0 \tag{3.53}$$

iterativ bestimmt werden. Hierfür bietet sich eine lokale Iteration mit Hilfe des quadratisch konvergenten Newton-Raphson-Verfahrens an, wobei die Linearisierung der Spannung S_{33} an der Stelle C_{33}^k vorzunehmen ist, d.h. es gilt mit der Taylorreihenentwicklung von S_{33} und Abbruch nach dem linearen Glied

$$S_{33}^{k+1} = 0 = S_{33}^k + \left.\frac{\partial S_{33}}{\partial C_{33}}\right|_{C_{33}^k} (C_{33}^{k+1} - C_{33}^k). \tag{3.54}$$

Mit der Komponente $\mathbb{C}_{3333}$ der materiellen Form des Werkstofftensors aus der Beziehung (2.57) bzw. (3.27) gilt dann

$$\boxed{C_{33}^{k+1} = C_{33}^k - \left\{ \left.\frac{\partial S_{33}}{\partial C_{33}}\right|_{C_{33}^k} \right\}^{-1} S_{33}^k = C_{33}^k - 2\,\frac{S_{33}^k}{\mathbb{C}_{3333}^k}.} \tag{3.55}$$

3.4.3 Spannungs- und Materialtensoren für kompressible Materialien im ebenen Spannungszustand

Nach der Berechnung der Komponente C_{33} kann der Spannungstensor aus der Beziehung des allgemeinen dreidimensionalen Verzerrungszustandes berechnet werden, d.h.

$$\boxed{\mathbf{S}_{esz} = 2\,\frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}}.} \tag{3.56}$$

Der Materialtensor $\mathbb{C}_{esz}$ des ebenen Spannungszustands kann im weiteren durch eine Kondensation aus dem Materialtensor $\mathbb{C}$ des allgemeinen dreidimensionalen Verzerrungszustandes hergeleitet werden. Hierzu wird das vollständige Differential des Spannungstensors $\mathbf{S}$ in der Form

$$d\mathbf{S} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{C}_{esz}} : d\mathbf{C}_{esz} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial C_{33}} \cdot dC_{33}. \tag{3.57}$$

betrachtet und dC_{33} aus der Bedingung $dS_{33} = 0$ berechnet, d.h. es gilt

$$0 = dS_{33} = \frac{\partial S_{33}}{\partial \mathbf{C}_{esz}} : d\mathbf{C}_{esz} + \frac{\partial S_{33}}{\partial C_{33}} \cdot dC_{33} \tag{3.58}$$

und damit

$$dC_{33} = \left[- \left\{ \frac{\partial S_{33}}{\partial C_{33}} \right\}^{-1} \frac{\partial S_{33}}{\partial \mathbf{C}_{esz}} \right] : d\mathbf{C}_{esz}. \tag{3.59}$$

Für die Ableitung der Spannungen $\mathbf{S}_{esz}$ nach $\mathbf{C}_{esz}$ folgt der Materialtensor

$$\mathbb{C}_{esz} = 2 \left\{ \frac{\partial \mathbf{S}_{esz}}{\partial \mathbf{C}_{esz}} - \left\{ \frac{\partial S_{33}}{\partial C_{33}} \right\}^{-1} \frac{\partial \mathbf{S}_{esz}}{\partial C_{33}} \otimes \frac{\partial S_{33}}{\partial \mathbf{C}_{esz}} \right\}, \tag{3.60}$$

und mit (3.56) ergibt sich die Darstellung

$$\boxed{\mathbb{C}_{esz} = 4 \left\{ \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{C}_{esz} \partial \mathbf{C}_{esz}} - \left\{ \frac{\partial^2 W}{\partial C_{33} \partial C_{33}} \right\}^{-1} \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{C}_{esz} \partial C_{33}} \otimes \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{C}_{esz} \partial C_{33}} \right\}.} \tag{3.61}$$

Die lokale Iteration zur Bestimmung der Dickenänderung C_{33} kompressibler Materialien im ebenen Spannungszustand ist in der nachfolgenden Tafel zusammengestellt.

Tafel 3.7: Der Verzerrungszustand des ebenen Spannungszustandes

Eingang: Gegeben sei der ebene Anteil $\mathbf{C}_{esz}$ des Verzerrungstensors $\mathbf{C}$ und die Abbruchgenauigkeit ϵ zur Erfüllung der Bedingung $S_{33} = 0$.

1. Berechne die ebenen Anteile der tensoriellen Basis $\underline{\mathbf{Z}}$ sowie die ebenen Anteile der Ableitung der tensoriellen Basis nach $\mathbf{C}$.
2. Wähle den Startwert C_{33}^0 für die lokale Iteration:
   - der ungestörte Zustand $C_{33} = 1$ oder
   - der Lösungspunkt der vorhergehenden lokalen Iteration.
3. Lokale Iteration zur Bestimmung der Dickenänderung C_{33}:
   (a) Berechne die Anteile von C_{33}^k an der Tensorbasis $\underline{\mathbf{Z}}$ und an den Ableitungen der Basistensoren nach $\mathbf{C}$.
   (b) Berechne die Invarianten $\mathrm{I}_{\mathbf{C}^k}, \mathrm{II}_{\mathbf{C}^k}, \mathrm{III}_{\mathbf{C}^k}$ des vollständigen Verzerrungstensors $\mathbf{C}^k$.
   (c) Bestimme die Matrix $\underline{A}$, sowie die Koeffizienten α_m^k und β_{lm}^k zur Bestimmung der Spannungs- und Materialtensoren.
   (d) Berechne die Komponenten S_{33}^k des Spannungs- und $\mathbb{C}_{3333}^k$ des Materialtensors aus (3.25) bzw. (3.27).
   (e) Abbruch der Berechnung:
   Für $\mid S_{33}^k \mid < \epsilon$ setze $C_{33}^\star = C_{33}^k$ und gehe zum Schritt 4.
   (f) Berechne die Verbesserung der Dickenänderung gemäß
   $$C_{33}^{k+1} = C_{33}^k - 2\,\frac{S_{33}^k}{\mathbb{C}_{3333}^k}.$$
   (g) Setze $k = k + 1$ und gehe zu Schritt 3a.
4. Berechne mit der Lösung $C_{33}^\star$ den vollständigen Verzerrungszustand $\mathbf{C}$, die Basistensoren, die Ableitung der Basistensoren, die Invarianten und bestimme damit den aktuellen Spannungszustand $\mathbf{S}$ sowie die Materialmatrix $\mathbb{C}$ des allgemeinen räumlichen Verzerrungszustandes gemäß Tafel 3.4.
5. Berechnung der Materialmatrix $\mathbb{C}_{esz}$ des ebenen Spannungszustandes nach (3.61), d.h.

$$\mathbb{C}_{esz} = 4\left\{\frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{C}_{esz}\partial \mathbf{C}_{esz}} - \left\{\frac{\partial^2 W}{\partial C_{33}\partial C_{33}}\right\}^{-1}\frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{C}_{esz}\partial C_{33}} \otimes \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{C}_{esz}\partial C_{33}}\right\}.$$

3.5 Der ebene Spannungszustand bei inkompressiblen Materialien

Für die Grundlagen der Berechnung, insbesondere für die Einführung der ebenen Spannungs- und Verzerrungstensoren $\mathbf{S}_{esz}$ und $\mathbf{C}_{esz}$, siehe Abschnitt 3.4.1. Die Berechnung inkompressibler Materialien im ebenen Spannungszustand basiert auf den Ergebnissen des Abschnitts 3.3 für inkompressible Materialien im allgemeinen dreidimensionalen Verzerrungszustand, die in der Tafel 3.5 zusammengefaßt sind. Die Ergebnisse sind in anderer Notation schon in *Gruttmann, Taylor* [46] enthalten.

3.5.1 Die Berechnung der Dickenänderung

Mit der Inkompressibilitätsbedingung nach (2.22), die in diesem Fall in der Form

$$\mathrm{III}_{\mathbf{C}} = C_{33} \cdot \det \mathbf{C}_{esz} = C_{33} \cdot \{C_{11}\, C_{22} - C_{12}\, C_{12}\} = 1 \tag{3.62}$$

geschrieben werden kann, ist die direkte Berechnung der Dickenveränderung

$$\boxed{C_{33} = \hat{C}_{33}(\mathbf{C}_{esz}) = \frac{1}{\det \mathbf{C}_{esz}} = \frac{1}{C_{11}\, C_{22} - C_{12}\, C_{12}}} \tag{3.63}$$

möglich. Die Ableitung dieser Beziehung nach $\mathbf{C}_{esz}$ ergibt

$$\frac{\partial C_{33}}{\partial \mathbf{C}_{esz}} = -C_{33}^2\, \frac{\partial}{\partial \mathbf{C}_{esz}}\, [\det \mathbf{C}_{esz}] = -C_{33}^2\, \det \mathbf{C}_{esz}\; \mathbf{C}_{esz}^{-1} = -C_{33}\, \mathbf{C}_e^{-1}. \tag{3.64}$$

3.5.2 Spannungs- und Materialtensoren für inkompressible Materialien im ebenen Spannungszustand

Der Ausgangspunkt für die Berechnung inkompressibler Materialien im ebenen Spannungszustand ist die Formänderungsenergie nach Gleichung (2.77), d.h. in der Form

$$W = \check{W}(\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}) = \overline{\check{W}}(\bar{\mathrm{I}}, \bar{\mathrm{II}}) + U(J).$$

Der 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor ergibt sich nach Abschnitt 3.3 zu

$$\mathbf{S} = J\, U'\, \mathbf{C}^{-1} + 2\, \frac{\partial \overline{W}}{\partial \mathbf{C}},$$

so daß mit der Beziehung $[C_{33}]^{-1} = [C^{-1}]_{33}$ aus der Bedingung $S_{33} = 0$, d.h. aus

$$S_{33} = J\, U'\, C_{33}^{-1} + 2\, \frac{\partial \overline{W}}{\partial C_{33}} = 0, \tag{3.65}$$

der hydrostatische Druck $p = U'$ zu

$$p = U' = -\frac{2}{J}\, C_{33}\, \frac{\partial \overline{W}}{\partial C_{33}} \tag{3.66}$$

berechnet werden kann. Damit können die restlichen Spannungen $\mathbf{S}_{esz}$ in der Form

$$\boxed{\mathbf{S}_{esz} = 2\,\frac{\partial \overline{W}}{\partial \mathbf{C}} = 2\left\{\frac{\partial \overline{W}}{\partial \mathbf{C}_{esz}} - C_{33}\frac{\partial \overline{W}}{\partial C_{33}}\,\mathbf{C}_{esz}^{-1}\right\}} \tag{3.67}$$

dargestellt werden. Hieraus kann der Materialtensor $\mathbb{C}_{esz}$ direkt berechnet werden, d.h. es gilt

$$\mathbb{C}_{esz} = 2\,\frac{\partial \mathbf{S}_{esz}}{\partial \mathbf{C}_{esz}} + 2\,\frac{\partial \mathbf{S}_{esz}}{\partial C_{33}} \otimes \frac{\partial C_{33}}{\partial \mathbf{C}_{esz}} = 2\,\left\{\frac{\partial \mathbf{S}_{esz}}{\partial \mathbf{C}_{esz}} - C_{33}\,\frac{\partial \mathbf{S}_{esz}}{\partial C_{33}} \otimes \mathbf{C}_{esz}^{-1}\right\}. \tag{3.68}$$

Eine weitere Form ergibt sich durch Einsetzen des Ausdrucks (3.67) des Spannungstensors in die obige Beziehung und die Ausführung der auftretenden Ableitungen, d.h. es gilt

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{1}{4}\mathbb{C}_{esz} \;&=\; \frac{\partial^2 \overline{W}}{\partial \mathbf{C}_{esz}\partial \mathbf{C}_{esz}} - C_{33}\,\frac{\partial \overline{W}}{\partial C_{33}}\frac{\partial \mathbf{C}_{esz}^{-1}}{\partial \mathbf{C}_{esz}} \\ &-\; \left\{\mathbf{C}_{esz}^{-1} \otimes \left(C_{33}\,\frac{\partial^2 \overline{W}}{\partial \mathbf{C}_{esz}\partial C_{33}}\right) + \left(C_{33}\,\frac{\partial^2 \overline{W}}{\partial \mathbf{C}_{esz}\partial C_{33}}\right) \otimes \mathbf{C}_{esz}^{-1}\right\} \\ &+\; \left\{C_{33}\,\frac{\partial}{\partial C_{33}}\left(C_{33}\,\frac{\partial \overline{W}}{\partial C_{33}}\right)\right\}\,\mathbf{C}_{esz}^{-1} \otimes \mathbf{C}_{esz}^{-1}.\end{aligned}} \tag{3.69}$$

Der Ablauf der Berechnung des Spannungs- und des Materialtensors eines inkompressiblen Materials im ebenen Spannungszustand ist in der folgenden Tafel zusammengefaßt.

Tafel 3.8: Spannungs- und Materialtensoren für inkompressible Materialien im ebenen Spannungszustand

Eingang: Ebener Anteil $\mathbf{C}_{esz}$ des Verzerrungszustandes.

1. Berechne die Dickenveränderung C_{33} gemäß

$$C_{33} = \hat{C}_{33}(\mathbf{C}_{esz}) = \frac{1}{\det \mathbf{C}_{esz}} = \frac{1}{C_{11}\,C_{22} - C_{12}\,C_{12}}$$

2. Berechne mit dem vollständigen dreidimensionalen Verzerrungstensor $\mathbf{C}$ die deviatorischen Anteile der Formänderungsenergie nach Abschnitt 3.3, d.h. von

$$\frac{\partial \overline{W}}{\partial \mathbf{C}} \qquad \text{und} \qquad \frac{\partial^2 \overline{W}}{\partial \mathbf{C}\partial \mathbf{C}}.$$

3. Berechne den Spannungstensor $\mathbf{S}_{esz}$ eines inkompressiblen Materials im ebenen Spannungszustand nach (3.67).

4. Berechne den Materialtensor $\mathbb{C}_{esz}$ eines inkompressiblen Materials im ebenen Spannungszustand nach (3.69).

3.6 Ableitung der Formänderungsenergie in den Eigenwerten nach den Invarianten für den allgemeinen Fall $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$

In diesem Abschnitt wird für eine Formänderungsenergiefunktion in den Eigenwerten nach (2.78), d.h. $W = \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$, die gewählte Vorgehensweise am Beispiel des 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensors $\mathbf{S}$ und des zugehörigen Materialtensors $\mathbb{C}$ erläutert. Zur Verwendung der in den Abschnitten 3.2 bzw. 3.5 beschriebenen Algorithmen sind die Ableitungen nach den Invarianten zu berechnen.

3.6.1 Ableitungen der Eigenwerte nach den Invarianten

Die Beziehung zwischen den Invarianten $\mathrm{I}_k, k = 1, 2, 3$, und den Eigenwerten $\lambda_i^2, i = 1, 2, 3$, des Rechts-Cauchy-Green-Tensors $\mathbf{C}$ lautet

$$\begin{aligned} \mathrm{I}_{\mathbf{C}} &= \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2, && (3.70)\\ \mathrm{II}_{\mathbf{C}} &= \lambda_1^2\,\lambda_2^2 + \lambda_2^2\,\lambda_3^2 + \lambda_3^2\,\lambda_1^2, && (3.71)\\ \mathrm{III}_{\mathbf{C}} &= \lambda_1^2\,\lambda_2^2\,\lambda_3^2\,. && (3.72) \end{aligned}$$

Für die Ableitung dieser Beziehungen nach den Eigenwerten gilt

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial \mathrm{I}}{\partial \lambda_1} & \dfrac{\partial \mathrm{I}}{\partial \lambda_2} & \dfrac{\partial \mathrm{I}}{\partial \lambda_3} \\ \dfrac{\partial \mathrm{II}}{\partial \lambda_1} & \dfrac{\partial \mathrm{II}}{\partial \lambda_2} & \dfrac{\partial \mathrm{II}}{\partial \lambda_3} \\ \dfrac{\partial \mathrm{III}}{\partial \lambda_1} & \dfrac{\partial \mathrm{III}}{\partial \lambda_2} & \dfrac{\partial \mathrm{III}}{\partial \lambda_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\lambda_1 & 2\lambda_2 & 2\lambda_3 \\ 2\lambda_1(\lambda_2^2 + \lambda_3^2) & 2\lambda_2(\lambda_3^2 + \lambda_1^2) & 2\lambda_3(\lambda_1^2 + \lambda_2^2) \\ 2\lambda_1\lambda_2^2\lambda_3^2 & 2\lambda_2\lambda_1^2\lambda_3^2 & 2\lambda_3\lambda_1^2\lambda_2^2 \end{pmatrix}. \tag{3.73}$$

Durch eine Matrizeninversion erhält man die Ableitungen der Eigenwerte nach den Invarianten in der Form

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial \lambda_1}{\partial \mathrm{I}} & \dfrac{\partial \lambda_1}{\partial \mathrm{II}} & \dfrac{\partial \lambda_1}{\partial \mathrm{III}} \\ \dfrac{\partial \lambda_2}{\partial \mathrm{I}} & \dfrac{\partial \lambda_2}{\partial \mathrm{II}} & \dfrac{\partial \lambda_2}{\partial \mathrm{III}} \\ \dfrac{\partial \lambda_3}{\partial \mathrm{I}} & \dfrac{\partial \lambda_3}{\partial \mathrm{II}} & \dfrac{\partial \lambda_3}{\partial \mathrm{III}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{\lambda_1^4}{N_1} & \dfrac{-\lambda_1^2}{N_1} & \dfrac{1}{N_1} \\ \dfrac{\lambda_2^4}{N_2} & \dfrac{-\lambda_2^2}{N_2} & \dfrac{1}{N_2} \\ \dfrac{\lambda_3^4}{N_3} & \dfrac{-\lambda_3^2}{N_3} & \dfrac{1}{N_3} \end{pmatrix} \tag{3.74}$$

mit den Abkürzungen

$$N_i := 2\lambda_i(2\lambda_i^4 - \mathrm{I}\lambda_i^2 + \mathrm{III}\lambda_i^{-2}) = 2\lambda_i(\lambda_i^2 - \lambda_j^2)(\lambda_i^2 - \lambda_k^2), \tag{3.75}$$

wobei die Indizes i, j, k eine gerade Permutation der Zahlen $1, 2, 3$ darstellen, siehe auch *Ting* [101], *Morman* [63]. Die Ableitung des i-ten Eigenwertes nach der k-ten Invarianten kann auch in der Form

$$\boxed{\frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_k} = \frac{(-1)^{k+1}}{N_i}\lambda_i^{6-2k}} \tag{3.76}$$

geschrieben werden.

Bedeutsam für die gesamte Vorgehensweise ist die Tatsache, daß die Ausdrücke N_i nur für den Fall $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$ ungleich Null sind, d.h. daß die Inversion nur für diesen Fall überhaupt möglich ist. Damit sind die Beziehungen (3.74) und (3.76) für die Sonderfälle des biaxialen Verzerrungszustandes $\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$ (entspricht wegen der Isotropie dem biaxialen Spannungszustand) und $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ (hydrostatischer Spannungszustand) nicht definiert. Dies wird insbesondere daran deutlich, daß in (3.76) die Nenner N_i für zusammenfallende Eigenwerte zu Null werden.

3.6.2 Erste Ableitung der Formänderungsenergie nach den Invarianten für $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$

Für den Fall $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$ können die Beziehungen (3.70) bis (3.72) nach den Eigenwerten λ_i aufgelöst werden. Unter Berücksichtigung der Ableitung der Eigenwerte nach den Invarianten gemäß (3.76) ergibt sich die Ableitung der Formänderungsenergie nach den Invarianten aus der Kettenregel zu

$$\boxed{\frac{\partial \tilde{W}(\lambda_s(\mathrm{I}_t))}{\partial \mathrm{I}_k} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \cdot \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_k} = (-1)^{k+1} \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \cdot \frac{\lambda_i^{6-2k}}{N_i}.} \tag{3.77}$$

3.6.3 Zweite Ableitung der Formänderungsenergie nach den Invarianten für $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$

Zur Vereinfachung der Notation wird die Einsteinsche Summenkonvention über doppelt auftretende Indizes benutzt. Die zweite Ableitung der Formänderungsenergie W nach den Invarianten $\dfrac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_s \partial \mathrm{I}_t}$ kann auf zweierlei Wegen berechnet werden. Zunächst sei die Darstellung des Materialtensors nach (3.15) betrachtet, die durch Anwendung der Kettenregel mit Hilfe der partiellen Ableitungen der Eigenwerte nach den Invarianten in die Form

$$\begin{aligned}
\mathbb{C} &= 4 \sum_{i=1}^{3} \left[\sum_{j=1}^{3} \left\{ \frac{\partial^2 W}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \cdot \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathbf{C}} \otimes \frac{\partial \lambda_j}{\partial \mathbf{C}} \right\} + \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \cdot \frac{\partial^2 \lambda_i}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}} \right] \\
&= 4 \sum_{s=1}^{3} \sum_{t=1}^{3} \left\{ \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s} \cdot \frac{\partial^2 W}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \cdot \frac{\partial \lambda_j}{\partial \mathrm{I}_t} + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \cdot \frac{\partial^2 \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s \partial \mathrm{I}_t} \right\} \frac{\partial \mathrm{I}_s}{\partial \mathbf{C}} \otimes \frac{\partial \mathrm{I}_t}{\partial \mathbf{C}} \\
&+ 4 \sum_{i=1}^{3} \sum_{s=1}^{3} + \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \cdot \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s} \cdot \frac{\partial^2 \mathrm{I}_s}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}}
\end{aligned}$$

überführt werden kann. Ein Vergleich mit Gleichung (3.9) liefert dann für die zweite Ableitung der Formänderungsenergie nach den Invarianten die Beziehung

$$\frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_s \partial \mathrm{I}_t} = \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s} \cdot \frac{\partial^2 W}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \cdot \frac{\partial \lambda_j}{\partial \mathrm{I}_t} + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \cdot \frac{\partial^2 \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s \partial \mathrm{I}_t}. \tag{3.78}$$

Diese Beziehung ist für die weitere Herleitung ungünstig, da hierfür die zweite partielle Ableitung der Eigenwerte nach den Invarianten, d.h. $\dfrac{\partial^2 \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s \partial \mathrm{I}_t}$, zu berechnen ist, was für den Fall zusammenfallender Eigenwerte nicht trivial ist, siehe auch Abschnitt 3.6.1. Ein besserer Zugang ergibt sich aus der Betrachtung der Ableitung von

$$\frac{\partial W}{\partial \lambda_i} = \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_k} \cdot \frac{\partial \mathrm{I}_k}{\partial \lambda_i} \tag{3.79}$$

nach λ_j, d.h. von

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 W}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} &= \frac{\partial}{\partial \lambda_j}\left(\frac{\partial W}{\partial \lambda_i}\right) = \frac{\partial}{\partial \lambda_j}\left(\frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_k} \cdot \frac{\partial \mathrm{I}_k}{\partial \lambda_i}\right) \\
&= \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_k} \cdot \frac{\partial^2 \mathrm{I}_k}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} + \frac{\partial \mathrm{I}_k}{\partial \lambda_i} \cdot \frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_k \partial \mathrm{I}_m} \cdot \frac{\partial \mathrm{I}_m}{\partial \lambda_j}.
\end{aligned}$$

Durch Multiplikation mit $\dfrac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s}$ und $\dfrac{\partial \lambda_j}{\partial \mathrm{I}_t}$ ergibt sich die Darstellung

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s} \cdot \frac{\partial \mathrm{I}_k}{\partial \lambda_i} \cdot \frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_k \partial \mathrm{I}_m} \cdot \frac{\partial \mathrm{I}_m}{\partial \lambda_j} \cdot \frac{\partial \lambda_j}{\partial \mathrm{I}_t} &= \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s} \cdot \frac{\partial^2 W}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \cdot \frac{\partial \lambda_j}{\partial \mathrm{I}_t} \\
&- \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s} \cdot \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_k} \cdot \frac{\partial^2 \mathrm{I}_k}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \cdot \frac{\partial \lambda_j}{\partial \mathrm{I}_t},
\end{aligned}$$

die mit den Beziehungen

$$\frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s} \cdot \frac{\partial \mathrm{I}_k}{\partial \lambda_i} = \delta_{sk} \qquad \text{und} \qquad \frac{\partial \mathrm{I}_m}{\partial \lambda_j} \cdot \frac{\partial \lambda_j}{\partial \mathrm{I}_t} = \delta_{mt} \tag{3.80}$$

in die endgültige Form

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_s \partial \mathrm{I}_t} &= \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s} \cdot \frac{\partial^2 W}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \cdot \frac{\partial \lambda_j}{\partial \mathrm{I}_t} - \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_k} \cdot \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s} \cdot \frac{\partial^2 \mathrm{I}_k}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \cdot \frac{\partial \lambda_j}{\partial \mathrm{I}_t} \\
&= \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s} \cdot \left\{ \frac{\partial^2 W}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} - \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_k} \cdot \frac{\partial^2 \mathrm{I}_k}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \right\} \cdot \frac{\partial \lambda_j}{\partial \mathrm{I}_t} \\
&= \frac{\partial \lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s} \cdot A_{ij} \cdot \frac{\partial \lambda_j}{\partial \mathrm{I}_t}
\end{aligned} \tag{3.81}$$

der zweiten Ableitung der Formänderungsenergie nach den Invarianten überführt werden kann. Dabei wurde die Matrix $\underline{A}$ mit den Elementen A_{ij} gemäß

$$A_{ij} := \frac{\partial^2 W}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} - \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_k} \cdot \frac{\partial^2 \mathrm{I}_k}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \tag{3.82}$$

eingeführt. Hierbei treten die zweiten Ableitungen der Invarianten nach den Eigenwerten auf, die direkt aus den Beziehungen (3.70) bis (3.72) durch zweimalige Differentiation nach den Eigenwerten in der Form

$$\frac{\partial^2 \mathrm{I}}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} = 2\delta_{ij}, \tag{3.83}$$

$$\frac{\partial^2 \mathrm{II}}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} = 2\left\{ \left(\mathrm{I} - 3\lambda_i^2\right)\delta_{ij} + 2\lambda_i \lambda_j \right\}, \tag{3.84}$$

$$\frac{\partial^2 \mathrm{III}}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} = 2\mathrm{III}\left\{ 2\lambda_i^{-1}\lambda_j^{-1} - \lambda_i^{-2}\delta_{ij} \right\} \tag{3.85}$$

hergeleitet werden können. Durch Einsetzen der Beziehungen für die erste Ableitung der Formänderungsenergie nach den Invarianten (3.77), für die zweiten Ableitungen der Invarianten nach den Eigenwerten (3.83) – (3.85) und unter Berücksichtigung der Definition der Werte N_i nach (3.75) ergibt sich für die Diagonalelemente A_{ii} die Beziehung

$$\boxed{A_{ii} = \frac{\partial^2 W}{\partial\lambda_i \partial\lambda_i} - \frac{1}{\lambda_i}\frac{\partial W}{\partial\lambda_i}.} \tag{3.86}$$

Analog hierzu folgt für die Nebendiagonalelemente A_{ij} für $i \neq j$

$$\boxed{A_{ij} = \frac{\partial^2 W}{\partial\lambda_i \partial\lambda_j} + \frac{2\lambda_j}{\lambda_i^2 - \lambda_j^2}\frac{\partial W}{\partial\lambda_i} - \frac{2\lambda_i}{\lambda_i^2 - \lambda_j^2}\frac{\partial W}{\partial\lambda_j}.} \tag{3.87}$$

Damit erhält Gleichung (3.81) die Form

$$\boxed{\frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_s \partial \mathrm{I}_t} = \frac{\partial\lambda_i}{\partial \mathrm{I}_s} \cdot A_{ij} \cdot \frac{\partial\lambda_j}{\partial \mathrm{I}_t} = \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} A_{ij}\frac{(-1)^{s+t}}{N_i N_j}\lambda_i^{2(3-s)}\lambda_j^{2(3-t)}.} \tag{3.88}$$

Der Ablauf der Berechnung der Ableitungen einer Formänderungsenergiefunktion der Eigenwerte nach den Invarianten ist in der nachfolgenden Tafel zusammengestellt.

Tafel 3.9: Ableitung der Formänderungsenergie der Eigenwerte nach den Invarianten für $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$

1. Berechne die Ableitungen der Formänderungsenergie $W = \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ nach den Eigenwerten, d.h. von

$$\frac{\partial \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)}{\partial\lambda_i} \qquad \text{und} \qquad \frac{\partial^2 \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)}{\partial\lambda_i\, \partial\lambda_j}.$$

2. Berechne die Beziehungen

$$N_i := 2\lambda_i(2\lambda_i^4 - \mathrm{I}\lambda_i^2 + \mathrm{III}\lambda_i^{-2}) = 2\lambda_i(\lambda_i^2 - \lambda_j^2)(\lambda_i^2 - \lambda_k^2).$$

3. Berechne die ersten partiellen Ableitungen nach den Invarianten in der Form

$$\frac{\partial \tilde{W}(\lambda_s(\mathrm{I}_t))}{\partial \mathrm{I}_k} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial W}{\partial\lambda_i} \cdot \frac{\partial\lambda_i}{\partial \mathrm{I}_k} = (-1)^{k+1}\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial W}{\partial\lambda_i} \cdot \frac{\lambda_i^{6-2k}}{N_i}$$

4. Berechne die zweiten partiellen Ableitungen nach den Invarianten durch
   (a) Berechnung der Werte A_{ij} für $i = j$ nach Gleichung (3.86).
   (b) Berechnung der Werte A_{ij} für $i \neq j$ nach Gleichung (3.87).
   (c) Auswertung der Gleichung (3.88).

3.7 Ableitung der Formänderungsenergie in den Eigenwerten nach den Invarianten für den Sonderfall $\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$

Das in Tafel 3.9 angegebene Verfahren zur Berechnung der partiellen Ableitung der Formänderungsenergie $W = \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ nach den Invarianten ist auf den Sonderfall $\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$ nicht direkt anzuwenden, da die Nenner $N_i = 2\lambda_i(\lambda_i^2 - \lambda_j^2)(\lambda_i^2 - \lambda_k^2)$ dann zu Null werden. Somit ist für den Sonderfall die Angabe der gewünschten partiellen Ableitungen auf dem Weg der Grenzwertbetrachtung zu erarbeiten.

3.7.1 Spannungs- und Materialtensoren für den Sonderfall $\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$

Der Spannungstensor $\mathbf{S}$ lautet nach Gleichung (3.24) und (3.25)

$$\mathbf{S} = 2\sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i}\sum_{m=1}^{3}\left(A_{im}\,\mathbf{Z}_m\right)\right]. \tag{3.89}$$

Für den Sonderfall $\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$ ergeben sich die Spannungen aus dem Grenzübergang

$$\begin{aligned}\lim_{\lambda_2\to\lambda_1}\mathbf{S} &= \lim_{\lambda_2\to\lambda_1}\left\{2\sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i}\sum_{m=1}^{3}\left(A_{im}\,\mathbf{Z}_m\right)\right]\right\}\\ &= 2\sum_{i=1}^{3}\left\{\left(\lim_{\lambda_2\to\lambda_1}\frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i}\right)\left(\sum_{m=1}^{3}A_{im}\,\mathbf{Z}_m\right)\right\},\end{aligned} \tag{3.90}$$

da die Größen A_{im} und $\mathbf{Z}_m$ im Punkt $\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$ stetig sind. Entsprechende Beziehungen gelten für den Materialtensor $\mathbb{C}$, so daß für die Berechnung nur die Grenzwerte

$$\lim_{\lambda_2\to\lambda_1}\frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_i} \qquad \text{und} \qquad \lim_{\lambda_2\to\lambda_1}\frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_i \partial \mathrm{I}_j}$$

für $i, j = 1, 2, 3$ bereitzustellen sind.

3.7.2 Betrachtung der Grenzwerte $\lim_{\lambda_2\to\lambda_1} W_{,i}$

3.7.2.1 Grenzwertbetrachtung für beliebige hyperelastische Materialien

Die partielle Ableitung der Formänderungsenergie nach den Invarianten für $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$ ergibt die Beziehung der Gleichung (3.77). Für den Grenzwertübergang $\lambda_2 \to \lambda_1$ gilt somit

$$\begin{aligned}\lim_{\lambda_2\to\lambda_1}\frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_k} &= \lim_{\lambda_2\to\lambda_1}\left\{(-1)^{k+1}\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial W}{\partial \lambda_i}\frac{\lambda_i^{2(3-k)}}{N_i}\right\}\\ &= (-1)^{k+1}\left.\frac{\partial W}{\partial \lambda_3}\right|_{\lambda_2=\lambda_1}\frac{\lambda_3^{2(3-k)}}{2\lambda_3(\lambda_1^2-\lambda_3^2)^2}\\ &+ (-1)^{k+1}\lim_{\lambda_2\to\lambda_1}\left\{\frac{\partial W}{\partial \lambda_1}\frac{\lambda_1^{2(3-k)}}{N_1}+\frac{\partial W}{\partial \lambda_2}\frac{\lambda_2^{2(3-k)}}{N_2}\right\},\end{aligned} \tag{3.91}$$

da N_3 stetig für $\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$ ist. Damit ist nur noch der Ausdruck

$$\boxed{A := \lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} \left\{ \frac{\partial W}{\partial \lambda_1} \frac{\lambda_1^{2(3-k)}}{N_1} + \frac{\partial W}{\partial \lambda_2} \frac{\lambda_2^{2(3-k)}}{N_2} \right\}} \tag{3.92}$$

zu untersuchen. Hierzu ist die Kenntnis der Formänderungsenergie W und deren Ableitung nach den Eigenwerten erforderlich. Somit ist die obige Gleichung der weitestgehende Punkt, der ohne Kenntnis des speziellen Materials erreicht werden kann.

3.7.2.2 Grenzwertbetrachtung für Ogden-Materialien

Im weiteren wird die Wahl eines Materials aus der Klasse der Ogden-Materialien nach (2.74) vorausgesetzt. Der volumetrische Anteil $g(J)$ der Formänderungsenergie kann direkt nach den Invarianten abgeleitet, d.h. es gilt mit $\mathrm{III} = J^2$

$$\frac{\partial g(J)}{\partial \mathrm{III}} = \frac{\partial g}{\partial J} \frac{\partial J}{\partial \mathrm{III}} = \frac{1}{2\,J} \frac{\partial g}{\partial J}. \tag{3.93}$$

Somit wird im weiteren nur noch der Anteil

$$W = \tilde{W}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \sum_{p=1}^{N} \frac{\mu_p}{\alpha_p} \left\{ \lambda_1^{\alpha_p} + \lambda_2^{\alpha_p} + \lambda_3^{\alpha_p} \right\} \tag{3.94}$$

mit der ersten Ableitung nach den Eigenwerten

$$\frac{\partial W}{\partial \lambda_i} = \sum_{p=1}^{N} \mu_p \lambda_i^{\alpha_p - 1} \tag{3.95}$$

betrachtet. Damit gilt mit (3.92)

$$A = \sum_{p=1}^{N} \mu_p \left\{ \lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} \left[\frac{\lambda_1^{\alpha_p + 5 - 2k}}{N_1} + \frac{\lambda_2^{\alpha_p + 5 - 2k}}{N_2} \right] \right\}, \tag{3.96}$$

und für die weitere Untersuchungen ist nur noch der Ausdruck

$$B := \left[\frac{\lambda_1^{\beta}}{N_1} + \frac{\lambda_2^{\beta}}{N_2} \right] = \frac{\lambda_1^{\beta-1} (\lambda_2^2 - \lambda_3^2) - \lambda_2^{\beta-1} (\lambda_1^2 - \lambda_3^2)}{2\,(\lambda_1^2 - \lambda_2^2)\,(\lambda_1^2 - \lambda_3^2)\,(\lambda_2^2 - \lambda_3^2)} \tag{3.97}$$

mit $\beta := \alpha_p + 5 - 2k$ zu betrachten. Mit dem Ansatz $\lambda_2 = \lambda_1 + \epsilon$ folgt nach Einsetzen in den Ausdruck für $B = \hat{B}(\epsilon)$ die Grenzwertbetrachtung für $\epsilon \to 0$, die nach Ausführung und Anwendung der Regel von l' Hospital die Beziehung

$$B(0) := \lim_{\epsilon \to 0} \hat{B}(\epsilon) = \frac{(\beta - 3)\lambda_1^{\beta-1} + (1 - \beta)\lambda_1^{\beta-3}\lambda_3^2}{4\,(\lambda_1^2 - \lambda_3^2)^2} \tag{3.98}$$

liefert.

Mit diesem Ergebnis kann der Grenzwert gemäß (3.90) berechnet werden.

Die partiellen Ableitungen der Formänderungsenergie nach den Eigenwerten ergeben sich zu

$$\lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_k} = \frac{(-1)^{k+1}}{4(\lambda_1^2 - \lambda_3^2)^2} \sum_{p=1}^{N} \mu_p R(\alpha_p, k) \tag{3.99}$$

mit dem Summanden

$$R(\alpha_p, k) := (\delta - 2)\lambda_1^{\delta} - \delta \lambda_1^{\delta-2}\lambda_3^2 + 2\lambda_3^{\delta} \tag{3.100}$$

und der Schreibweise $\delta = \hat{\delta}(\alpha_p, k) := \alpha_p + 4 - 2k$.

3.7.3 Betrachtung der Grenzwerte $\lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} W_{,ij}$

3.7.3.1 Grenzwertbetrachtung für beliebige hyperelastische Materialien

Für die zweiten partiellen Ableitungen der Formänderungsenergie W nach den Eigenwerten gilt für $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$ die Gleichung (3.88), so daß für den Grenzübergang $\lambda_2 \to \lambda_1$ folgt

$$\lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} \frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_s \partial \mathrm{I}_t} = \lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} \left\{ \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} A_{ij} \frac{(-1)^{s+t}}{N_i N_j} \lambda_i^{2(3-s)} \lambda_j^{2(3-t)} \right\}. \tag{3.101}$$

Für die Grenzwertbetrachtung sind somit die Ausdrücke

$$\begin{aligned}
E_1 &:= A_{11} \frac{\lambda_1^{12-2(s+t)}}{N_1^2} + A_{22} \frac{\lambda_2^{12-2(s+t)}}{N_2^2} + A_{12} \frac{\lambda_1^{2(3-s)} \lambda_2^{2(3-t)}}{N_1 N_2} + A_{21} \frac{\lambda_2^{2(3-s)} \lambda_1^{2(3-t)}}{N_2 N_1}, \\
E_2 &:= A_{13} \frac{\lambda_1^{2(3-s)} \lambda_3^{2(3-t)}}{N_1 N_3} + A_{23} \frac{\lambda_2^{2(3-s)} \lambda_3^{2(3-t)}}{N_2 N_3}, \\
E_3 &:= A_{31} \frac{\lambda_3^{2(3-s)} \lambda_1^{2(3-t)}}{N_3 N_1} + A_{32} \frac{\lambda_3^{2(3-s)} \lambda_2^{2(3-t)}}{N_3 N_2}, \\
E_4 &:= A_{33} \frac{\lambda_3^{2(3-s)} \lambda_3^{2(3-t)}}{N_3 N_3}
\end{aligned}$$

zu betrachten, die jeweils einzeln einen endlichen Grenzwert besitzen, so daß die Aufteilung

$$\begin{aligned}
\lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} \frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_s \partial \mathrm{I}_t} &= (-1)^{s+t} \lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} \{E_1 + E_2 + E_3 + E_4\} \\
&= (-1)^{s+t} \left\{ \lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} E_1 + \lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} E_2 + \lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} E_3 + \lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} E_4 \right\}
\end{aligned}$$

nach den Rechenregeln der Grenzwertbildung erlaubt ist.

Entsprechend dem Vorgehen bei der ersten partiellen Ableitung nach den Eigenwerten kann erst durch das Einsetzen des speziell gewählten Materials der Grenzübergang durchgeführt werden.

3.7.3.2 Grenzwertbetrachtung für Ogden-Materialien

Für die Klasse der Ogden-Materialien ergeben sich die Diagonalelemente A_{ii} der Matrix $\underline{A}$ aus (3.87) zu

$$A_{ii} = \sum_{p=1}^{N} \mu_p(\alpha_p - 2)\lambda_i^{\alpha_p-2}, \tag{3.102}$$

während für die Nebendiagonalelemente $i \neq j$ die Beziehung

$$A_{ij} = 2\sum_{p=1}^{N} \mu_p \left\{ \frac{\lambda_j \lambda_i^{\alpha_p-1} - \lambda_i \lambda_j^{\alpha_p-1}}{\lambda_i^2 - \lambda_j^2} \right\} \tag{3.103}$$

folgt.

Zur Berechnung der Grenzwerte ist eine umfangreiche algebraische Berechnung erforderlich, bei der ebenfalls mehrfach die Regel von l' Hospital eingesetzt werden muß. Auf eine genauere Darstellung der Herleitung wird an dieser Stelle verzichtet.

Als Ergebnis der Grenzwertbetrachtung für $\lambda_2 \to \lambda_1$ erhält man die zweiten partiellen Ableitungen der Formänderungsenrgie W nach den Eigenwerten

$$\lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} \frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_s \partial \mathrm{I}_t} = \frac{(-1)^{s+t}}{96(\lambda_1^2 - \lambda_3^2)^5} \sum_{p=1}^{N} \mu_p P(\alpha_p, s, t) \tag{3.104}$$

mit dem Summanden

$$\begin{aligned} P(\alpha_p, s, t) \;&:=\; 24\lambda_3^{\gamma-2} \cdot \left\{ \lambda_1^2 \gamma - \lambda_3^2(\gamma - 12) \right\} \\ &+\; \lambda_1^{\gamma}(\gamma-8)(\gamma-6)(\gamma-4) - 3\lambda_1^{\gamma-2}\lambda_3^2(\gamma-8)(\gamma-6)\gamma \\ &+\; 3\lambda_1^{\gamma-4}\lambda_3^4(\gamma-8)(\gamma-2)\gamma - \lambda_1^{\gamma-6}\lambda_3^6(\gamma-4)(\gamma-2)\gamma, \end{aligned} \tag{3.105}$$

wobei die Schreibweise $\gamma = \hat{\gamma}(\alpha_p, s, t) := \alpha_p + 10 - 2(s+t)$ benutzt wurde.

Den Ablauf der Berechnung faßt die folgende Tafel zusammen.

Tafel 3.10: Ableitung der Formänderungsenergie des Ogden-Materials nach den Invarianten für $\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$

1. Berechnung des Grenzwertes für die ersten Ableitungen:

   (a) Berechne die Faktoren

   $$\delta = \hat{\delta}(\alpha_p, k) := \alpha_p + 4 - 2k.$$

   (b) Berechne den Summanden

   $$R(\alpha_p, k) := (\delta - 2)\lambda_1^\delta - \delta\lambda_1^{\delta-2}\lambda_3^2 + 2\lambda_3^\delta.$$

   (c) Berechne die ersten Ableitungen nach den Invarianten gemäß

   $$\lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_k} = \frac{(-1)^{k+1}}{4(\lambda_1^2 - \lambda_3^2)^2} \sum_{p=1}^{N} \mu_p R(\alpha_p, k).$$

2. Berechnung des Grenzwertes für die zweiten Ableitungen:

   (a) Berechne die Faktoren

   $$\gamma = \hat{\gamma}(\alpha_p, s, t) := \alpha_p + 10 - 2(s + t).$$

   (b) Berechne den Summanden

   $$\begin{aligned} P(\alpha_p, s, t) \;&:=\; 24\lambda_3^{\gamma-2} \cdot \left\{\lambda_1^2\gamma - \lambda_3^2(\gamma - 12)\right\} \\ &+\; \lambda_1^\gamma(\gamma - 8)(\gamma - 6)(\gamma - 4) - 3\lambda_1^{\gamma-2}\lambda_3^2(\gamma - 8)(\gamma - 6)\gamma \\ &+\; 3\lambda_1^{\gamma-4}\lambda_3^4(\gamma - 8)(\gamma - 2)\gamma - \lambda_1^{\gamma-6}\lambda_3^6(\gamma - 4)(\gamma - 2)\gamma. \end{aligned}$$

   (c) Berechne die zweiten Ableitungen nach den Invarianten gemäß

   $$\lim_{\lambda_2 \to \lambda_1} \frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_s \partial \mathrm{I}_t} = \frac{(-1)^{s+t}}{96(\lambda_1^2 - \lambda_3^2)^5} \sum_{p=1}^{N} \mu_p P(\alpha_p, s, t).$$

3.8 Ableitung der Formänderungsenergie in den Eigenwerten nach den Invarianten für den Sonderfall $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$

Der Übergang vom allgemeinen Fall zum Sonderfall $\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$ ist im Abschnitt 3.7 vorgenommen worden. Aufbauend auf diesem Teilergebnis ist der weitere Übergang zum Grenzwert für $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ durchzuführen. Analog dem obigen Vorgehen erhält man die im folgenden dargestellten Ergebnisse für die partiellen Ableitungen der Formänderungsenergie nach den Eigenwerten. Hierbei wird darauf hingewiesen, daß die unten angegebenen Ergebnisse nur für das Ogden-Material gültig sind.

Die Ableitungen der Formänderungsenergiefunktion nach den Invarianten für den Sonderfall identischer Eigenwerte $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ ergeben sich aus dem Grenzübergang $\lambda_3 \to \lambda_1$ der Beziehungen (3.99) und (3.104) nach umfangreicher algebraischer Rechnung und mehrmaliger Anwendung der Regel von l' Hospital. Auf eine ausführliche Darstellung der Herleitung wird verzichtet. Die folgende Tafel faßt die Ergebnisse zusammen.

Tafel 3.11: Ableitung der Formänderungsenergie des Ogden-Materials nach den Invarianten für $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$

1. Berechnung des Grenzwertes für die ersten Ableitungen:

   (a) Berechne die Faktoren $\delta = \hat{\delta}(\alpha_p, k) := \alpha_p + 4 - 2k$.

   (b) Berechne den Summanden $R(\alpha_p, k) := (\delta - 2)\, \delta\, \lambda_1^{\delta-4}$.

   (c) Berechne die ersten Ableitungen nach den Invarianten gemäß

$$\lim_{\lambda_2,\lambda_3 \to \lambda_1} \frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_k} = \frac{(-1)^{k+1}}{16} \sum_{p=1}^{N} \mu_p\; R(\alpha_p, k)$$

2. Berechnung des Grenzwertes für die zweiten Ableitungen:

   (a) Berechne den Summanden

$$P(\alpha_p, s, t) := \left\{ \prod_{i=1}^{5} (\alpha_p + 12 - 2(s + t + i)) \right\} \lambda_1^{\alpha_p - 2(s+t)}.$$

   (b) Berechne die zweiten Ableitungen nach den Invarianten gemäß

$$\lim_{\lambda_2,\lambda_3 \to \lambda_1} \frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_s \partial \mathrm{I}_t} = \frac{(-1)^{s+t}}{7680} \sum_{p=1}^{N} \mu_p\; P(\alpha_p, s, t)$$

Kapitel 4

Finite Element Formulierung

Die Finite-Elemente-Methode stellt ein numerisches Näherungsverfahren zur Lösung von (Anfangs-) und Randwertaufgaben dar. Die Grundlagen dieses Verfahrens sind in vielfältiger Form in der Literatur dargestellt worden, siehe z.B. *Bathe* [9], *Hughes*[52], *Zienkiewicz, Taylor* [111].

Für die numerische Berechnung inkompressibler Materialien sind die grundlegenden Ideen des in dieser Arbeit benutzten Vorgehens bei *Simo, Taylor, Pister* [91] zuerst vorgestellt worden. Für die Anwendung auf hyperelastische Materialien siehe auch *Simo, Taylor* [88], *Wriggers* [108], *Müller-Hoeppe* [64].

Aufgrund der umfangreichen Literatur zur Finiten-Elemente-Methode und deren weiten Verbreitung werden an dieser Stelle nur die Grundzüge des Vorgehens aufgezeigt und die Notation eingeführt.

4.1 Die Verschiebungsmethode

Im Rahmen dieser Arbeit wurden isoparametrische Scheibenelemente als Dreiecke bzw. Vierecke mit einer variablen Knotenanzahl von drei bis sechs bzw. vier bis neun Knoten sowie ein 8-Knoten isoparametrisches Volumenelement sowohl für eine Formulierung bezüglich der Referenzkonfiguration als auch bezüglich der Momentankonfiguration kodiert. Bei dieser Formulierung sind die Verschiebungen $\underline{V}$ der Knoten der finiten Elemente als Unbekannte eingeführt, so daß sich für die Approximation $\mathbf{u}_h$ des Verschiebungszustandes $\mathbf{u}$ für die Darstellung auf Elementebene die Beziehung

$$\underline{u}_{(i)} = \underline{N}_{(i)}\, \underline{v}_{(i)} \tag{4.1}$$

ergibt. Hierbei ist $\underline{N}_{(i)}$ die Matrix der Ansatzfunktionen und $\underline{v}_{(i)}$ der Vektor der Knotenverschiebungen für das i-te Element.

Für die isoparametrische Beschreibung der finiten Elemente gilt für die Komponenten u_h^i des diskreten Verschiebungszustandes

$$u_h^i = \hat{u}_h^i(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sum_{k=1}^{nkel} \hat{N}^k(\xi_1, \xi_2, \xi_3)\, \hat{v}_k^i \tag{4.2}$$

$$= \tilde{u}_h^i(X^1, X^2, X^3) = \sum_{k=1}^{nkel} \tilde{N}^k(X^1, X^2, X^3)\, v_k^i. \tag{4.3}$$

Dabei sind ξ_1, ξ_2, ξ_3 die lokalen Koordinaten des isoparametrischen Konzeptes und X^1, X^2, X^3 die kartesischen Koordinaten der Punkte der diskreten Referenzkonfiguration. Weiterhin stellen X_k^A die A-te Koordinate und v_k^i die i-te Verschiebungskomponente des k-ten Knotens dar.

Die Besonderheit des isoparametrischen Konzeptes besteht darin, daß die Geometrie und der Verschiebungszustand im Element in gleicher Form über die Knotenwerte approximiert werden, d.h. es gilt für die Geometrie des Elementes

$$\boxed{X_h^A = \hat{X}_h^A(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sum_{k=1}^{nkel} \hat{N}^k(\xi_1, \xi_2, \xi_3)\, \hat{X}_k^A.} \tag{4.4}$$

Das isoparametrische Konzept ist in der Abbildung 4.1 verdeutlicht.

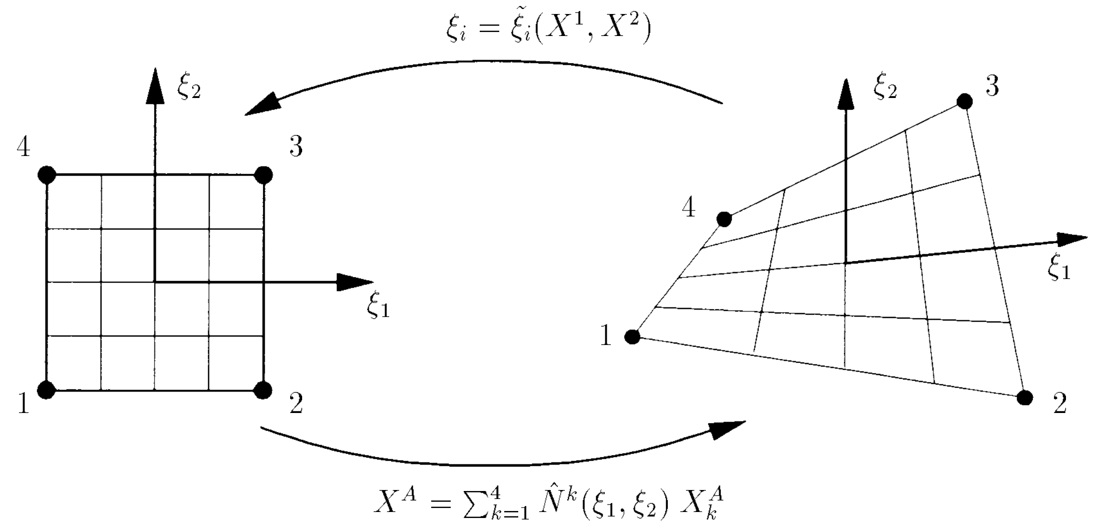

Abbildung 4.1: Darstellung des isoparametrischen Konzepts

Die Beziehung (4.1) gelte auch für die virtuelle Verschiebung $\delta\mathbf{u}$, die sich aus der Testfunktion $\boldsymbol{\eta}$ zu $\epsilon\, \boldsymbol{\eta} = \delta\mathbf{u}$ ergibt. In der Matrizenschreibweise gilt dann mit den virtuellen Knotenverschiebungen $\delta\underline{v}_{(i)}$

$$\delta\underline{u}_{(i)} = \underline{N}_{(i)}\, \delta\underline{v}_{(i)}. \tag{4.5}$$

Mit der Einführung der B-Matrizen in der Form

$$(\mathrm{grad}^s\, \underline{u})_{(i)} = \underline{B}_{(i)}\, \underline{v}_{(i)} \qquad \text{bzw.} \qquad (\mathrm{grad}^s\, \delta\underline{u})_{(i)} = \underline{B}_{(i)}\, \delta\underline{v}_{(i)} \tag{4.6}$$

und der geeigneten Wahl der Matrix $\underline{R}_{(i)}$ der Ansatzfunktionen ergibt sich für den Anteil des i-ten Elementes an der schwachen Form des Gleichgewichts z.B. in der Momentankonfiguration aus (2.81) die Beziehung

$$g_{h(i)} = \delta\underline{v}_{(i)}^T \left\{ \int\limits_{\mathbf{B}_{t\,(i)}} \underline{R}_{(i)}^T\, \underline{T}_{(i)}\, dv - \int\limits_{\mathbf{B}_{t\,(i)}} \underline{N}_{(i)}^T\, \rho\, \overline{\underline{k}}_{(i)}\, dv - \int\limits_{\partial\mathbf{B}_{t\sigma\,(i)}} \underline{N}_{(i)}^T\, \overline{\underline{t}}_{(i)}\, da. \right\} \tag{4.7}$$

Hieraus folgt durch Assemblierung aller Elementanteile die Matrizendarstellung

$$g_h = \delta\underline{V}^T\, \underline{g} = 0 \qquad \text{und damit} \qquad \underline{g} = \underline{0} \tag{4.8}$$

mit dem Fehlkraftvektor $\underline{g}$ der Momentankonfiguration. Analog kann somit die Bedingung

$$G_h = \delta\underline{V}^T\, \underline{\mathrm{G}} = 0 \qquad \text{und damit} \qquad \underline{\mathrm{G}} = \underline{0} \tag{4.9}$$

für den Fehlkraftvektor $\underline{\mathrm{G}}$ der Referenzkonfiguration hergeleitet werden. Diese Beziehungen werden für die Behandlung der diskreten Sensitivitätsanalyse in Abschnitt 5.3 benötigt.

Weiterhin ergibt sich für die Linearisierung der schwachen Form des Gleichgewichts aus (2.93) die matrizielle Darstellung

$$\begin{aligned} A_{(i)} \;&:=\; \delta\underline{v}_{(i)}^T \left\{ \int\limits_{\mathbf{B}_{t\,(i)}} \underline{B}_{(i)}^T\, \underline{\mathfrak{C}}_{(i)}\, \underline{B}_{(i)}\, dv + \int\limits_{\mathbf{B}_{t\,(i)}} \underline{R}_{(i)}^T\, \underline{T}_{(i)}\, \underline{R}_{(i)}\, dv \right\} \underline{v}_{(i)} \\ &+\; g_{(i)}(\overline{\Phi}). \end{aligned}$$

Durch Assemblierung aller Elementanteile folgt dann die Matrizendarstellung der Linearisierung der schwachen Form des Gleichgewichts.

4.2 Die Gemischte Methode

Im Gegensatz zur Verschiebungsmethode, bei der die Spannungen über die Verzerrungen und das Werkstoffgesetz und damit durch die Ableitung der Ansätze für die Verschiebungen ermittelt werden, werden bei der gemischten Methode für die Spannungen bzw. andere kontinuumsmechanische Größen eigene Ansätze eingeführt. Für die Betrachtung quasi-inkompressibler Materialien führt dies zur Einführung von unabhängigen Ansätzen für den Druck p in der Form

$$\underline{p}_{(i)} = \underline{M}_{(i)}\, \underline{q}_{(i)} \qquad \text{bzw.} \qquad \delta\underline{p}_{(i)} = \underline{M}_{(i)}\, \delta\underline{q}_{(i)}, \tag{4.10}$$

sowie für die Jacobi-Determinante des Deformationsgradienten

$$\underline{\theta}_{(i)} = \underline{L}_{(i)}\, \underline{\phi}_{(i)} \qquad \text{bzw.} \qquad \delta\underline{\theta}_{(i)} = \underline{L}_{(i)}\, \delta\underline{\phi}_{(i)} \tag{4.11}$$

entsprechend der Darstellung in Abschnitt 2.5.

Wesentlich für das Vorgehen ist, daß die zusätzlich eingeführten Knotenvariablen durch Manipulationen auf Elementebene eliminiert werden können. Dieser Vorgang ist in *Simo, Taylor, Pister* [91] zuerst vorgestellt worden, siehe auch *Müller-Hoeppe* [64].

Entsprechend dem obigen Vorgehen ergibt sich für den Elementanteil die Darstellung

$$
\begin{aligned}
A_{(i)} \;&:=\; \delta \underline{v}_{(i)}^T \left\{ \int\limits_{\mathbf{B}_{t\,(i)}} \underline{B}_{(i)}^T \mathfrak{C}_{(i)} \underline{B}_{(i)} \; dv \right\} \underline{v}_{(i)} \\
&+\; \delta \underline{v}_{(i)}^T \left\{ \int\limits_{\mathbf{B}_{t\,(i)}} \underline{G}_{(i)}^T \left(\operatorname{dev} \underline{T}_{(i)} + p_{(i)} \underline{I} \right) \underline{G}_{(i)} \; dv \right\} \underline{v}_{(i)} \\
&+\; \delta \underline{v}_{(i)}^T \left\{ \frac{p'_{(i)}}{V_{(i)}} \int\limits_{\mathbf{B}_{t\,(i)}} \underline{H}_{(i)}^T \; dv \int\limits_{\mathbf{B}_{t\,(i)}} \underline{H}_{(i)} \; dv \right\} \underline{v}_{(i)} \\
&+\; g_{(i)}(\overline{\Phi}).
\end{aligned}
$$

Hierbei ist $\underline{H}_{(i)}^T$ eine Matrix, welche die Ableitungen der Ansatzfunktionen enthält und den Divergenzoperator darstellt. Somit kann der Elementanteil wieder gemäß der reinen Verschiebungsmethode zum Gesamtanteil der Linearisierung der Variationsformulierung zusammengefügt werden.

Kapitel 5

Sensitivitätsanalyse

Die Grundlage der Strukturoptimierung ist die *Sensitivitätsanalyse*, d.h. die Beschreibung der Veränderung einer Problemfunktion φ im System, z.B. der Zielfunktion f oder einer Nebenbedingung g_j, infolge der Modifikation einer gewählten Designvariablen s. Die in der Sensitivitätsanalyse berechneten vollständigen Ableitungen nach den Designvariablen sowie die Werte der Problemfunktionen sind Eingangsgrößen für die Formulierung der Problemstellung der Strukturoptimierung als mathematisches Optimierungsproblem und für die damit verbundenden numerischen Algorithmen, siehe Kapitel 6.

Die komplexen Aufgaben z.B. der Strukturmechanik werden überwiegend durch die Verwendung numerischer Näherungsverfahren wie z.B. der Finite-Elemente-Methode oder Rand-Elemente-Methode behandelt. Somit ist der auf die Strukturanalyse aufbauenden Strukturoptimierung das numerische Näherungsverfahren vorgegeben, für das aus der Sensitivitätsanalyse die zugehörigen, zum numerischen Näherungsverfahren konsistenten, algebraischen Gleichungen bereitgestellt werden müssen. Die Bereitstellung der algebraischen Gleichungen der Sensitivitätsanalyse kann mittels unterschiedlicher Vorgehensweisen vorgenommen werden.

Tafel 5.1: Sensitivitätsanalyse eines strukturmechanischen Problems

1. **Variationelle Sensitivitätsanalyse**
   (a) Berechnung der Gradienten des kontinuierlichen Problems nach den Designvariablen.
   (b) Diskretisierung der kontinuierlichen Sensitivitätsaussagen in Raum und Zeit entsprechend dem zugrunde liegenden Näherungsverfahren.
2. **Diskrete Sensitivitätsanalyse**
   (a) Diskretisierung des strukturmechanischen Problems in Raum und Zeit entsprechend dem numerischen Näherungsverfahren.
   (b) Berechnung der Gradienten der erhaltenen diskreten, algebraischen Beziehungen nach den Designvariablen.

Für die variationelle Sensitivitätsanalyse wurde von *Céa* (siehe [23], [24], [25]) und *Zolesio* (siehe [114], [113]) das aus der Kontiuumsmechanik bekannte Konzept der Materialableitung für die Behandlung der Strukturoptimierung eingeführt, siehe auch *Haug, Choi, Komkov* [51].

Eine Erweiterung der variationellen Methoden auf geometrisch nichtlineare Probleme in der Total und Updated Lagrange Formulierung sind bei *Choi, Santos, Yao* [26], [81], [109] und *Arora, Cardoso* [3], [2] zu finden. Außerhalb eines bestehenden Programmpaketes (ADINA) wurde die Sensitivitätsanalyse mittels Postprozessing-Daten durchgeführt.

Ein variationeller Zugang zur Sensitivitätsanalyse, jedoch ohne numerische Verifikation, ist in *Dems, Mróz* [30], [31], [32] zu finden.

Für die numerische Realisation wird vorwiegend die diskrete Sensitivitätsanalyse, d.h. die Ableitung der diskreten, algebraischen Beziehungen nach den Designvariablen, aufbereitet und in die Sensitivitätsmodule der Optimierungsprogrammsystems implementiert. Diese Vorgehen ist z.B. in *Neittaanmäki et al.* [65, 4, 49] beschrieben. Für die vollständige Implementation der analytischen Gradienten dieser Vorgehensweise in ein bestehendes Programmsystem siehe *Bletzinger* [19], *Kimmich* [54] (CARAT) sowie *Becker* [10], *Becker, Barthold* [11], *Stein, Becker, Barthold* [96] für die Verwendung im Forschungsprogrammpaket INA–OPT.

Die diskrete Sensitivitätsanalyse mit der semianalytischer Herleitung der Sensitivitäten wird von *Adelmann, Haftka* [1], *Haftka, Grandhi* [47] und *Eschenauer* [35], *Eschenauer, Post, Bremicker* [37] empfohlen.

Für eine übersichtliche Zusammenfassung dieser Methoden siehe z.B. *Haslinger, Neittaanmäki* [49], die auch auf die Äquivalenz der beiden Vorgehensweisen hinweisen.

In dieser Arbeit werden zunächst im Abschnitt 5.1 die kontinuumsmechanischen Grundlagen aufgezeigt, die für die variationelle Formulierung der Sensitivitäten kontinuumsmechanischer Größen benötigt werden. Dabei zeigt sich, daß das Konzept der Materialableitung und insbesondere die oft angeführte dynamische Interpretation der Formänderung (siehe z.B. *Haug, Choi, Komkov* [51]) aus kontinuumsmechanischer Sicht nicht ohne Einwand akzeptiert werden kann.

In Kapitel 5.2 wird die variationelle Sensitivitätsanalyse am Beispiel des materiellen Deformationsgradienten und der Spannungen, d.h. der zentralen kontinuumsmechanischen Größen der Analyse isotroper, hyperelastischer Materielien, durchgeführt. Für die Sensitivität der Spannungen ergeben sich sowohl in der materiellen als auch der räumlichen Formulierung grundlegende, neue Einsichten, die für die vollständige analytische Druchführung der variationellen Sensitivitätsanalyse von großer Bedeutung sind. Diese Beziehungen sind in vollständig analytischer Form in das Finite-Element-Programmpaket INA–OPT implementiert worden.

Darüberhinaus wird im Abschnitt 5.3 die Sensitivität der diskreten Formulierung angegeben, die mit der vorhergehenden Formulierung übereinstimmt, und in vollständiger analytischer Form in das Finite-Elemente-Programmpaket INA–OPT implementiert wurde, siehe hierzu auch *Becker* [10].

5.1 Die kontinuumsmechanischen Grundlagen der Strukturoptimierung

In diesem Abschnitt wird die Abhängigkeit der kontinuumsmechanischen Größen von der Ausgangsgeometrie und somit von den Designvariablen s_i $(i = 1, 2, \ldots, n)$ aufgezeigt. Die Designvariablen stellen dabei skalare Variablen dar, die zur Spaltenmatrix $\underline{s} \in I\!R^n$ zusammengefaßt werden. Zur Vereinfachung der Notation wird eine beliebige Designvariable ausgewählt und ohne Index, d.h. als $s \in I\!R$, geschrieben. Der ursprüngliche Startentwurf der Geometrie korrespondiert dabei mit dem Startwert $s_\circ = 0$.

Um die Abhängigkeit einer kontinuumsmechanischen Größe von der Designvariablen s anzuzeigen, wird die Größe mit einem Index s versehen. Für den Startentwurf der Geometrie mit der Designvariablen $s_\circ$ entfällt dieser Index.

5.1.1 Die Abhängigkeit des materiellen Körpers und der Konfigurationen vom Design

Bei der Strukturoptimierung werden strenggenommen unterschiedliche materielle Körper betrachtet und in ihren Eigenschaften (z.B. Gewicht) und dem Deformationsverhalten beurteilt. Damit ist das in Kapitel 2 eingeführte Konzept der Beschreibung der Lage und der Bewegung <u>eines</u> materiellen Körpers im Raum nicht mehr ausreichend.

Um die Eigenschaften zweier unterschiedlicher materieller Körper vergleichen zu können, ist es zunächst erforderlich, den Übergang eines materiellen Körpers in einen anderen bei Veränderung der Designvariable s zu beschreiben. Dabei sei der Übergang bezüglich der Designvariablen hinreichend oft stetig differenzierbar, d.h. die materiellen Körper gehen kontinuierlich ineinander über.

Die für diese Arbeit wesentliche Sichtweise der Formoptimierung kann folgendermaßen beschrieben werden.

Tafel 5.2: Eine kontinuumsmechanisch geprägte Sichtweise der Formoptimierung

1. In der Strukturoptimierung werden die Eigenschaften (Zielfunktion, Nebenbedingungen) <u>unterschiedlicher materieller Körper</u> betrachtet und verglichen.

2. Der Vergleich unterschiedlicher materieller Körper und deren Eigenschaften ist durch die Beschreibung der Transformation der verschiedenen materiellen Körper ineinander möglich.

3. Die Transformation wird dabei durch Einführung von Designvariablen parametrisch beschrieben und sei bzgl. der Veränderung der Designvariablen hinreichend oft stetig differenzierbar.

Ein Vergleich dieser Sichtweise mit dem bereits genannten Konzept der Materialableitung findet sich in Abschnitt 5.1.2.

Zur Beschreibung eines materiellen Körpers in Abhängigkeit der Designvariable s ist der Bezug auf die in Abschnitt 2.1 eingeführten konvektiven Koordinaten $\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3$ nützlich, da der Parameterraum $T_\Theta = [0,1]^3 \subset I\!R^3$ für jeden beliebigen materiellen Körper eingeführt wurde und somit von der Designvariablen s unabhängig ist.

Mit diesen Bemerkungen soll die Abbildung ω nach (2.4) um die Abhängigkeit von der Designvariablen s erweitert werden, wofür wieder die Bezeichnung ω gewählt wird. Mit dem Parameterraum $T_s := I\!R$ der Designvariablen gilt für die Darstellung eines materiellen Körpers $\mathcal{B}$ in Abhängigkeit der Designvariablen die Abbildung

$$\boxed{\omega : \begin{cases} T_\Theta \times T_s & \rightarrow & B \\ (\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s) & \mapsto & \mathcal{M} = \omega(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s). \end{cases}} \tag{5.1}$$

Die Abbildung ω sei hinreichend oft bezüglich der konvektiven Koordinaten und der Designvariable stetig differenzierbar und für festgehaltene Designvariable s bijektiv. Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 5.1 dargelegt.

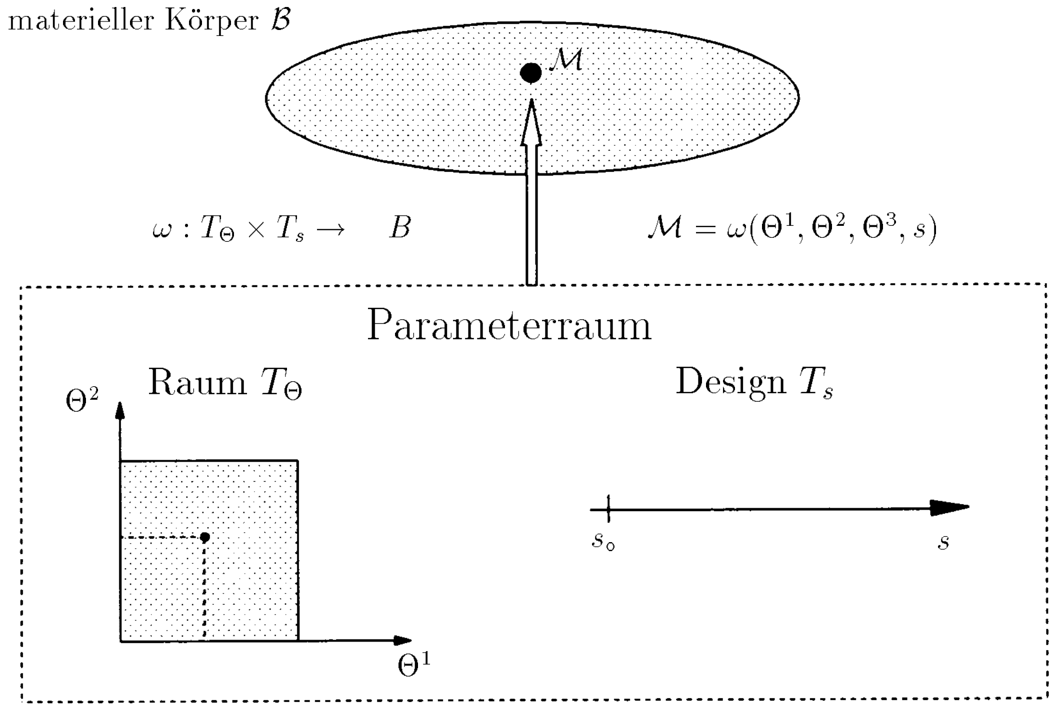

Abbildung 5.1: Parametrische Beschreibung des materiellen Körpers durch die konvektiven Koordinaten und die Designvariable

Mit der in Abschnitt 2.1 definierten Abbildung χ der materiellen Punkte $\mathcal{M}$ auf die Raumpunkte kann durch Abbildungskomposition die in Gleichung (2.5) definierte Abbildung ψ um die Abhängigkeit von der Designvariablen s erweitert werden, d.h. es gilt mit $\psi = \xi \circ \omega$

$$\boxed{\psi : \begin{cases} T_\Theta \times T_t \times T_s & \to & I\!R^3 \\ (\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t, s) & \mapsto & \mathbf{x} = \psi(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t, s) \end{cases}} \tag{5.2}$$

Für festgehaltene Zeit und festgehaltene Designvariable wird auch die Bezeichnung ψ_t^s benutzt. Damit können die kartesischen Koordinaten X^A bzw. x^i über die Abbildung ψ durch die konvektiven Koordinaten, die Zeit und die Designvariable beschrieben werden, d.h. es gilt

$$X^A = \hat{X}^A(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s) \qquad \text{bzw.} \qquad x^i = \hat{x}^i(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t, s). \tag{5.3}$$

Die Darstellung der Lage des materiellen Körpers im Raum über die Parametrisierung des materiellen Körpers, der Zeit und der Designvariablen ist in Abbildung 5.2 angegeben.

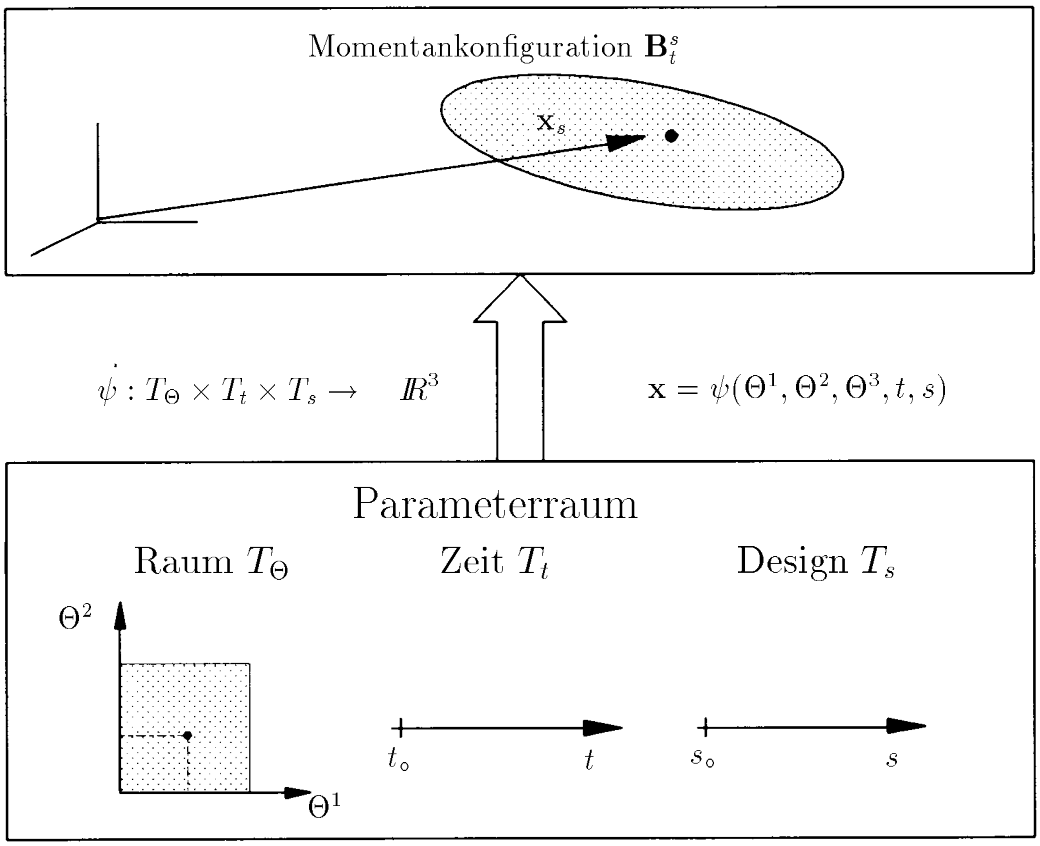

Abbildung 5.2: Beschreibung der Lage des materiellen Körpers durch die Parametrisierung des materiellen Körpers, der Zeit und der Designvariablen

Zum Referenzzeitpunkt $t_\circ$ und für den Startwert $s_\circ$ der Designvariablen kann die zugehörende Referenzkonfiguration in Abhängigkeit der konvektiven Koordinaten in der Form

$$\mathbf{B}_\circ = \psi(T_\Theta, t_\circ, s_\circ) \qquad \text{mit} \qquad \mathbf{X} = \psi(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t_\circ, s_\circ) \tag{5.4}$$

dargestellt werden. Für eine Veränderung der Designvariablen $s > s_\circ$ ergibt sich ein modifizierter materieller Körper mit zugehöriger Referenzkonfiguration, d.h. es gilt

$$\mathbf{B}_\circ^s = \psi(T_\Theta, t_\circ, s) \qquad \text{mit} \qquad \mathbf{X}_s := \psi(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t_\circ, s). \tag{5.5}$$

Analog gilt dies für die zugehörigen Momentankonfigurationen $\mathbf{B}_t$ und $\mathbf{B}_t^s$. Damit kann die Deformation eines materiellen Körpers für eine feste Designvariable s von der Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ^s$ in die Momentankonfiguration $\mathbf{B}_t^s$ durch die Abbildung

$$\boxed{\Phi_{t,t_\circ}^s : \left\{ \begin{array}{ccl} \mathbf{B}_\circ^s & \rightarrow & \mathbf{B}_t^s \\ \mathbf{X} & \mapsto & \mathbf{x} = \Phi_{t,t_\circ}^s(\mathbf{X}) := \left[\psi_t^s \circ \{\psi_\circ^s\}^{-1}\right](\mathbf{X}) \end{array} \right.} \tag{5.6}$$

dargestellt werden. Dabei ist die Abbildung $\Phi_{t,t_\circ}^s$ stetig differenzierbar und für jeden beliebigen und dann festgewählten Zeitpunkt t sowie für jede beliebige und dann festgehaltene Designvariable bijektiv.

Für die weitere Untersuchung ist der Übergang zwischen den Referenz- und Momentankonfigurationen unterschiedlicher materieller Körper zu beschreiben. Die Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ$ für die Designvariable $s_\circ$ wird durch

$$\boxed{\Psi_\circ : \left\{ \begin{array}{ccl} \mathbf{B}_\circ \times I\!R & \rightarrow & \mathbf{B}_\circ^s \\ (\mathbf{X}, s) & \mapsto & \mathbf{X}_s = \Psi_\circ(\mathbf{X}, s) := \left[\psi_\circ^s \circ {\psi_\circ}^{-1}\right](\mathbf{x}, s) \end{array} \right.} \tag{5.7}$$

auf die Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ^s$ zur Designvariable s abgebildet.

Für die zugehörigen Momentankonfigurationen $\mathbf{B}_t$ und $\mathbf{B}_t^s$ wird die Abbildung

$$\boxed{\Psi_t : \left\{ \begin{array}{ccl} \mathbf{B}_t \times I\!R & \rightarrow & \mathbf{B}_t^s \\ (\mathbf{x}, s) & \mapsto & \mathbf{x}_s = \Psi_t(\mathbf{x}, s) := \left[\Phi_{t,t_\circ}^s \circ \Psi_\circ \circ \Phi_{t,t_\circ}^{-1}\right](\mathbf{x}, s) \end{array} \right.} \tag{5.8}$$

eingeführt. Damit wird für jeden Zeitpunkt t die Veränderung der Konfiguration $\mathbf{B}_t$ des Ausgangsdesigns (mit $s = s_\circ$) zu der Konfiguration $\mathbf{B}_t^s$ des modifizierten Designs (mit $s > s_\circ$) beschrieben. Diese Situation ist in der Abbildung 5.3 dargestellt.

Der Erhaltungssatz der Masse (siehe Abschnitt 2.2.1) ist für die Abbildungen $\Psi_\circ$ und Ψ_t nicht erfüllt. Dies ist auch verständlich, da es sich dabei um den Übergang der Konfigurationen zweier unterschiedlicher Körper handelt und z.B. für die Optimierungsaufgabe „Gewichtsminimierung“ die Abnahme der Gesamtmasse des Körpers erwünscht ist.

Die Veränderung der Konfiguration $\mathbf{B}_\circ$ des materiellen Körpers $\mathcal{B}$ in die Konfiguration $\mathbf{B}_\circ^s$ des materiellen Körpers $\mathcal{B}^s$ kann für kleine Änderungen gegenüber dem Referenzwert $s_\circ$ mit Hilfe der Abbildung vom $\Psi_\circ$ in erster Näherung als

$$\mathbf{X}_s = \Psi_\circ(\mathbf{X}, s) = \Psi_\circ(\mathbf{X}, s) + (s - s_\circ)\, \frac{d\Psi_\circ}{ds}(\mathbf{X}, s_\circ) = \mathbf{X} + (s - s_\circ)\, \mathbf{V}(\mathbf{X}) \tag{5.9}$$

geschrieben werden. Dabei stellt $\mathbf{V}$ die sogenannte *Formänderungsgeschwindigkeit* dar, siehe *Haug, Choi, Konkov* [51].

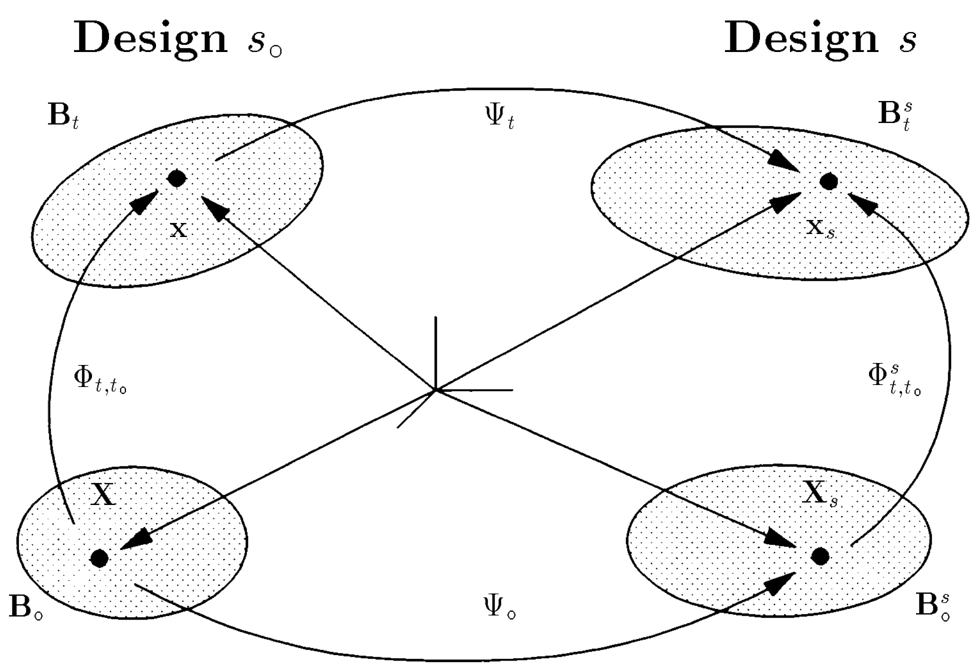

Abbildung 5.3: Beziehung zwischen den Referenz- und Momentankonfigurationen für unterschiedliche Designvariablen

Wird weiterhin die Konfiguration $\mathbf{B}_\circ$ zur Designvariablen $s_\circ$ als Referenzkonfiguration bzgl. einer Gestaltsänderung angesehen, gilt

$$\mathbf{V} = \frac{d\Psi_\circ}{ds}(\mathbf{X}, s_\circ) = \frac{\partial \Psi_\circ}{\partial s}(\mathbf{X}, s_\circ), \tag{5.10}$$

da in diesem Fall $\mathbf{X} \in \mathbf{B}_\circ$ unabhängig von s ist. Die obige Darstellung wird in Abschnitt 5.1.2 erläutert, in dieser Arbeit jedoch nicht weiter verwendet.

Demgegenüber gilt für die Veränderung der Momentankonfiguration $\mathbf{B}_t^s$ zum Zeitpunkt t bei Änderung der Designvariablen s die Beziehung

$$\boxed{\mathbf{q}_t = \hat{\mathbf{q}}_t(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s) := \frac{d\psi_t}{ds} = \frac{\partial \psi_t}{\partial s},} \tag{5.11}$$

da die konvektiven Koordinaten definitionsgemäß unabhängig vom Design sind. Für die Referenzkonfiguration ist die Auswertung für $t = t_\circ$ einfach, da es sich in diesem Fall ausschließlich um eine geometrische Beziehung handelt. Für die Momentankonfiguration ist jedoch die implizite Abhängigkeit des Verschiebungszustandes von der Designvariablen zu berücksichtigen. Diese Zusammenhänge werden im Abschnitt 5.2 näher erläutert.

Abschließend werden die zentralen Abbildungen im Überblick dargestellt.

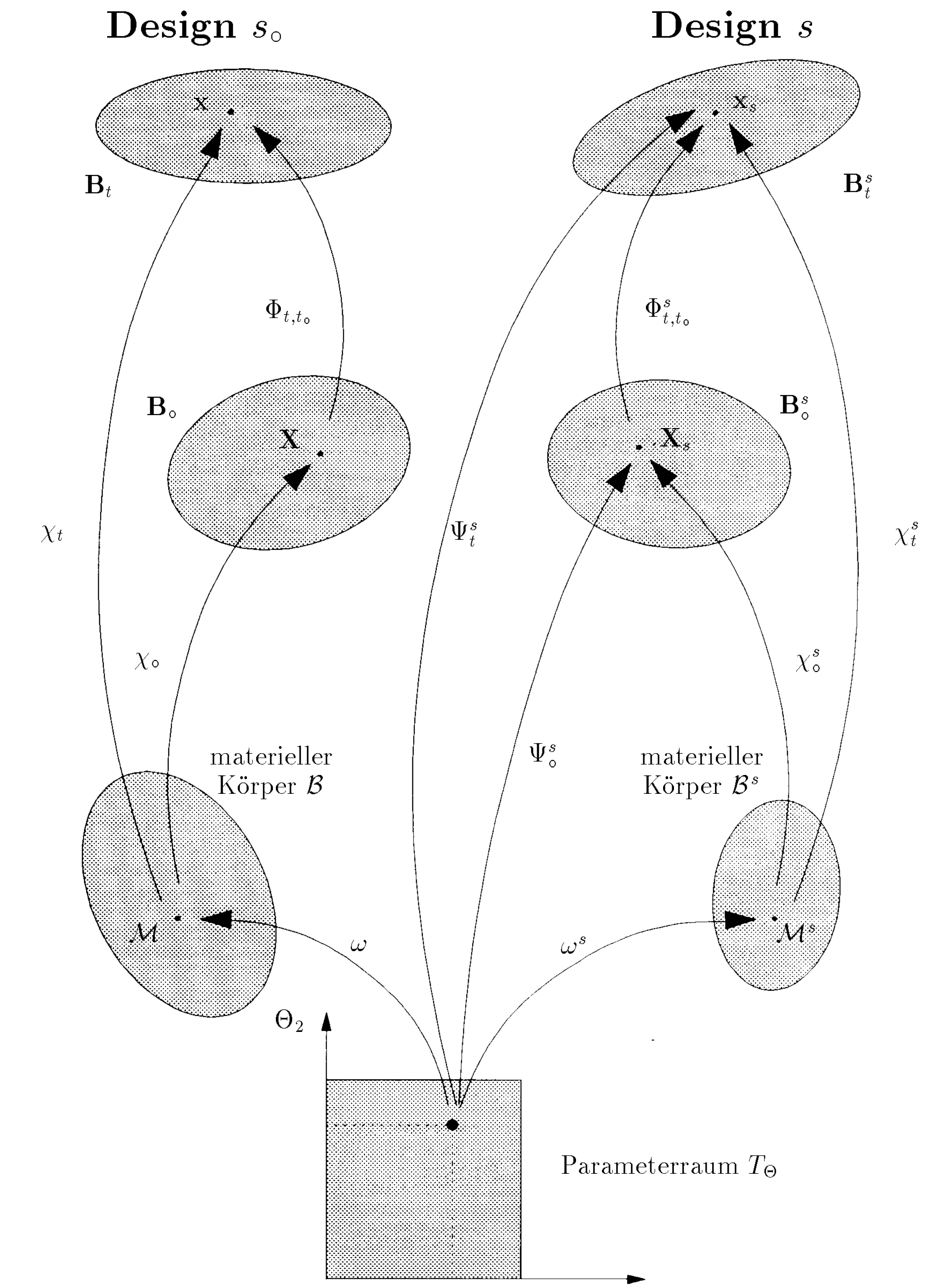

Abbildung 5.4: Zusammenstellung der eingeführten Konfigurationen und Abbildungen

5.1.2 Ein Vergleich mit dem Konzept der Materialableitung

In diesem Abschnitt wird die eigene Darstellung der kontinuumsmechanischen Grundlagen der Formoptimierung mit dem von *Céa* und *Zolesio* eingeführten Konzept der Materialableitung verglichen. Als Grundlage dient dabei die Darstellung in *Haug, Choi, Komkov* [51, S. 190ff].

Hierin wird die Formänderung <u>eines</u> Körpers als „dynamic process of deforming a continuum, with τ (Anm.: in dieser Arbeit s) playing the role of time“ interpretiert.

Diese Interpretation der Vorgänge bei der Strukturoptimierung als eine zwangsläufig spannungs- und verzerrungsfreie „Deformation“ eines Körpers ist aus meiner kontinuumsmechanischen Sicht nicht akzeptabel, da zusätzlich bei der „Deformation“ der Erhaltungssatz der Masse nicht erfüllt wird. Auf diese Tatsache wird in der obigen Interpretation nicht eingegangen.

Demgegenüber ist durch die Darstellung in Abschnitt 5.1.1 eine eindeutige Trennung der physikalischen Vorgänge

1. Änderung des materiellen Körpers $\mathcal{B}$ mit der Änderung der Designvariablen s noch vor der Einbettung in den Euklidischen Vektorraum sowie

2. der Deformation eines materiellen Körpers $\mathcal{B}$ von der Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ$ in die Momentankonfiguration $\mathbf{B}_t$ mit der Zeit t

vorgenommen worden.

Weiterhin wird in *Haug, Choi, Komkov* [51] bei der Herleitung der Formänderungsgeschwindigkeit implizit eine Referenzkonfiguration bzgl. der Designvariablen durch die Adaption der kontinuumsmechanischen Zusammenhänge eingeführt. Dies ist aus theoretischer und numerischer Sicht nicht erforderlich, da bei Verwendung konvektiver Koordinaten, d.h. der Darstellung des materiellen Körpers als differenzierbare Mannigfaltigkeit, die Veränderung der kartesischen Koordinaten aus der Abbildung

$$X^A = \hat{X}^A(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s)$$

nach (5.2) beschrieben werden kann, d.h. nach Gleichung (5.11) gilt

$$\mathbf{q}_t = \hat{\mathbf{q}}_t(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s) := \frac{d\psi_t}{ds} = \frac{\partial \psi_t}{\partial s}.$$

Entsprechend zur Beschreibung kontinuumsmechanischer Beziehungen in den Größen der Momentankonfiguration (Fluidmechanik, große Deformationen) kann auch in der Formoptimierung der Bezug ausschließlich auf den aktuellen Körper und dessen Konfiguration erfolgen.

Der Vorteil der Darstellung nach Gleichung (5.2) besteht in der natürlichen Umsetzung in ein numerisches Konzept mit Hilfe der CAGD–Beschreibung der Geometrie, das in Kapitel 6 vorgestellt wird.

5.1.3 Festlegung funktionaler Abhängigkeiten für die Sensitivitätsanalyse hyperelastischer Materialien

Im obigen Abschnitt ist die Abhängigkeit der Referenz- und Momentankonfiguration von der Designvariablen s dargestellt worden. In der Strukturanalyse wird üblicherweise die Deformation über das Verschiebungsfeld $\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X}$ mit der funktionalen Abhängigkeit (2.6)

$$\mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, t, s) = \tilde{\mathbf{u}}(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t, s),$$

dargestellt. Für die Berechnung der Sensitivität einer exemplarischen kontinuumsmechanischen Größe φ, die skalar-, vektor- oder tensorwertig sein kann, wird die funktionale Abhängigkeit

$$\boxed{\varphi = \hat{\varphi}(s, \hat{\mathbf{u}}(s))} \tag{5.12}$$

vorausgesetzt. Damit ist für diese Problemfunktion, z.B. die Zielfunktion f oder eine Nebenbedingung g_j, neben der direkten Abhängigkeit auch die implizite Abhängigkeit von der Designvariablen über das Verschiebungsfeld $\mathbf{u}$ im Gleichgewichtszustand gegeben.

Diese hier aufgezeigte Abhängigkeit beinhaltet nur die Abhängigkeit vom Verschiebungsfeld im Lösungszustand. Dies ist für den Rahmen der hyperelastischen Materialien ausreichend. Für weitergehende Betrachtungen, z.B. geschichtsabhängiger Materialien in Form der Elastoplastizität, ist die funktionale Abhängigkeit der Problemfunktion φ auf die Geschichte der Deformation zu erweitern.

5.1.4 Bemerkungen zur Berechnung partieller Ableitungen kontinuumsmechanischer Größen nach der Designvariablen

Für die Sensitivitätsanalyse sind die partiellen Ableitungen kontinuumsmechanischer Größen nach der Designvariablen s bereitzustellen, siehe auch Abschnitt 5.2.1. Für die in der grundlegenden Beziehung (5.2) für die Abbildung eines materiellen Körpers auf die Raumpunkte eingeführte Abhängigkeit von den konvektiven Koordinaten $\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3$, der Zeit t und der Designvariablen s gelten die folgenden Zusammenhänge.

1. Sowohl die physikalische Größe Zeit t als auch die physikalische Größe Designvariable s sind skalare Parameter, die voneinander unabhängig sind. Die Abbildung (5.2) sowie jede hierauf aufbauende Aussage besitzt bzgl. t und s die gleiche mathematische Struktur.

2. Die Gleichungen, die sich auf die zeitliche Veränderung der Konfiguration eines Körpers beziehen (Zeitableitungen), können unmittelbar aufgrund der identischen mathematischen Struktur ohne besonderen Beweis auf die entsprechenden Beziehungen bei Änderung der Designvariablen übertragen werden.

3. Zur Vereinfachung der Schreibarbeit wird für die partielle Ableitung einer kontinuumsmechanischen Größe nach der Designvariablen s die Notation

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial s}\,\{\bullet\} =: \overset{\Delta}{\{\bullet\}}} \tag{5.13}$$

eingeführt.

4. Als Beispiel für die materielle Zeitableitung sei die Ableitung des Cauchy-Spannungstensors nach (2.46), d.h.

$$\dot{\mathbf{T}} = \mathbb{C} : \mathbf{d} + \mathbf{l}\,\mathbf{T} + \mathbf{T}\,\mathbf{l}^T - \mathrm{tr}\,\mathbf{l}\,\mathbf{T}$$

mit den Beziehungen

$$\mathbf{l} = \dot{\mathbf{F}}\,\mathbf{F}^{-1} \qquad \text{und} \qquad \mathbf{d} = \frac{1}{2}\,\left\{\mathbf{l} + \mathbf{l}^T\right\}$$

nach (2.42), betrachtet. Analog gilt dann aufgrund der identischen mathematischen Struktur für die vollständige Ableitung des Cauchy-Spannungstensors nach der Designvariablen s mit den Definitionen

$$\mathbf{l}_s := \frac{d\mathbf{F}}{ds}\,\mathbf{F}^{-1} \qquad \text{und} \qquad \mathbf{d}_s := \frac{1}{2}\,\left\{\mathbf{l}_s + \mathbf{l}_s^T\right\} \tag{5.14}$$

die Beziehung

$$\boxed{\frac{d\mathbf{T}}{ds} = \mathbb{C} : \mathbf{d}_s + \mathbf{l}_s\,\mathbf{T} + \mathbf{T}\,\mathbf{l}_s^T - \mathrm{tr}\,\mathbf{l}_s\,\mathbf{T}.} \tag{5.15}$$

Hierbei wird die totale Ableitung des materiellen Deformationsgradienten $\mathbf{F}$ nach der Designvariablen auf der Grundlage der funktionalen Beziehung (5.12) zu

$$\frac{d\mathbf{F}}{ds} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial s} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}}\,\frac{d\mathbf{u}}{ds}$$

berechnet. Durch Einsetzen dieser Beziehung in Gleichung (5.15) kann die partielle Ableitung des Cauchy-Spannungstensors nach der Designvariablen s unter Benutzung der partiellen Ableitung des materiellen Deformationsgradienten nach der Designvariablen und der Definitionen

$$\mathbf{l}_\Delta := \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial s}\,\mathbf{F}^{-1} \qquad \text{und} \qquad \mathbf{d}_\Delta := \frac{1}{2}\,\left\{\mathbf{l}_\Delta + \mathbf{l}_\Delta^T\right\}$$

in der Form

$$\boxed{\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial s} = \mathbb{C} : \mathbf{d}_\Delta + \mathbf{l}_\Delta\,\mathbf{T} + \mathbf{T}\,\mathbf{l}_\Delta^T - \mathrm{tr}\,\mathbf{l}_\Delta\,\mathbf{T}} \tag{5.16}$$

dargestellt werden.

5.2 Die variationelle Sensitivitätanalyse

Bei der variationellen Sensitivitätsanalyse wird die vollständige Ableitung der kontinuumsmechanischen, kontinuierlichen Problemfunktionen nach den Designvariablen hergeleitet. Durch die sich hieran anschließende, zum Näherungsverfahren konsistente Diskretisierung in Raum und Zeit ergeben sich die der numerischen Berechnung zugänglichen algebraischen Gleichungen der Sensitivitätsanalyse.

5.2.1 Grundlagen der variationellen Sensitivitätsanalyse

In der Strukturanalyse wird für ein gegebenes Problem die unbekannte Deformation bzw. das unbekannte Verschiebungsfeld $\mathbf{u}$ ermittelt. Im Rahmen der Formoptimierung ist, wie im Abschnitt 5.1.3 gezeigt, die funktionale Abhängigkeit der kontinuumsmechanischen Größen um die Abhängigkeit von der Designvariablen s zu erweitern. Für eine exemplarische kontinuierliche kontinuumsmechanische Größe φ, die skalar-, vektor- oder tensorwertig sein kann, wird mit den Ergebnissen des obigen Abschnittes die funktionale Abhängigkeit

$$\boxed{\varphi = \hat{\varphi}(s, \hat{\mathbf{u}}(s))} \tag{5.17}$$

vorausgesetzt. Analog gilt damit für die Gleichgewichtsaussage der schwachen Form des Gleichgewichts nach Gleichung (2.80) die Beziehung

$$G = \hat{G}(s, \hat{\mathbf{u}}(s)) = \int\limits_{\mathbf{B}_\circ^s} \mathbf{P} : \operatorname{Grad} \boldsymbol{\eta}\, dV_s - \int\limits_{\mathbf{B}_\circ^s} \rho_\circ\, \overline{\mathbf{k}}_\circ \cdot \boldsymbol{\eta}\, dV_s - \int\limits_{\partial \mathbf{B}_{\circ\sigma}^s} \overline{\mathbf{t}}_\circ \cdot \boldsymbol{\eta}\, dA_s = 0 \tag{5.18}$$

für die Formulierung in den Größen der Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ^s$ bzw. mit (2.81)

$$g = \hat{g}(s, \hat{\mathbf{u}}(s)) = \int\limits_{\mathbf{B}_t^s} \mathbf{T} : \operatorname{grad} \boldsymbol{\eta}\, dv_s - \int\limits_{\mathbf{B}_t^s} \rho\, \overline{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\eta}\, dv_s - \int\limits_{\partial \mathbf{B}_{t\sigma}^s} \overline{\mathbf{t}} \cdot \boldsymbol{\eta}\, da_s = 0 \tag{5.19}$$

für die Formulierung in den Größen der Momentankonfiguration $\mathbf{B}_t^s$.

Für die variationelle Sensitivitätsanalyse ist die totale Ableitung der kontinuierlichen Problemfunktion φ, d.h. der Zielfunktion f oder einer Nebenbedingung g_j, bereitzustellen. Mit Hilfe der Kettenregel ergibt sich

$$\boxed{\frac{d\varphi}{ds} = \frac{\partial \varphi}{\partial s} + \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{u}} \frac{d\mathbf{u}}{ds}.} \tag{5.20}$$

Im Rahmen der Formoptimierung strukturmechanischer Probleme muß für jede Wahl der Designvariablen der Körper selbstverständlich in einem Gleichgewichtszustand sein, d.h. die Aussage der schwachen Form des Gleichgewichts muß für jede Wahl der Designvariablen erfüllt werden. Diese wesentliche Nebenbedingung führt mit der Formulierung (5.18) der schwachen Form des Gleichgewichts in den Größen der Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ^s$ zu der Aussage

$$\boxed{\frac{dG}{ds} = \frac{\partial G}{\partial s} + \frac{\partial G}{\partial \mathbf{u}} \frac{d\mathbf{u}}{ds} = 0,} \tag{5.21}$$

während sich für die Darstellung in den Größen der Momentankonfiguration $\mathbf{B}_t^s$ die Beziehung

$$\boxed{\frac{d\,g}{d\,s} = \frac{\partial g}{\partial s} + \frac{\partial g}{\partial \mathbf{u}}\frac{d\,\mathbf{u}}{d\,s} = 0} \tag{5.22}$$

ergibt. Hieraus kann die totale Ableitung des Verschiebungszustandes nach der Designvariablen ermittelt und somit Gleichung (5.20) ausgewertet werden. Die explizite Auflösung der Beziehungen und ihre numerisch effiziente Berechnung kann erst nach Durchführung der Diskretisierung in Raum und Zeit erfolgen, siehe hierzu auch Abschnitt 5.2.4.

Nach der Elimination der Ableitung des Verschiebungsfeldes nach der Designvariablen in Gleichung (5.20) durch Ausnutzung der stets zu erfüllenden Gleichgewichtsbedingung, d.h. durch Gleichung (5.21), sind für die variationelle Sensitivitätsanalyse die Größen

$$\boxed{\frac{\partial \varphi}{\partial s}, \qquad \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{u}}, \qquad \frac{\partial G}{\partial s} \qquad \text{und} \qquad \frac{\partial G}{\partial \mathbf{u}}}$$

zu berechnen.

Die partielle Ableitung der kontinuumsmechanischen Größen φ sowie der schwachen Form des Gleichgewichts $G = 0$ bzw. $g = 0$ nach dem unbekannten Verschiebungszustand $\mathbf{u}$ (bei unveränderter Designvariablen) ist in der Strukturanalyse bereits für die Ermittlung sogenannter konsistenter Formulierungen, Materialtensoren und Algorithmen und im diskreten Fall für die sogenannten konsistenten Steifigkeitsmatrizen durchgeführt worden. Im weiteren werden deshalb diese Anteile an der Sensitivität, sowohl in der kontinuierlichen als auch der diskreten Form, als bekannt vorausgesetzt und nicht weiter behandelt.

Damit ist für die Sensitivitätsanalyse noch die partielle Ableitung der kontinuumsmechanischen Größe φ, z.B. des materiellen Deformationsgradienten in Abschnitt 5.2.2, der Spannungen in Abschnitt 5.2.3 sowie der schwachen Form des Gleichgewichts in Abschnitt 5.2.4 nach der Designvariablen s bereitzustellen. Im Rahmen dieser Arbeit seien die äußeren Lasten dabei unabhängig von der Designvariablen s.

5.2.2 Die partielle Ableitung des materiellen Deformationsgradienten nach der Designvariablen

Der materielle Deformationsgradient ist die zentrale Größe für die Definition weiterer geometrischer Größen, so daß an dieser Stelle beispielhaft die kontinuierliche partielle Ableitung von $\mathbf{F}$ nach der Designvariablen angegeben werden soll. Dazu eignet sich besonders die Darstellung in konvektiven Koordinaten nach (2.11)

$$\mathbf{F} = \operatorname{Grad}\mathbf{x} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \Theta^i} \otimes \mathbf{G}^i = \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{G}^i.$$

Für die konvektiven Basisvektoren der Momentankonfiguration gilt mit $\mathbf{x} = \mathbf{X} + \mathbf{u}$ die Beziehung

$$\mathbf{g}_i = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \Theta^i} = \frac{\partial}{\partial \Theta^i}\,(\mathbf{X} + \mathbf{u}) = \mathbf{G}_i + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \Theta^i}. \tag{5.23}$$

Nach Abschnitt 5.1.4 sind die Designvariable s und der Verschiebungszustand $\mathbf{u}$ für die Sensitivitätsanalyse unabhängige Variablen, d.h. aus der partiellen Ableitung der kovarianten Basisvektoren der Momentankonfiguration $\mathbf{g}_i = \hat{\mathbf{g}}_i(s, \mathbf{u})$ ergibt sich

$$\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s}\left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \Theta^i}\right) = \frac{\partial \mathbf{G}_i}{\partial s}. \tag{5.24}$$

Hiermit und analog aus der partiellen Ableitung des materiellen Deformationsgradienten $\mathbf{F}$ in der Form $\mathbf{F} = \mathbf{1} + \operatorname{Grad}\mathbf{u}$ nach der Designvariablen s folgt mit der Unabhängigkeit des Einheitstensors von s

$$\boxed{\overset{\vartriangle}{\mathbf{F}} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial s} = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial s} = \frac{\partial \operatorname{Grad}\mathbf{u}}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s}\left(\frac{\partial u^i}{\partial X^A}\right)\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{E}^A = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \Theta^i} \otimes \frac{\partial \mathbf{G}^i}{\partial s}.} \tag{5.25}$$

Bei der Verwendung konvektiver Koordinaten führt dies auf die Berechnung der partiellen Ableitung der kontravarianten Basisvektoren $\mathbf{G}^i = \hat{\mathbf{G}}^i(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s)$ nach der Designvariablen s. Die kovarianten Basisvektoren $\mathbf{G}_j$ sind durch die kontinuumsmechanische Beschreibung der Referenzkonfiguration in der Form

$$X^i = \hat{X}^i(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s) \qquad \text{und} \qquad \mathbf{G}_j = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \Theta^j} = \frac{\partial X^i}{\partial \Theta^j}\,\mathbf{E}_i.$$

gegeben, d.h. für die Ableitung nach der Designvariablen s gilt

$$\boxed{\overset{\vartriangle}{\mathbf{G}}_j = \frac{\partial \mathbf{G}_j}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s}\left(\frac{\partial X^i}{\partial \Theta^j}\right)\mathbf{E}_i = \frac{\partial^2 X^i}{\partial \Theta^j\,\partial s}\,\mathbf{E}_i.} \tag{5.26}$$

Die Ableitung der kovarianten Metrikkoeffizienten $G_{ij} = \mathbf{G}_i \cdot \mathbf{G}_j$ ergibt sich somit zu

$$\overset{\vartriangle}{G}_{ij} = \overset{\vartriangle}{\mathbf{G}}_i \cdot \mathbf{G}_j + \mathbf{G}_i \cdot \overset{\vartriangle}{\mathbf{G}}_j = \sum_{k=1}^{3}\left[\frac{\partial^2 X^k}{\partial \Theta^i\,\partial s}\,\frac{\partial X^k}{\partial \Theta^j} + \frac{\partial X^k}{\partial \Theta^i}\,\frac{\partial^2 X^k}{\partial \Theta^j\,\partial s}\right].$$

Damit kann aus der Beziehung $G_{ij}\,G^{jk} = \delta_i^k$ die Ableitung der kontravarianten Metrikkoeffizienten in der Form

$$\overset{\vartriangle}{G}{}^{sk} = -G^{si}\;\overset{\vartriangle}{G}_{ij}\;G^{jk}$$

hergeleitet werden. Abschließend folgt aus der Beziehung $\mathbf{G}^k = G^{ks}\,\mathbf{G}_s$ mit den obigen Formeln die partielle Ableitung der kontravarianten Basisvektoren der Referenzkonfiguration nach der Designvariablen s in der Form

$$\boxed{\overset{\vartriangle}{\mathbf{G}}{}^{k} = -G^{kj}\;\overset{\vartriangle}{G}_{ji}\;G^{is}\mathbf{G}_s + G^{ks}\;\overset{\vartriangle}{\mathbf{G}}_s\,.} \tag{5.27}$$

Damit kann die kontinuierliche partielle Ableitung des materiellen Deformationsgradienten $\mathbf{F}$ nach der Designvariablen s aus den obigen Teilergebnissen berechnet werden. Zentral ist dabei die Berechnung der partiellen Ableitung des kovarianten Basisvektors $\mathbf{G}_i$ nach der Designvariablen s gemäß Gleichung (5.26).

Die Ergebnisse bei der Berechnung der partiellen Ableitung des materiellen Deformationsgradienten $\mathbf{F}$ nach der Designvariablen s sind in der nachfolgenden Tafel zusammengefaßt.

Tafel 5.3: Partielle Ableitung des materiellen Deformationsgradienten **F** nach der Designvariablen s

Die partielle Ableitung des materiellen Deformationsgradienten **F** nach der Designvariablen ist durch Gleichung (5.25) gegeben, d.h.

$$\overset{\Delta}{\mathbf{F}}= \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial s} = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial s} = \frac{\partial \,\mathrm{Grad}\,\mathbf{u}}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s}\left(\frac{\partial u^i}{\partial X^A}\right)\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{E}^A = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \Theta^i} \otimes \frac{\partial \mathbf{G}^i}{\partial s}.$$

Für die Verwendung kartesischer bzw. konvektiver Koordinaten ergeben sich unterschiedliche Darstellungen.

1. **Berechnung in konvektiven Koordinaten:**
   Zusätzlich zur bereits für die Strukturanalyse zu berechnenden Ableitung des Verschiebungsfeldes **u** nach der konvektiven Koordinate Θ^i, ist die analytische Bestimmung der gemischten zweiten Ableitung der Koordinaten der Referenzkonfiguration nach der konvektiven Koordinate Θ^j und der Designvariablen s auf der Grundlage der gegebenen funktionalen Beziehung $X^i = \hat{X}^i(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s)$ durchzuführen, d.h. es ist
   $$\frac{\partial^2 \hat{X}^i(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s)}{\partial \Theta^j \, \partial s}$$
   zu berechnen.

2. **Berechnung in kartesischen Koordinaten:**
   Für die Verwendung kartesischer Koordinatensysteme, z.B. im Rahmen der numerischen Berechnung, ist die Beziehung
   $$\frac{\partial}{\partial s}\left(\frac{\partial u^i}{\partial X^A}\right)$$
   auszuwerten. Zur Berechnung der Ableitung nach der Designvariablen ist der Zusammenhang der kartesischen Koordinaten von der Designvariablen unter Benutzung einer Parametrisierung der Geometrie erforderlich. Werden hierzu wieder die konvektiven Koordinaten $\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3$ herangezogen, so handelt es sich um die oben diskutierte Formulierung.

Die Verwendung einer weiteren lokalen Parametrisierung der Geometrie wird in Abschnitt 5.2.5 und 5.3.3 im Rahmen der Diskretisierung der kontinuierlichen partiellen Ableitung des materiellen Deformationsgradienten untersucht.

Mit Hilfe der oben berechneten Ableitung $\overset{\Delta}{\mathbf{F}}$ des materiellen Deformationsgradienten ergibt sich sofort die partielle Ableitung des Rechts-Cauchy-Green-Tensors in der Form

$$\overset{\Delta}{\mathbf{C}}= \mathbf{F}^T \overset{\Delta}{\mathbf{F}} + \left(\mathbf{F}^T \overset{\Delta}{\mathbf{F}}\right)^T =: C_{ij}^{\Delta}\ \mathbf{G}^i \otimes \mathbf{G}^j \tag{5.28}$$

sowie in analoger Form die partielle Ableitung für den Links-Cauchy-Green-Tensor **b**.

5.2.3 Die partielle Ableitung der Spannungen nach der Designvariablen

Die Spannungstensoren des in dieser Arbeit betrachteten isotropen, hyperelastischen Materials sind Funktionen der Verzerrungstensoren $\mathbf{C} = \hat{\mathbf{C}}(s)$ bzw. $\mathbf{b} = \hat{\mathbf{b}}(s)$ und der Materialparameter $z_i = \hat{z}_i(s)$ für $i = 1, 2, \ldots, p$ (siehe auch Kapitel 3), d.h. es gilt

$$\mathbf{S} = \hat{\mathbf{S}}(\hat{z}_1(s), \ldots, \hat{z}_p(s), \hat{\mathbf{C}}(s)) \qquad \text{bzw.} \qquad \mathbf{T} = \hat{\mathbf{T}}(\hat{z}_1(s), \ldots, \hat{z}_p(s), \hat{\mathbf{b}}(s)). \tag{5.29}$$

Damit liefert die partielle Ableitung nach der Designvariablen s die Gleichungen

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial s} = \sum_{i=1}^{p} \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial z_i} \frac{\partial z_i}{\partial s} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{C}} : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial s} \tag{5.30}$$

$$\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial s} = \sum_{i=1}^{p} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial z_i} \frac{\partial z_i}{\partial s} + \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{b}} : \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial s}. \tag{5.31}$$

Aus dieser allgemeinen Darstellung ergeben sich zwei wichtige Sonderfälle.

1. Berechnung der Materialparameter aus Versuchsergebnissen.
   Für konstante Geometrie gelten die funktionalen Abhängigkeiten

   $$\mathbf{S} = \hat{\mathbf{S}}(\hat{z}_1(s), \ldots, \hat{z}_p(s)) \qquad \text{bzw.} \qquad \mathbf{T} = \hat{\mathbf{T}}(\hat{z}_1(s), \ldots, \hat{z}_p(s)). \tag{5.32}$$

   und die partiellen Ableitungen ergeben sich zu

   $$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial s} = \sum_{i=1}^{p} \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial z_i} \frac{\partial z_i}{\partial s} \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial s} = \sum_{i=1}^{p} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial z_i} \frac{\partial z_i}{\partial s}. \tag{5.33}$$

2. Formoptimierung bei bekanntem Materialverhalten.
   In diesem Fall sind die Spannungstensoren ausschließlich implizit über die Verzerrungstensoren von der Designvariablen abhängig, d.h. es gilt

   $$\mathbf{S} = \hat{\mathbf{S}}(\hat{\mathbf{C}}(s)) \qquad \text{bzw.} \qquad \mathbf{T} = \hat{\mathbf{T}}(\hat{\mathbf{b}}(s)). \tag{5.34}$$

   Damit ergeben sich die partiellen Ableitungen der Spannungen zu

   $$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial s} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{C}} : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial s} \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial s} = \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{b}} : \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial s}. \tag{5.35}$$

Für den wichtigen zweiten Sonderfall werden im weiteren die partiellen Ableitungen mit Hilfe der bereits aus der Strukturanalyse bekannten Materialtensoren berechnet. Die partiellen Ableitungen der Verzerrungstensoren nach der Designvariablen sind im vorhergehenden Abschnitt behandelt worden.

Für den 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor der Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ^s$ ergibt sich mit (3.1) und (5.35) die Darstellung

$$\boxed{\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial s} = \mathbb{C} : \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial s} = \mathbb{C} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial s}.} \tag{5.36}$$

Die Berechnung der partiellen Ableitung des Cauchy-Spannungstensors $\mathbf{T}$ der Momentankonfiguration $\mathbf{B}_t^s$ kann mit dem Argument der vergleichbaren mathematischer Struktur durch Analogieschluß aus der entsprechenden Beziehung der Zeitableitung ermittelt werden. Dieser Weg ist beispielhaft in Abschnitt 5.1.4 bei der Herleitung der Gleichung (5.15) aufgezeigt worden.

An dieser Stelle soll eine direkte Herleitung einer Darstellung der partiellen Ableitung des Cauchy-Spannungstensors unter Benutzung des Materialtensors $\mathbbm{c}$ nach (3.2) angegeben werden. Ein Vergleich der Gleichungen (5.35) und (3.3) zeigt, daß bei der Berechnung der partiellen Ableitung von $\mathbf{T}$ nach s über Gleichung (5.35) diese direkt ausgewertet werden muß und der Materialtensor $\mathbbm{c}$ nicht eingesetzt werden kann.

Mit dem Kirchhoff-Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$ nach (2.31), d.h. $\boldsymbol{\tau} = J\,\mathbf{T} = \mathbf{F}\,\mathbf{S}\,\mathbf{F}^T$, ergibt sich die partielle Ableitung des Cauchy-Spannungstensors $\mathbf{T}$ zu

$$\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s}\left(\frac{1}{J}\,\boldsymbol{\tau}\right) = \frac{-1}{J^2}\,\frac{\partial J}{\partial s}\,\boldsymbol{\tau} + \frac{1}{J}\,\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial s}.$$

Hierbei gilt für die Ableitung der Determinante des materiellen Deformationsgradienten

$$\frac{\partial J}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s}(\det \mathbf{F}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}}(\det \mathbf{F}) : \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial s} = J\mathbf{F}^{-T} : \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial s} = J\,\mathrm{tr}\left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial s}\,\mathbf{F}^{-1}\right) = J\,\mathrm{tr}\,\mathbf{l}_\Delta,$$

wobei die Bezeichnungen

$$\mathbf{l}_\Delta := \overset{\Delta}{\mathbf{F}}\;\mathbf{F}^{-1} \qquad \text{und} \qquad \mathbf{d}_\Delta := \frac{1}{2}\left\{\mathbf{l}_\Delta + \mathbf{l}_\Delta^T\right\} \tag{5.37}$$

hier und im weiteren benutzt werden. Die partielle Ableitung des Kirchhoff-Spannungstensors $\boldsymbol{\tau}$ wird über die Transformationsbeziehung $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{F}\,\mathbf{S}\,\mathbf{F}^T$ berechnet, d.h. es gilt

$$\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial s} &= \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial s}\,\mathbf{S}\,\mathbf{F}^T + \mathbf{F}\,\mathbf{S}\,\frac{\partial \mathbf{F}^T}{\partial s} + \mathbf{F}\,\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial s}\,\mathbf{F}^T \\ &= \mathbf{l}_\Delta\,\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau}\,\mathbf{l}_\Delta + \mathbf{F}\left[\mathbb{C} : \frac{1}{2}\,\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial s}\right]\,\mathbf{F}^T.\end{aligned}$$

Der Materialtensor der Momentankonfiguration $\mathbbm{c}$ nach (3.2) und der Materialtensor $\mathbb{C}$ der Referenzkonfiguration nach (3.1) sind durch den Zusammenhang

$$\mathbbm{c} : \mathbf{a} = \frac{1}{J}\,\mathbf{F}\,\left[\mathbb{C} : \left(\mathbf{F}^T\,\mathbf{a}\,\mathbf{F}\right)\right]\,\mathbf{F}^T$$

für jeden räumlichen Tensor $\mathbf{a}$ verbunden, siehe Abschnitt 2.3 Gleichung (2.59). Mit der Beziehung

$$\frac{1}{2}\,\overset{\Delta}{\mathbf{C}} = \mathbf{F}^T\,\mathbf{d}_\Delta\,\mathbf{F} \tag{5.38}$$

gilt mit der obigen Beziehung

$$\boxed{\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial s} = \mathbbm{c} : \mathbf{d}_\Delta = \frac{1}{J}\,\mathbf{F}\,\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial s}\,\mathbf{F}^T.} \tag{5.39}$$

Zusammenfassend ergibt sich damit die partielle Ableitung des Cauchy-Spannungstensors $\mathbf{T}$ der Momentankonfiguration $\mathbf{B}_t^s$ nach der Designvariablen s in der Form

$$\boxed{\overset{\Delta}{\mathbf{T}} = \mathbb{c} : \mathbf{d}_\Delta + \mathbf{l}_\Delta\, \mathbf{T} + \mathbf{T}\, \mathbf{l}_\Delta^T - \operatorname{tr} \mathbf{l}_\Delta\, \mathbf{T}.} \tag{5.40}$$

Damit ist gezeigt, daß (zumindest für isotrope, hyperelastische Materialien) die Berechnung der partiellen Ableitung der Spannungen nach der Designvariablen wesentlich auf die Ermittlung der konsistenten Materialmatrizen, die bereits aus der Strukturanalyse bekannt sind, zurückgeführt werden kann.

5.2.4 Die partielle Ableitung der schwachen Form des Gleichgewichts nach der Designvariablen

Die schwache Form des Gleichgewichts ist eine integrale Formulierung der Gleichgewichtsbedingung, bei der sowohl in der Formulierung bzgl. der Größen der Momentankonfiguration $\mathbf{B}_t^s$ als auch der Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ^s$ die Integrationsgrenzen von der Designvariablen s abhängen. Aus diesem Grund ist für die Berechnung der partiellen Ableitung der schwachen Form des Gleichgewichts nach der Designvariablen eine Rücktransformation auf eine bzgl. der Designvariablen unabhängige Beschreibung erforderlich.

Hierzu eignet sich die Parametrisierung des materiellen Körpers $\mathcal{B}$ durch die konvektiven Koordinaten $\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3$, wie sie in Abschnitt 5.1 angegeben wurde. Hierbei sind die kartesischen Koordinaten X^A bzw. x^i durch

$$X^A = \hat{X}^A(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s) \qquad \text{bzw.} \qquad x^i = \hat{x}^i(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t, s)$$

gegeben, d.h. durch die Abbildung

$$\psi : \begin{cases} T_\Theta \times T_t \times T_s & \rightarrow \quad I\!R^3 \\ (\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t, s) & \mapsto \quad \mathbf{x} = \psi(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t, s) = [\chi \circ \omega]\,(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, t, s) \end{cases}$$

nach (5.2). Damit kann eine Koordinatentransformation der kartesischen Koordinaten X^A der Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ^s$ auf die konvektiven Koordinaten vorgenommen werden. Aus der Darstellung (5.18) der schwachen Form des Gleichgewichts in den Größen der Referenzkonfiguration $\mathbf{B}_\circ^s$ ergibt sich somit

$$\begin{aligned} G &= \int_{\mathbf{B}_\circ^s} \mathbf{P} : \operatorname{Grad} \boldsymbol{\eta}\, dV_s - \int_{\mathbf{B}_\circ^s} \rho_\circ\, \overline{\mathbf{k}}_\circ \cdot \boldsymbol{\eta}\, dV_s - \int_{\partial \mathbf{B}_{\circ\sigma}^s} \overline{\mathbf{t}}_\circ \cdot \boldsymbol{\eta}\, dA_s \\ &= \int_{T_\Theta} \mathbf{P} : \operatorname{Grad} \boldsymbol{\eta}\, J_\Theta^s\, dV_\Theta - \int_{T_\Theta} \rho_\circ\, \overline{\mathbf{k}}_\circ \cdot \boldsymbol{\eta}\, J_\Theta^s\, dV_\Theta - \int_{\partial T_{\Theta\sigma}} \overline{\mathbf{t}}_\Theta \cdot \boldsymbol{\eta}\, dA_\Theta = 0, \end{aligned}$$

worin $T_\Theta = [0,1]^3 \subset I\!R^3$ den Parameterraum der konvektiven Koordinaten, $\partial T_{\Theta\sigma}$ die zugehörige belastete Oberfläche und $\overline{\mathbf{t}}_\Theta$ die hierauf bezogene äußere Belastung darstellt. Die Jacobische Funktionalmatrix der Koordinatentransformation wird mit

$$\underline{F}_\Theta^s := \left[\frac{\partial \psi_\circ^{si}}{\partial \Theta^j} \right] \tag{5.41}$$

und die zugehörige Determinante mit J^s_Θ bezeichnet.

Damit kann die partielle Ableitung nach der Designvariablen durch Anwendung der Kettenregel berechnet werden und wieder zurück in die Referenzkonfiguration $\mathbf{B}^s_\circ$ transformiert werden. Auf eine Ausformulierung dieser Berechnung wird verzichtet, da sich die auftretenden Ableitungen stets auf die bereits dargestellten Beziehungen der Abschnitte 5.2.2 und 5.2.3 zurückführen lassen.

5.2.5 Die Diskretisierung der variationellen Sensitivitätsaussage

Für die numerische Umsetzung der Sensitivitätsaussagen ist die Diskretisierung in Raum und Zeit entsprechend des gewählten Näherungsverfahrens, hier der Finite-Elemente-Methode, vorzunehmen. Hierbei sei an dieser Stelle ausschließlich das isoparametrische Konzept betrachtet, bei dem die Geometrie und der Verschiebungszustand im Element in gleicher Form über die Knotenwerte approximiert werden, siehe Kapitel 4. Die Geometrie des Elementes wird somit bei zusätzlicher Berücksichtigung der Abhängigkeit durch die Designvariabele s durch zwei Gesichtspunkte kennzeichnet:

1. Die Knoten des Finite-Elemente-Netzes liegen auf der exakten Geometrie und für die Knotenkoordinaten ergibt sich als funktionale Abhängigkeit die Darstellung der Gleichung (5.3). Da die konvektiven Koordinaten $\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3$ der Knoten des Finite-Elemente-Netzes festgehalten werden, wird hier nur die funktionale Abhängigkeit von der Designvariablen s betrachtet, d.h.

$$X^A_k = \hat{X}^A_k(s). \tag{5.42}$$

2. Die Angabe der Koordinaten von Punkten im Element erfolgt über die Ansatzfunktionen $N^k = \hat{N}^k(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ der Knoten, die Funktionen der zusätzlich eingeführten lokalen Koordinaten der isoparametrischen Formulierung und damit unabhängig von der Designvariablen sind. Genauer gilt

$$X^A_h = \hat{X}^A_h(\xi_1, \xi_2, \xi_3, s) = \sum_{k=1}^{nkel} \hat{N}^k(\xi_1, \xi_2, \xi_3)\, \hat{X}^A_k(s). \tag{5.43}$$

   Für die Beziehungen zwischen den konvektiven Koordinaten $\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3$ im Element erhält man analog die Darstellung

$$\Theta^A_h = \hat{\Theta}^A_h(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sum_{k=1}^{nkel} \hat{N}^k(\xi_1, \xi_2, \xi_3)\, \hat{\Theta}^A_k, \tag{5.44}$$

   wobei Θ^A_k die Werte der konvektiven Koordinaten an den Knoten des Finite-Elemente-Netzes angeben.

Für den Verschiebungszustand im Element gilt für das isoparametrische Konzept

$$\begin{aligned} u^i_h &= \hat{u}^i_h(\xi_1, \xi_2, \xi_3, s) = \sum_{k=1}^{nkel} \hat{N}^k(\xi_1, \xi_2, \xi_3)\, \hat{v}^i_k(s) \\ &= \tilde{u}^i_h(X^1_h, X^2_h, X^3_h) = \sum_{k=1}^{nkel} \tilde{N}^k(X^1_h, X^2_h, X^3_h)\, v^i_k(s). \end{aligned}$$

Dabei sind ξ_1, ξ_2, ξ_3 die lokalen Koordinaten des isoparametrischen Konzeptes und X_h^1, X_h^2, X_h^3 die kartesischen Koordinaten der Punkte der diskreten Referenzkonfiguration. Weiterhin stellen X_k^A die A-te Koordinate und v_k^i die i-te Verschiebungskomponente des k-ten Knotens dar.

Der materielle Deformationsgradient spielt sowohl für die Strukturanalyse hyperelastischer Materialien als auch für deren Sensitivitätsanalyse eine wesentliche Rolle. Als exemplarisches Beispiel wurde in Abschnitt 5.2.3 die Darstellung der partiellen Ableitung der Spannungstensoren nach der Designvariablen, Gleichungen (5.31) und (5.40), auf die partielle Ableitung des materiellen Deformationsgradienten zurückgeführt. Damit ist die Diskretisierung der partiellen Ableitung des materiellen Deformationsgradienten nach der Designvariablen zentral für den Übergang von den kontinuierlichen Beziehungen zur algebraischen Formulierung nach Abschnitt 5.3.3.

Für die partielle Ableitung von $\mathbf{F}$ nach den Designvariablen gilt mit (5.25) die kontinuierliche Beziehung

$$\overset{\vartriangle}{\mathbf{F}} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial s} = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial s} = \frac{\partial \,\mathrm{Grad}\,\mathbf{u}}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s}\left(\frac{\partial u^i}{\partial X^A}\right) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{E}^A = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \Theta^i} \otimes \frac{\partial \mathbf{G}^i}{\partial s}.$$

Dies führt bei der Verwendung kartesischer bzw. konvektiver Koordinatensysteme auf die Berechnung der partiellen Ableitungen

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial s}\left(\frac{\partial u^i}{\partial X^A}\right) \qquad \text{bzw.} \qquad \frac{\partial^2 \hat{X}^k(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s)}{\partial \Theta^j \, \partial s}.}$$

Diese Beziehungen sind konsistent zum numerischen Näherungsverfahren zu diskretisieren.

Für die Darstellung in kartesischen Koordinaten sei auf die Abschnitte 5.3.3.7 und 5.3.3.8 verwiesen, wo die oben angegebene Gleichung durch Einführung der Ansätze für die kartesischen Koordinaten und den Verschiebungszustand diskretisiert wird.

Für die Darstellung in konvektiven Koordinaten gilt dann mit der Darstellung (5.43) der kartesischen Koordinaten als Funktion der lokalen Koordinaten und der Designvariable sowie mit der Beziehung (5.44) zwischen lokalen und konvektiven Koordinaten

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \hat{X}_h^k(\xi^1, \xi^2, \xi^3, s)}{\partial \Theta^j \, \partial s} &= \frac{\partial^2}{\partial \Theta^j \, \partial s} \left[\sum_{k=1}^{nkel} \hat{N}^k(\xi^1, \xi^2, \xi^3) \, \hat{X}_k^A(s) \right] \\
&= \sum_{k=1}^{nkel} \left[\frac{\partial \hat{N}^k(\xi^1, \xi^2, \xi^3)}{\partial \Theta^j} \, \frac{\partial \hat{X}_k^A(s)}{\partial s} \right] \\
&= \sum_{k=1}^{nkel} \left[\frac{\partial \hat{N}^k}{\partial \xi_i} \, \frac{\partial \hat{\xi}_i}{\partial \Theta^j} \, \frac{\partial \hat{X}_k^A}{\partial s} \right].
\end{aligned}$$

Damit sind zur Berechnung innerhalb des isoparametrischen Konzepts die konvektiven Koordinaten Θ_k^A der Knoten bereitzustellen.

5.3 Die diskrete Sensitivitätsanalyse

Der Ausgangspunkt der diskreten Sensitivitätsanalyse ist, wie bereits oben erläutert, das durch den Diskretisierungsprozeß in Raum und Zeit aus dem kontinuierlichen strukturmechanischen Problem hergeleitete diskrete Näherungsproblem. In der diskreten Sensitivitätsanalyse sind die Ableitungen der algebraischen Gleichungen des diskreten Näherungsproblems, zumeist auf der Basis der programmierten Beziehungen der Strukturanalyse, zu ermitteln.

5.3.1 Grundlagen der diskreten Sensitivitätsanalyse

Grundsätzlich sollen keine Unterschiede zwischen der funktionalen Abhängigkeit der diskret formulierten Zielfunktion f_h und den Nebenbedingungen g_{h_j} $(j = 1, 2, \ldots, m)$ von den diskreten Größen des Näherungsproblems gemacht werden. Damit reicht es aus, exemplarisch die diskrete Problemfunktion φ_h zu untersuchen. Die veränderbaren Größen innerhalb der Strukturoptimierung werden als Designvariablen s_i $(i = 1, 2, \ldots, n)$ bezeichnet und zur n-dimensionalen Spaltenmatrix der Designvariablen $\underline{s}$ zusammengefaßt. Zur Vereinfachung der Notation wird eine beliebige Designvariable ausgewählt und ohne Index, d.h. als $s \in I\!R$ geschrieben. Die Designvariablen werden für die Formoptimierung insbesondere aus den Größen des Geometriemodells ausgewählt und sind somit von der Diskretisierung unabhängig.

Die funktionale Abhängigkeit der (diskreten) Problemfunktion φ_h von den Designvariablen besteht zum einen aus der expliziten Abhängigkeit von den Designvariablen und zum anderen aus der schwieriger handhabbaren Abhängigkeit des diskreten Gleichgewichtszustandes von den Designvariablen. Wird der diskrete Lösungszustand über das approximierende Verschiebungsfeld $\mathbf{u}_h = \hat{\mathbf{u}}_h(s)$ beschrieben, so ergibt sich in Anlehnung an Gleichung (5.17) der funktionale Zusammenhang

$$\boxed{\varphi_h = \check{\varphi}_h(s, \hat{\mathbf{u}}_h(s))} \tag{5.45}$$

Analog zu den Beziehungen (5.18) und (5.25) der variationellen Sensitivitätsanalyse gilt damit für die diskreten Formulierungen der schwachen Form des Gleichgewichts die funktionale Abhängigkeit

$$G_h = \check{G}_h(s, \hat{\mathbf{u}}_h(s)) = 0 \tag{5.46}$$

für die Formulierung in den Größen der Referenzkonfiguration bzw.

$$g_h = \check{g}_h(s, \hat{\mathbf{u}}_h(s)) = 0 \tag{5.47}$$

für die Formulierung in den Größen der Momentankonfiguration. Aus diesen Beziehungen können formal die diskreten Sensitivitätsaussagen analog zur kontinuierlichen Formulierung in Abschnitt 5.2.1 aufgestellt werden.

Für die numerische Berechnung sind die obigen Beziehungen erst durch Auswertung der Beziehungen der Finite-Elemente-Methode zugänglich. Im Rahmen dieser Arbeit wird einschränkend vorausgesetzt, daß sich der Gleichgewichtszustand durch die Angabe des globalen Knotenverschiebungsvektors $\underline{V}$ des FE-Netzes beschreiben läßt, d.h. daß es sich um eine Verschiebungsmethode bzw. um eine verallgemeinerte Verschiebungsmethode handelt, siehe auch Kapitel 4. Nach Einsetzen des Näherungsansatzes gilt für den Verschiebungszustand die Form

$$u_h^i = \hat{u}_h^i(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sum_{k=1}^{nkel} \hat{N}^k(\xi_1, \xi_2, \xi_3)\, v_k^i. \tag{5.48}$$

Hierin sind $\hat{N}^k$ die Ansatzfunktionen des k-ten Knotens als Funktion der lokalen Koordinaten (ξ_1, ξ_2, ξ_3), v_k^i die i-te Verschiebungskomponente des k-ten Knotens und $nkel$ die Anzahl der Knoten am Element. In den obigen Beziehungen tritt anstelle der Abhängigkeit vom approximierenden Verschiebungszustand $\mathbf{u}_h = \hat{\mathbf{u}}_h(s)$ die Abhängigkeit vom Verschiebungsvektor $\underline{V} = \hat{\underline{V}}(s)$ auf, d.h. für die Sensitivitätsanalyse wird der funktionale Zusammenhang

$$\boxed{\varphi_h = \hat{\varphi}_h(s, \hat{\underline{V}}(s))} \tag{5.49}$$

vorausgesetzt. Die Beschränkung auf die ausschließliche Abhängigkeit der diskreten Problemfunktion vom Knotenverschiebungsvektor des betrachteten Gleichgewichtszustandes entspricht den Eigenschaften des vorliegenden hyperelastischen Materials. Für die Sensitivitätsanalyse geschichtsabhängiger Prozesse ist eine Modifikation dieser Abhängigkeit auf die Berücksichtigung aller eingenommenen Gleichgewichtszustände vorzunehmen.

Analog werden die diskreten Formulierungen der schwachen Form des Gleichgewichtes behandelt, wobei zusätzlich durch Elimination des Vektors der virtuellen Knotenverschiebungen (siehe Kapitel 4) aus den skalaren Gleichungen $G_h = 0$ bzw. $g_h = 0$ vektorwertige Beziehungen entstehen, d.h. es gelte für die diskrete Gleichgewichtaussage in den Größen der Referenzkonfiguration die Beziehung

$$\underline{G} = \hat{\underline{G}}(s, \hat{\underline{V}}(s)) = \underline{0}. \tag{5.50}$$

Analog gilt für die Beschreibung in den Größen der Momentankonfiguration die Aussage

$$\underline{g} = \hat{\underline{g}}(s, \hat{\underline{V}}(s)) = \underline{0}. \tag{5.51}$$

Aus der funktionalen Abhängigkeit der Problemfunktion φ_h von der Designvariablen nach (5.49) kann durch Anwendung der Kettenregel die totale Ableitung in der Form

$$\frac{d\varphi_h}{ds} = \frac{\partial \varphi_h}{\partial s} + \frac{\partial \varphi_h}{\partial \underline{V}}\, \frac{d\underline{V}}{ds}. \tag{5.52}$$

angegeben werden. Nach der Wahl der diskreten Problemfunktion φ_h sind deren partielle Ableitungen nach der Designvariablen s und den Knotenverschiebungen V_k leicht zu ermittteln. Die Schwierigkeit besteht in der Berechnung der totalen Ableitung des Verschiebungszustandes nach den Designvariablen.

Hierzu ist festzustellen, daß bei der Optimierung stets die Gleichgewichtsbedingung, z.B. die schwache Form des Gleichgewichts nach (2.80), erfüllt sein muß. Für die Finite-Elemente-Methode in Form der Verschiebungsmethode bzw. einer modifizierten Verschiebungsmethode ergibt sich aus dieser Forderung für die Beschreibung in den Größen der Referenzkonfiguration die Gleichung (5.50), woraus sich mit Hilfe der Kettenregel die Aussage

$$\frac{d\underline{G}}{ds} = \frac{\partial \underline{G}}{\partial s} + \frac{\partial \underline{G}}{\partial \underline{V}} \frac{d\underline{V}}{ds} = \underline{0} \tag{5.53}$$

ergibt. Durch Auflösen dieser Gleichung erhält man die gesuchte totale Ableitung des Verschiebungszustandes von den Designvariablen

$$\frac{d\underline{V}}{ds} = \left\{ \frac{\partial \underline{G}}{\partial \underline{V}} \right\}^{-1} \left\{ -\frac{\partial \underline{G}}{\partial s} \right\}, \tag{5.54}$$

die eingesetzt in Gleichung (5.52) die Darstellung

$$\boxed{\frac{d\varphi_h}{ds} = \frac{\partial \varphi_h}{\partial s} + \frac{\partial \varphi_h}{\partial \underline{V}} \left\{ \frac{\partial \underline{G}}{\partial \underline{V}} \right\}^{-1} \left\{ -\frac{\partial \underline{G}}{\partial s} \right\}} \tag{5.55}$$

der totalen Ableitung der diskreten Problemfunktion nach den Designvariablen ergibt.

Die Bedeutung der Strukturanalyse für die Sensitivitätsanalyse besteht zunächst in der Notwendigkeit, zu den aktuellen Werten der Designvariablen den zugehörigen Gleichgewichtszustand zu ermitteln. Darüberhinaus werden die Informationen der Strukturanalyse für die Ermittlung der Sensitivitäten direkt benötigt. In der Strukturanalyse, die für eine feste Wahl der Designvariablen durchgeführt wird, muß für das Newton-Verfahren die exakte Linearisierung der notwendigen Gleichgewichtsbedingungen, z.B. die Formulierung der schwachen Form des Gleichgewichts nach (2.80), durchgeführt werden. Dies ergibt die sogenannte „konsistente tangentiale Steifigkeitsmatrix“ als

$$\underline{K}_T = \frac{\partial \underline{G}}{\partial \underline{V}}, \tag{5.56}$$

die aus der Strukturanalyse für den Lösungspunkt ermittelt und bereits faktorisiert wurde. Damit kann Gleichung (5.55) in der Form

$$\boxed{\frac{d\varphi_h}{ds} = \frac{\partial \varphi_h}{\partial s} + \frac{\partial \varphi_h}{\partial \underline{V}} \left\{ \underline{K}_T \right\}^{-1} \left\{ -\frac{\partial \underline{G}}{\partial s} \right\}} \tag{5.57}$$

geschrieben werden.

Über diesen wichtigen Aspekt hinaus können die in der Strukturanalyse zur Berechnung der tangentialen Steifigkeitsmatrix ermittelten konsistenten Ableitungen wichtiger Größen, z.B. der Materialtensor, für die Berechnung der partiellen Ableitungen der Problemfunktion nach den Designvariablen benutzt werden.

5.3.2 Der Aufbau der diskreten Sensitivitätsberechnung

Zur Berechnung der Sensitivität der diskreten Problemfunktion φ_h muß die totale Ableitung nach den Designvariablen bestimmt werden. Hierzu sind gemäß Gleichung (5.55) die partiellen Ableitungen der Problemfunktion φ_h und der schwachen Form des Gleichgewichts $\underline{G}$ nach den Designvariablen $\underline{s}$ und den Verschiebungen $\underline{V}$ bereitzustellen. Die Berechnung der partiellen Ableitungen ist dabei von der Programmstruktur so allgemeingültig zu halten, daß eine Veränderung der Designvariablen bzw. der Art und Anzahl der Verschiebungen nicht zur Änderung des Quellcodes der Software führt.

Zur Erläuterung des Vorgehens sei exemplarisch eine Problemfunktion φ_h, beispielsweise die Vergleichsspannung in einem Gaußpunkt eines ausgewählten Elementes, als Funktion von $n_\circ$ Variablen α_i für $i = 1, 2, \ldots, n_\circ$ gegeben, d.h.

$$\varphi_h = \hat{\varphi}_h(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_i, \ldots, \alpha_{n_\circ}). \tag{5.58}$$

Die Variablen α_i sind dabei selbst wieder Funktionen von n_i Variablen α_{ij} mit $j = 1, 2, \ldots, n_{ij}$, d.h.

$$\alpha_i = \hat{\alpha}_i(\alpha_{i1}, \alpha_{i2}, \ldots, \alpha_{ij}, \ldots, \alpha_{in_i}). \tag{5.59}$$

Diese Abhängigkeit setzt sich beliebig fort, bis in der letzten Stufe die tatsächlich unabhängigen Variablen erreicht werden. Für die Funktion $\alpha_{ij\ldots y}$ gilt damit

$$\alpha_{ij\ldots y} = \hat{\alpha}_{ij\ldots y}(\alpha_{ij\ldots y1}, \alpha_{ij\ldots y2}, \ldots, \alpha_{ij\ldots yz}, \ldots, \alpha_{ij\ldots yn_y}), \tag{5.60}$$

wobei die Variablen $\alpha_{ij\ldots yz}$ für $z = 1, 2, \ldots n_{ij\ldots y}$, d.h. die möglichen Designvariablen und die Verschiebungskomponenten, unabhängig voneinander sind und selbst nicht mehr von weiteren Variablen abhängen sollen. Die Abhängigkeit der Verschiebungen des Gleichgewichtszustandes von den Designvariablen wird gemäß (5.54) über die Ableitung der schwachen Form des Gleichgewichts berücksichtigt, so daß für die Berechnung der partiellen Ableitungen die Designvariablen und Verschiebungen unabhängig voneinander sind. Damit ist die diskrete Problemfunktion φ_h letztlich von den Variablen $\alpha_{ij\ldots yz}$ abhängig.

Für eine flexible Behandlung einer großen Breite möglicher Designvariablen ist die Tiefe der Schachtelung variabel und unterschiedlich. Zudem wird in den meisten Fällen für die Problemfunktion die Abhängigkeit von der gewählten Designvariablen über mehrere unterschiedliche Variablen mit unterschiedlicher Schachtelungstiefe gegeben sein.

Für eine spezielle Wahl der Designvariablen s_α ist eine der unabhängigen Variablen $\alpha_{ij\ldots yz}$ als Designvariable definiert und veränderbar, während alle anderen für diese Situation fest bleiben. Damit erhält man für die Ableitung der Variablen $\alpha_{ij\ldots yz}$ nach der definierten Designvariable s_α die Beziehung

$$\frac{\partial \alpha_{ij\ldots yz}}{\partial s_\alpha} = \begin{cases} 1 & \text{falls } \alpha_{ij\ldots yz} \text{ die Designvariable } s_\alpha \text{ ist} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{5.61}$$

Für die partielle Ableitung der Problemfunktion φ_h nach der Designvariablen s_α gilt somit die Beziehung

$$\frac{\partial \varphi_h}{\partial s_\alpha} = \sum_{i=1}^{n_\circ} \frac{\partial \varphi_h}{\partial \alpha_i} \frac{\partial \alpha_i}{\partial s_\alpha} = \sum_{i=1}^{n_\circ} \frac{\partial \varphi_h}{\partial \alpha_i} \left[\sum_{j=1}^{n_i} \frac{\partial \alpha_i}{\partial \alpha_{ij}} \frac{\partial \alpha_{ij}}{\partial s_\alpha} \right] = \cdots$$

$$\cdots = \sum_{i=1}^{n_\circ} \frac{\partial\varphi_h}{\partial\alpha_i} \left[\sum_{j=1}^{n_i} \frac{\partial\alpha_i}{\partial\alpha_{ij}} \left(\cdots\left\{\sum_{z=1}^{n_{ij\ldots y}} \frac{\partial\alpha_{ij\ldots y}}{\partial\alpha_{ij\ldots yz}} \frac{\partial\alpha_{ij\ldots yz}}{\partial s_\alpha}\right\}\cdots\right)\right]. \tag{5.62}$$

Analog zur obigen Struktur ist die Abhängigkeit der schwachen Form des Gleichgewichts von den Designvariablen gegeben, so daß die Gleichung (5.62) auch für die Komponenten des Vektors $\underline{G}$ gilt. Die partiellen Ableitungen der Komponenten des Vektors $\underline{G}$ nach den Designvariablen werden zu einem Vektor zusammengefaßt.

Wird dagegen die partielle Ableitung der Problemfunktion φ_h bzw. einer Komponente der schwachen Form nach den Verschiebungskomponenten V_α abgeleitet, so gilt beispielhaft für die Problemfunktion der Zusammenhang

$$\frac{\partial\varphi_h}{\partial V_\alpha} = \sum_{i=1}^{n_\circ} \frac{\partial\varphi_h}{\partial\alpha_i} \left[\sum_{j=1}^{n_i} \frac{\partial\alpha_i}{\partial\alpha_{ij}} \left(\cdots\left\{\sum_{z=1}^{n_{ij\ldots y}} \frac{\partial\alpha_{ij\ldots y}}{\partial\alpha_{ij\ldots yz}} \frac{\partial\alpha_{ij\ldots yz}}{\partial V_\alpha}\right\}\cdots\right)\right], \tag{5.63}$$

mit der Beziehung

$$\frac{\partial\alpha_{ij\ldots yz}}{\partial V_\alpha} = \begin{cases} 1 & \text{falls } \alpha_{ij\ldots yz} \text{ die Verschiebungskomponente } V_\alpha \text{ ist} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{5.64}$$

Die partiellen Ableitungen von φ_h nach V_α werden zu einem Vektor zusammengefaßt.

Die Sensitivitätsanalyse von allgemeinen Problemfunktionen mit den oben beschriebenen komplexen Abhängigkeiten kann nur bei einem modularen Aufbau der Berechnung erfolgen. Hierbei wird aus der Kette der Abhängigkeiten ein Segment herausgelöst und isoliert betrachtet. Zur Erläuterung wird beispielhaft die Variable α_i der Problemfunktion φ_h betrachtet, die, wie in Gleichung (5.59) gezeigt, wiederum von mehreren Variablen anhängig ist. Für die Ableitung der Funktion α_i nach der Designvariablen s_α gilt

$$\frac{\partial\alpha_i}{\partial s_\alpha} = \sum_{j=1}^{n_i} \frac{\partial\alpha_i}{\partial\alpha_{ij}} \frac{\partial\alpha_{ij}}{\partial s_\alpha}. \tag{5.65}$$

Die Programmablauf führt somit dazu, daß für die Berechnung der partiellen Ableitung der Funktion α_i nach der Designvariablen s_α, d.h. von $\dfrac{\partial\alpha_i}{\partial s_\alpha}$, dem ausführenden Unterprogramm die partiellen Ableitungen der (die Funktion α_i definierenden) Variablen α_{ij} nach der Designvariablen s_α, d.h. die bereits berechneten Ableitungen $\dfrac{\partial\alpha_{ij}}{\partial s_\alpha}$, bereitgestellt werden. Damit ist auf der Ebene des parallel zur Berechnung vorhandenen Unterprogramms der Sensitivitätsanalyse nur die Gleichung (5.65) auszuwerten. Der Ausgabewert $\dfrac{\partial\alpha_i}{\partial s_\alpha}$ stellt somit für das folgende Unterprogramm der Sensitivitätsanalyse die Eingangsdaten dar.

Für die weitere Untersuchung wird die Abhängigkeit der Problemfunktion φ_h nach den unabhängigen Variablen $\alpha_{ij\ldots yz}$ durch das totale Differential $d\varphi_h$ der Problemfunktion φ_h ausgedrückt, d.h.

$$d\varphi_h = \sum_{i=1}^{n_\circ} \sum_{j=1}^{n_i} \cdots \sum_{z=1}^{n_{ij\ldots y}} \frac{\partial\varphi_h}{\partial\alpha_{ij\ldots yz}} d\alpha_{ij\ldots yz}. \tag{5.66}$$

5.3.3 Die diskrete Sensitivität der Spannungen

Die Untersuchung isotroper, hyperelastischer Materialien lieferte mit Gleichung (3.23) die allgemeingültige Darstellungsform für den 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor

$$\mathbf{S} = 2\,\frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} = 2\,\frac{\partial W}{\partial \mathrm{I}_k}\,\frac{\partial \mathrm{I}_k}{\partial \mathbf{C}} = 2\,W_{,k}\,A_{km}\,\mathbf{Z}_m. \tag{5.67}$$

Für die Betrachtung inkompressibler Materialien kann diese Darstellung in die Form

$$\mathbf{S} = 2\,\frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} = 2\,\frac{\partial W}{\partial \bar{\mathrm{I}}_k}\,\frac{\partial \bar{\mathrm{I}}_k}{\partial \mathbf{C}} = 2\,\overline{W}_{,k}\,\overline{A}_{km}\,\overline{\mathbf{Z}}_m \tag{5.68}$$

modifiziert werden, wobei jetzt die Summation nur noch über 1 und 2 läuft.

Im weiteren wird die Sensitivität des kompressiblen Materials, d.h. die Bestimmung der partiellen Ableitung der Spannungen nach den Designvariablen, näher untersucht. Die Berechnung der partiellen Ableitung der Spannungen nach den Verschiebungen ist aus der Strukturanalyse bekannt und wird nicht angegeben. Die Sensitivität inkompressibler Materialien verläuft formal äquivalent zur dargestellten Behandlung kompressibler Materialien und wird ebenfalls nicht explizit dargestellt.

Die Sensitivitätsanalyse läßt sich, wie in Gleichung (5.66) dargelegt, über die vollständigen Differentiale der zu untersuchenden Größen formulieren, d.h. für die Spannungen nach (5.67) gilt

$$\boxed{d\mathbf{S} = 2\,[dW_{,k}\,A_{km}\,\mathbf{Z}_m + W_{,k}\,dA_{km}\,\mathbf{Z}_m + W_{,k}\,A_{km}\,d\mathbf{Z}_m]\,.} \tag{5.69}$$

Damit ist das vollständige Differential der Spannungen auf die vollständigen Differentiale $dW_{,k}$ der partiellen Ableitung der Formänderungsenergie nach den Invarianten, dA_{km} der Beziehung zwischen der Ableitung der Invarianten und der gewählten Basis und $d\mathbf{Z}_m$ der gewählten Basis zurückzuführen. Diese sind im weiteren zu vereinfachen.

5.3.3.1 Das vollständige Differential der partiellen Ableitung der Formänderungsenergie nach den Invarianten

Die Formänderungsenergie W ist nach den Untersuchungen im Kapitel 2 als Funktion der Invarianten $\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}$ des Rechts- bzw. Links-Cauchy-Green-Tensors $\mathbf{C}$ bzw. $\mathbf{b}$ aufzufassen. Daneben sind bei der Sensitivitätsanalyse auch die nicht geometrischen Parameter der Formänderungsenergie als veränderliche Größen anzusehen, d.h. es wird im weiteren der funktionale Zusammenhang

$$W = \hat{W}(z_1, z_2, z_3, \ldots, z_p, \mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}) \tag{5.70}$$

vorausgesetzt. Dabei seien die Variablen $z_1, z_2, \ldots, z_p$ und die Invarianten $\mathrm{I}, \mathrm{II}, \mathrm{III}$ voneinander unabhängig. Bei Betrachtung der Formänderungsenergiefunktion W, z.B. des Ogden-Materials, handelt es sich bei den Variablen $z_1, z_2, \ldots, p_n$ um Materialparameter, die im folgenden stets unter diesem Namen angesprochen werden sollen.

Damit kann das vollständige Differential in der Form

$$dW_{,k} = \sum_{i=1}^{p} \frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_k \partial z_i} dz_i + \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial^2 W}{\partial \mathrm{I}_k \partial \mathrm{I}_j} d\mathrm{I}_j \tag{5.71}$$

angegeben werden, wobei die zweite partielle Ableitung der Formänderungsenergie nach den Invarianten durch die Betrachtungen in Kapitel 3 gegeben ist. Da die Variablen $z_1, z_2, \ldots, z_p$ und I_k voneinander unabhängig sind, ist die gemischte Ableitung ohne weitere Schwierigkeiten auch für die Sonderfälle zusammenfallender Eigenwerte anzugeben. Damit ist zur Berechnung nur die weitere Kenntnis der vollständigen Differentiale der Variablen dz_i für $i = 1, 2, \ldots, p$ und $d\mathrm{I}_k$ für $k = 1, 2, 3$ erforderlich.

5.3.3.2 Das vollständige Differential der Größen A_{km}

Die partiellen Ableitungen der Invarianten nach $\mathbf{C}$ werden nach Abschnitt 3.2.1 bezüglich der gewählten Basis $\mathbf{Z}_m$, d.h. in der Form der Gleichung (3.21), angegeben. Damit ergibt sich das vollständige Differential zu

$$dA_{km} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial A_{km}}{\partial \mathrm{I}_i} \, d\mathrm{I}_i, \tag{5.72}$$

so daß das vollständige Differential der Invarianten zu berechnen ist.

5.3.3.3 Das vollständige Differential der Basis $\mathbf{Z}_m$

Die Basistensoren $\mathbf{Z}_m$ für $m = 1, 2, 3$ sind durch die Wahl der Betrachtungsweise im wesentlichen vorgegeben. Für das zugehörige vollständige Differential ergibt sich

$$d\mathbf{Z}_i = \frac{\partial \mathbf{Z}_i}{\partial \mathbf{C}} : d\mathbf{C}, \tag{5.73}$$

wobei die vierstufigen Tensoren $\dfrac{\partial \mathbf{Z}_i}{\partial \mathbf{C}}$ aus der Berechnung des Materialtensors bereits bekannt sind. Damit wird die Bereitstellung des vollständigen Differentials des Rechts-Cauchy-Green-Tensors $\mathbf{C}$ erforderlich.

5.3.3.4 Das vollständige Differential der Invarianten

Die Invarianten sind gemäß Gleichung (2.13) Funktionen des Rechts-Cauchy-Green-Tensors, d.h. für das vollständige Differential der Invarianten erhält man somit die Beziehungen

$$d\mathrm{I}_k = \frac{\partial \mathrm{I}_k}{\partial \mathbf{C}} : d\mathbf{C} = [A_{km} \; \mathbf{Z}_m] : d\mathbf{C}. \tag{5.74}$$

Aus dieser und den obigen Beziehungen wird deutlich, daß für die Berechnung des vollständigen Differentials der Spannungen nur die weitere Kenntnis des vollständigen Differentials der sonstigen Variablen in der Formänderungsenergie (außer den Invarianten), d.h. dz_i für $i = 1, 2, \ldots, p$, und des vollständigen Differentials des Rechts-Cauchy-Green-Tensors, d.h. $d\mathbf{C}$, erforderlich ist.

5.3.3.5 Das vollständige Differential der Materialparameter

Das vollständige Differential eines Materialparameters z_j mit $j \in \{1, 2, 3, \dots, p\}$ ist in der Regel in der Form

$$dz_j = \begin{cases} 1 & \text{falls} \quad z_j \quad \text{die aktuelle Designvariable ist} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{5.75}$$

gegeben. Sollen weitergehende Zusammenhänge betrachtet werden, so ist die Kette der Beziehungen natürlich weiter fortzusetzen und es werden auch Werte zwischen 0 und 1 möglich sein.

5.3.3.6 Das vollständige Differential des Rechts-Cauchy-Green-Tensors C

Das vollständige Differential des Rechts-Cauchy-Green-Tensors kann mit Gleichung (2.19) aus dem vollständigen Differential des Verschiebungsgradienten $\mathbf{H} = \operatorname{Grad}\mathbf{u}$ in der folgenden Form berechnet werden

$$d\mathbf{C} = 2\,d\mathbf{E} = d\left\{\mathbf{H} + \mathbf{H}^T + \mathbf{H}^T\mathbf{H}\right\} = d\mathbf{H} + d\mathbf{H}^T + d\mathbf{H}^T\,\mathbf{H} + \mathbf{H}^T\,d\mathbf{H}. \tag{5.76}$$

5.3.3.7 Das vollständige Differential des Verschiebungsgradienten H

In der Kette der Abhängigkeiten ist mit dem Verschiebungsgradienten der Punkt erreicht, an dem für die Sensitivitätsanalyse das Vorgehen der Finite-Elemente-Methode zu berücksichtigen ist. Dies bedeutet, daß die bisher bereitgestellten Beziehungen sowohl für den kontinuierlichen als auch den diskreten Zugang zur Sensitivitätsanalyse gültig sind. Der Verschiebungsgradient ist durch

$$\mathbf{H} = \operatorname{Grad}\mathbf{u} = \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial\mathbf{X}} = \frac{\partial u^i}{\partial X^A}\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{E}^A \tag{5.77}$$

bezüglich einer kartesischen Basis gegeben.

Für den Verschiebungszustand wird im Rahmen der Finite-Elemente-Methode unter unter Berücksichtigung der Abhängigkeit von der Designvariablen für die i-te Verschiebungskomponente der Ansatz

$$\boxed{u_h^i = \tilde{u}_h^i(X^1, X^2, X^3, s) = \sum_{k=1}^{nkel} \tilde{N}^k(X^1, X^2, X^3)\,\hat{v}_k^i(s)} \tag{5.78}$$

gemacht, wobei die obige Beziehung für die Darstellung der Verschiebung in einem Element gilt, siehe auch Gleichung (4.3). Hierbei stellt $v_k^i = \hat{v}_k^i(s)$ die i-te Komponente der Verschiebung des k-ten Knotens dar und $\tilde{N}^k = \tilde{N}^k(X^1, X^2, X^3)$ ist die zugehörige Formfunktion in Abhängigkeit der globalen Koordinaten X^1, X^2, X^3, die bei Einführung der lokalen Koordinaten ξ_1, ξ_2, ξ_3 des isoparametrischen Konzepts (siehe den nächsten Abschnitt) auch in der Form $N^k = \tilde{N}^k(X^1, X^2, X^3) = \hat{N}^k(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$

geschrieben werden kann. Damit ergibt sich für die Koeffizienten des diskreten Verschiebungsgradienten bzgl. einer kartesischen Basis die Darstellung

$$\boxed{\frac{\partial u_h^i}{\partial X^A} = \sum_{k=1}^{nkel} \frac{\partial \tilde{N}^k(X^1, X^2, X^3)}{\partial X^A} \, v_k^i,} \tag{5.79}$$

woraus sich das vollständige Differential der Matrix $\underline{H}$ der Ableitung der diskreten Verschiebungskomponenten nach den kartesischen Koordinaten

$$d\underline{H} = d\left[\frac{\partial u_h^i}{\partial X^A}\right] = \sum_{k=1}^{nkel} \left\{ d\left[\frac{\partial \tilde{N}^k}{\partial X^A}\right] \, v_k^i + \frac{\partial \tilde{N}^k}{\partial X^A} \, d\, v_k^i \right\} \tag{5.80}$$

ergibt. Damit ist die Sensitivität der Spannungen auf die Sensitivität der Knotenverschiebungen des FE-Netzes und die Sensitivität der kartesischen Ableitungen der zugehörigen Ansatzfunktionen zurückgeführt.

5.3.3.8 Das vollständige Differential der kartesischen Ableitungen der Ansatzfunktionen

Die zentrale Grundlage für die Bestimmung des vollständigen Differentials der kartesischen Ableitungen der Ansatzfunktionen ist in dieser Arbeit die isoparametrische Beschreibung der finiten Elemente, die aus der Literatur der Finiten-Elemente-Methode hinreichend bekannt ist, siehe z.B. *Bathe* [9], *Hughes* [52], *Zienkiewicz, Taylor* [111] und die Darstellung in Kapitel 4.

Die Abbildung der lokalen Koordinaten (ξ_1, ξ_2, ξ_3) auf die kartesischen Koordinaten (X^1, X^2, X^3) wird bei der isoparametrischen Vorgehensweise mit Hilfe der Formfunktionen $N^k = \hat{N}^k(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ (siehe auch Gleichung (5.78)) durchgeführt, d.h. mit der A-ten Koordinate des k-ten Knotens gilt

$$\boxed{X^A = \hat{X}^A(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sum_{k=1}^{nkel} \hat{N}^k(\xi_1, \xi_2, \xi_3 s) \, \hat{X}_k^A(s).} \tag{5.81}$$

Das totale Differential dieser Beziehung liefert

$$d\hat{X}^A(\xi_1, \xi_2, \xi_3, s) = \sum_{k=1}^{nkel} \hat{N}^k \, dX_k^A, \tag{5.82}$$

d.h. im weiteren ist das totale Differential der Knotenkoordinaten dX_k^A zu bestimmen.

Die Formfunktionen N^k sind üblicherweise als Funktionen der lokalen Variablen gegeben. Die benötigten partiellen Ableitungen der Formfunktionen nach den kartesischen Koordinaten werden durch Berechnung und Inversion der Funktionalmatrix der Beziehung (5.81)

$$\underline{J} := \left(\frac{\partial X^A}{\partial \xi_j}\right) \qquad \text{und damit} \qquad \underline{J}^{-1} = \left(\frac{\partial \xi_l}{\partial X^B}\right) \tag{5.83}$$

in der Form

$$\frac{\partial N^k}{\partial X^B} = \sum_{l=1}^{3} \frac{\partial N^k}{\partial \xi_l} \, \frac{\partial \xi_l}{\partial X^B}. \tag{5.84}$$

bereitgestellt. Für das totale Differential der kartesischen Ableitungen der Ansatzfunktionen ergibt sich somit die Beziehung

$$d\left\{\frac{\partial N^k}{\partial X^B}\right\} = d\left\{\sum_{l=1}^{3} \frac{\partial N^k}{\partial \xi_l} \, \frac{\partial \xi_l}{\partial X^B}\right\} = \sum_{l=1}^{3} \frac{\partial N^k}{\partial \xi_l} \, d\left\{\frac{\partial \xi_l}{\partial X^B}\right\}, \tag{5.85}$$

da die Ansatzfunktionen nur von den lokalen Koordinaten abhängen und somit bei einer Veränderung der vorgesehenen Designvariablen nicht modifiziert werden. Damit ist das totale Differential der inversen isoparametrischen Abbildung in der Form

$$d\underline{J}^{-1} = d\left[\frac{\partial \xi_l}{\partial X^B}\right]$$

bereitzustellen. Mit den Beziehungen

$$\underline{J}\,\underline{J}^{-1} = \underline{1} \qquad \text{und} \qquad d\left\{\underline{J}\,\underline{J}^{-1}\right\} = \{d\underline{J}\}\;\underline{J}^{-1} + \underline{J}\,d\left\{\underline{J}^{-1}\right\} = d\,\{\underline{1}\} = \underline{0}$$

gilt somit

$$d\left\{\underline{J}^{-1}\right\} = -\underline{J}^{-1}\;d\underline{J}\;\underline{J}^{-1} \tag{5.86}$$

und mit Gleichung (5.81) ergibt sich die totale Differential der Deteminante der Funktionalmatrix zu

$$d\underline{J} = d\left[\frac{\partial \hat{X}^A(\xi_1, \xi_2, \xi_3, s)}{\partial \xi_j}\right] = \sum_{k=1}^{nkel} \frac{\partial \hat{N}^k(\xi_1, \xi_2, \xi_3)}{\partial \xi_j}\, dX_k^A. \tag{5.87}$$

Dies führt abschließend zu der Darstellung

$$\boxed{d\left[\frac{\partial N^k}{\partial X^A}\right] = -\sum_{B=1}^{3} \frac{\partial N^k}{\partial X^B}\,\left(\sum_{r=1}^{nkel} \frac{\partial N^r}{\partial X^A}\, dX_r^B\right).} \tag{5.88}$$

5.3.3.9 Die Berechnung der partiellen Ableitungen der Spannungen

Die Berechnung des vollständigen Differentials der Spannungen ist, wie oben gezeigt, auf die Bereitstellung der totalen Differentiale der Knotenkoordinaten dX_k^A und der Knotenverschiebungen dv_k^i zurückzuführen. Bei einem modularen Aufbau der Programme sind diese Informationen dem berechnenden Unterprogramm zu übergeben.

Für die Sensitivitätsanalyse sind die partiellen Ableitungen der Problemfunktionen nach den Knotenverschiebungen und nach den Designvariablen bereitzustellen, siehe Gleichung (5.57), die aus dem oben berechneten totalen Differential der Spannungen herausgefiltert werden.

Kapitel 6

Ein Gesamtkonzept der Optimalen Formgebung

Die Problemstellung *Optimale Formgebung* wird in ihrer algorithmischen Umsetzung im wesentlichen von den in Tafel 6.1 zusammengefaßten Schwerpunkten geprägt.

Tafel 6.1: Die Bausteine der Prozeßkette Optimale Formgebung

Mathematische Optimierung (MO): Formulierung des ingenieurmäßigen Problems als ein Minimalproblem der mathematischen Optimierung und Auswahl eines geeigneten Algorithmus.

Computer Aided Geometric Design (CAGD): Beschreibung der Geometrie der Struktur in Abhängigkeit der gewählten Designvariablen.

Finite-Elemente-Methode (FEM): Durchführung der Strukturanalyse.

Sensitivitätsanalyse (SA): Ermittlung der Werte der Zielfunktion und Nebenbedingungen sowie deren Gradienten nach den Designvariablen.

Die Formulierung eines Gesamtkonzeptes zur Optimalen Formgebung muß die jeweils vorhandenen Möglichkeiten, insbesondere der softwaretechnischen Realisation, berücksichtigen. Eine Diskussion dieser Problematik und die Darlegung der eigenen Zielsetzung sowie des hieraus entstehenden Konzeptes erfolgt in Abschnitt 6.2. Im folgenden Abschnitt soll zunächst die Formulierung des Problems der Optimalen Formgebung als ein Minimalproblem der mathematischen Optimierung erfolgen.

6.1 Mathematische Formulierung und Algorithmus

Die Aufgabenstellung der Optimalen Formgebung, ein Bauteil bezüglich definierter Ziele und einzuhaltender Nebenbedingungen bei Veränderung signifikanter, die Struktur beschreibende, Systemvariablen zu optimieren, führt zur Formulierung der Ingenieuraufgabe als ein Problem der mathematischen Optimierung und zum Einsatz der hierfür entwickelten Algorithmen.

6.1.1 Überblick über die Optimierungsverfahren

Bei der Auswahl eines geeigneten Algorithmus ist die grundlegende Unterscheidung in stochastische und deterministische Verfahren vorzunehmen. Die stochastischen Verfahren, z.B. genetische Algorithmen in Form der Evolutionsstrategie, eignen sich besonders bei geringen Kosten der Funktionsauswertungen, siehe z.B. *Rechenberg* [76]). Eine umfassende Darstellung dieser Klasse der Optimierungsverfahren und ein Vergleich zu den deterministischen Verfahren ist z.B. in *Schwefel* [87] vorgenommen worden.

In dieser Arbeit werden ausschließlich Gradientenverfahren oder gradientenähnliche Verfahren innerhalb der Klasse der deterministischen Verfahren betrachtet, deren theoretische Grundlagen und algorithmische Umsetzung z.B. in *Luenberger* [56] und *Gill, Murray, Wright* [44] behandelt werden. Dabei werden ausschließlich hinreichend oft stetig differenzierbare, reellwertige Zielfunktionen und Nebenbedingungen betrachtet. Für Problemformulierungen mit nichtdifferenzierbaren Zielfunktionen und Nebenbedingungen sei z.B. auf die Arbeiten von *Zowe*, z.B. [115], und die dort entwickelten „bundle trust“ Verfahren verwiesen.

Einen Überblick über den Einsatz der Gradientenverfahren im Rahmen der Strukturoptimierung geben z.B. *Arora* [2], *Atrek et. al* [5]. Auf die im Rahmen dieser Arbeit eingesetzten Algorithmen wird in Abschnitt 6.1.4 näher eingegangen.

Sind für die veränderbaren Problemvariablen nur diskrete Lösungen erlaubt, können bei quasi-kontinuierlichen Problemen die im weiteren vorgestellten Verfahren benutzt werden, und der ermittelten kontinuierlichen Lösung ist in geeigneter Weise die zugehörige diskrete Lösung zuzuordnen. Diese Problematik tritt z.B. bei der Gewichtsminimierung von Stabtragwerken bei Verwendung von Profilen aus den Profiltabellen auf, siehe hierzu z.B. *Becker* [10], *Eschenauer, Schäfer* [38]. Dagegen ist z.B. die Ermittlung der hinsichtlich der globalen Stabilität optimalen Anzahl von Längssteifen einer ausgesteiften Kreiszylinderschale ein diskretes Optimierungsproblem. Eine Anwendung der Algorithmen der diskreten Optimierung auf Problemstellungen der Optimalen Formgebung ist bisher nur in Ausnahmen (z.B. *Grierson* [45]) vorgenommen worden.

Bei der Gestaltung von Ingenieurbauteilen sollen zumeist mehrere Ziele möglichst gut erreicht werden. Dieser Spannungskreis ist mit der Redewendung „so günstig wie möglich – so sicher wie nötig“ passend umschrieben. Für die numerische Umsetzung bedeutet dies, daß mehrere Zielfunktionen zur Beurteilung der Güte einer Konstruktion herangezogen werden, und man spricht in diesem Fall von „Mehrzieloptimierung“. Auf diese Problematik wird in der vorliegenden Arbeit nicht eingegangen, siehe hierzu z.B. *Stadler* [93], [94], *Osyczka* [70] und *Eschenauer et. al.* [36].

Ein wesentliches Interesse praktischer Ingenieurarbeit liegt in der Beurteilung qualitativer Veränderungen der Strukturen und Bauteile, wie z.B. das Hinzufügen von Bauelementen. Die theoretische Formulierung und die algorithmische Umsetzung dieser sogenannten *Topologieoptimierung* sind z. Zt. Gegenstand intensiver Forschung, siehe z.B. *Bremicker* [22].

6.1.2 Das mathematische Optimierungsproblem

Das im weiteren betrachtete Minimalproblem hinreichend oft stetig differenzierbarer, reellwertiger Zielfunktionen bzw. Nebenbedingungen wird in Tafel 6.2 zusammengefaßt.

Tafel 6.2: Das mathematische Optimierungsproblem

Gesucht wird ein lokales Minimum der skalarwertigen Zielfunktion (ZF) f für den Vektor $\underline{s} \in \mathbb{R}^n$ der Designvariablen (DV)

$$\min_{\underline{s} \in \mathbb{R}^n} f(\underline{s})$$

unter Berücksichtigung der Nebenbedingungen (NB)

$\bar{s}_i^u \leq s_i \leq \bar{s}_i^o$	für	$i = 1, \ldots, n$	Schranken (US,OS)
$g_j(\underline{s}) \leq 0$	für	$j = 1, \ldots, m_e$	Ungleichheitsnb. (UNB)
$g_j(\underline{s}) = 0$	für	$j = m_e + 1, \ldots, m$	Gleichheitsnb. (GNB)

Die Zielfunktion $f(\underline{s})$ wird somit in der Menge

$$M := \{\underline{s} \in \mathbb{R}^n \mid g_j(\underline{s}) = 0 \quad \text{für } j = 1, \ldots, m_e \ , \quad g_j(\underline{s}) \leq 0 \quad \text{für } j = m_e + 1, \ldots, m\}$$

minimiert.

6.1.3 Die Kuhn-Tucker-Bedingungen

Falls ein Vektor $\underline{s}^* \in M$ existiert, wobei die Menge $I^* := \{j | \; g_j(\underline{s}^*) = 0\}$ die Indizes der zu diesem Zeitpunkt *aktiven Nebenbedingungen* enthält und $\{\nabla g_j(\underline{s}^*); \; j \in I^*\}$ eine linear unabhängige Menge von Vektoren darstellt (es können dann höchstens n Nebenbedingungen aktiv werden), dann ist $\underline{s}^*$ ein *regulärer Punkt*. Stellt nun $\underline{s}^* \in M$ ein lokales Minimum von f in M und außerdem einen regulären Punkt dar, so gibt es eindeutig bestimmte Lagrange-Multiplikatoren $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbb{R}^m$, so daß von dem Lösungsvektor $(\underline{s}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$ die notwendigen Bedingungen nach *Kuhn, Tucker* erfüllt werden (siehe *Luenberger* [56]).

Tafel 6.3: Die Kuhn-Tucker-Bedingungen

Ist $\underline{s}^* \in \mathbb{R}^n$ ein reguläres, lokales Minimum, dann existieren die eindeutig bestimmten Lagrange-Multiplikatoren $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbb{R}^m$ und der Lösungsvektor $(\underline{s}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$ erfüllt die notwendigen Bedingungen

$$\begin{aligned}
\nabla f(\underline{s}^*) \; + \; \sum_{j=1}^{m} \lambda_j^* \nabla g_j(\underline{s}^*) \; &= \; \underline{0} & & \\
g_j(\underline{s}^*) \; &= \; 0 \quad & \text{für} \quad & 1 \leq j \leq m_e, \\
\lambda_j^* \, g_j(\underline{s}^*) \; &= \; 0 \quad & \text{für} \quad & m_e + 1 \leq j \leq m, \\
\lambda_j^* \; &\geq \; 0 \quad & \text{für} \quad & m_e + 1 \leq j \leq m.
\end{aligned}$$

6.1.4 Anmerkungen zur Wahl der Optimierungsalgorithmen

Im Rahmen der algorithmischen Umsetzung der Optimalen Formgebung sind in das Finite-Elemente-Forschungsprogrammpaket INA–OPT des Instituts die Sequentielle Quadratische Programmierung (SQP) durch die Unterstützung von *Schittkowski* (Bereitstellung der Fortran-Quelle seiner Programmentwicklung) (siehe [82] und auch *Bischoff* [16], *Barthold* [6], *Becker* [10]) und die Methode der mitbewegten Asymptoten (MMA) (siehe *Mahnken* [57]) implementiert worden.

Es ist stets zu beachten, daß sich durch die spezielle Problemstellung der Optimalen Formgebung, d.h. durch die Anzahl der Designvariablen, der Gleichungs- und Ungleichungsnebenbedingungen sowie deren mathematischen Struktur (linear, quadratisch, konvex, allgemein nichtlinear, separabel, etc.) ein mathematisches Optimierungsproblem ergibt, das mit einem ausgewählten Algorithmus, der nicht auf diese spezielle Situation ausgerichtet ist, nicht optimal behandelt wird, siehe hierzu z.B. die Problemklassifikation in *Gill, Murray, Wright*[44].

Der Einsatz dieser Algorithmen für die Problemstellungen der Optimalen Formgebung ist in den letzten Jahren vielfältig untersucht, und die Ergebnisse sind veröffentlicht worden, so daß an dieser Stelle nur einige wenige Literaturstellen angegeben werden.

Auswahl der Literatur zur Sequentiellen Quadratischen Optimierung (SQP):

- Theorie: *Han* [48], *Powell* [74], *Schittkowski* [82], [83]
- Anwendung Optimale Formgebung: *Bletzinger* [19], *Kimmich* [54], *Becker* [10], *Belegundu, Arora* [14], *Thanedar, Arora, Tseng et. al* [100]
- Weitere Anwendungsgebiete:
  - Kontaktprobleme: *Bischoff* [16], *Barthold* [6]
  - Einspielen plastischer Materialien: *Zhang* [110], *Mahnken* [57]

Auswahl der Literatur zur Methode der mitbewegten Asymptoten (MMA):

- Theorie: *Fleury* [40] [42], *Svanberg* [98] [99], *Mahnken* [57], *Bletzinger* [20]
- Anwendung Optimale Formgebung: *Bletzinger* [19], *Kimmich* [54], *Fleury, Sander* [43], *Fleury* [41]
- Weitere Anwendungsgebiete:
  - Einspielen plastischer Materialien: *Zhang* [110], *Mahnken* [57]

Für die Einordnung der Algorithmen der mathematischen Optimierung in den Gesamtprozeß der Optimalen Formgebung sind einige Bemerkungen hilfreich.

1. Das mathematische Optimierungsproblem ist der Kern der numerischen Behandlung der Optimalen Formgebung. Damit ist die zur mathematischen Formulierung führende Modellbildung wesentlich für den Erfolg der Berechnung. Insbesondere wirken sich eine Beschränkung der Größe des Optimierungsproblems, d.h. der Anzahl der Designvariablen und der Nebenbedingungen, vorteilhaft aus.

2. Der ausgewählte Algorithmus stellt den „Motor" der gesamten numerischen Behandlung dar. Je besser der Algorithmus die im Optimierungsproblem vorhandene mathematische Struktur ausnutzt, desto schneller, d.h. in weniger Iterationsschritten, wird das Optimum erreicht.

3. Für ein vorliegendes mathematisches Optimierungsproblem sind nach der Auswahl eines geeigneten Optimierungsalgorithmus zunächst die den Verlauf der Iteration beeinflussenden Steuergrößen, d.h. Abbruchgenauigkeiten, Information zur Skalierung der Problemformulierung, Steuerung der Varianten des Algorithmus, bereitzustellen.

4. Für den Einsatz im Rahmen des Gesamtprozesses der Optimalen Formgebung ist jedoch die Einordnung des Algorithmus in die Gesamtprozeßkette von Bedeutung.

   - **Eingang in den Algorithmus der mathematischen Optimierung:** Werte, Gradienten und Hessematrizen der Zielfunktion und Nebenbedingungen für den aktuellen Vektor der Designvariablen.
   - **Ausgang aus dem Algorithmus der mathematischen Optimierung:** Vektor der verbesserten Designvariablen im Sinne eines Abstiegs der zu der Zielfunktion und Nebenbedingungen gehörenden Bewertungsfunktion des Optimierungsproblems.

5. Die Berechnung der zweiten Ableitungen der Zielfunktion und der Nebenbedingungen nach den Designvariablen, d.h. der Hessematrizen, ist eine äußerst komplexe Aufgabe, die üblicherweise in der Sensitivitätsanalyse nicht geleistet wird. Vielmehr wird in den Algorithmen der mathematischen Optimierung, z.B. dem SQP-Verfahren, eine positiv definite Approximation der Lagrangefunktion ermittelt. Aus diesem Grund versteht sich die Sensitivitätsanalyse als die Bestimmung der Werte und der Gradienten von Zielfunktion und Nebenbedingungen.

Die Bedeutung des Algorithmus der Mathematischen Optimierung für die erfolgreiche Behandlung des Strukturoptimierungsproblems sowie der zugehörige separate, modulare Baustein in der softwaretechnischen Realisation ist in der Abbildung 6.1 schematisch dargestellt.

6.2 Die Prozeßkette Optimale Formgebung

6.2.1 Übersicht

Die bei der Problemstellung Optimale Formgebung zu berücksichtigenden Bausteine (siehe Tafel 6.1) sind in geeigneter Weise zu verbinden. Aufgrund der Komplexität bereits der einzelnen Algorithmen, die sich noch durch die notwendige Interaktion erhöht, wird im weiteren von der *Prozeßkette Optimale Formgebung* gesprochen. Das Zusammenwirken der Module ist z.B. von *Eschenauer* [35] in dem *Drei-Säulen-Konzept* der Optimalen Formgebung dargelegt worden.

Für die Strukturierung der softwaretechnischen Arbeiten und der Entwicklung eigener Programmkonzepte ist zunächst die Analyse der Problemstellung und hieraus die Definition modularer Bausteine zentraler Aufgaben im Algorithmus sowie die Verdeutlichung der notwendigen Datenflüsse zwischen den Bauteilen erforderlich.

Mit den Bemerkungen des letzten Abschnittes ist die Bedeutung der richtigen Wahl eines leistungsfähigen mathematischen Optimierungsalgorithmus für den Optimierungsverlauf deutlich geworden. Im Rahmen der softwaretechnischen Konzeption bildet der Optimierungsalgorithmus ein separates Modul, das über eine (durch die mathematische Struktur vorgegebene) genau beschriebene Datenschnittstelle verfügt. Daher können unterschiedliche Algorithmen ohne Berücksichtigung der anderen Module eingesetzt werden, siehe hierzu auch *Mahnken* [57].

In Abbildung 6.1 sind die Bausteine und der Datenfluß innerhalb der Prozeßkette Optimale Formgebung dargestellt. Die Bedeutung der Algorithmen der mathematischen Optimierung und ihre separate, von den weiteren Modulen unabhängige Stellung ist dabei besonders hervorgehoben, so daß im weiteren nur noch die Interaktion zwischen Geometriemodell, Finite-Elemente-Berechnung und Sensitivitätsanalyse behandelt wird.

In dem Schema sind die Hauptbausteine und der primäre Datenfluß (in Form der eingezeichneten Pfeile) eingetragen. Dabei ist zum einen horizontal das Nebeneinander des Geometrie-, Technologie- und FE–Modells in der Beschreibung des Optimierungsproblems bedeutsam, zum anderen wird in vertikaler Richtung die Abfolge der Module und ihre gegenseitige Abhängigkeit beschrieben.

Der Optimierungsprozeß wird durch die Vorgabe eines Geometrieentwurfs gestartet und endet durch das Erreichen der geforderten Güte der Zielfunktion und Nebenbedingungen im mathematischen Optimierungsalgorithmus.

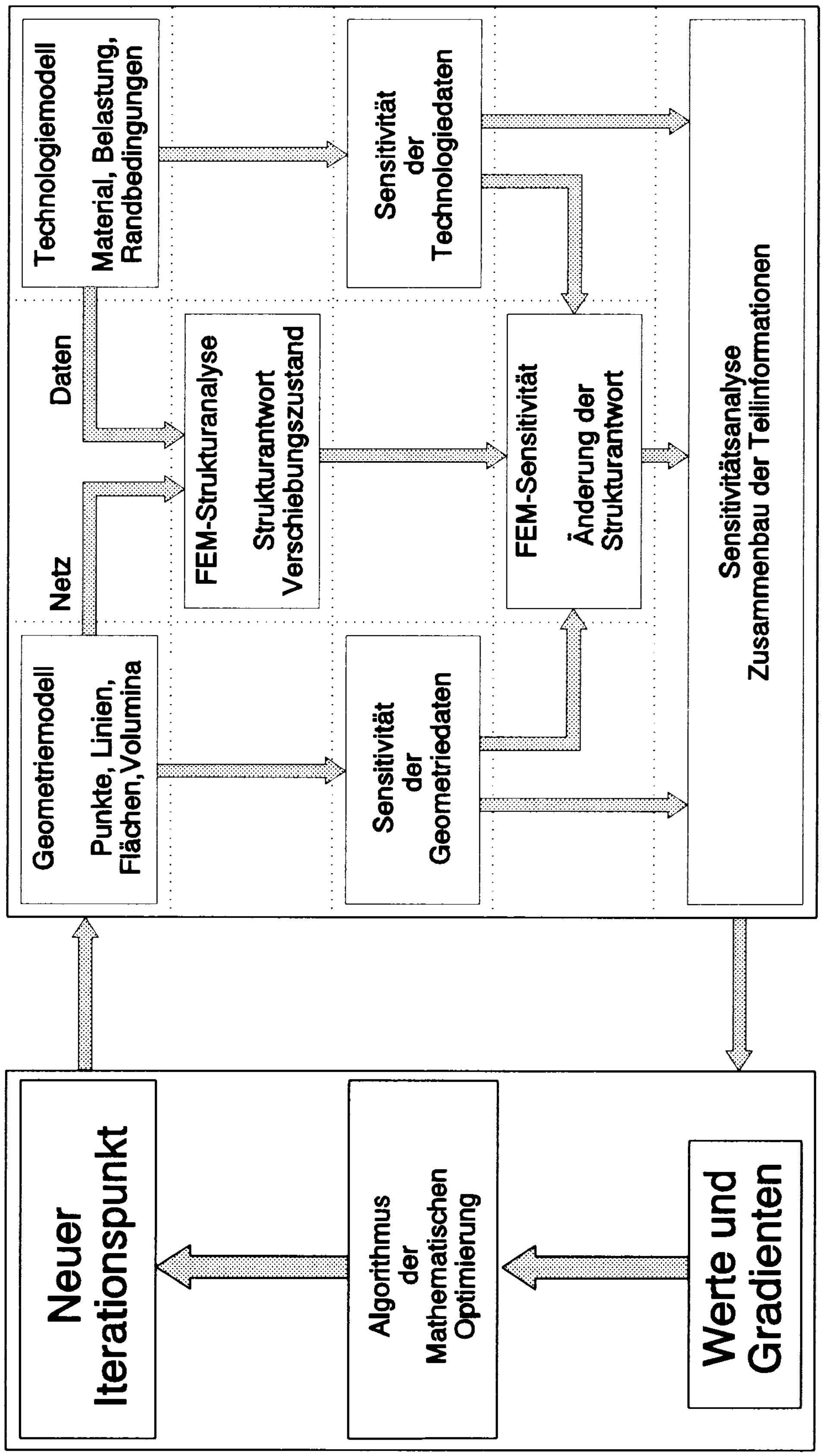

Abbildung 6.1: Baustein- und Datenflußschema der Prozeßkette Optimale Formgebung

6.2.2 Zielsetzung der softwaretechnischen Bearbeitung

Die numerische Behandlung der Strukturoptimierung erfordert aufgrund der Problemkomplexität neben der systematischen Strukturierung und Analyse der Problemstellung eine exakte Definition der eigenen Ziele unter Berücksichtigung der vorhandenen Möglichkeiten zur Umsetzung der Ziele. Dabei werden die objektiv auftretenden Vor- und Nachteile je nach Standpunkt unterschiedlich gewichtet, so daß sehr unterschiedliche Konzepte zur Behandlung entwickelt werden können, siehe hierzu auch die Diskussion in *Kimmich* [54].

Die eigene Zielsetzung sei im weiteren erläutert, wobei zunächst ausdrücklich auf den Grundlagencharakter einer Forschungsarbeit an der Universität hingewiesen wird. Die sich aus dieser Tatsache ergebende programmtechnische Konzeption muß sich in dem komplexen Arbeitsgebiet Optimale Formgebung wesentlich von den Verfahren der Industrie, die sich großer, leistungsfähiger, kommerzieller Programmpakete ohne Quellcodezugriff und Änderungsmöglichkeiten bedienen, unterscheiden.

1. **Zielsetzung:**

   (a) Grobziele:

   - Entwicklung einer Methodik zur numerischen Behandlung der Problemstellung „Optimale Formgebung“.
   - Programmtechnische Realisation innerhalb des Forschungsprogrammpaketes INA–OPT des Instituts für Baumechanik und Numerische Mechanik der Universität Hannover, die die Weiterentwicklung und die Integration der Arbeiten benachbarter Forschungsgebiete unterstützt.

   (b) Feinziele:

   - Darlegung der theoretischen Grundlagen der Strukturoptimierung.
   - Exakte Abbildung der theoretischen Beziehungen der variationellen Sensitivitätsanalyse (siehe Kapitel 5) im Programm.
   - Exakte analytische Berechnung der Gradienten unter Verzicht auf numerische Approximationstechniken, siehe hierzu z.B. *Becker* [10], *Kimmich* [54].
   - Definition von Optimierungsproblemen mit einer minimalen Anzahl von Designvariablen durch die Angabe signifikanter Entwurfsvariablen.
   - Größtmögliche Flexibilität bei der Erweiterung des Katalogs der möglichen Zielfunktionen, Nebenbedingungen und Designvariablen sowie des Katalogs der vorhandenen Elementformulierungen.
   - Berücksichtigung der Netzabhängigkeit der Strukturanalyse und der Sensitivitätsanalyse durch den Einsatz adaptiver FE–Verfahren, d.h. Netzverfeinerungsstrategien und -kriterien.
   - Ständige Kontrolle des Optimierungsprozesses durch den Ingenieur sowie die Möglichkeit interaktiver Eingriffe.

2. **Strategie:**

    (a) Entwicklung hochwertiger Beschreibungsmodelle sowie der zugehörigen Programmbausteine mit eindeutigen Datenschnittstellen.

    (b) Vermeidung von redundanten Informationen innerhalb und zwischen den einzelnen Modellen.

    (c) Beschränkung der Aufgabe des Optimierungsmodells auf die Zusammenstellung der bereits in den einzelnen Modellen enthaltenen Informationen über die Zielfunktion, Nebenbedingungen und Designvariablen sowie der Sensitivitäten.

    (d) Durch das Optimierungsmodell dürfen keine qualitativ neuen Strukturen in die Problembeschreibung eingeführt werden.

    (e) Verzicht auf „ad-hoc-Lösungen“ zugunsten einer langfristigen Programmentwicklung.

3. **Voraussetzungen:**

    (a) Die Anwendung der hochwertigen Modelle erfordert von dem qualifizierten Benutzer Kenntnisse des strukturmechanischen Verhaltens sowie eine Beurteilung des Änderungsverhaltens bei Variation der Ausgangsdaten.

    (b) Diese Informationen müssen bereits in der Konstruktionsphase und bei der Modellbildung einfließen.

    (c) Kenntnisse und Zugriffsmöglichkeiten auf den Quellcode und die Datenbasis.

    (d) Die Auswirkungen von Veränderungen innerhalb der Module müssen lokal begrenzt sein und dürfen keinen globalen Charakter besitzen. Ist dies nicht der Fall, so müssen zuerst die Modelle bzw. deren Implementation verbessert werden.

4. **Einschränkungen:**

    (a) Die Implementation umfaßt die Formoptimierung ein-, zwei- und dreidimensionaler Strukturen. Die Formoptimierung dreidimensionaler Körper ist im wesentlichen durch die Notwendigkeit eines leistungsfähigen Volumenmodellierers sowie der zugehörigen Netzgeneratoren und -verfeinerer geprägt.

5. **Konsequenzen:**

    (a) Die Realisation wird innerhalb eines integrierten Programmkonzeptes mit gemeinsamer Datenbasis durchgeführt.

    (b) Die programmtechnische Arbeit ist geprägt von der Entwicklung klarer Programm- und Datenschnittstellen innerhalb und zwischen den einzelnen Modellen und Programmbausteinen.

    (c) Auf den Einsatz nicht einsehbarer und nicht veränderbarer „black box“ Programmbausteine an zentraler Stelle im Algorithmus wird verzichtet.

6. **Programmtechnische Realisation:**

   (a) Die Definition des Optimierungsproblems (Optimierungsmodell) greift auf die Datenbasis und Datenmenge der strukturmechanischen Problemdefinition (Geometrie, Technologiedaten, Elementtypen, usw.) zurück. Den Daten werden zusätzliche, optimierungsspezifische Attribute (Kennung als Zielfunktion, Nebenbedingung, Designvariable, Schranken, Wichtungsfunktionen, etc.) zugeordnet. Damit sind sämtliche Größen der Optimierung zugänglich.

   (b) Nach Abschluß der Definition des Optimierungsproblems werden die optimierungsspezifischen Daten geordnet und komprimiert ohne Verlust an Information zusammengefaßt.

Die Konzeption und programmtechnische Realisation der numerischen Behandlung der Optimalen Formgebung basiert auf der Arbeit vieler Mitarbeiter am Institut. Die grundlegenden Strukturen des Programmpaketes INA–SP als Vorläufer zu INA–OPT wurden dabei von *Plank*, *Lambertz*, *Bischoff* siehe z.B. [72], [55], [16], [73], eingeführt. Die Anfänge der Formoptimierung am Institut gehen auf die Initiative von *Bischoff* [17] und Arbeiten von *Berkhahn* [15] und *Berkhahn, Becker* [12], [13] zurück. Die Konzeption und programmtechnische Realisation in der oben beschriebenen Form wurde auf der Grundlage der bereits von *Berkhahn* ausformulierten und realisierten Querschnittsoptimierung ab 1989 von *Becker* [10] und dem Autor entwickelt und implementiert. Hierauf aufbauend wird von *Falk*, siehe z.B. *Barthold et. al.* [8], der Einsatz von Adaptionskriterien und -strategien für die Optimale Formgebung entwickelt.

6.3 Das Geometriemodell innerhalb der Prozeßkette

In dem Geometriemodell im Programmsystem INA–OPT, das durch die Vorgehensweise des Computer Aided Geometric Design (CAGD) gekennzeichnet ist, unterscheidet zwischen

1. der Topologie der unterschiedlichen geometrischen Strukturen,
2. den Entwurfsvariablen der Konstruktion und
3. der parametrischen Darstellung

der Geometrie. Die aufgeführten Modelle sind am Beispiel einer viereckigen Fläche schematisch in Abbildung 6.2 dargestellt und werden im weiteren näher beschrieben.

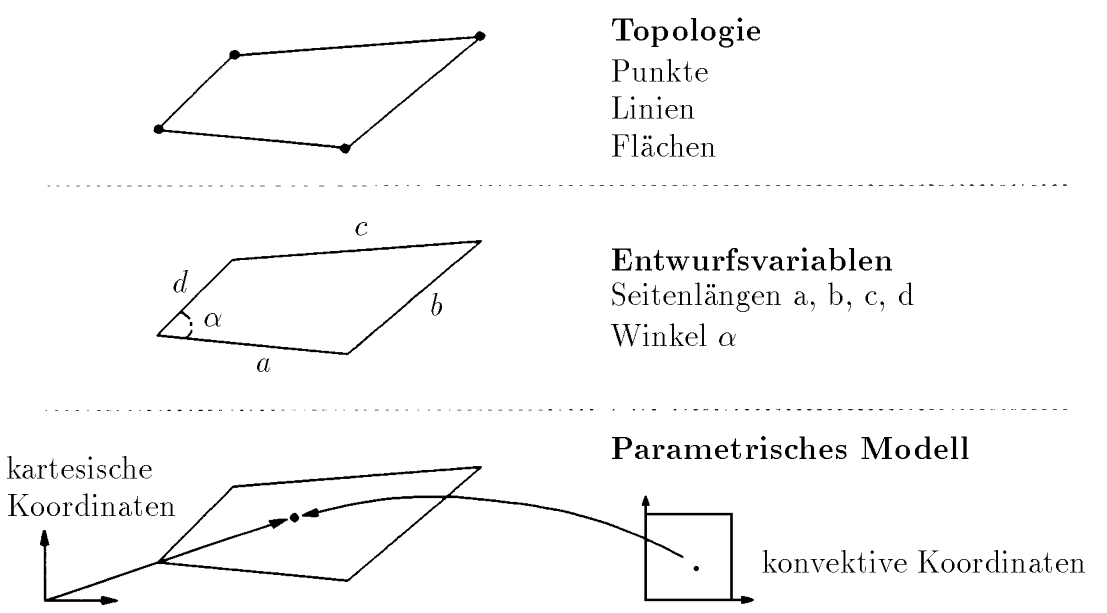

Abbildung 6.2: Beispiel für die unterschiedlichen Aspekte des Geometriemodells

6.3.1 Das Topologiemodell der Geometrie

Das Topologiemodell innerhalb von INA–OPT ist ein hierarchisches Drahtmodell, bei dem die niederdimensionalen Strukturen zur Definition der höherdimensionalen Gebilde herangezogen werden. Die topologische Hierarchie des Drahtmodells ist anschaulich in Abbildung 6.3 dargestellt.

Zusätzlich ist noch die Definition von Attributen einzelner Geomtrieelemente und deren Relationen untereinander und die Verwaltung dieser Informationen innerhalb des Modells vorgesehen.

Hierarchisches Topologiemodell

Dimension	Objekt	definiert durch	enthält Objekte niederer Dimension	
0	**Punkte**			
1	**Linien**	Randpunkte	innere Punkte	
2	**Flächen**	Randlinien	innere Linien	
			innere Punkte	(auf keiner Linie)
3	**Volumina**	Randflächen	innere Flächen	
			innere Linien	(auf keiner Fläche)
			innere Punkte	(auf keiner Linie)
				(auf keiner Fläche)

Abbildung 6.3: Das hierarchische Topologiemodell in INA–OPT

Die Definition der Designvariablen sowie der Zielfunktionen und Nebenbedingungen erfolgt unter strenger Einhaltung der oben genannten Hierarchie. Damit ist sichergestellt, daß eine große Anzahl zusätzlicher redundanter Informationen vermieden wird. Dabei ist wesentlich, daß das Topologiemodell der Geometrie während der Strukturoptimierung nicht verändert wird. Insbesondere ist nicht vorgesehen, die Elemente des Topologiemodells als Designvariablen zu definieren bzw. sie zum Bestandteil von Zielfunktion und Nebenbedingung zu machen. In diesem Sinne besteht das Topologiemodell aus qualitativen Größen, die einer Optimierung nicht zugänglich sind.

Für die numerische Behandlung der sogenannten „Topologieoptimierung", d.h. der durch Hinzufügen und Hinwegnahme topologischer Strukturen (Punkte, Linien, Flächen, Volumina) beabsichtigte Veränderung der Geometrie, ist eine Parametrisierung wesentliche Voraussetzung. Ein erfolgversprechender Ansatz stellt z.B. die Einführung einer Dichtefunktion und deren Veränderung dar. Hierbei bleibt das eingeführte topologische Modell erhalten, die „Bedeutung der Anwesenheit einzelner Geometrieelemente" wird jedoch mittels der kontinuierlichen Dichtefunktion gewichtet. Reduziert sich der Einfluß einzelner Bauteile, d.h. werden diese Strukturen nicht wesentlich zum Lastabtrag benötigt, so wird dies durch die Dichtefunktion angezeigt und in einem weiteren Schritt kann der optimierende Ingenieur bzw. ein Algorithmus innerhalb des Programmsystems diese Bauteile tatsächlich aus dem topologischen Modell entfernen.

Gemäß dem Grundsatz, durch das Optimierungsmodell keine zusätzlichen neue Strukturen einzuführen, sind auch im Optimierungsmodell nur die Effekte zu erzielen, die grundsätzlich durch die Geometriebeschreibung, in diesem Fall durch das Topologiemodell, ermöglicht sind.

6.3.2 Das Entwurfsvariablenmodell der Geometrie

Das Entwurfsvariablenmodell beschreibt nach der qualitativen Definition der Topologie die genaue Struktur des betrachteten Körpers. Die Beschreibung erfolgt dabei in den Größen, die dem Konstrukteur die Anschauung und damit die Arbeit wesentlich erleichtern. Dies sind insbesondere Längen, Winkel, Radien und Verhältnisse zwischen diesen Größen. Damit handelt es sich um quantitative Größen, die einer Veränderung und damit der Optimierung zugänglich sind. In diesem Sinne stellt das Entwurfsvariablenmodell den Raum der möglichen (geometrischen) Designvariablen dar. Die direkt von den Designvariablen abhängigen Entwurfsvariablen werden im weiteren mit $\gamma = \hat{\gamma}(s)$ bezeichnet.

Auch hier ist wieder zu erwähnen, daß nur eine bereits durch den Entwurf eingeführte Größe als Designvariable definiert werden kann. Dies führt zu der Schlußfolgerung das nur ein hochwertiges Entwurfsvariablenmodell mit großen Beschreibungsmöglichkeiten bei minimaler Anzahl von Parametern (Entwurfsvariablen) eine erfolgreiche und numerisch effiziente Optimierung verspricht.

6.3.3 Das parametrische Modell der Geometrie

Das Entwurfsvariablenmodell stellt die Menge der möglichen Designvariablen dar, ist jedoch für den weiteren Verlauf der Behandlung, insbesondere für die Abbildung der theoretischen Überlegungen des Kapitels 5 in das numerische Modell, nicht ausreichend. Hierzu ist aus dem Entwurfsvariablenmodell durch Parametrisierung der Geometrie eine Beschreibung zu entwickeln, die sowohl für die Generierung bzw. Verfeinerung der Netze als auch für die notwendige Modifikation der Netze bei Veränderung der Entwurfsvariablen benötigt wird und die einfache Berechnung der Sensitivitäten zuläßt.

Diese Forderung führt zu der analogen parametrischen Beschreibung der Geometrie wie sie für die Konfiguration $\mathbf{B}^s_\circ$ des materiellen Körpers vorgenommen wurde, d.h. für die Punkte der Geometrie gelte die Beziehung

$$\boxed{\psi_\circ : \left\{ \begin{array}{ccl} T_\Theta \times T_s & \to & I\!R^3 \\ (\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s) & \mapsto & \mathbf{X} = \psi(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s). \end{array} \right.} \tag{6.1}$$

Dies ist ja auch natürlich, da es sich bei der Geometriebeschreibung innerhalb des CAGD–Modells um nichts anderes handelt als die softwaretechnische Umsetzung des Begriffes „Konfiguration eines materiellen Körpers“, siehe Kapitel 2. Insbesondere sei darauf verwiesen, daß sich die Darstellung der Konfiguration eines materiellen Körpers als differenzierbare Mannigfaltigkeit (im Riemannschen Sinne) in der Flächen- bzw. Volumenbeschreibung des CAGD–Programms in der Form des CAD–Patches als Karte im Atlas der Mannigfaltigkeit wiederfindet.

Damit werden geometrische Strukturen, die sich nicht als differenzierbare Mannigfaltigkeit darstellen lassen, zunächst nicht betrachtet. Für die hier betrachtete Optimierung von Flächenstrukturen stellt dies keine wesentliche Einschränkung dar.

Im Rahmen der programmtechnischen Realisation ist die Form der Abbildung $\psi_\circ$ nach Gleichung (6.1) bzw. (5.7) noch genauer anzugeben. Hierzu eignet sich die Darstellung in der Form

$$\boxed{\mathbf{X} = \psi_\circ(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3, s) = \sum_{i=1}^{n} \hat{M}_i(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3)\, \mathbf{Y}_i,} \tag{6.2}$$

in der die Funktionen $M_i = \hat{M}_i(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3)$ die Gestaltsfunktionen bezeichnen und $\mathbf{Y}_i = \hat{\mathbf{Y}}_i(s)$ die sogenannten Kontrollpunkte darstellen. Während die Gestaltsfunktionen nur von den konvektiven Koordinaten $\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3$ abhängen, wird die Form der geometrischen Struktur von den Werten der Kontrollpunkte $\mathbf{Y}_i$ beeinflußt. Diese Kontrollpunkte verändern sich mit dem gewählten Design, d.h. sie sind abhängig von den Designvariablen, wobei die Abhängigkeit implizit über die Abhängigkeit der Kontrollpunkte $\mathbf{Y}$ von den Entwurfsvariablen $\gamma = \hat{\gamma}(s)$ besteht, d.h.

$$\mathbf{Y}_i = \hat{\mathbf{Y}}_i(s) = \tilde{\mathbf{Y}}_i(\hat{\gamma}(s)).$$

6.4 Die Strategie der Netzveränderung innerhalb der Prozeßkette

Die grundlegenden Überlegungen zur Erzeugung eines Finite-Elemente-Netzes und dessen Modifikation bei Veränderung der Designvariablen werden an dieser Stelle angesprochen. Für die Grundlagen der im Programmsystem INA–OPT eingesetzten Netzverfeinerungsstrategien siehe die Arbeiten von *Plank* [72], *Rust* [80].

1. Der im Programmpaket INA–OPT vorhandene Netzgenerierer und Netzverfeinerer greift auf die parametrische Geometriebeschreibung zurück, d.h. für die Geometriedarstellung nach (6.1) werden zunächst durch Indikation der a-priori und a-posteriori Adaptionskriterien die konvektiven Koordinaten $\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3$ der neugenerierten Knoten berechnet. Dies ist der eigentliche Erzeugungs- bzw. Verfeinerungsschritt. Dabei sind die geometrischen Verfeinerungskriterien in den kartesischen Koordinaten formuliert, während die Verfeinerungsstrategie auf der Basis der konvektiven Koordinaten arbeitet. Die konvektiven Koordinaten der Knoten sind nach ihrer Erzeugung im Verlauf der weiteren Berechnung unveränderlich und werden in der Datenbasis abgelegt.

2. Die kartesischen Koordinaten der FE-Knoten werden anschließend durch Auswertung der obigen Beziehung ermittelt. Die kartesischen Koordinaten ändern sich mit der Veränderung der Designvariablen.

3. Für das Nachziehen des FE–Netzes muß zunächst die parametrische Geometriebeschreibung dem modifizierten Design angepaßt werden, d.h. aus den veränderten Designvariablen ergeben sich neue Entwurfsvariablen $\gamma = \hat{\gamma}(s)$ die im Übergang zum parametrischen Modell modifizierte Werte der Kontrollpunkte und Kontrollvariablen $\mathbf{Y}_i = \hat{\mathbf{Y}}_i(\hat{\gamma}_1(s), \hat{\gamma}_2(s), \ldots)$ hervorrufen. Damit kann die Berechnung der neuen Lage der FE-Knoten wieder durch Auswertung der Gleichung (6.1) erfolgen.

4. Die Sensitivität der FE–Knoten wird aus der Sensitivität der Kontrollpunkte $\mathbf{Y}_i$ in der Form

$$\boxed{\frac{d\mathbf{X}}{ds} = \sum_{i=1}^{n} \hat{M}_i(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3)\,\frac{d\mathbf{Y}_i}{ds}} \tag{6.3}$$

   ermittelt. Hierbei ist wesentlich, daß sich die Werte der Gestaltsfunktionen $M_i = \hat{M}_i(\Theta^1, \Theta^2, \Theta^3)$ nicht verändern.

5. Der oben beschriebene Ablauf der Netzmodifikation garantiert durchdringungsfreie Elementnetze solange der CAD-Patch der Geometrie selbst durchdringungsfrei ist. Bei großen Gestaltsänderungen können stark gestörte Elementformen entstehen. In diesem Fall sind folgende drei wesentliche Eingriffsmöglichkeiten vorhanden:

   (a) Neuvernetzung der modifizierten Geometrie,

   (b) Einsatz geometrischer Kriterien auf der Grundlage der modifizierten Geometrie,

(c) Netzvergröberungsstrategien.

Für den Algorithmus der mathematischen Optimierung bedeuten alle Vorgehensweisen einen Restart im letzten Iterationspunkt, da durch die qualitative Änderung des FE-Netzes das Optimierungsproblem sich geändert hat.

6.5 Die Finite-Elemente-Strukturanalyse und die zugehörige Sensitivität innerhalb der Prozeßkette

Die Datenschnittstelle zwischen dem Geometriemodell und dem Netzgenerator bzw. –verfeinerer auf der einen Seite und dem FE–Strukturanalyse–Modul auf der anderen Seite überträgt zum FE-Modul im wesentlichen

1. die FE–Netz–Topologie,
2. die Koordinaten der FE–Knoten.

Darüberhinaus sind die Technologiedaten für die Berechnung erforderlich.

Für die Sensitivitätsberechnung der Größen der FE–Strukturanalyse (Verschiebungen, Verzerrungen, Spannungen) sind die Sensitivitäten der Eingangsgrößen des FE–Modells anzugeben, d.h. im Rahmen unserer Konzeptentwicklung und –implementation gelten die folgende Bemerkungen.

1. Die FE–Netz–Topologie ist im Rahmen der Prozeßkette Optimale Formgebung nicht durch die Wahl von Designvariablen veränderbar, d.h. zur Elementtopologie treten keine zugehörigen Sensitivitäten auf. Die Modifikation der FE–Netze durch den kontrollierenden Benutzer bzw. durch den Automatismus wiederholter Anwendung a–priori Kriterien stellt jeweils den Beginn einer neuen Berechnung mit modifizierter Problemstellung dar. Eine Modifikation der Elementtopologie durch eine Optimierungsaufgabe ist erst nach erfolgreicher Parametrisierung der FE–Netz–Topologie möglich.
2. Die Sensitivität der FE–Knotenkoordinaten ist im Rahmen der Anpassung des FE–Netzes an die modifizierte Geometrie berechnet worden. Die Weitergabe dieser Information stellt die wesentliche Erweiterung der bisherigen Datenschnittstelle zum FE–Modul für die Sensitivitätsberechnung dar.
3. Weiterhin sind die Sensitivitäten der Größen des Technologiemodells durch die modifizierte Datenschnittstelle in das FE–Modul zu übertragen.

Damit ist für die Sensitivitätsanalyse eine exakt definierte Datenschnittstelle beschrieben. Die Leistungsfähigkeit der FE–Sensitivitätsanalyse kann durch den Zugriff auf die Gesamtinformation des Optimierungsproblems in allen Teilmodellen noch erhöht werden. Grundsätzlich ist der Einfluß einer Designvariablen zunächst nur auf die Geometrieobjekte (Punkt, Linie, Fläche) begrenzt, deren Zweig ihr definierendes Objekt in der Geometrietopologiestruktur angehört. Der Einflußbereich kann sich z.B. durch die definierten Relationen unter den Objekten noch vergrößern, bleibt in den meisten Fällen jedoch auf Teilstrukturen der Geometrie begrenzt. Somit werden bei der FE–Sensitivitätsanalyse auch nur die finiten Elemente dieser Teilstrukturen von einer Änderung der betrachteten Designvariablen beeinflußt. Die Berücksichtigung dieser Information vermeidet die unnötige Berechnung überflüssiger Daten und verkürzt somit die Rechenzeit. Eine effiziente Steuerung der FE–Sensitivitätsanalyse erfordert den Zugriff auf die Datenbasis des Geometrie- und Optimierungsmodells wie sie im Programmsystem INA–OPT implementiert ist.

In Kapitel 5 konnte für die Berechnung hyperelastischer Materialien gezeigt werden, wie sich die Sensitivität aller kontinuumsmechanischen Größen auf die Sensitivität der FE–Knotenkoordinaten und der Technologiedaten zurückführen läßt. Damit kann für die weitere Entwicklung der FE–Module auch im kommerziellen Bereich die folgende Konzeption aufgestellt werden.

Tafel 6.4: Strategievorschlag für die Softwareentwicklung innerhalb des FE–Berechnungsmoduls

- Eingang durch die bestehende Schnittstelle:
  - Netz–Topologie,
  - Netz–Koordinaten und
  - Technologiedaten.
- Zusätzlicher Eingang durch die Erweiterung der Schnittstelle:
  - Sensitivität der Netzkoordinaten und
  - Sensitivität der Technologiedaten
- Analytische Gradientenermittlung auf Elementebene als Erweiterung des Standards der Elementformulierung, d.h.
  - Zusätzlicher Eingang auf Elementebene:
    - Sensitivität der Knotenkoordinaten und
    - Sensitivität der Materialwerte des betrachteten Elementes
  - Zusätzlicher Ausgang auf Elementebene:
    - partielle Ableitung des Elementresiduums nach den Designvariablen und
    - die elementbezogenen Anteile der Zielfunktion und Nebenbedingungen sowie die partiellen Ableitungen nach der Designvariablen und den Verschiebungen.
- Ausgang durch die bestehende Schnittstelle:
  - Spannungen zur graphischen Darstellung.
- Zusätzlicher Ausgang durch die modifizierte Schnittstelle:
  - partielle Ableitung des Gesamtresiduums und
  - die Werte und Ableitungen der Zielfunktion und Nebenbedingung des FE–Modells.