



Zentrum für Technomathematik
Fachbereich 3 – Mathematik und Informatik

**Zu einem neuen Ansatz zur
Parameterbestimmung in der Mechanik
der Festkörper**

M. Wolff

M. Böhm

Report 13–03

Berichte aus der Technomathematik

Report 13–03

July 2013

Zu einem neuen Ansatz zur Parameterbestimmung in der Mechanik der Festkörper

M. Wolff, M. Böhm
Zentrum für Technomathematik, Universität Bremen

Zusammenfassung

“Klassische” Methoden zur Bestimmung von Materialparametern für das mechanische Verhalten von Festkörpern nutzen i.d.R. Experimente mit allgemein kleinen Probekörpern unter *homogenen* Spannungs- und Deformationszuständen. Bei inhomogenen und/oder anisotropen Materialien treten hierbei größere Schwierigkeiten auf, so dass seit etwa zwanzig Jahren nach Alternativen gesucht wird. Diese bestehen darin, mögliche Inhomogenitäten und Anisotropien schon in den Methoden der Parameteridentifizierung zu berücksichtigen, indem die Probekörper selbst als drei- oder zwei-dimensionale Festkörper betrachtet werden, bei denen sich im Experiment allgemein inhomogene Zustände einstellen können. Charakteristisch für diese Ansätze ist, dass im Experiment mehr Informationen gewonnen werden, als zur Berechnung des Spannungs- und Deformationszustandes bei bekanntem Materialverhalten nötig wären. Diese zusätzlichen Informationen werden benutzt, um nicht oder nur ungenau bekannte Materialparameter zu bestimmen. Im Prinzip berechnet man mit einem Teil der experimentell gewonnenen Informationen die übrigen Informationen und vergleicht sie mit ihrem experimentell ermittelten Gegenstück. Die Minimierung (“Fitting”) dieser Abweichung ist dann Grundlage für das Finden optimaler Materialparameter. In einer aktuellen Arbeit von Yun und Shang (IJP, 27, 2011) wurde ein neuer Ansatz vorgestellt, bei dem berechnete mit ebenfalls berechneten Werten (im Innern des Bauteiles) verglichen werden, was auch eine Einbeziehung von allgemein schwer messbaren Zuständen im Inneren des Körpers in die Parameteroptimierung ermöglicht. Ziel der vorliegenden Studie ist es, diesem Ansatz einen mathematischen Rahmen im Umfeld der Theorie schwacher Lösungen partieller Differentialgleichungen zu geben und erste Resultate zu beweisen.

1 Einführung

Die Bestimmung von Materialparametern (Parameteridentifikation) kann in einigen einfachen Fällen direkt mit den Versuchsdaten erfolgen, wie z.B. im Falle des Elastizitätsmoduls. Dabei werden ein homogener Zustand der Probe zumindest über den Messbereich sowie isotropes Verhalten vorausgesetzt. In allgemeiner Situation mit mehreren Parametern versagt ein solches “Hand-Fitting” (Mahnken (1998)) häufig. Bei komplexem Materialverhalten (z.B. Elastoplastizität mit Verfestigung) kann bei *isotropem* Materialverhalten eine Parameteridentifikation mit hinreichendem Erfolg auf der Basis von ein- und zweiachsigen Versuchen mit kleinen (meist zylindrischen oder hohlzylindrischen) Probekörpern in speziellen Testmaschinen (z.B. Gleeble[®]) durchgeführt werden. In Mahnken und Stein (1996a) wurde ein allgemeiner Algorithmus für einachsige Versuche mit viskoplastischen Materialien entwickelt. Spezielle Methoden, die auf zyklische Plastizität und Ratcheting in zweiachsigen Versuchen Bezug nehmen, finden sich z.B. in Bari und Hassan (2000), Abdel-Karim (2005), Taleb und Cailletaud (2010), Djimli et al. (2010). In Wolff et al. (2012) wurde ein semi-impliziter Algorithmus für die Auswertung einachsiger Versuchsdaten für Kriechen und Umwandlungsplastizität beim Stahl entwickelt. Liegt anisotropes und/oder inhomogenes Materialverhalten vor, erwachsen größere Schwierigkeiten. Es können unterschiedliche Versuche mit speziell gefertigten Proben durchgeführt werden, die die zu erwartete Anisotropie im Material berücksichtigen. Wir verweisen hierzu exemplarisch auf Noman et al. (2010) und Pietryga et al. (2012). Eine Alternative zu diesen Ansätzen besteht darin, die Probekörper als zwei- oder dreidimensionale Bauteile zu betrachten, ihr Verhalten mit partiellen Differentialgleichungen zu modellieren und entsprechende zwei- bzw. dreidimensionale Rechnungen durchzuführen.

Mathematisch gesehen erfolgt die Parameteridentifikation in der Regel über die Lösung eines inversen Problems. Bei der direkten Aufgabe sind das bestimmende Gleichungssystem (gewöhnliche, partielle oder Integralgleichungen) einschließlich der Koeffizienten sowie Rand- und Anfangsbedingungen bekannt und die Lösung ist zu bestimmen. In den Anwendungen sind die Koeffizienten(-funktionen) meist Material- oder Prozessparameter, die bei der direkten Aufgabe als bekannt angenommen werden. Bei der inversen

Aufgabe sind die Lösung (bei Anwendungen meist nur Teile derselben), Rand- und Anfangsbedingungen bekannt, die Gleichungen jedoch nur in ihrer Struktur ohne Kenntnis einzelner oder aller Koeffizienten(-funktionen), die jetzt zu bestimmen sind. Dabei sind mehr Informationen bekannt als zur Lösung der direkten Aufgabe erforderlich wäre. Diese zusätzlichen Informationen ermöglichen die Lösung der inversen Aufgabe. Auf diesen Aspekt gehen wir weiter unten genauer ein. Bei den Anwendungen liegt die Lösung in Gestalt von Versuchsdaten vor, mit deren Hilfe die Parameter zu identifizieren sind. Wir verweisen exemplarisch auf Bard (1974), Banks und Kunisch (1989), Bui und Tanaka (1994), Mahnken und Stein (1996a). In Mahnken (2004) wird auf Probleme eingegangen, die bei der Parameteridentifizierung entstehen können, wie etwa "Überparametrisierung" oder Daten, die aus ungünstig konzipierten Versuchen stammen, bei denen die zu untersuchenden Phänomene nicht oder nur ungenügend aktiviert werden.

Neben der Bestimmung der eigentlichen Materialparameter bzw. -Funktionen ist es oft von großer Wichtigkeit, Prozessparameter, z.B. Wärmeübergangskoeffizienten, zu finden, um nach dem Produktionsprozess (z.B. Abschrecken) möglichst geringe Abweichungen von der gewünschten Geometrie der Bauteile (wenig "Verzug") zu erhalten. Hierzu sei exemplarisch auf Alder et al. (2006), Hömberg und Weiss (2006), Kern (2011) sowie Liščić (2009) und Liščić et al. (2011) verwiesen. Mathematisch verwandt mit den Aufgaben zur Parameterbestimmung sind auch Steuerungsprobleme (vgl. z.B. Tröltzsch (2009)) bei Aufgaben aus der Festkörpermechanik, wie sie etwa in Herzog et al. (2012), Herzog et al. (2013) untersucht werden.

Bei der Lösung inverser Aufgaben stellen sich vielfältige mathematische Herausforderungen, sowohl nach Existenz und Einzigkeit von Lösungen der direkten und der inversen Aufgabe als auch in Bezug auf die Entwicklung numerischer Verfahren zur näherungsweise Berechnung. Die zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen werden in aller Regel in Ort und Zeit diskretisiert und oft mit der Methode der Finiten Elemente näherungsweise gelöst, wobei bei Bedarf adaptive Verfahren zum Einsatz gelangen. Hierzu sei z.B. auf Vexler (2004), Meidner (2008) und die dortigen Quellen verwiesen. Zu inversen Problemen in der Mechanik sei auf den Übersichtsartikel von Kajberg et al. (2004), Bonnet und Constantinescu (2005) sowie z.B. auf Grédiac und Pierron (2006), Avril und Pierron (2007), Lecomte et al. (2007), Cooreman et al. (2007), Kajberg und Wikman (2007) verwiesen.

Es wurde bereits darauf hingewiesen, dass zur Lösung der inversen Aufgabe bzw. zur Parameteridentifikation bei den Anwendungen mehr Information nötig ist, als zur Lösung der direkten Aufgabe bei angenommener Kenntnis der Parameter erforderlich wäre. Diese zusätzliche Information kann z.B. bei Aufgaben aus der Mechanik darin bestehen, dass auf Teilen des Randes des untersuchten Bauteiles sowohl die Spannung als auch die Verschiebung bekannt sind. Wird z.B. die direkte Aufgabe mit den Spannungen auf diesem Teil des Randes gerechnet, so könnten die berechneten Verschiebungen auf diesem Randstück mit den gemessenen verglichen werden. In den letzten Jahren haben sich die technischen Voraussetzungen für berührungsfreie optische Messverfahren sowie die Möglichkeiten zur entsprechenden Auswertung der großen anfallenden Datenmengen stark entwickelt (vgl. etwa Avril et al. (2008a) und die dort aufgeführten Quellen). Daraus ergibt sich die Möglichkeit, die Parameter über den Vergleich zwischen berechneten und (auf Teilen der Oberfläche) gemessenen Größen (z.B. Verschiebungen) in einem Optimierungsverfahren zu bestimmen. In Widany und Mahnken (2012) erfolgt auf dieser Grundlage die Parameteridentifikation für ein inkompressibles hyperelastisches Material, in Mahnken und Dammann (2013) für ein ursprünglich isotropes Polymer, das eine dehnungs-induzierte Anisotropie entwickelt. In speziellen Situationen, z.B. bei dünnen, durchsichtigen Proben ist es auch möglich, Deformationen im Inneren zu messen und für die Parameteridentifizierung zu nutzen ("full-field method", s. z.B. Avril und Pierron (2007), Avril et al. (2008b)).

Der Ansatz, zusätzliche Informationen auf dem Rand zur Lösung inverser Aufgaben zu nutzen, findet auch in anderen Bereichen Anwendung. Es sei z.B. auf Jin und Maaß (2012) und Gehre et al. (2012) zu Theorie und Anwendung der Impedanz-Tomographie verwiesen.

Liegt Materialverhalten vor, bei dem noch ein eindeutiger Zusammenhang zwischen Spannungen und Verzerrungen besteht, wie bei der linearen und nichtlinearen Elastizität in kleinen und großen Deformationen, so genügt es, stationäre Aufgaben (direkte und inverse) zu rechnen. Plastisches oder visko-plastisches Materialverhalten führt hingegen auf instationäre Aufgaben mit größeren mathematischen Herausforderungen als auch mit größerem experimentellen Aufwand.

In Yun und Shang (2011) wurde eine neue Methode vorgeschlagen und auf die zyklische Elastoplastizität angewendet. In Shang und Yun (2012) wurde sie weiter experimentell verifiziert. Dabei wird die auf einem Teil des Randes des Bauteiles im Experiment erhaltene doppelte Information genutzt, um die Ergebnisse von zwei parallelen Rechnungen im Inneren des Bauteils als Grundlage für die Parameteridentifikation zu nehmen. Die Autoren nennen ihre Methode "Self-OPTIM" für "selbstoptimierende inverse Analyse-Methode", da im ablaufenden Algorithmus der Vergleich der Ergebnisse der parallelen

Rechnungen das Bewertungskriterium darstellt und nicht ständig mit den gemessenen Daten verglichen wird. Diese Daten erscheinen nur als Randbedingungen für die Rechnungen. Das Kostenfunktional ist in diesem Sinne implizit (s. Shang und Yun (2012) für weitere Erläuterungen). Ein solches Herangehen, das berechnete Größen im Innern des Bauteiles vergleicht, scheint besonders angebracht bei inhomogenen Zuständen und anisotropem Materialverhalten.

Ziel dieser Studie ist es, dem von Yun und Shang (2011) vorgeschlagenen Ansatz eine strenge mathematische Form im Rahmen der schwachen Lösungstheorie partieller Differentialgleichungen zu geben und einige Ergebnisse für die inverse Aufgabe zu beweisen. Diskretisierungsmethoden (z.B. Finite Elemente) werden in dieser Arbeit nicht betrachtet, obwohl ihre große Wichtigkeit für die numerische Umsetzung und die praktische Anwendung außer Frage steht. Die Arbeit gliedert sich wie folgt.

- (i) Im Abschnitt 2 wird das allgemeine Konzept dieses Ansatzes anhand der stationären Aufgabe vorgestellt.
- (ii) Abschnitt 3 ist den direkten Aufgaben der linearen, allgemein anisotropen und inhomogenen Elastizitätstheorie gewidmet. Die dort aufgeführten Resultate sind weitgehend bekannt und dienen als Vorbereitung für die folgenden Untersuchungen der inversen Aufgaben. Zusätzlich können diese Ergebnisse auch Zwischenschritte bei der Untersuchung allgemeinen inelastischen Verhaltens in quasi-stationären Aufgaben sein.
- (iii) Im Abschnitt 4 erfolgen die Formulierung der inversen Aufgabe mit einem allgemeinen Kostenfunktional, das viele Möglichkeiten von situationsabhängigen Spezialisierungen bietet. Wir formulieren "kontinuierliche" Ansätze mit Integraltermen, im Gegensatz zu Yun und Shang (2011), wo das Kostenfunktional unter Benutzung der Diskretisierung definiert wird.
- (iv) Zur inversen Aufgabe werden im Abschnitt 5 Resultate zur Existenz eines globalen Minimums von Kostenfunktionalen bewiesen. Außerdem werden notwendige und hinreichende Kriterien für lokale Minima mit Hilfe von Fréchet-Differenzialen bereitgestellt.
- (v) Ein Ausblick in Abschnitt 6 beschließt die Arbeit.

2 Allgemeines Konzept des Ansatzes von Yun und Shang

Im Folgenden geht es darum, die Idee von Yun und Shang (2011) (s. auch Shang und Yun (2012)) in einen präzisen mathematischen Rahmen zu bringen: Gegeben sei ein dreidimensionaler Festkörper, der eine Probe oder ein Bauteil im Versuch darstellt. Seine Referenzkonfiguration sei mit $\Omega \in \mathbb{R}^3$ bezeichnet. In dieser Arbeit betrachten wir nur den dreidimensionalen Fall, obwohl auch zweidimensionale Ansätze möglich sind.

Die direkten Aufgaben zur Bestimmung der Verschiebungen in der linearen und nichtlinearen Elastizitätstheorie in kleinen sowie großen Deformationen gelten als gut gestellt, so z.B. für gemischte Randbedingungen. Dabei werden auf einem Teil des Randes $\Gamma_0 \subset \partial\Omega$ der Verschiebungsvektor und auf dem alternativen Teil $\Gamma_1 := \partial\Omega \setminus \Gamma_0$ die (Normal-)Spannung vorgegeben. Sind aus Experimenten auf Teilen des Randes sowohl Verschiebungen als auch Spannungen bekannt, so lassen sich zwei alternative direkte Aufgaben formulieren. Ein Vergleich ihrer Ergebnisse kann dann Grundlage für eine Parameteroptimierung sein. Bei allgemeinem, inelastischem Materialverhalten gibt es keinen eindeutigen Zusammenhang zwischen Spannung und Verzerrung, so dass anstelle von stationären instationäre Aufgaben zu lösen sind, was die Komplexität, insbesondere der durchzuführenden Rechnungen erhöht.

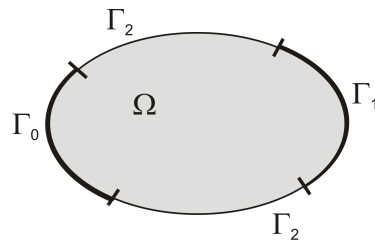


Abbildung 1: Schema eines dreidimensionalen Festkörpers im Versuchsaufbau: Der Teil Γ_0 des Randes $\partial\Omega$ ist fest, Γ_2 ist frei, auf Γ_1 sind Spannung und Verschiebung aus dem Experiment bekannt.

Der Rand $\partial\Omega$ zerfalle in drei disjunkte Teile: Γ_0 , Γ_1 und Γ_2 (s. Bild 1). Auf Γ_0 sei die Verschiebung \mathbf{u}

vorgegeben, aus Gründen der besseren Übersicht sei sie gleich null (“feste Einspannung”), auf Γ_2 sei die (Normal-)Spannung vorgegeben, ebenso sei diese als gleich null angenommen (“freier Rand”). Schließlich seien auf Γ_1 sowohl die Spannung als auch die Verschiebung bekannt - durch geeignete Messung im Experiment, wobei auch hier die Spannung null sein kann. Werden auf Γ_1 *alternativ* die Spannung und die Verschiebung als gegeben angesehen, so ergeben sich *zwei* Aufgaben, die zur Parameteroptimierung genutzt werden können. Bei praktischen Anwendungen liegen die Messdaten in diskreter Form vor. Durch geeignete Interpolation können aus ihnen kontinuierliche Funktionen gewonnen werden. In dieser Arbeit gehen wir auf diesen Aspekt nicht näher ein und nehmen an, dass die auftretenden Größen als Funktionen vorliegen. Im weiteren seien

- (2.1) $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ beschränktes Lipschitz-Gebiet,
(2.2) $\Gamma_0, \Gamma_1, \Gamma_2 \subset \partial\Omega$ paarweise disjunkt,
(2.3) Γ_0, Γ_2 abgeschlossen mit positivem Oberflächenmaß.

Im Rahmen kleiner Deformationen betrachten wir die folgenden beiden Aufgaben:

Aufgabe I (“displacement-driven”)

- (2.4) $-\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{f}$ in Ω ,
(2.5) $\mathbf{u} = 0$, auf Γ_0 ,
(2.6) $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n} = 0$ auf Γ_2 ,
(2.7) $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$ auf Γ_1 .

Aufgabe II (“traction-driven”)

- (2.8) $-\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{f}$ in Ω ,
(2.9) $\mathbf{u} = 0$, auf Γ_0 ,
(2.10) $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n} = 0$ auf Γ_2 ,
(2.11) $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n} = \boldsymbol{\tau}$ auf Γ_1 .

Es sind: $\boldsymbol{\sigma}$ - (Cauchyscher) Spannungstensor, \mathbf{u} - Verschiebungsvektor, $\bar{\mathbf{u}}$ - Verschiebungsvektor auf Γ_1 , $\boldsymbol{\tau}$ - Kraftdichte (Spannung) auf Γ_1 , \mathbf{f} - Volumendichte der äußeren Kräfte, \mathbf{n} - äußerer Normalenvektor an $\partial\Omega$. Oft wird statt \mathbf{f} auch $\varrho\bar{\mathbf{f}}$ geschrieben, mit der Massendichte in der Referenzkonfiguration ϱ sowie mit der Massendichte der äußeren Kräfte $\bar{\mathbf{f}}$ (z.B. Gravitationsbeschleunigung). Obwohl bei vielen Experimenten der Einfluss der Gravitation gering ist, lassen wir aus mathematischen Gründen eine allgemeine rechte Seite in (2.4) und (2.8) zu.

Um die Aufgaben (2.4) – (2.7) bzw. (2.8) – (2.11) zu lösen, d.h. ein Verschiebungsfeld \mathbf{u} zu bestimmen, das den gestellten Gleichungen und Bedingungen genügt, bedarf es noch eines Materialgesetzes. Ist ein solches gegeben, sprechen wir von den direkten Aufgaben. Sind die Parameter des Materialgesetzes nicht oder nur ungenau bekannt, dafür aber die Randbedingungen (2.7) und (2.11) bekannt, so führt das auf eine inverse Aufgabe zur Bestimmung der Parameter.

Wir betrachten im Weiteren zuerst lineares, allgemein anisotropes und inhomogenes elastisches Materialverhalten. Im Abschnitt 6 wird kurz auf inelastisches Verhalten im quasi-stationären Fall eingegangen.

3 Direkte Aufgaben der linearen Elastizitätstheorie

3.1 Vorbereitungen

Wir nehmen das folgende lineare Materialgesetz an (weiterhin im Rahmen kleiner Deformationen):

$$(3.1) \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{E}\boldsymbol{\varepsilon}.$$

Dabei ist $\boldsymbol{\varepsilon}$ der gemäß

$$(3.2) \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) := \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T).$$

definierte linearisierte Cauchy-Greensche Verzerrungstensor. Mit \mathbb{E} sei der vierstufige Elastizitätstensor bezeichnet, der im allgemeinen Fall $n_{ai} = 21$ unabhängige Einträge (von insgesamt 81) hat (s. z.B. Haupt

(2002), Bertram und Glüge (2013)). (Der Index ai ist durch ‘‘anisotrop’’ motiviert.) Für die Zahl n_{ai} der unabhängigen Einträge sind sieben Werte mechanisch relevant, die für acht Symmetriegruppen stehen (s. z.B. Bertram und Glüge (2013))

$$(3.3) \quad n_{ai} \in \{2, 3, 5, 6, 9, 13, 21\}.$$

Im räumlich homogenen Fall sind alle Einträge von \mathbb{E} konstant und es gilt der Zusammenhang

$$(3.4) \quad \mathbb{E} \in \text{Hom}(\mathbb{R}^{n_{ai}}, \mathbb{R}^{81}).$$

Im allgemeinen inhomogenen Fall sind die Einträge von \mathbb{E} Funktionen des Ortes. Daher definieren wir die maximal zulässige Menge K_{max} der Materialparameter für die anisotrope inhomogene lineare Elastizitätstheorie gemäß

$$(3.5) \quad K_{max} := (L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}.$$

In der Folge schreiben wir $\mathbb{E}(\kappa)$ für $\kappa \in K_{max}$, um die Parameterabhängigkeit zu unterstreichen. Für festes $\kappa \in K_{max}$ sind die Werte $\mathbb{E}(\kappa)(x)$ punktweise fast überall in Ω erklärt und es gilt für die Tensorfunktion \mathbb{E} :

$$(3.6) \quad \mathbb{E} \in L((L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}, (L^\infty(\Omega))^{81}).$$

Bekanntlich genügt \mathbb{E} Symmetriebedingungen (s. z.B. Haupt (2002), Bertram und Glüge (2013)), so dass wir fordern.

$$(3.7) \quad \forall \kappa \in K_{max} \quad \forall i, j, k, l \in \{1, 2, 3\} \quad : \quad \mathbb{E}_{ijkl} = \mathbb{E}_{jikl} = \mathbb{E}_{klji}.$$

Zum anderen ist der Elastizitätstensor positiv definit. Wir sagen daher, eine Menge

$$(3.8) \quad \emptyset \neq K \subset K_{max}$$

heißt Menge der zulässigen Parameterfunktionen κ , falls sie beschränkt ist, und falls \mathbb{E} auf K gleichmäßig positiv definit ist. Es soll also gelten:

$$(3.9) \quad \exists M = M(K) > 0 \quad \forall \kappa \in K \quad : \quad \|\kappa\|_{(L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}} \leq M,$$

$$(3.10) \quad \exists c_0 = c_0(K) > 0 \quad \forall \kappa \in K \quad \forall \varepsilon \in \text{Sym}(3) \quad : \quad \mathbb{E}(\kappa)\varepsilon : \varepsilon \geq c_0 \varepsilon : \varepsilon.$$

Es ergibt sich leicht, dass K eine abgeschlossene und beschränkte Menge in K_{max} ist.

Bemerkung 3.1. (Isotroper Fall) Im isotropen Fall reduziert sich (3.1) zu

$$(3.11) \quad \sigma = \mathbb{E}(\kappa)\varepsilon = 2\mu \varepsilon + \lambda \text{tr}(\varepsilon)\mathbf{I}.$$

Die beiden Lamé-Koeffizienten $\mu > 0$ und $\lambda \geq 0$ sind allgemein ortsabhängig. In diesem Fall sind $\kappa = (\mu, \lambda) \in K_{max} = (L^\infty(\Omega))^2$ und $\mathbb{E}(\kappa)$ lautet in der Darstellung nach Voigt (s. z.B. Bertram und Glüge (2013)):

$$(3.12) \quad \mathbb{E}(\kappa) = \mathbb{E}(\mu, \lambda) = \begin{pmatrix} \mathbb{E}_{1111} & \mathbb{E}_{1122} & \mathbb{E}_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbb{E}_{1122} & \mathbb{E}_{1111} & \mathbb{E}_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbb{E}_{1122} & \mathbb{E}_{1122} & \mathbb{E}_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbb{E}_{1111} - \mathbb{E}_{1122} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbb{E}_{1111} - \mathbb{E}_{1122} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbb{E}_{1111} - \mathbb{E}_{1122} \end{pmatrix}$$

mit

$$(3.13) \quad \mathbb{E}(\mu, \lambda)_{1111} = 2\mu + \lambda, \quad \mathbb{E}(\mu, \lambda)_{1122} = \lambda.$$

Es besteht folgender Zusammenhang mit Young-Modul E und Poisson-Zahl ν :

$$(3.14) \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad \lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)},$$

$$(3.15) \quad E = \frac{\mu(2\mu + 3\lambda)}{\mu + \nu}, \quad \nu = \frac{\lambda}{2(\mu + \lambda)}.$$

Eine geeignete Teilmenge $K \subset K_{max}$ kann im isotropen Fall leicht erhalten werden. Wir wählen folgende (physikalisch plausible) Schranken für den Elastizitätsmodul E und die Poisson-Zahl ν , die aufgrund von Vorüberlegungen bzw. Vorversuchen zu bestimmen sind.

$$(3.16) \quad 0 < E_0 \leq E(x) \leq E_1 < \infty, \quad 0 \leq \nu(x) \leq \nu_1 < \frac{1}{2} \quad \text{für fast alle } x \in \Omega.$$

Augrund von (3.14) ergaben sich damit folgende Schranken für μ und λ .

$$(3.17) \quad \frac{E_0}{3} \leq \mu(x) \leq \frac{E_1}{2}, \quad 0 \leq \lambda(x) \leq \frac{\nu_1 E_1}{1 - 2\nu_1} \quad \text{für fast alle } x \in \Omega.$$

Den isochoren Fall $\nu = \frac{1}{2}$ (entspricht $\lambda = \infty$) schließen wir aus. In diesem Fall werden divergenzfreie Verschiebungsfelder betrachtet. Wir verweisen auf Widany und Mahnken (2012) für eine Anwendung auf gummiartigen Kunststoff.

Es wird dann folgende beschränkte abgeschlossene konvexe Teilmenge $K \subset K_{max}$ definiert.

$$(3.18) \quad K := \{(\mu, \lambda) \in (L^\infty(\Omega))^2 \mid \mu, \lambda \text{ genügen (3.17)}\}.$$

Offenbar gibt es für diese Menge ein $c_0 > 0$, so dass die Bedingungen (3.9) und (3.10) erfüllt sind.

Bemerkung 3.2. (Polykristall, Kompositionsmaterial) Neben dem oben betrachteten allgemeinen Fall von Anisotropie und Inhomogenität ist folgende Erweiterung möglich, wie sie z.B. bei Kompositionsmaterialien oder Polykristallen vorkommen kann. Wir nehmen an, dass der Körper in endlich viele Teilkörper zerlegbar sei:

$$(3.19) \quad \bar{\Omega} = \bigcup_{l=1}^N \bar{\Omega}_l, \quad \Omega_l \text{ Lipschitz-Gebiet,} \quad \Omega_l \cap \Omega_j = \emptyset \quad \text{für } i \neq j.$$

Weiter sei angenommen, dass sich der Körper in jedem seiner Teilkörper Ω_l linear elastisch verhalte, es somit einen zugehörigen Elastizitätstensor \mathbb{E}_l mit den entsprechenden Symmetrieeigenschaften (3.7) sowie eine Menge $K_l \subset (L^\infty(\Omega_l))^{n_{ai}^l}$ mit den zu (3.8) - (3.10) analogen Eigenschaften gebe. Dann lässt sich eine Tensorfunktion für den ganzen Körper definieren, die zusätzlich direkt vom Ort $x \in \Omega$ abhängt.

$$(3.20) \quad \mathbb{E} : \Omega \times (L^\infty(\Omega_1))^{n_{ai}^1} \times \cdots \times (L^\infty(\Omega_N))^{n_{ai}^N} \rightarrow (L^\infty(\Omega))^{81},$$

$$(3.21) \quad \mathbb{E}(x, \kappa) := \sum_{l=1}^N \chi_l(x) \mathbb{E}_l(\kappa_l).$$

Dabei sind χ_l die charakteristische Funktionen von Ω_l und $\kappa = \{\kappa_1, \dots, \kappa_N\}$ mit $\kappa_l \in (L^\infty(\Omega_l))^{n_{ai}^l}$. Somit gilt

$$(3.22) \quad \text{f.f.a } x \in \Omega \quad : \quad \mathbb{E}(x, \cdot) : (L^\infty(\Omega_1))^{n_{ai}^1} \times \cdots \times (L^\infty(\Omega_N))^{n_{ai}^N} \rightarrow (L^\infty(\Omega))^{81} \quad \text{linear.}$$

Außerdem ist durch

$$(3.23) \quad K := K_1 \times \cdots \times K_N$$

eine entsprechende Parameter-Menge für \mathbb{E} gegeben, so dass ebenso Bedingungen der Art (3.8) - (3.10) erfüllt sind. Bei Polykristallen aus gleichem Material gehen die Tensoren \mathbb{E}_l durch orthogonale Drehungen auseinander hervor, bei Kompositionsmaterialien haben sie allgemein unterschiedliche Grade der Anisotropie.

3.2 Schwache Formulierungen der direkten Aufgaben

Für die schwachen Formulierungen für beide Aufgaben definieren wir die folgenden Räume für die Testfunktionen.

$$(3.24) \quad V_0 := \{\varphi \in [W^{1,2}(\Omega)]^3 \mid \varphi = 0 \text{ auf } \Gamma_0\},$$

$$(3.25) \quad V_1 := \{\varphi \in [W^{1,2}(\Omega)]^3 \mid \varphi = 0 \text{ auf } \Gamma_0 \cup \Gamma_1\}.$$

$W^{1,2}(\Omega)$ ist der übliche Sobolev-Raum. Mit V_0^* und V_1^* bezeichnen wir entsprechend die dualen Räume zu V_0 und V_1 . Mit $\langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{V_0^* V_0}$ sei die Dualpaarung zwischen $\mathbf{f} \in V_0^*$ und $\boldsymbol{\varphi} \in V_0$ bezeichnet.

Schwache Formulierung zur Aufgabe I (nichthomogenisierte Form) (“displacement-driven”)

Es seien

$$(3.26) \quad \mathbf{f} \in V_1^*$$

$$(3.27) \quad \bar{\mathbf{u}} \in (W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3$$

gegeben. Gesucht ist $\mathbf{u} \in V_0$ mit

$$(3.28) \quad \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{auf } \Gamma_1$$

und

$$(3.29) \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx = \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{V_1^* V_1} \quad \forall \boldsymbol{\varphi} \in V_1.$$

Zu beachten ist, dass die gesuchte Funktion \mathbf{u} allgemein *nicht* zum Raum der Testfunktionen V_1 gehört. Um die Aufgabe I zu homogenisieren, nehmen wir an, die Funktion $\bar{\mathbf{u}}$ besitze eine Fortsetzung zu einem $\tilde{\mathbf{u}} \in V_0$ mit der Normabschätzung

$$(3.30) \quad \|\tilde{\mathbf{u}}\|_{(W^{1,2}(\Omega))^3} \leq c_1 \|\bar{\mathbf{u}}\|_{(W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3}$$

mit $c_1 > 0$ unabhängig von $\bar{\mathbf{u}}$.

Schwache Formulierung zur Aufgabe I (homogenisierte Form) (“displacement-driven”)

Es seien (3.26), (3.27) und (3.30) gegeben. Gesucht ist $\mathbf{u} \in V_0$ mit

$$(3.31) \quad \mathbf{u} = \mathbf{w} + \tilde{\mathbf{u}},$$

wobei $\mathbf{w} \in V_1$ der folgenden Beziehung genügt.

$$(3.32) \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{w}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx = - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\tilde{\mathbf{u}}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx + \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{V_1^* V_1} \quad \forall \boldsymbol{\varphi} \in V_1.$$

Schwache Formulierung zur Aufgabe II (“traction-driven”)

Es seien

$$(3.33) \quad \mathbf{f} \in V_0^*,$$

$$(3.34) \quad \boldsymbol{\tau} \in ((W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3)^*$$

gegeben. Gesucht ist $\mathbf{v} \in V_0$ mit

$$(3.35) \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx = \langle \boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{((W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3)^* (W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3} + \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{V_0^* V_0} \quad \forall \boldsymbol{\varphi} \in V_0.$$

Bemerkung 3.3. Aus Gründen der mathematischen Allgemeinheit wurden allgemeine schwache Formulierungen mit \mathbf{f} und $\boldsymbol{\tau}$ als Distributionen gewählt. Bei vielen Anwendungen sind $\mathbf{f} \in (L^2(\Omega))^3$ und $\boldsymbol{\tau} \in (L^2(\Gamma_1))^3$ und stellen somit reguläre Distributionen dar. In diesen Fällen gelten dann

$$(3.36) \quad \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{V_0^* V_0} = \int_{\Omega} \mathbf{f} \boldsymbol{\varphi} \, dx, \quad \langle \boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{((W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3)^* (W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3} = \int_{\Gamma_1} \boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\varphi} \, ds \quad \forall \boldsymbol{\varphi} \in V_0$$

mit stillschweigender Identifikation von regulärer Distribution und erzeugender Funktion.

3.3 Existenz, Einzigkeit, Korrektheit für die direkten Aufgaben

Mit Standard-Methoden lassen sich leicht Resultate zu Existenz, Einzigkeit und Korrektheit für die schwachen Aufgaben im Rahmen der L^2 -Theorie beweisen. Wir verweisen z.B. auf Duvaut und Lions (1976), Ciarlet (1988), Zeidler (1990), Zeidler (1997). Wesentlich für diese Beweise sind die Voraussetzungen (3.9) und (3.10) sowie die Kornsche Ungleichung (s. z.B. Duvaut und Lions (1976), Ciarlet (1988)), die die

unmittelbare Anwendung des Satzes von Lax und Milgram gestatten. Wegen der allgemeinen Bekanntheit verzichten wir hier auf Beweise.

Aus Gründen der besseren Übersicht bleiben wir bei Elastizitätstensoren \mathbb{E} , die auf dem ganzen Körper Ω die gleiche Struktur haben. Es ist jedoch leicht einzusehen, dass auf der Grundlage der Bemerkung 3.2 die nachfolgenden Aussagen auch für den allgemeinen Fall gelten, wenn der Körper aus endlich vielen linear elastischen Teilkörpern zusammengesetzt ist.

Satz 3.4. (Existenz und Einzigkeit) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein beschränktes Lipschitz-Gebiet, und es mögen (2.2) - (2.3) gelten. Die Menge $\emptyset \neq K \subset (L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}$ der zulässigen Parameterfunktionen κ genüge den Bedingungen (3.9) und (3.10). Dann gelten die folgenden Aussagen.

(i) **(Aufgabe I)** Falls (3.26), (3.27) und (3.30) gelte, so existiert zu jedem $\kappa \in K$ genau eine schwache Lösung $\mathbf{u} \in V_0$ der Aufgabe I (2.4) – (2.7) mit der Normabschätzung

$$(3.37) \quad \|\mathbf{u}\|_{(W^{1,2}(\Omega))^3} \leq c_2 (\|\bar{\mathbf{u}}\|_{(W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3} + \|\mathbf{f}\|_{V_1^*}).$$

Die Konstante $c_2 > 0$ ist unabhängig von \mathbf{u} , $\bar{\mathbf{u}}$ und \mathbf{f} sowie universell für alle $\kappa \in K$.

(ii) **(Aufgabe II)** Falls (3.33) und (3.34) gelten, so existiert zu jedem $\kappa \in K$ genau eine schwache Lösung $\mathbf{v} \in V_0$ der Aufgabe II (2.8) – (2.11) mit der Normabschätzung

$$(3.38) \quad \|\mathbf{v}\|_{(W^{1,2}(\Omega))^3} \leq c_3 (\|\boldsymbol{\tau}\|_{((W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3)^*} + \|\mathbf{f}\|_{V_0^*}).$$

Die Konstante $c_3 > 0$ ist unabhängig von \mathbf{u} , $\boldsymbol{\tau}$ und \mathbf{f} sowie universell für alle $\kappa \in K$.

Abgeschlossenheit oder Konvexität von K werden an dieser Stelle nicht benötigt. Wir definieren die Lösungsoperatoren der beiden direkten Aufgaben. Unter den Voraussetzungen des Satzes 3.4 ist durch

$$(3.39) \quad \mathbf{u} = L_I(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa)$$

der Lösungsoperator der Aufgabe I in der Konstellation

$$(3.40) \quad L_I : V_1^* \times (W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3 \times K \rightarrow V_0 \subset (W^{1,2}(\Omega))^3$$

gegeben. Analog ist durch

$$(3.41) \quad \mathbf{v} = L_{II}(\mathbf{f}, \boldsymbol{\tau}, \kappa)$$

der Lösungsoperator der Aufgabe II in der Konstellation

$$(3.42) \quad L_{II} : V_0^* \times ((W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3)^* \times K \rightarrow V_0 \subset (W^{1,2}(\Omega))^3$$

gegeben. Aus dem vorstehenden Satz folgt leicht

Satz 3.5. (Korrektheit) Es seien die Eingangs-Voraussetzungen des Satzes 3.4 gegeben. Dann gelten die folgenden Aussagen.

(i) **(Aufgabe I)** Es seien $\kappa_1, \kappa_2 \in K$, $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2 \in V_1^*$ sowie $\bar{\mathbf{u}}_1, \bar{\mathbf{u}}_2 \in (W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3$ mit der Forsetzungseigenschaft (3.30). Schließlich seien $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \in V_0$ die entsprechenden zugehörigen einzigen schwachen Lösungen der Aufgabe I (2.4) – (2.7). Dann gilt die Abschätzung

$$(3.43) \quad \|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2\|_{(W^{1,2}(\Omega))^3} \leq c_4 \left\{ \|\mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_2\|_{V_1^*} + (1 + \|\kappa_1\|_{(L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}}) \|\bar{\mathbf{u}}_1 - \bar{\mathbf{u}}_2\|_{(W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3} + (\|\bar{\mathbf{u}}_2\|_{(W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3} + \|\mathbf{f}_2\|_{V_1^*}) \|\kappa_1 - \kappa_2\|_{(L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}} \right\}.$$

Die Konstante $c_4 > 0$ ist unabhängig von $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \bar{\mathbf{u}}_1, \bar{\mathbf{u}}_2, \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2$ sowie universell für alle $\kappa \in K$.

(ii) **(Aufgabe II)** Es seien $\kappa_1, \kappa_2 \in K$, $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2 \in V_0^*$, $\boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2 \in ((W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3)^*$ sowie $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \in V_0$ die entsprechenden zugehörigen einzigen schwachen Lösungen der Aufgabe II (2.8) – (2.11). Dann gilt die Abschätzung

$$(3.44) \quad \|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2\|_{(W^{1,2}(\Omega))^3} \leq c_5 \left\{ \|\boldsymbol{\tau}_1 - \boldsymbol{\tau}_2\|_{((W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3)^*} + \|\mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_2\|_{V_0^*} + (\|\boldsymbol{\tau}_2\|_{((W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3)^*} + \|\mathbf{f}_2\|_{V_0^*}) \|\kappa_1 - \kappa_2\|_{(L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}} \right\}.$$

Die Konstante $c_5 > 0$ ist unabhängig von $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2, \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2$ sowie universell für alle $\kappa \in K$.

Aus den Aussagen des Satzes 3.5 ergeben sich die folgenden Stetigkeitsaussagen für die Lösungsoperatoren.

Satz 3.6. (Stetigkeitsaussagen für die Lösungsoperatoren) Es seien die Eingangs-Voraussetzungen des Satzes 3.4 gegeben. Dann gelten die folgenden Aussagen.

(i) **(Aufgabe I)**

$$(3.45) \quad \forall \kappa \in K \quad : \quad L_I(\cdot, \cdot, \kappa) : V_1^* \times (W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3 \rightarrow V_0 \subset (W^{1,2}(\Omega))^3 \quad \text{linear, stetig,}$$

und die Stetigkeit ist gleichmäßig bezüglich $\kappa \in K$.

(ii) **(Aufgabe II)**

$$(3.46) \quad \forall \kappa \in K \quad : \quad L_{II}(\cdot, \cdot, \kappa) : V_0^* \times ((W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3)^* \rightarrow V_0 \subset (W^{1,2}(\Omega))^3 \quad \text{linear, stetig,}$$

und die Stetigkeit ist gleichmäßig bezüglich $\kappa \in K$.

(iii) **(Aufgabe I)**

$$(3.47) \quad L_I : V_1^* \times (W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3 \times K \rightarrow V_0 \subset (W^{1,2}(\Omega))^3 \quad \text{Lipschitz-stetig}$$

auf beschränkter Teilmenge von $V_1^* \times (W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3$.

(iv) **(Aufgabe II)**

$$(3.48) \quad L_{II} : V_0^* \times ((W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3)^* \times K \rightarrow V_0 \subset (W^{1,2}(\Omega))^3 \quad \text{Lipschitz-stetig}$$

auf beschränkter Teilmenge von $V_0^* \times (L^2(\Gamma_1))^3$.

3.4 Höhere Integrierbarkeit der Gradienten der schwachen Lösungen

Es lässt sich zeigen, dass bei etwas besseren Voraussetzungen an die Daten $\bar{\mathbf{u}}, \mathbf{f}$ bzw. $\boldsymbol{\tau}, \mathbf{f}$ sowie an die Randteile Γ_i ($i = 1, 2, 3$) die schwachen Lösungen der beiden Aufgaben zu $(W^{1,p}(\Omega))^3$ mit $p > 2$ gehören. Diese ‘‘höhere Integrierbarkeit des Gradienten’’ wurde in den letzten Jahrzehnten intensiv untersucht, zuerst lokal, dann global. Wir verweisen auf Haller-Dintelmann und Rehberg (2008) für allgemeine elliptische (und parabolische) Aufgaben sowie auf Shi und Wright (1994) und Herzog et al. (2011) bezüglich der Lamé-Gleichungen. Diese letzten Resultate lassen sich auf die beiden direkten Aufgaben anwenden. Es sei darauf hingewiesen, dass die Lamé-Gleichungen ein spezielles elliptisches System darstellen, was besondere Schwierigkeiten beim Beweisen ‘‘analoger’’ Aussagen in Randnähe hervorrufen kann (s. hierzu z.B. Shi und Wright (1994)). Der folgende Satz 3.7 ergibt sich leicht aus einem Resultat von Herzog et al. (2011) für eine entsprechende nichtlineare Aufgabe. Es werden weitere Bezeichnungen benötigt.

$$(3.49) \quad V_0^p := \{\boldsymbol{\varphi} \in (W^{1,p}(\Omega))^3 \mid \boldsymbol{\varphi} = 0 \text{ auf } \Gamma_0\},$$

$$(3.50) \quad V_1^p := \{\boldsymbol{\varphi} \in (W^{1,p}(\Omega))^3 \mid \boldsymbol{\varphi} = 0 \text{ auf } \Gamma_0 \cup \Gamma_1\}.$$

$W^{1,p}(\Omega)$ ist der übliche Sobolev-Raum für $1 \leq p \leq \infty$. Mit $(V_0^p)^*$ und $(V_1^p)^*$ bezeichnen wir entsprechend die dualen Räume zu V_0^p und V_1^p . Für $p = 2$ erhalten wir sofort die in (3.24) und (3.25) eingeführten Räume V_0, V_1 sowie V_0^* und V_1^* . Mit $\langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{(V_0^p)^* V_0^p}$ sei die Dualpaarung zwischen $\mathbf{f} \in (V_0^p)^*$ und $\boldsymbol{\varphi} \in V_0^p$ bezeichnet sowie mit $p' := \frac{p}{p-1}$ der zu p konjugierte Exponent. Zusätzlich zu den Eigenschaften (2.1) – (2.3) mögen die Teile Γ_i ($i = 1, 2, 3$) des Randes $\partial\Omega$ in nicht zu schlechter Weise zusammenstoßen. Es wird gefordert, dass

$$(3.51) \quad \Omega \cup \Gamma_2 \quad \text{regulär im Sinne von Gröger}$$

sei, wobei wir für Details auf Gröger (1989), Haller-Dintelmann und Rehberg (2008) und Herzog et al. (2011) verweisen. In Shi und Wright (1994) wird ein alternativer Beweis geführt, der etwas andere Voraussetzungen an Ω erfordert.

Satz 3.7. (Höhere Integrierbarkeit der Gradienten) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein beschränktes Lipschitz-Gebiet, und es mögen (2.2) – (2.3) sowie (3.51) gelten. Die Menge $\emptyset \neq K \subset (L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}$ der zulässigen Parameterfunktionen κ genüge den Bedingungen (3.9) und (3.10). Dann existiert ein $\bar{p} > 2$, so dass für alle $p \in [2, \bar{p}]$ die folgenden Aussagen gelten.

- (i) **(Aufgabe I)** Es seien $\mathbf{f} \in (V_1^{p'})^*$ und $\bar{\mathbf{u}} \in (W^{1-\frac{1}{p},p}(\Gamma_1))^3$ mit einer zu (3.30) analogen Fortsetzungseigenschaft in $(W^{1,p}(\Omega))^3$. Dann existiert zu jedem $\kappa \in K$ genau eine schwache Lösung $\mathbf{u} \in V_0^p$ der Aufgabe I (2.4) – (2.7) mit der Normabschätzung

$$(3.52) \quad \|\mathbf{u}\|_{(W^{1,p}(\Omega))^3} \leq c_6 (\|\bar{\mathbf{u}}\|_{(W^{1-\frac{1}{p},p}(\Gamma_1))^3} + \|\mathbf{f}\|_{(V_1^{p'})^*}).$$

Die Konstante $c_6 > 0$ ist unabhängig von \mathbf{u} , $\bar{\mathbf{u}}$ und \mathbf{f} sowie universell für alle $\kappa \in K$ und für alle $p \in [2, \bar{p}]$.

- (ii) **(Aufgabe II)** Falls $\mathbf{f} \in (V_0^{p'})^*$ und $\boldsymbol{\tau} \in ((W^{1-\frac{1}{p'},p'}(\Gamma_1))^3)^*$ gelten, so existiert zu jedem $\kappa \in K$ genau eine schwache Lösung $\mathbf{v} \in V_0^p$ der Aufgabe II (2.8) – (2.11) mit der Normabschätzung

$$(3.53) \quad \|\mathbf{v}\|_{(W^{1,p}(\Omega))^3} \leq c_7 (\|\boldsymbol{\tau}\|_{((W^{1-\frac{1}{p'},p'}(\Gamma_1))^3)^*} + \|\mathbf{f}\|_{(V_0^{p'})^*}).$$

Die Konstante $c_7 > 0$ ist unabhängig von \mathbf{u} , $\boldsymbol{\tau}$ und \mathbf{f} sowie universell für alle $\kappa \in K$ und für alle $p \in [2, \bar{p}]$.

Auf der Grundlage des vorstehenden Satzes lassen sich analoge Aussagen zu den Sätzen 3.5 und 3.6 leicht beweisen. Dabei gelten die modifizierten Abschätzungen und Stetigkeitsaussagen gleichmäßig für alle $p \in [2, \bar{p}]$.

3.5 Zusätzliche Regularität der schwachen Lösungen

Die wesentlich von Agmon et al. (1964) entwickelte allgemeine Regularitätstheorie lässt sich auch auf das Gleichungssystem der stationären linearen Elliptizität anwenden (siehe z.B. Ebenfeld (2002) für einen aktuelleren Überblick). Neben weiteren Hinweisen auf Quellen finden sich in Ciarlet (1988) globale Resultate für das stationäre Lamé-System mit konstanten Koeffizienten μ und λ (vgl. (3.11)) für die reine Verschiebungs-Aufgabe (Dirichlet-Randbedingungen) und für die reine Spannungs-Aufgabe (Neumann-Randbedingungen). Bei gemischten Randbedingungen wie in unserem Fall ist globale Regularität allgemein nicht zu erwarten, da sie in der Nähe des Zusammenstoßens der Randteile mit unterschiedlichen Typen der Randbedingungen selbst bei sonst guten Daten allgemein verloren geht. Für den allgemeinen Fall der linearen Elastizität mit einem Elastizitätstensor \mathbb{E} wie im Abschnitt 3.1 beschrieben gibt es in Neff (2005) für die Dirichlet-Aufgabe ein globales Regularitätsresultat. Für die Neumann-Aufgabe lässt sich ein globales Resultat bei hinreichenden Glattheitsvoraussetzungen vermuten. Den Autoren sind hierzu keine Quellen bekannt.

Für die hier betrachteten Aufgaben möchten wir ein Ergebnis für die innere Regularität formulieren, das für die Untersuchung von allgemeineren Kostenfunktionalen hilfreich sein kann (s. Abschnitt 5.2).

Satz 3.8. (Innere Regularität für die schwachen Lösungen) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein beschränktes Lipschitz-Gebiet, und es mögen (2.2) – (2.3) gelten. Die Menge $\emptyset \neq K \subset (L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}$ der zulässigen Parameterfunktionen κ genüge den Bedingungen (3.9) und (3.10). Zusätzlich sei

$$(3.54) \quad \mathbf{f} \in (L_{loc}^2(\Omega))^3,$$

und $M \subset (C^{0,1}(\Omega))^{n_{ai}}$ sei eine nichtleere Menge mit den Eigenschaften

$$(3.55) \quad \forall \Omega' \subset\subset \Omega \quad \exists L(\Omega') > 0 \quad \forall \kappa \in M \quad \forall x, y \in \Omega' \quad : \\ : \quad \max_{x, y \in \Omega'} \left\{ \max_{i \in \{1, \dots, n_{ai}\}} \{|\kappa_i(x) - \kappa_i(y)|\} \right\} \leq L \|x - y\|.$$

Dann gelten für die schwachen Lösungen $\mathbf{u}_\kappa, \mathbf{v}_\kappa \in V_0$ der Aufgabe I bzw. II

$$(3.56) \quad \forall \kappa \in K \cap M \quad : \quad \mathbf{u}_\kappa, \mathbf{v}_\kappa \in (W_{loc}^{2,2})^3,$$

$$(3.57) \quad \forall \Omega' \subset\subset \Omega'' \subset\subset \Omega, \quad \Omega', \Omega'' \text{ Gebiete} \quad : \\ : \quad \|\mathbf{u}_\kappa\|_{(W_{loc}^{2,2}(\Omega'))^3} \leq c_8 \|\mathbf{f}\|_{(L^2(\Omega''))^3} + c_9(\Omega', \Omega'') \|\mathbf{u}_\kappa\|_{(W^{1,2}(\Omega))^3}, \\ : \quad \|\mathbf{v}_\kappa\|_{(W_{loc}^{2,2}(\Omega'))^3} \leq c_8 \|\mathbf{f}\|_{(L^2(\Omega''))^3} + c_9(\Omega', \Omega'') \|\mathbf{v}_\kappa\|_{(W^{1,2}(\Omega))^3}.$$

Die Konstanten $c_8, c_9(\Omega', \Omega'') > 0$ sind unabhängig von \mathbf{f} und \mathbf{u}_κ bzw. \mathbf{v}_κ sowie universell für alle $\kappa \in K \cap M$.

Die von Ω' und Ω'' abhängige Zahl c_9 wächst im Allgemeinen, wenn Ω' sich Ω nähert. Die Bezeichnung $\Omega' \subset\subset \Omega$ meint, dass der Abschluss von Ω' eine kompakte Teilmenge von Ω ist. Das vorstehende Resultat lässt sich ohne größere Schwierigkeiten mit der Standard-Methode des Differenzenquotienten beweisen (s. z.B. Gilbarg und Trudinger (2001)). Bei noch besserer innerer Regularität von \mathbf{f} und κ lässt sich mit dieser Methode eine bessere innere Regularität der schwachen Lösungen beweisen.

Bei Polykristallen und Kompositionswerkstoffen (s. Bemerkung 3.2) ist $W^{2,2}$ -Regularität allgemein nur im Inneren der einzelnen Kristalle bzw. Komponenten zu erwarten.

4 Ansätze zur Parameterbestimmung im Falle linearer anisotroper inhomogener Elastizität

Unter den Voraussetzungen im Satz 3.4 besitzen die beiden Aufgaben I (2.4) – (2.7) und II (2.8) – (2.11) eindeutig bestimmte schwache Lösungen $\mathbf{v} = \mathbf{v}_\kappa \in V_0$ und $\mathbf{u} = \mathbf{u}_\kappa \in V_0$, wobei wir in der Schreibweise die Abhängigkeit von $\kappa \in K$ hervorheben.

Im Falle, dass das Materialgesetz das Materialverhalten exakt beschreibt, die Randbedingungen (2.7) und (2.11) zum selben Experiment gehören und $f \in V_0^*$ gilt, würden die beiden Lösungen \mathbf{v}_κ und \mathbf{u}_κ übereinstimmen. In einer *realen* Situation werden die beiden Lösungen allgemein unterschiedlich sein. Anhand dieser Abweichungen lassen sich Kostenfunktionale aufstellen. Wir formulieren “kontinuierliche”, durch Integrale definierte Funktionale, im Gegensatz zum diskreten Ansatz in Yun und Shang (2011), Shang und Yun (2012). Dieser nutzt die Zerlegung des Gebietes für die numerische Berechnung der Lösungen (s. Formel (4.1)). Diskrete Ansätze für die Kostenfunktionale finden sich oft in den anwendungsorientierten Arbeiten, es sei z.B. auf Avril und Pierron (2007), Cooreman et al. (2007), Lecompte et al. (2007) und Kajberg und Wikman (2007) verwiesen. In Geymonat und Pagano (2003) und Avril und Pierron (2007), beispielsweise, werden auch Kostenfunktionale in Integralform betrachtet.

4.1 Zum Ansatz von Yun und Shang

Das in Yun und Shang (2011), Shang und Yun (2012) vorgestellte Kostenfunktional (“implicit objective function”) vergleicht die beiden berechneten Lösungen über ihre diskreten Werte in den Integrationspunkten (Gauß-Punkten) des Finite-Elemente-Netzes. Es lautet gemäß Shang und Yun (2012):

$$(4.1) \quad OF_{implicit} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{LS} \left(1 - \frac{\sum_{j=1}^{NE} \sum_{i=1}^{GP} \|\boldsymbol{\sigma}_{iU}^k\|_j}{\sum_{j=1}^{NE} \sum_{i=1}^{GP} \|\boldsymbol{\sigma}_{iF}^k\|_j} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{LS} \left(1 - \frac{\sum_{j=1}^{NE} \sum_{i=1}^{GP} \|\boldsymbol{\varepsilon}_{iU}^k\|_j}{\sum_{j=1}^{NE} \sum_{i=1}^{GP} \|\boldsymbol{\varepsilon}_{iF}^k\|_j} \right)^2.$$

Dabei sind: $\|\cdot\|$ - Euklidische Norm, LS - Anzahl der ausgewählten Lastschritte, NE - Anzahl der ausgewählten Elemente im relevanten Bereich (“zone of interest”), GP - Anzahl der Gaußpunkte in den Elementen. Der Index U bezieht sich auf die Rechnung bei vorgegebener Verschiebung (bei uns Aufgabe I), der Index F entsprechend auf die Rechnung bei vorgegebener Spannung (bei uns Aufgabe II). Gegenüber der ursprünglichen Fassung in Yun und Shang (2011) erfuhr die Formel (4.1) einige Modifikationen, so kam z.B. die Berücksichtigung eines relevanten Bereichs hinzu. Ein Vorteil dieses Ansatzes ist seine Dimensionsfreiheit. Die Division durch möglicherweise kleine Zahlen erscheint problematisch.

4.2 Motivation und ein erster “kontinuierlicher” Ansatz

Wir wollen einen integralen Ansatz entwickeln, der stärker durch die Mechanik motiviert ist. Aus (3.29) und (3.35) folgt unter Beachtung von $V_1 \subset V_0$ für $f \in V_0^*$:

$$(4.2) \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_\kappa - \mathbf{v}_\kappa) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx = 0 \quad \forall \boldsymbol{\varphi} \in V_1.$$

Unter der Annahme, dass das Materialverhalten korrekt beschrieben wird, haben \mathbf{v}_κ und \mathbf{u}_κ auf Γ_1 den gleichen Wert, nämlich $\bar{\mathbf{u}}$. Somit liegt dann die Differenz $\mathbf{u}_\kappa - \mathbf{v}_\kappa$ in V_1 und ist somit eine zulässige Testfunktion in (4.2). Also gilt

$$(4.3) \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_\kappa - \mathbf{v}_\kappa) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_\kappa - \mathbf{v}_\kappa) \, dx = 0.$$

Im Allgemeinen gilt statt (4.3) nur (beachte die positive Definitheit von $\mathbb{E}(\kappa)$):

$$(4.4) \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) \, dx \geq 0.$$

Das Integral in (4.4) stellt die gespeicherte elastische Energie der zulässigen Verschiebung (“Differenzverschiebung”) $\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}$ dar. Im Allgemeinen sind die Randwerte auf Γ_1 auch nicht gleich, so dass nur

$$(4.5) \quad \int_{\Gamma_1} |\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}|^2 \, ds = \int_{\Gamma_1} |\bar{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_{\kappa}|^2 \, ds \geq 0.$$

gilt. Aus (4.4) und (4.5) ergibt sich dann folgendes Kostenfunktional. Mögliche und sicher auch sinnvolle Gewichtungsfaktoren (s. Bemerkung 4.1) seien hier beiseite gelassen.

$$(4.6) \quad \Phi(\kappa, \bar{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\tau}) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) \, dx + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_1} |\bar{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_{\kappa}|^2 \, ds.$$

Es können auch noch die zugehörigen Spannungen verglichen werden, was dann zur folgenden Erweiterung führt (unter Beachtung von (3.1)).

$$(4.7) \quad \begin{aligned} \Phi_1(\kappa, \bar{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\tau}) := & \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) \, dx + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_1} |\bar{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_{\kappa}|^2 \, ds + \\ & + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) : \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) \, dx + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_1} |\mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa}) \mathbf{n} - \boldsymbol{\tau}|^2 \, ds. \end{aligned}$$

Zu beachten ist dabei, dass der Vergleich der Spannungen auf dem Rand im Funktional Φ_1 eine bessere Regularität von $\bar{\mathbf{u}}$ voraussetzt, als es zur korrekten Formulierung der schwachen Aufgabe für \mathbf{u}_{κ} erforderlich ist (vgl. die Ausführungen im Abschnitt 3.5). Oder es ist ein geeigneter Glättungsoperator zu verwenden, worauf im Abschnitt 4.3 eingegangen wird.

Bemerkungen 4.1. (i) Gewichtungsfaktoren für die einzelnen Summanden in den Funktionalen (4.6) und (4.7) können über einen Größenvergleich zwischen Spannungen und Verzerrungen bzw. Verschiebungen gefunden werden, wenn z.B. eine ungefähre Kenntniss über den Kompressionsmodul bei isotropen Verhalten vorhanden ist.

(ii) Die Funktionale Φ und Φ_1 hängen *explizit* von κ ab, was den (numerischen) Aufwand erhöhen kann. Möglich wäre, ein geeignetes festes κ_0 (“Referenzwert”) zu wählen oder bei numerischen Verfahren κ aus dem vorigen Iterationsschritt zu nehmen. Die erste Alternative führt auf ein Funktional $\tilde{\Phi}$ gemäß

$$(4.8) \quad \tilde{\Phi}(\kappa, \bar{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\tau}) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) \, dx + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_1} |\bar{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_{\kappa}|^2 \, ds.$$

4.3 Ein kontinuierlicher Ansatz

Es soll jetzt ein allgemeines Kostenfunktional entwickelt werden, das unsere obigen Ansätze sowie einige in Gebrauch befindliche einschließt. Wir definieren für $\kappa \in K$, $\mathbf{f} \in V_0^*$, $\bar{\mathbf{u}} \in (W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3$ und $\boldsymbol{\tau} \in (L^2(\Gamma_1))^3$

$$(4.9) \quad \begin{aligned} \Phi(\kappa, \bar{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\tau}) := & \frac{1}{2} \int_{\Omega} g_1 \tilde{\mathbb{E}}_1(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) \, dx + \\ & + \frac{1}{2} \int_{\Omega} g_2 \tilde{\mathbb{E}}_2(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) : \tilde{\mathbb{E}}_2(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}) \, dx + \\ & + \frac{1}{2} \int_{\Omega} g_3 |\mathbf{u}_{\kappa} - \mathbf{v}_{\kappa}|^2 \, dx + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_1} h_1 |\bar{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_{\kappa}|^2 \, ds + \\ & + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_1} h_2 |(G \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa})) \mathbf{n} - \boldsymbol{\tau}|^2 \, ds + \frac{\alpha}{2} \|P(\kappa - \bar{\kappa})\|_{(L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}}. \end{aligned}$$

Diese Darstellung verzichtet auf mögliche nichtnegative Gewichtungsfaktoren (s. Bemerkung 4.1), $\alpha \geq 0$ ist ein Regularisierungsparameter (vgl. Bemerkung 4.5), $\bar{\kappa} \in K$ ein a-priori gegebener Schätzwert. In der Bemerkung 4.5 erfolgen hierzu weitere Kommentare. Die weiteren neu auftretenden Größen g_i ($i = 1, 2, 3$), h_j ($j = 1, 2$), $\tilde{\mathbb{E}}_i$ ($i = 1, 2$), G und P sind wie folgt erklärt:

- (4.10) $g_i \in L^\infty(\Omega)$ ($i = 1, 2, 3$) mit $g_i \geq 0$ f.ü. in Ω ,
- (4.11) $h_j \in L^\infty(\Gamma_1)$ ($j = 1, 2$) mit $h_j \geq 0$ f.ü. in Γ_1 ,
- (4.12) $\tilde{\mathbb{E}}_i : K \rightarrow (L^\infty(\Omega))^{81}$ linear, stetig mit (3.9), (3.10), $i = 1, 2$,
- (4.13) $G : (L^2(\Omega))^9 \rightarrow (W^{1,2}(\Omega))^3$ linear, stetig ,
- (4.14) $P : (L^\infty(\Omega))^{n_{ai}} \rightarrow (L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}$ stetiger Projektor.

In den folgenden Bemerkungen erläutern wir die Bedeutung dieser Größen und geben Beispiele an.

Bemerkungen 4.2. (Erläuterungen zu den auftretenden Größen)

- (i) Die g_i und h_j sind Gewichtsfunktionen auf Ω bzw. Γ_1 . Sie können identisch eins, aber auch auf Teilmengen von Ω bzw. Γ_1 gleich null sein. Damit können bestimmte Bereiche im Bauteil bzw. auf seiner Oberfläche stärker berücksichtigt werden, wenn es z.B. durch den Versuchsaufbau nahegelegt wird.
- (ii) Beispiele für die Tensorfunktionen $\tilde{\mathbb{E}}_i$ ($i = 1, 2$) sind
- (a) der Elastizitätstensor $\mathbb{E} = \mathbb{E}(\kappa)$ selbst. In diesem Falle bewertet das erste Integral in (4.9) die (möglicherweise gewichtete) gespeicherte Energie, die der Verschiebungsdifferenz $\mathbf{u}_\kappa - \mathbf{v}_\kappa$ entspricht. Das zweite Integral in (4.9) bewertet die zugehörigen Spannungen.
- (b) der Elastizitätstensor $\mathbb{E}(\tilde{\kappa})$ für eine geeignet gewählte Parameterfunktion $\tilde{\kappa}$. Damit wird eine explizite Abhängigkeit des ersten bzw. zweiten Integrals von der Parameterfunktion κ vermeiden, wie schon im Ansatz (4.8) dargestellt.
- (c) der vierstufige Identitätstensor \mathbb{I} . Damit bewerten die beiden ersten Integrale die der Verschiebungsdifferenz $\mathbf{u}_\kappa - \mathbf{v}_\kappa$ entsprechende Differenz der Verzerrungen.
- (iii) G ist ein Glättungsoperator, damit der Vergleich der Spannungen auf Γ_1 in der angegebenen Weise unter den obigen Voraussetzungen für die schwache Lösbarkeit der direkten Aufgaben korrekt ist.
- (iv) P ist eine stetige Projektion, im einfachsten Fall die Identität. Mit einer speziellen Wahl von P kann erzwungen werden, dass bestimmte Komponenten von κ in der Nähe von bereits bekannten Werten liegen. Das kann für das ganze Gebiet Ω geschehen, oder aber auch auf Teilgebieten.

Bemerkung 4.3. (Äquivalentes Kostenfunktional mit Zwangsbedingungen)

Das Kostenfunktional in (4.9) ist ohne Zwangsbedingungen formuliert. In äquivalenter Weise lässt sich eine Formulierung mit Nebenbedingungen und Lagrange-Multiplikatoren angeben (vgl. z.B. Ito und Kunisch (2008)). Dazu wird das Funktional Φ derart abgeändert, dass auf der rechten Seite in (4.9) statt der Lösungen \mathbf{u}_κ und \mathbf{v}_κ formal beliebige $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in V_0$ zugelassen sind, wobei für \mathbf{u} die Bedingungen (3.28) und (3.29) als Nebenbedingung sowie für \mathbf{v} die Bedingung (3.35) als Nebenbedingung gestellt werden.

Bemerkung 4.4. (Beziehung zu anderen Ansätzen)

- (i) Das Kostenfunktional in (4.9) schließt bekannte Ansätze ein. So ergibt sich für verschwindende g_1, g_2, g_3, h_2 (und $\alpha = 0$) ein Ansatz, bei dem ein Teil der Randwerte einer berechneten Funktion mit gemessenen Randwerten verglichen wird. Wir verweisen auf die aktuellen Arbeiten Widany und Mahnken (2012), Mahnken und Dammann (2013).
- (ii) Der oben in (4.1) vorgestellte diskrete Ansatz von Yun und Shang ist mit den hier betrachteten integralen Ansätzen *nicht* direkt vergleichbar. Die Ansätze könnten indirekt über die jeweiligen Ergebnisse der Parameteridentifizierung anhand von konkreten Versuchsdaten verglichen werden.
- (iii) Ebenso sind die in Geymonat und Pagano (2003) und Avril und Pierron (2007) angegebenen Ansätze mit Volumenintegralen nicht direkt vergleichbar. Dort wird ein auf der Basis im Inneren gemessener Werte ermitteltes Verzerrungsfeld verwendet (“full-field measurement”).

Bemerkungen 4.5. (Zum Regularisierungsterm im Kostenfunktional)

- (i) Bei der Untersuchung inverser Probleme sind Regularisierungsterme wie der letzte Ausdruck in der Darstellung (4.9) weit verbreitet. Neben der klassischen Tichonov-Regularisierung, bei der eine L^2 -Norm gewählt wird (vgl. etwa Engl et al. (1996)), spielen Ansätze mit allgemeinen Banach-Räumen eine wichtige Rolle. Wir verweisen auf Scherzer (2009) und Schuster et al. (2012).

- (ii) Bei der Verwendung des Regularisierungsterms in (4.9) könnten Schwierigkeiten erwachsen, da das Kostenfunktional Φ auf einer Teilmenge von $(L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}$ definiert ist. Nach Satz 3.7 gilt

$$(4.15) \quad \varepsilon(u_\kappa), \varepsilon(v_\kappa) \in (L^p(\Omega))^9 \quad \text{mit } 2 \leq p \leq \bar{p}.$$

Daher ist in diesem Falle das Kostenfunktional Φ für $\kappa \in (L^q(\Omega))^{n_{ai}}$ mit $q := \frac{\bar{p}}{\bar{p}-2}$ und $2 < p \leq \bar{p}$ *formal* definiert. Allerdings sind die Resultate von Nach Satz 3.4 für $\kappa \in (L^q(\Omega))^{n_{ai}}$ mit $q < \infty$ *nicht* gesichert.

- (iii) Bei der Identifikation von Materialparametern wird verschiedentlich auf einen derartigen Regularisierungsterm verzichtet. Ausführungen hierzu finden sich z.B. in Mahnen und Stein (1996b) und Thielecke (1998). Als problematisch wird angesehen, dass die Wahl eines Regularisierungsterms, insbesondere die Größe des Parameters α , nicht klar ist und die Ergebnisse von dieser Wahl abhängen.

5 Zur inversen Aufgabe für die lineare Elastizität

Wir betrachten jetzt die entstehende mathematische Aufgabe, für das Funktional Φ gemäß (4.9) die Existenz eines Minimums nachzuweisen, was wir als inverse Aufgabe verstehen wollen. Zuerst schränken wir den Definitionsbereich des Kostenfunktionals geeignet ein, wodurch sich die Existenz eines Minimums für das in (4.9) angegeben allgemeine Kostenfunktional nachweisen lässt. Danach zeigen wir die Existenz eines Minimums auf der Menge K , allerdings für einen Spezialfall von (4.9). Im Abschnitt 5.3 werden mit Hilfe der Differentialrechnung notwendige und hinreichende Bedingungen für lokale Minima formuliert. Aufgrund der komplexen Struktur ist für Funktionale der Art (4.9) keine Konvexität bezüglich des Parameters κ zu erwarten, so dass Einzigkeitsaussagen nicht trivial sind. Wir konzentrieren uns auf den Fall eines Elastizitätstensors \mathbb{E} für den ganzen Körper, obwohl bei gewisser Vorsicht die Resultate auch für den in Bemerkung 3.2 angesprochenen Fall von Polykristallen gelten. Zu gegebener Zeit geben wir hierzu Kommentare.

5.1 Existenz eines globalen Minimums auf einer Teilmenge von K

Für das Funktional Φ in der allgemeinen Form (4.9) lässt sich leicht die Existenz eines globalen Minimums zeigen, wenn der Definitionsbereich K auf eine kompakte Teilmenge eingeschränkt wird. Aus den Stetigkeitseigenschaften der Lösungsoperatoren der direkten Aufgaben (s. Satz 3.6) sowie aus der Struktur von Φ ergibt sich ohne Mühe der folgende Satz.

Satz 5.1. (Stetigkeit des Funktionals Φ gemäß (4.9)) Neben den Voraussetzungen im Satz 3.4 seien zusätzlich

$$(5.1) \quad \tau \in (L^2(\Gamma_1))^3, \quad \mathbf{f} \in V_0^*$$

und (4.10) – (4.14) gegeben. Dann gilt für das gemäß (4.9) definierte Funktional Φ :

$$(5.2) \quad \Phi(\bullet, \bar{\mathbf{u}}, \tau) : K \rightarrow \mathbb{R} \quad \text{stetig und beschränkt auf beschränkten Mengen.}$$

Um die Existenz eines globalen Minimums von Φ nachzuweisen, schränken wir die Menge K , definiert in (3.8) mit den Bedingungen (3.9), (3.10) geeignet ein. Dazu sei das beschränkte Gebiet Ω wie folgt zerlegt.

$$(5.3) \quad \bar{\Omega} = \bigcup_{k=1}^N \bar{B}_k, \quad B_k \text{ Lipschitz-Gebiete,} \quad B_k \cap B_j = \emptyset \quad \text{für } k \neq j, \quad N \in \mathbb{N}.$$

Für $0 < \delta \leq 1$ definieren wir folgende Teilmenge von K_{max} :

$$(5.4) \quad K_{max}^\delta := \{w \in K_{max} \mid \forall k = 1, \dots, N \quad : \quad w|_{B_k} \text{ fortsetzbar zu } \bar{w}|_{\bar{B}_k} \in [C^{0,\delta}(\bar{B}_k)]^{n_{ai}}\}.$$

K_{max}^δ ist ein Banach-Raum bezüglich der durch (5.3) und (5.4) erzeugten Norm (Summe der Hölder-Normen auf B_k). Weiter definieren wir die Menge K^δ gemäß

$$(5.5) \quad K^\delta := K_{max}^\delta \cap K.$$

Aus den Eigenschaften der Räume Hölder-stetiger Funktionen (s. z.B. Wloka (1971)) sowie der Abgeschlossenheit und Beschränktheit von K ergeben sich leicht die folgenden Aussagen.

Lemma 5.2. (Kompakte Teilmengen von K) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein beschränktes Lipschitz-Gebiet mit einer Zerlegung gemäß (5.3).

- (i) Für jedes $\delta > 0$ ist die Menge K_δ , definiert durch (5.5) eine kompakte Teilmenge von K .
- (ii) Für beliebige $0 < \delta_1 < \delta_2 \leq 1$ ist die Menge K_{δ_2} eine kompakte Teilmenge von K_{δ_1} .

Wir erhalten folgendes Resultat, wobei die Existenzaussage wesentlich auf einem bekannten Satz von Weierstraß über das Minimum einer stetigen Funktion basiert, die auf einer kompakten Teilmenge eines metrischen Raumes definiert ist.

Satz 5.3. (Kompaktheit von Φ und Existenz eines globalen Minimums) Es mögen die Voraussetzungen im Satz 3.4, (5.1) und (4.10) – (4.14) gelten. Seien weiter K_δ gemäß (5.5) und $1 \geq \delta > \delta_1 > 0$. Für das durch (4.9) definierte Funktional Φ gelten dann:

- (i) Kompaktheit von Φ :
 - (a) $\Phi : K_\delta \subset K \rightarrow \mathbb{R}$ stetig, kompakt bezüglich der Norm in $(L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}$.
 - (b) Für $0 < \delta_1 < \delta \leq 1$ gilt $\Phi : K_\delta \subset K_{\delta_1} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig, kompakt bezüglich der Norm in K_{δ_1} .

- (ii) Existenz eines globalen Minimums:

$$(5.6) \quad \exists \kappa_0 \in K_\delta \quad \forall \kappa \in K_\delta \quad : \quad \Phi(\kappa_0, \bar{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\tau}) \leq \Phi(\kappa, \bar{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\tau}).$$

Bemerkungen 5.4. (i) Die vorstehenden Resultate gelten auch, falls der Regularisierungsparameter α gleich null ist.

- (ii) Statt der Menge K_δ können auch beschränkte, stückweise konstante Funktionen bezüglich der Zerlegung (5.3) genommen werden.
- (iii) Die vorstehenden Ergebnisse gelten analog auch für Polykristalle und Kompositionsmaterialien (s. Bemerkung 3.2), wenn die Zerlegung in (5.3) der durch den Polykristall bzw. durch den Kompositen in (3.20) gegebenen untergeordnet ist.

5.2 Existenz eines globalen Minimums auf K und K_{reg}

Der Nachweis eines globalen Minimums auf dem gesamten Definitionsbereich K erfordert stärkere Voraussetzungen als beim Vorgehen im letzten Unterabschnitt. Zur besseren Übersicht betrachten wir zuerst einen Spezialfall des in (4.9) dargestellten Funktionals und wenden uns später - unter stärkeren Voraussetzungen - dem allgemeinen Fall zu, wobei die Parameterfunktionen zu einer engeren Menge K_{reg} gehören. Wir definieren für $\kappa \in K$ unter den Voraussetzungen des Satzes 3.4 sowie $\mathbf{f} \in V_0^*$:

$$(5.7) \quad \Phi_2(\kappa) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_\kappa - \mathbf{v}_\kappa) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_\kappa - \mathbf{v}_\kappa) \, dx,$$

wobei die Abhängigkeit von den fixierten $\bar{\mathbf{u}}$ und $\boldsymbol{\tau}$ nicht explizit aufgeführt wird.

Satz 5.5. (Existenz eines globalen Minimums auf K) Für die Parametermenge K gemäß (3.8) – (3.10) gelte

$$(5.8) \quad K \quad \text{konvex.}$$

Es seien $\mathbf{f} \in V_0^*$, $\boldsymbol{\tau} \in ((W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3)^*$ und $\bar{\mathbf{u}} \in (W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3$ mit der Fortsetzungseigenschaft (3.30). Dann besitzt das gemäß (5.7) definierte Funktional Φ_2 auf K ein nichtnegatives globales Minimum. Es gilt also

$$(5.9) \quad \exists \kappa_0 \in K \quad \forall \kappa \in K \quad : \quad \Phi_2(\kappa) \geq \Phi_2(\kappa_0) \geq 0.$$

Beweis: Existenz einer minimisierenden Folge: Nach Konstruktion und wegen (3.10) ist $\Phi_2 \geq 0$. Somit existiert eine Folge (κ_n) in K mit

$$(5.10) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \Phi_2(\kappa_n) = \inf_{\kappa \in K} \Phi_2(\kappa) =: \alpha_0 \geq 0.$$

Zu zeigen ist nun, dass ein $\kappa_0 \in K$ existiert mit $\Phi_2(\kappa_0) = \alpha_0$.

Auswahl schwach konvergenter Teilfolgen: Da K eine abgeschlossene beschränkte konvexe Teilmenge von $(L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}$ ist, so existiert nach dem Satz von Banach und Alaoglu eine Teilfolge der Folge (κ_n) , ebenso mit (κ_n) bezeichnet, sowie ein $\kappa_0 \in K$ mit

$$(5.11) \quad \kappa_n \xrightarrow{w^*} \kappa_0.$$

(Mit $\xrightarrow{w^*}$ bezeichnen wir die schwache* Konvergenz.) Zu κ_n und κ_0 existieren eindeutig bestimmte schwache Lösungen \mathbf{u}_{κ_n} , \mathbf{u}_{κ_0} und \mathbf{v}_{κ_n} , \mathbf{v}_{κ_0} der Aufgaben I bzw. II. Nach Satz 3.4 sind die Folgen (\mathbf{u}_{κ_n}) und (\mathbf{v}_{κ_n}) in $V_0 \subset (W^{1,2}(\Omega))^3$ beschränkt. Dann existieren in $(W^{1,2}(\Omega))^3$ schwach konvergente Teilfolgen, die in $(L^2(\Omega))^3$ stark sowie fast überall auf Ω punktweise gegen $\mathbf{u}_0 \in (W^{1,2}(\Omega))^3$ bzw. $\mathbf{v}_0 \in (W^{1,2}(\Omega))^3$ konvergieren. Überdies konvergieren die Folgen der ersten schwachen Ableitungen schwach gegen die entsprechenden schwachen Ableitungen von \mathbf{u}_0 bzw. \mathbf{v}_0 . Aus Bequemlichkeit seien diese Teilfolgen ebenso mit (\mathbf{u}_{κ_n}) und (\mathbf{v}_{κ_n}) bezeichnet.

Wir zeigen, dass die Folgen \mathbf{u}_{κ_n} und \mathbf{v}_{κ_n} in $(W^{1,2}(\Omega))^3$ auch schwach gegen \mathbf{u}_{κ_0} bzw. \mathbf{v}_{κ_0} konvergieren. Dazu zeigen wir zuerst die folgende Beziehung.

$$(5.12) \quad \forall \varphi \in V_0 \quad : \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0)(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_n}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_0})) : \boldsymbol{\varepsilon}(\varphi) \, dx \rightarrow 0,$$

Offenbar folgt aus der Definition der schwachen Lösung (3.35):

$$(5.13) \quad \forall \varphi \in V_0 \quad : \quad \int_{\Omega} (\mathbb{E}(\kappa_n)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_n}) - \mathbb{E}(\kappa_0)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_0})) : \boldsymbol{\varepsilon}(\varphi) \, dx.$$

Hieraus folgt dann leicht durch Umstellung und erneuter Beachtung von (3.35):

$$(5.14) \quad \forall \varphi \in V_0 \quad : \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0)(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_n}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_0})) : \boldsymbol{\varepsilon}(\varphi) \, dx = \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_n)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_n}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\varphi) \, dx + \\ - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_n)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_0}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\varphi) \, dx = \langle \boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{((W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3)^* (W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3} + \\ + \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{V_0^* V_0} - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_n)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_0}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\varphi) \, dx.$$

Im letzten Integral ist der Grenzübergang für $n \rightarrow \infty$ korrekt, weshalb dann die rechte Seite gegen null geht. Damit ist die Beziehung (5.12) bewiesen. Wegen der schwachen Konvergenz der Ableitungen in $(L^2(\Omega))^3$ gilt auch

$$(5.15) \quad \forall \varphi \in V_0 \quad : \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0)(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_n}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_0)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\varphi) \, dx \rightarrow 0,$$

Ein Vergleich mit (5.12) ergibt dann

$$(5.16) \quad \forall \varphi \in V_0 \quad : \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0)(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_0}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_0)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\varphi) \, dx = 0,$$

Da $\varphi = \mathbf{v}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_0 \in V_0$ liefert ergibt die Kornsche Ungleichung

$$(5.17) \quad \mathbf{v}_{\kappa_0} = \mathbf{v}_0.$$

Analoge Argumente lassen sich auch auf die Folge (\mathbf{u}_{κ_n}) anwenden. Somit gelten

$$(5.18) \quad \forall \varphi \in V_1 \quad : \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0)(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_n}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0})) : \boldsymbol{\varepsilon}(\varphi) \, dx \rightarrow 0.$$

sowie

$$(5.19) \quad \mathbf{u}_{\kappa_0} = \mathbf{u}_0.$$

$\tilde{\mathbf{u}} \in V_0$ sei eine Homogenisierungsfunktion für \mathbf{u}_{κ_n} und $\mathbf{u}_{\kappa_0} = \mathbf{u}_0$. Somit gilt

$$(5.20) \quad \mathbf{u}_{\kappa_n} = \mathbf{w}_{\kappa_n} + \tilde{\mathbf{u}}, \quad \mathbf{u}_{\kappa_0} = \mathbf{w}_{\kappa_0} + \tilde{\mathbf{u}}$$

mit $\mathbf{w}_{\kappa_n}, \mathbf{w}_{\kappa_0} \in V_1$.

Grenzübergang im Funktional: Nach Definition von Φ_2 ergibt sich

$$(5.21) \quad \Phi_2(\kappa_n) - \Phi_2(\kappa_0) = \\ = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_n)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_n} - \mathbf{v}_{\kappa_n}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_n} - \mathbf{v}_{\kappa_n}) \, dx - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) \, dx = \\ = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\mathbb{E}(\kappa_n)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_n}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_n}) - \mathbb{E}(\kappa_0)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0})) \, dx + \\ - \int_{\Omega} (\mathbb{E}(\kappa_n)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_n}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_n}) - \mathbb{E}(\kappa_0)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_0})) \, dx + \\ + \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\mathbb{E}(\kappa_n)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_n}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_n}) - \mathbb{E}(\kappa_0)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_0}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_{\kappa_0})) \, dx.$$

Es sind \mathbf{v}_{κ_n} und \mathbf{v}_{κ_0} zu κ_n bzw. κ_0 gehörende schwache Lösungen. Außerdem sind \mathbf{u}_{κ_n} und \mathbf{u}_{κ_0} sowie \mathbf{v}_{κ_n} und \mathbf{v}_{κ_0} zugelassene Testfunktionen. Außerdem sind die Funktionen \mathbf{w}_{κ_n} und \mathbf{w}_{κ_0} zulässige Testfunktionen in den schwachen Formulierungen für \mathbf{u}_{κ_n} und \mathbf{u}_{κ_0} . Somit können die in den Integralen in (5.21) stehenden Differenzen geschickt umgeschrieben werden. Es ergibt sich dann.

$$(5.22) \quad \Phi_2(\kappa_n) - \Phi_2(\kappa_0) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\mathbb{E}(\kappa_n)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) - \mathbb{E}(\kappa_0)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_0})) : \varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}) \, dx + \frac{1}{2} \langle \mathbf{f}, \mathbf{w}_{\kappa_n} - \mathbf{w}_{\kappa_0} \rangle + \\ - \langle \mathbf{f}, \mathbf{u}_{\kappa_n} - \mathbf{u}_{\kappa_0} \rangle - \langle \boldsymbol{\tau}, \mathbf{u}_{\kappa_n} - \mathbf{u}_{\kappa_0} \rangle + \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\tau}, \mathbf{v}_{\kappa_n} - \mathbf{v}_{\kappa_0} \rangle + \frac{1}{2} \langle \mathbf{f}, \mathbf{v}_{\kappa_n} - \mathbf{v}_{\kappa_0} \rangle.$$

Die Dualpaarungen konvergieren für $n \rightarrow \infty$ gegen null. Wir zeigen, dass das Integral auf der rechten Seite von (5.22) für alle zulässigen Fortsetzungen $\tilde{\mathbf{u}}$ des Randwertes $\bar{\mathbf{u}}$ auf Γ_1 den gleichen Wert besitzt. Seien also $\tilde{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}} \in V_0$ mit $\tilde{\mathbf{u}} = \hat{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{u}}$ auf Γ_1 . Wegen

$$(5.23) \quad \tilde{\mathbf{u}} = \hat{\mathbf{u}} + (\tilde{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}}), \quad (\tilde{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}}) \in V_1$$

sowie der schon benutzten Eigenschaft, dass \mathbf{u}_{κ_n} und \mathbf{u}_{κ_0} schwache Lösungen sind, gilt dann

$$(5.24) \quad \int_{\Omega} (\mathbb{E}(\kappa_n)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) - \mathbb{E}(\kappa_0)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_0})) : \varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}) \, dx = \int_{\Omega} (\mathbb{E}(\kappa_n)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) - \mathbb{E}(\kappa_0)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_0})) : \varepsilon(\hat{\mathbf{u}}) \, dx.$$

Dieses Integral lässt sich umformen zu

$$(5.25) \quad \int_{\Omega} (\mathbb{E}(\kappa_n)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) - \mathbb{E}(\kappa_0)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_0})) : \varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}) \, dx = \\ = \int_{\Omega} (\mathbb{E}(\kappa_n) - \mathbb{E}(\kappa_0))\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) : \varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}) \, dx + \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n} - \mathbf{u}_{\kappa_0}) : \varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}) \, dx.$$

Offenbar konvergiert das zweite Integral auf der rechten Seite für $n \rightarrow \infty$ gegen null. Der Grenzübergang für $n \rightarrow \infty$ in (5.21) ergibt somit unter Beachtung von (5.22), (5.25) sowie (5.10):

$$(5.26) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\mathbb{E}(\kappa_n) - \mathbb{E}(\kappa_0))\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) : \varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}) \, dx = \\ = \alpha_0 - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) : \varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) \, dx =: \beta_0 \leq 0.$$

Es bleibt zu zeigen, dass $\beta_0 = 0$ ist. Das Integral auf der linken Seite von (5.26) konvergiert sowohl für $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}_{\kappa_n}$ als auch für $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}_{\kappa_0}$. Somit erhalten wir:

$$(5.27) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_n)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) : \varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) \, dx - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) : \varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) \, dx \right\} = \\ = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_n)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) : \varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_0}) \, dx - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_0}) : \varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_0}) \, dx \right\}.$$

Das zweite Integral auf der rechten Seite konvergiert offensichtlich. Das zweite Integral auf der linken Seite stellt wegen der Eigenschaften von $\mathbb{E}(\kappa_0)$ und wegen der Kornschen Ungleichung das Quadrat einer in $(W^{1,2}(\Omega))^3$ äquivalenten Norm da. Somit konvergiert auch dieses Integral (gegebenenfalls nach Auswahl einer Teilfolge). Im Ergebnis erhalten wir

$$(5.28) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_n)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) : \varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n} - \mathbf{u}_{\kappa_0}) \, dx = 0.$$

Das Integral in der Beziehung (5.22) lässt sich mit $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}_{\kappa_0}$ wie folgt schreiben.

$$(5.29) \quad \int_{\Omega} (\mathbb{E}(\kappa_n)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) - \mathbb{E}(\kappa_0)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_0})) : \varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_0}) \, dx = \\ = \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_n)\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n}) : \varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_n} - \mathbf{u}_{\kappa_0}) \, dx + \int_{\Omega} (\mathbb{E}(\kappa_n) - \mathbb{E}(\kappa_0))\varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_0}) : \varepsilon(\mathbf{u}_{\kappa_0}) \, dx.$$

Das zweite Integral auf der rechten Seite geht offenbar gegen null, das erste wegen (5.28). Damit ergibt der Grenzübergang in (5.22) null, woraus dann $\beta_0 = 0$ und die Behauptung folgen. \square

Ein Übertragen des vorstehenden Ergebnisses auf das gesamte Kostenfunktional in (4.9), insbesondere auf die ersten beide Integrale, stößt auf größere Schwierigkeiten. In den folgenden Bemerkungen geben wir weitere Resultate an, die sich leicht beweisen lassen.

- Bemerkungen 5.6.** (i) Der Satz 5.5 gilt auch mit denselben Voraussetzungen, falls im Funktional (5.7) $\mathbb{E}(\kappa)$ durch $\mathbb{E}(\tilde{\kappa})$ mit beliebigem fixierten $\tilde{\kappa} \in K$ oder durch den vierstufigen Identitätstensor \mathbb{I} ersetzt wird, da dann wegen der Kornschen Ungleichung das Quadrat einer in $(W^{1,2}(\Omega))^3$ äquivalenten Norm erzeugt wird (s. Bemerkung 4.2 (ii)).
- (ii) Der Satz 5.5 bleibt auch gültig, wenn zum Funktional (5.7) das dritte, vierte und fünfte Integral sowie der Regularisierungsterm aus der allgemeinen Dartsellung (4.9) hinzugefügt werden. Dabei sollen dann die (4.10), (4.11), (4.13) und (4.14) gelten. Die Begründung stützt sich auf die kompakten Einbettungen von $W^{1,2}(\Omega)$ in $L^2(\Omega)$ sowie $L^2(\Gamma_1)$ sowie auf die schwache* Unterhalbstetigkeit der Norm.
- (iii) Der Beweis des Satzes 5.5 nutzt wesentlich die Konvexität der Menge K . Wie in Bemerkung 3.1 gesehen, ist im isotropen Fall die Konvexität von K leicht zu sichern. In den anisotropen Fällen können sich hier Schwierigkeiten ergeben.

Um ein analoges Existenzresultat für das allgemeine Kostenfunktional in (4.9) zu beweisen, bedarf es besserer Regularität der schwachen Lösungen, wie im Abschnitt 3.5 angesprochen. Unter den Voraussetzungen des Satzes 3.8 gehören die schwachen Lösungen zu $(W_{loc}^{2,2}(\Omega))^3$. Allerdings lässt sich auf die Parametermenge $K \cap M$ nicht der Satz von Banach und Alaoglu anwenden, selbst bei angenommener Konvexität. Daher muss zusätzlich eine bessere Regularität der Parameterfunktionen κ gefordert werden. Sei z.B.

$$(5.30) \quad \emptyset \neq K_{reg} \subset K \cap (W_{loc}^{3,2}(\Omega))^{nai} \quad \text{abgeschlossen, beschränkt, konvex in } (W^{3,2}(\Omega'))^{nai},$$

wobei Ω' ein Gebiet mit $\Omega' \subset\subset \Omega$ ist. Aufgrund der stetigen Einbettung (bei zwei und drei Raumdimensionen und hinreichend glattem Rand) von $(W^{3,2}(\Omega))^{nai}$ in $(C^{0,1}(\bar{\Omega}))^{nai}$ (Lipschitz-stetige Funktionen) dürfen wir für $\kappa \in K_{reg}$ Satz 3.8 in Anspruch nehmen. Es folgt dann ohne Mühe:

Satz 5.7. (Existenz eines globalen Minimums auf K_{reg}) Es seien $\mathbf{f} \in V_0^* \cap (L_{loc}^2(\Omega))^3$, $\boldsymbol{\tau} \in (L^2(\Gamma_1))^3$ und $\bar{\mathbf{u}} \in (W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3$ mit der Fortsetzungseigenschaft (3.30). Außerdem mögen (4.10) – (4.14) sowie die folgenden Bedingungen an die Gewichtsfunktionen g_1 und g_2 gelten.

$$(5.31) \quad \forall x \in \Omega \setminus \Omega' \quad : \quad g_j(x) = 0 \quad (j = 1, 2).$$

Dann besitzt das gemäß (4.9) definierte Funktional Φ auf K_{reg} ein nichtnegatives globles Minimum, d.h.

$$(5.32) \quad \exists \kappa_0 \in K_{reg} \quad \forall \kappa \in K_{reg} \quad : \quad \Phi(\kappa) \geq \Phi(\kappa_0) \geq 0.$$

Außerdem gibt es eine minimisierende Folge κ_n in K_{reg} , die in der Norm von $(W^{2,2}(\Omega'))^{nai}$ gegen κ_0 konvergiert. Die zugehörigen Folgen der schwachen Lösungen $\mathbf{u}_{\kappa_n}, \mathbf{v}_{\kappa_n} \in V_1 \cap (W^{2,2}(\Omega'))^3$ konvergieren in der Norm von $(W^{1,2}(\Omega'))^{nai}$ gegen \mathbf{u}_{κ_0} bzw. \mathbf{v}_{κ_0} .

Das vorstehende Resultat gilt z.B. für die homogene Elastizität mit konstanten Einträgen in \mathbb{E} , jedoch allgemein nicht für Polykristalle und Komposite (s. Bemerkung 3.2).

5.3 Fréchet-Differentiale, notwendige und hinreichende Bedingungen für ein lokales Minimum des Kostenfunktionals

Bei weitergehenden mathematischen Untersuchungen sowie bei numerischen Verfahren ist es oft nötig, die (ersten und zweiten) Ableitungen des Kostenfunktionals nach dem Parameter zu berechnen. Bei diskreten Kostenfunktionalen mit diskreten Parametern führt das auf Matrizen. Verschiedentlich wird das Finden dieser Ableitungen als Sensitivitätsanalyse bezeichnet (vgl. z.B. Mahnken und Stein (1996a)). Wir beweisen zuerst die stetige Fréchet-Differenzierbarkeit der Lösungsoperatoren L_I und L_{II} unter den Voraussetzungen für die schwache Lösbarkeit zuzüglich der Konvexität der Parametermenge K . Da die Lösungsoperatoren in der schwachen Lösungstheorie “nur abstrakt” definiert sind, ist es zweckmäßig, statt mit den Fréchet-Ableitungen mit den zugehörigen Fréchet-Differentialen zu arbeiten. Zur Differentialrechnung in Banach-Räumen sei z.B. auf Showalter (1997) und Amann und Escher (2006) verwiesen.

Aus Gründen der Übersichtlichkeit führen wir die Untersuchungen für diese Parametermenge K gemäß (3.8) – (3.10) durch, obwohl die nachfolgenden Resultate auch für den allgemeinen Fall von Polykristallen und Kompositen gemäß der Bemerkung 3.2 gelten, da die Regularität von κ auf die Fréchet-Differenzierbarkeit des Kostenfunktionals keinen Einfluss hat.

Satz 5.8. Es seien die Voraussetzungen des Sates 3.4 sowie (5.8) und

$$(5.33) \quad \overset{\circ}{K} \neq \emptyset$$

gegeben. Dann gelten:

(i) Der im Abschnitt 3.3 gemäß

$$(5.34) \quad \mathbf{u}_\kappa = L_I(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa)$$

definierte Lösungsoperator L_I der Aufgabe I ist im Innern $\overset{\circ}{K}$ von K stetig Fréchet-differenzierbar. Sein Fréchet-Differential im Punkt $\kappa_0 \in \overset{\circ}{K}$ und für den Zuwachs $\kappa \in K_{max}$ mit $\kappa_0 + \kappa \in K$ lautet:

$$(5.35) \quad \frac{dL_I}{d\kappa}(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0)\kappa = L_I(F_{\kappa_0}^I(\kappa), 0, \kappa_0),$$

wobei $F_{\kappa_0}^I(\kappa) = F_{\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0}^I(\kappa) \in V_1^*$ das gemäß

$$(5.36) \quad \langle F_{\kappa_0}^I(\kappa), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{V_1^* V_1} := - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(L_I(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx \quad \forall \boldsymbol{\varphi} \in V_1$$

definierte lineare stetige Funktional auf V_1 ist, das stetig von κ_0 abhängt.

(ii) Der im Abschnitt 3.3 gemäß

$$(5.37) \quad \mathbf{v}_\kappa = L_{II}(\mathbf{f}, \boldsymbol{\tau}, \kappa)$$

definierte Lösungsoperator L_{II} der Aufgabe II ist im Innern $\overset{\circ}{K}$ von K stetig Fréchet-differenzierbar. Sein Fréchet-Differential im Punkt $\kappa_0 \in \overset{\circ}{K}$ und für den Zuwachs $\kappa \in K$ mit $\kappa_0 + \kappa \in K$ lautet:

$$(5.38) \quad \frac{dL_{II}}{d\kappa}(\mathbf{f}, \boldsymbol{\tau}, \kappa_0)\kappa = L_{II}(F_{\kappa_0}^{II}(\kappa), 0, \kappa_0),$$

wobei $F_{\kappa_0}^{II}(\kappa) = F_{\mathbf{f}, \boldsymbol{\tau}, \kappa_0}^{II}(\kappa) \in V_0^*$ das gemäß

$$(5.39) \quad \langle F_{\kappa_0}^{II}(\kappa), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{V_0^* V_1} := - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(L_{II}(\mathbf{f}, \boldsymbol{\tau}, \kappa_0)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx \quad \forall \boldsymbol{\varphi} \in V_0$$

definierte lineare stetige Funktional auf V_0 ist, das stetig von κ_0 abhängt.

Beweis: Für $\kappa_0 \in K$ und $\kappa_0 + \kappa \in K$ gelten offenbar (s. (3.28) und (3.29))

$$(5.40) \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0 + \kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(L_I(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0 + \kappa)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx = \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{V_1^* V_1} \quad \forall \boldsymbol{\varphi} \in V_1,$$

$$(5.41) \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0) \boldsymbol{\varepsilon}(L_I(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx = \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{V_1^* V_1} \quad \forall \boldsymbol{\varphi} \in V_1.$$

sowie

$$(5.42) \quad L_I(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0 + \kappa) = L_I(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0) = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{auf } \Gamma_1.$$

Die Bildung der Differenz von (5.40) und (5.41) führt nach Umordnung wegen der Linearität von \mathbb{E} bezüglich κ zu

$$(5.43) \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0) \boldsymbol{\varepsilon}(L_I(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0 + \kappa) - L_I(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx = - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(L_I(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx + \\ - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(L_I(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0 + \kappa) - L_I(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx \quad \forall \boldsymbol{\varphi} \in V_1.$$

Das erste Integral auf der rechten Seite ist bezüglich κ eine lineare und stetige Abbildung, das zweite Integral ist wegen der Lipschitz-Stetigkeit von L_I bezüglich κ ein $o(\kappa)$. Somit existiert das Fréchet-Differential von L_I und es gilt

$$(5.44) \quad \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0) \boldsymbol{\varepsilon}\left(\frac{dL_I}{d\kappa}(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0)\kappa\right) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx = - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(L_I(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varphi}) \, dx = \\ =: \langle F_{\kappa_0}^I(\kappa), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{V_1^* V_1} \quad \forall \boldsymbol{\varphi} \in V_1.$$

Wegen der offensichtlichen Beziehung

$$(5.45) \quad \frac{dL_I}{d\kappa}(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0)\kappa = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{auf } \Gamma_1$$

ist das Fréchet-Differential $\frac{dL_I}{d\kappa}(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0)\kappa$ schwache Lösung der Aufgabe I für die Daten $F_{\kappa_0}^I(\kappa) \in V_1^*$, $0 \in (W^{\frac{1}{2},2}(\Gamma_1))^3$ und $\kappa_0 \in K$, also folgt (5.35).

Für den Lösungsoperator L_{II} der Aufgabe II verläuft der Beweis analog. \square

Bemerkungen 5.9. (i) Der Beweis des Satzes 5.8 zeigt, dass die Lösungsoperatoren L_I und L_{II} auch auf dem Rand von K und somit auf der abgeschlossenen Menge K stetig Fréchet-differenzierbar sind, wenn für Punkte $\kappa_0 \in \partial K$ nur Richtungen zugelassen werden, die in die Menge K zeigen (s. z.B. Schowalter (1997), Amann und Escher (2006) für Einzelheiten).

(ii) Die Fréchet-Differentiale (bzw. die Fréchet-Ableitungen) der Lösungsoperatoren können als “Sensitivitäten” bezeichnet werden, wie es verschiedentlich für die Ableitung des Verschiebungsfeldes nach dem Parameter geschieht (vgl. z.B. Widany und Mahnken (2012)).

Es zeigt sich, dass *ohne* weitere zusätzliche Bedingungen die Lösungsoperatoren auch zweimal stetig Fréchet-differenzierbar sind, und dass die zweiten Fréchet-Differentiale sich in ähnlicher Weise wie die ersten als schwache Lösungen von Aufgaben des Typs I bzw. II darstellen lassen.

Satz 5.10. Unter den Voraussetzungen des Satzes 5.8 gelten:

(i) Der Lösungsoperator L_I der Aufgabe I ist auf K zweimal stetig Fréchet-differenzierbar, wobei bei Randpunkten nur Richtungen zugelassen sind, die nicht aus K hinausführen. Sein zweites Fréchet-Differential im Punkt $\kappa_0 \in K$ und für die Zuwächse $\kappa, \xi \in K_{max}$ mit $\kappa_0 + \kappa, \kappa_0 + \xi \in K$ lautet:

$$(5.46) \quad \frac{d^2 L_I}{d\kappa^2}(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0)(\kappa, \xi) = L_I(G_{\kappa_0}^I(\kappa, \xi), 0, \kappa_0),$$

wobei $G_{\kappa_0}^I(\kappa, \xi) = G_{\mathbf{f}, \bar{\mathbf{u}}, \kappa_0}^I(\kappa, \xi) \in V_1^*$ die gemäß

$$(5.47) \quad \langle G_{\kappa_0}^I(\kappa, \xi), \varphi \rangle_{V_1^* V_1} := - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \varepsilon(L_I(F_{\kappa_0}^I(\xi), 0, \kappa_0)) : \varepsilon(\varphi) dx + \\ - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\xi) \varepsilon(L_I(F_{\kappa_0}^I(\kappa), 0, \kappa_0)) : \varepsilon(\varphi) dx \quad \forall \varphi \in V_1$$

definierte stetige Bilinearform auf V_1 ist, die stetig von κ_0 abhängt.

(ii) Der Lösungsoperator L_{II} der Aufgabe II ist auf K zweimal stetig Fréchet-differenzierbar, wobei bei Randpunkten nur Richtungen zugelassen sind, die nicht aus K hinausführen. Sein zweites Fréchet-Differential im Punkt $\kappa_0 \in K$ und für die Zuwächse $\kappa, \xi \in K$ mit $\kappa_0 + \kappa, \kappa_0 + \xi \in K$ lautet:

$$(5.48) \quad \frac{d^2 L_{II}}{d\kappa^2}(\mathbf{f}, \boldsymbol{\tau}, \kappa_0)(\kappa, \xi) = L_{II}(G_{\kappa_0}^{II}(\kappa, \xi), 0, \kappa_0),$$

wobei $G_{\kappa_0}^{II}(\kappa, \xi) = G_{\mathbf{f}, \boldsymbol{\tau}, \kappa_0}^{II}(\kappa, \xi) \in V_0^*$ die gemäß

$$(5.49) \quad \langle G_{\kappa_0}^{II}(\kappa, \xi), \varphi \rangle_{V_0^* V_1} := - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \varepsilon(L_{II}(F_{\kappa_0}^{II}(\xi), 0, \kappa_0)) : \varepsilon(\varphi) dx + \\ - \int_{\Omega} \mathbb{E}(\xi) \varepsilon(L_{II}(F_{\kappa_0}^{II}(\kappa), 0, \kappa_0)) : \varepsilon(\varphi) dx \quad \forall \varphi \in V_0$$

definierte stetige Bilinearform auf V_0 ist, die stetig von κ_0 abhängt.

In ähnlicher Weise wie für die Lösungsoperatoren L_I und L_{II} lässt sich auch die Fréchet-Differenzierbarkeit der Kostenfunktionale zeigen. Aus Gründen der besseren Übersicht betrachten wir zuerst den technisch einfacheren Fall mit Φ_2 gemäß (5.7).

Satz 5.11. Es seien die Voraussetzungen des Satzes 5.5 sowie (5.33) gegeben. Dann ist das gemäß (5.7) definierte Kostenfunktional Φ_2 ist auf K zweimal stetig Fréchet-differenzierbar (in Randpunkten in Richtung Inneres).

(i) Das Fréchet-Differential im Punkt $\kappa_0 \in k$ und für den Zuwachs $\kappa \in K_{max}$ mit $\kappa_0 + \kappa \in K$ lautet:

$$(5.50) \quad \begin{aligned} \frac{d\Phi_2}{d\kappa}(\kappa_0)\kappa &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) dx + \\ &+ \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0) \boldsymbol{\varepsilon} \left(\frac{dL_I}{d\kappa}(\kappa_0)\kappa - \frac{dL_{II}}{d\kappa}(\kappa_0)\kappa \right) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) dx. \end{aligned}$$

(ii) Das zweite Fréchet-Differential im Punkt $\kappa_0 \in k$ und für die Zuwächse $\kappa, \xi \in K_{max}$ mit $\kappa_0 + \kappa, \kappa_0 + \xi \in K$ lautet:

$$(5.51) \quad \begin{aligned} \frac{d^2\Phi_2}{d\kappa^2}(\kappa_0)(\kappa, \xi) &= \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon} \left(\frac{dL_I}{d\kappa}(\kappa_0)\xi - \frac{dL_{II}}{d\kappa}(\kappa_0)\xi \right) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) dx + \\ &+ \int_{\Omega} \mathbb{E}(\xi) \boldsymbol{\varepsilon} \left(\frac{dL_I}{d\kappa}(\kappa_0)\kappa - \frac{dL_{II}}{d\kappa}(\kappa_0)\kappa \right) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) dx + \\ &+ \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0) \boldsymbol{\varepsilon} \left(\frac{d^2L_I}{d\kappa^2}(\kappa_0)(\kappa, \xi) - \frac{d^2L_{II}}{d\kappa^2}(\kappa_0)(\kappa, \xi) \right) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) dx + \\ &+ \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0) \boldsymbol{\varepsilon} \left(\frac{dL_I}{d\kappa}(\kappa_0)\kappa - \frac{dL_{II}}{d\kappa}(\kappa_0)\kappa \right) : \boldsymbol{\varepsilon} \left(\frac{dL_I}{d\kappa}(\kappa_0)\xi - \frac{dL_{II}}{d\kappa}(\kappa_0)\xi \right) dx. \end{aligned}$$

Folgerung 5.12. Die Beziehungen (5.50) und (5.51) lassen sich umschreiben. Dabei werden die Darstellungen (5.35) und (5.38) sowie (5.46) und (5.48) für die ersten und zweiten Differentiale der Lösungsoperatoren L_I und L_{II} benutzt. Das ergibt dann

$$(5.52) \quad \begin{aligned} \frac{d\Phi_2}{d\kappa}(\kappa_0)\kappa &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) dx + \\ &+ \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0) \boldsymbol{\varepsilon} (L_I(F_{\kappa_0}^I(\kappa), 0, \kappa_0) - L_{II}(F_{\kappa_0}^{II}(\kappa), 0, \kappa_0)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) dx. \end{aligned}$$

sowie

$$(5.53) \quad \begin{aligned} \frac{d^2\Phi_2}{d\kappa^2}(\kappa_0)(\kappa, \xi) &= \\ &= \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa) \boldsymbol{\varepsilon} (L_I(F_{\kappa_0}^I(\xi), 0, \kappa_0) - L_{II}(F_{\kappa_0}^{II}(\xi), 0, \kappa_0)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) dx + \\ &+ \int_{\Omega} \mathbb{E}(\xi) \boldsymbol{\varepsilon} (L_I(F_{\kappa_0}^I(\kappa), 0, \kappa_0) - L_{II}(F_{\kappa_0}^{II}(\kappa), 0, \kappa_0)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) dx + \\ &+ \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0) \boldsymbol{\varepsilon} (L_I(G_{\kappa_0}^I(\kappa, \xi), 0, \kappa_0) - L_{II}(G_{\kappa_0}^{II}(\kappa, \xi), 0, \kappa_0)) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_{\kappa_0} - \mathbf{v}_{\kappa_0}) dx + \\ &+ \int_{\Omega} \mathbb{E}(\kappa_0) \boldsymbol{\varepsilon} (L_I(F_{\kappa_0}^I(\kappa), 0, \kappa_0) - L_{II}(F_{\kappa_0}^{II}(\kappa), 0, \kappa_0)) : \\ &\quad : \boldsymbol{\varepsilon} (L_I(F_{\kappa_0}^I(\xi), 0, \kappa_0) - L_{II}(F_{\kappa_0}^{II}(\xi), 0, \kappa_0)) dx. \end{aligned}$$

Somit können die ersten beiden Fréchet-Differentiale des Kostenfunktionals Φ_2 ohne Verwendung der Fréchet-Differentiale der Lösungsoperatoren, sondern nur mit diesen selbst geschrieben werden.

Es ergeben sich aus den allgemeinen Resultaten für reelle Funktionen auf Banach-Räumen notwendige und hinreichende Bedingungen für die Existenz eines lokalen Minimums (s. z.B. Schowalter (1997)).

Satz 5.13. (Notwendige Bedingung für ein lokales Minimum) Es seien die Voraussetzungen des Satzes 5.5 sowie (5.33) gegeben und das gemäß (5.7) definierte Kostenfunktional Φ_2 besitze in $\kappa_0 \in K$ ein lokales Minimum. Dann gilt:

$$(5.54) \quad \forall \kappa \in K_{max}, \quad \kappa_0 + \kappa \in K \quad : \quad \frac{d\Phi_2}{d\kappa}(\kappa_0)(\kappa - \kappa_0) \geq 0.$$

Bemerkungen 5.14. (i) Das allgemeine Resultat gilt auch, falls nur die schwächere Voraussetzung der Gâteaux-Differenzierbarkeit gegeben ist (vgl. z.B. Schowalter (1997), Zeidler (1986)).

(ii) Für $\kappa_0 \in \overset{\circ}{K}$ folgt aus (5.54) die notwendige Bedingung:

$$(5.55) \quad \forall \kappa \in K_{max} \quad : \quad \frac{d\Phi_2}{d\kappa}(\kappa_0)\kappa = 0.$$

(iii) Unter den Voraussetzungen des Satzes 5.5 sowie der Bedingung (5.33) gilt für die $\kappa_0 \in K$, in denen Φ_2 das globale Minimum annimmt, die Bedingung (5.54).

Mit Hilfe des ersten und zweiten Fréchet-Differentials lässt sich auch ein hinreichendes Kriterium für ein lokales Minimum formulieren. Im konkreten Fall scheint jedoch seine Handhabbarkeit schwierig.

Satz 5.15. (Hinreichende Bedingung für ein lokales Minimum) Es seien die Voraussetzungen des Satzes 5.5 sowie (5.33) gegeben. Das gemäß (5.7) definierte Kostenfunktional Φ_2 besitzt in $\kappa_0 \in K$ ein lokales Minimum, wenn neben der Bedingung (5.54) auch die folgende erfüllt ist.

$$(5.56) \quad \exists c_0 > 0 \quad \forall \kappa \in K_{max} \quad : \quad \frac{d^2 \Phi_2}{d\kappa^2}(\kappa_0)(\kappa, \kappa) \geq c_0 \|\kappa\|_{(L^\infty(\Omega))^{n_{ai}}}^2.$$

Bekanntlich ist die L^∞ -Norm auf $L^\infty(\Omega)$ nicht Fréchet-differenzierbar. Daher ist das allgemeine Kostenfunktional Φ gemäß (4.9) für positive Regularisierungsparameter α nicht Fréchet-differenzierbar. Wird hingegen $\alpha = 0$ gesetzt, so übertragen sich unter den Bedingungen (4.10) – (4.14) die Sätze 5.11, 5.13 und 5.15 ohne Schwierigkeiten auf das allgemeine Funktional Φ . Da die Tensoren $\tilde{\mathbb{E}}_i$ linear und stetig von κ abhängen, steigt im Wesentlichen nur der technische Aufwand.

6 Ausblick

In dieser Arbeit wurde für einen neuen, auf einer Idee von Yun und Shang (2011) fußenden Ansatz zur Parameteridentifizierung bei Festkörpern eine rigorose mathematische Form im Rahmen der schwachen Lösungstheorie partieller Differentialgleichungen gefunden und auf die stationäre lineare, allgemein anisotrope und inhomogene Elastizität in kleinen Deformationen (und im isothermen Fall) angewendet. Für die direkten Aufgaben wurden Existenz- und Einzigkeitsresultate bereitgestellt und die inverse Aufgabe wurde auf globale und lokale Minima untersucht. Die Untersuchung der entsprechenden Aufgaben zur linearen und nichtlinearen Elastizität in endlichen Deformationen geschieht im ähnlichen Rahmen, wobei allerdings die mathematischen Schwierigkeiten beträchtlich anwachsen können, da bereits die entsprechenden direkten Aufgaben mehr Aufwand erfordern. Wir verweisen hierzu auf Ciarlet (1988), Valent (1988), Zeidler (1997).

Bei inelastischem Materialverhalten (in kleinen wie in endlichen Deformationen) besteht kein eindeutiger Zusammenhang zwischen aktueller Spannung und Verzerrung, so dass die Vorgeschichte der Deformation einzubeziehen ist. Eine Übertragung des hier diskutierten Ansatzes auf inelastisches Materialverhalten führt somit auf instationäre Aufgaben. Bei Anwendungen zur Parameteridentifizierung bedeutet dies, dass die Messungen über einen Zeitraum erfolgen. Die mathematische Untersuchung der direkten sowie der inversen Aufgabe führen in vielen Fällen, z.B. Plastizität mit nichtlinearer Verfestigung zu komplexen Aufgabenstellungen, für die bereits die direkten Aufgaben große Herausforderungen darstellen.

In vielen Fällen ist es sinnvoll, sowohl die Temperaturabhängigkeit der Materialfunktionen als auch die Wärmeleitung im Bauteil zu berücksichtigen. Das führt einerseits zu größeren mathematischen Herausforderungen bei der Untersuchung der entstehenden direkten und inversen Aufgaben, andererseits erhöht sich der experimentelle Aufwand. Werden auf Teilen der Oberfläche (bei Experimenten in möglichst enger Nachbarschaft) Temperatur und Wärmestrom (mittels Temperatur-Gradienten-Methode) bestimmt (vgl. z.B. Liščić (2009), Liščić et al. (2011)), so ergeben sich auch für die Wärmeleitung zwei parallele Aufgaben, die für die Bestimmung des Wärmeleitensors analog zur Bestimmung des Elastizitätstensors verwendet werden können. Mögliche Kopplungen zwischen mechanischen und thermischen Effekten erhöhen die Komplexität weiter.

Abschließend sei auf die Herausforderungen bei der Entwicklung effizienter numerischer Algorithmen hingewiesen, um den zu erwartenden großen Rechenaufwand in vertretbaren Zeiträumen zu bewältigen.

Literatur

- M. Abdel-Karim. Numerical integration method for kinematic hardening rules with partial activation of dynamic recovery term. *Int. J. of Plast.*, 21:1303–1321, 2005. doi: 10.1016/j.ijplas.2004.06.001.
- S. Agmon, A. Douglis, und L. Nirenberg. Estimates near the boundary for solutions of elliptic partial differential equations satisfying general boundary conditions 2. *Commun. Pure Appl. Anal.*, 17:35 – 92, 1964.

- H. Alder, D. Hömberg, und W. Weiss. Simulationsbasierte Regelung der Laserhärtung von Stahl. *HTM Z. Werkst. Waermebeh. Fertigung*, 61(2):103 – 108, 2006,. doi: <http://www.htm-journal.de/directlink.asp?HT100370>.
- H Amann und J Escher. *Analysis II. Grundstudium Mathematik. Zweite Auflage*. Birkhäuser, 2006.
- S. Avril und F. Pierron. General framework for the identification of constitutive parameters from full-field measurements in linear elasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 44(14):4978–5002, 2007.
- S. Avril, M. Bonnet, A.-S. Bretelle, M. Grédiac, F. Hild, P. Ienny, F. Latourte, D. Lemosse, S. Pagano, E. Pagnacco, und F. Pierron. Overview of identification methods of mechanical parameters based on full-field measurements. *Experimental Mechanics*, 48:381 – 402, 2008a. doi: 10.1007/s11340-008-9148-y.
- S. Avril, F. Pierron, Y. Pannier, und R. Rotinat. Stress reconstruction and constitutive parameter identification in plane-stress elasto-plastic problems using surface measurements of deformation fields. *Experimental Mechanics*, 48:403 – 419, 2008b.
- H.T. Banks und K. Kunisch. *Estimation Techniques for Distributed Parameter Systems*. Birk-häuser, Boston, 1989.
- Y. Bard. *Nonlinear Parameter Estimation*. Academic Press, New York, 1974.
- S. Bari und T. Hassan. Anatomy of coupled constitutive models for ratcheting simulation. *Int. J. of Plast.*, 16:381–409, 2000. doi: 10.1016/S0749-6419(99)00059-5.
- A. Bertram und R. Glüge. *Festkörpermechanik*. Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 2013.
- M. Bonnet und A. Constantinescu. Inverse problems in elasticity. *Inverse Problems*, 21:R1 – R50, 2005. doi: 10.1088/0266-5611/21/2/R01.
- H.D. Bui und M. Tanaka, editors. *Inverse Problems in Engineering Mechanics*. Balkema, Rotterdam, 1994.
- P. G. Ciarlet. *Mathematical Elasticity*, volume 1 of *Three Dimensional Elasticity*. Elsevier Science Publishers Ltd., 1988.
- S. Cooreman, D. Lecompte, H. Sol, J. Vantomme, und D. Debruyne. Elasto-plastic material parameter identification by inverse methods: Calculation of the sensitivity matrix. *International Journal of Solids and Structures*, 44:4329 – 4341, 2007. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2006.11.024.
- L. Djimli, L. Taleb, und S. Meziani. The role of the experimental data base used to identify material parameters in predicting the cyclic plastic response of an austenitic steel. *Int. J. of Pressure Vessels and Piping*, 87:177 – 186, 2010.
- G. Duvaut und J. L. Lions. *Inequalities in Mechanics and Physics*, volume 219 of *A Series of Comprehensive Studies in Mathematics*. Springer, 1976.
- S. Ebenfeld. L2-regularity theory of linear strongly elliptic dirichlet systems of order $2m$ with minimal regularity in the coefficients. *Quarterly of Applied Mathematics*, 60(3):547–576, 2002.
- H. W. Engl, M. Hanke, und A. Neubauer. *Regularization of inverse problems*, volume 375. Kluwer Academic Pub, 1996.
- M. Gehre, T. Kluth, A. Lipponen, B. Jin, A. Seppänen, J. P. Kaipio, und P. Maaß. Sparsity reconstruction in electrical impedance tomography: An experimental evaluation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 236:2126–2136, 2012.
- G. Geymonat und S. Pagano. Identification of mechanical properties by displacement field measurement: a variational approach. *Meccanica*, 38(5):535–545, 2003.
- D. Gilbarg und N. S. Trudinger. *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*. Springer, 2001.
- M. Grédiac und F. Pierron. Applying the virtual fields method to the identification of elasto-plastic constitutive parameters. *International Journal of Plasticity*, 22(4):602–627, 2006.

- K. Gröger. A $w^{1,p}$ -estimate for solutions to mixed boundary value problems for second order elliptic differential equations. *Math. Ann.*, 283:679 – 687, 1989.
- R. Haller-Dintelmann und J. Rehberg. Maximal parabolic regularity for divergence operators including mixed boundary conditions. WIAS Preprint 1288, WIAS Berlin, 2008.
- P. Haupt. *Continuum Mechanics and Theory of Materials*. Springer-Verlag, 2002.
- R. Herzog, C. Meyer, und G. Wachsmuth. Integrability of displacement and stresses in linear and nonlinear elasticity with mixed boundary conditions. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 382(2):802–813, 2011.
- R. Herzog, C. Meyer, und G. Wachsmuth. C-stationarity for optimal control of static plasticity with linear kinematic hardening. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 50(5):3052–3082, 2012.
- R. Herzog, C. Meyer, und G. Wachsmuth. B- and strong stationarity for optimal control of static plasticity with hardening. *SIAM Journal on Optimization*, 23(1):321–352, 2013.
- D. Hömberg und W. Weiss. PID control of laser surface hardening of steel. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 14(5):896 – 904, 2006. doi: 10.1109/TCST.2006.879978.
- K. Ito und K. Kunisch. *Lagrange multiplier approach to variational problems and applications*, volume 15. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2008.
- B. Jin und P. Maaß. An analysis of electrical impedance tomography with applications to tikhonov regularization. *ESAIM Control Optim. Calc. Var.*, 18:1027–1048, 2012.
- J. Kajberg und B. Wikman. Viscoplastic parameter estimation by high strain-rate experiments and inverse modelling - speckle measurements and high-speed photography. *International Journal of Solids and Structures*, 44:145–164, 2007. doi: 10.1016/j.ijstr.2006.04.018.
- J. Kajberg, K. G. Sundin, L. G. Melin, und P. Stähle. High strain-rate tensile testing and viscoplastic parameter identification using microscopic high-speed photography. *International Journal of Plasticity*, 20:561 – 575, 2004. doi: 10.1016/S0749-6419(03)00041-X.
- D. Kern. *Analysis and numerics for a thermomechanical phase transition model in steel*. PhD thesis, TU Berlin, 2011.
- D. Lecompte, A. Smits, H. Sol, J. Vantomme, und D. Van Hemelrijck. Mixed numerical–experimental technique for orthotropic parameter identification using biaxial tensile tests on cruciform specimens. *International Journal of Solids and Structures*, 44(5):1643–1656, 2007.
- B. Liščić. Heat transfer control during quenching. *Materials and Manufacturing Processes*, 24(7-8): 879–886, 2009.
- B. Liščić, S. Singer, und H. Beitz. Dependence of heat transfer coefficient at quenching on diameter of cylindrical workpieces. *International Heat Treatment & Surface Engineering*, 5(3):101–105, 2011.
- R. Mahnken. Theoretische und numerische aspekte zur parameteridentifikation und modellierung bei metallischen werkstoffen. Technical Report F 98/2, Universität Hannover, Juli 1998.
- R. Mahnken. *Encyclopedia of Computational Mechanics*, volume 2. John Wiley & Sons, Ltd, 2004.
- R. Mahnken und C. Dammann. Simulation of strain induced anisotropy for polymers with weighting functions. *submitted to Archive of Applied Mechanics*, 2013.
- R. Mahnken und E. Stein. Parameter identification for viscoplastic models based on analytical derivatives of a least-square functional and stability investigations. *Int. J. of Plast.*, 12:451 – 479, 1996a. doi: 10.1016/S0749-6419(95)00016-X.
- R. Mahnken und E. Stein. A unified approach for parameter identification of inelastic material models in the frame of the finite element method. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 136:225–258, 1996b.
- D. Meidner. *Adaptive Space-Time Finite Element Methods for Optimization Problems Governed by Non-linear Parabolic Systems*. PhD thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Germany, 2008.

- P. Neff. Local existence and uniqueness for quasistatic finite plasticity with grain boundary relaxation. *Quarterly of Applied Mathematics*, LXIII(1):88 – 116, 2005.
- M Noman, T Clausmeyer, C Barthel, B Svendsen, J Huétink, und M van Riel. Experimental characterization and modeling of the hardening behavior of the sheet steel lh800. *Materials Science and Engineering: A*, 527(10):2515–2526, 2010.
- M. P. Pietryga, I. N. Vladimirov, und S. Reese. A finite deformation model for evolving flow anisotropy with distortional hardening including experimental validation. *Mechanics of Materials*, 44:163–173, 2012.
- O. Scherzer. *Variational methods in imaging*, volume 167. Springer, 2009.
- R.E. Showalter. *Monotone Operators in Banach Space and Nonlinear Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 1997.
- T. Schuster, B. Kaltenbacher, B. Hofmann, und K. S. Kazimierski. *Regularization methods in Banach spaces*, volume 10. de Gruyter, 2012.
- S. Shang und G. J. Yun. Identification of elasto-plastic constitutive parameters by self-optimizing inverse method: Experimental verifications. *Computers Materials and Continua*, 27(1):55, 2012.
- P. Shi und S. Wright. Higher integrability of the gradient in linear elasticity. *Mathematische Annalen*, 299:435–448, 1994.
- R. E. Showalter. *Monotone Operators in Banach Spaces and Nonlinear Partial Differential Equations*, volume 49 of *Mathematical Surveys and Monographs*. American Mathematical Society, 1997.
- L. Taleb und G. Cailletaud. An updated version of the multimechanism model for cyclic plasticity. *Int. Journal of Plast.*, 26(6):859 – 874, 2010. doi: 10.1016/j.ijplas.2009.11.002.
- F. Thielecke. *Parameteridentifizierung von Simulationsmodellen für das viskoplastische Verhalten von Metallen - Theorie, Numerik, Anwendung* -. Braunschweiger Schriften zur Mechanik, Nr. 34, 1998.
- F. Tröltzsch. *Optimale Steuerung partieller Differentialgleichungen: Theorie, Verfahren und Anwendungen*. Springer DE, 2009.
- T. Valent. *Boundary Value Problems of Finite Elasticity – Local Theorems on Existence, Uniqueness and Analytic Dependence on Data*, volume 31 of *Tracts in Natural Philosophy*. Springer, 1988.
- B. Vexler. *Adaptive Finite Element Methods for Parameter Identification Problems*. PhD thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2004.
- K.-U. Widany und R. Mahnken. Adaptivity for parameter identification of incompressible hyperelastic materials using stabilized tetrahedral elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 245-246:117 – 131, 2012. doi: 10.1016/j.cma.2012.06.017.
- J. Wloka. *Funktionalanalysis und Anwendungen*. Walter de Gruyter, 1971.
- M. Wolff, M. Böhm, S. Bökenheide, D. Lammers, und T. Linke. An implicit algorithm to verify creep and trip behavior of steel using uniaxial experiments. *Z. Angew. Math. Mech.*, 92:355–379, 2012.
- G.J. Yun und S. Shang. A self-optimizing inverse analysis method for estimation of cyclic elasto-plasticity model parameters. *International Journal of Plasticity*, 27:576 – 595, 2011.
- E. Zeidler. *Nonlinear Functional Analysis and its Applications I - Fixed-Point Theorems*. Springer, 1986.
- E. Zeidler. *Nonlinear Functional Analysis and its Applications II/A - Linear Monotone Operators*. Springer, 1990.
- E. Zeidler. *Nonlinear Functional Analysis and its Applications IV - Applications to Mathematical Physics*. Springer, 1997.