

# Identifikation von Parameterstreuungen in kalibrierten Simulationsmodellen

PD Dr.-Ing. habil. Thomas Most

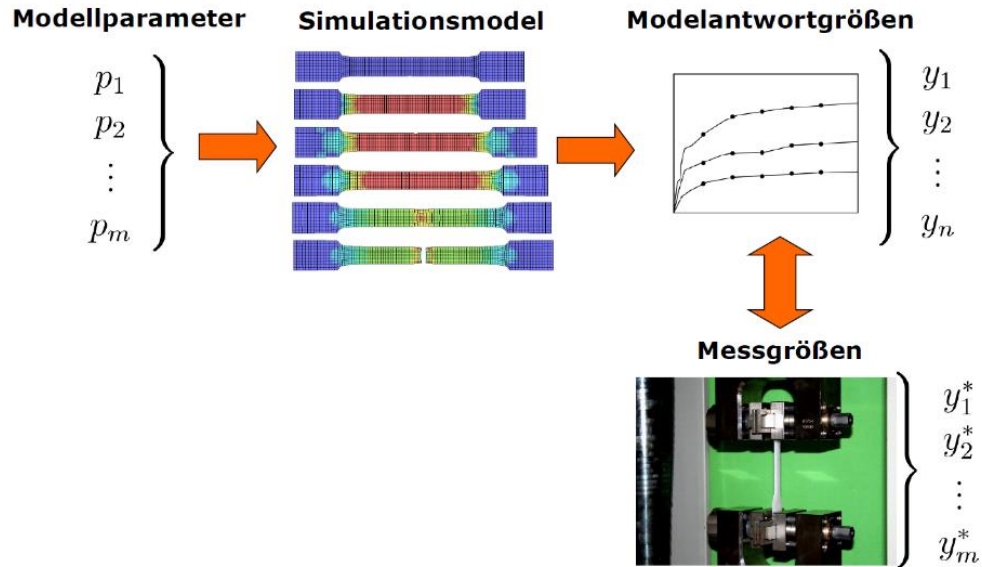
*Institut für Strukturmechanik, Bauhaus-Universität Weimar*

**Zusammenfassung:** In mechanischen Simulationsmodellen sind wichtige parametrische Kenngrößen, wie Materialeigenschaften, oft nur indirekt aus Versuchen durch Modellkalibrierung bestimmbar. Dabei wird meist das Identifikationsproblem als Optimierungsaufgabe formuliert und durch iterative Algorithmen gelöst. Die Unschärfe bzw. Streuung sowie die Eindeutigkeit dieser identifizierten Modellparameter infolge von Messungenauigkeiten soll in dem Beitrag näher untersucht werden. Dabei sollen probabilistische Ansätze sowie Intervallmodelle Anwendung finden.

## 1 Einleitung

Im Rahmen einer Kalibrierungsfragestellung werden häufig die Ergebnisgrößen eines Simulationsmodells  $\mathbf{y}$  an den Ergebnisdaten eines oder mehrerer Versuche  $\mathbf{y}^*$  angepasst (siehe Abbildung 1). Ein gebräuchliches Vorgehen ist die Minimierung einer Abweichungsmetrik zwischen Versuchsdaten und Simulationsergebnissen. In diesem Beitrag sollen zusätzlich die Unschärfe bzw. Streuung sowie die Eindeutigkeit von Materialkenngrößen  $p_i$ , welche mit Hilfe dieser Versuchsergebnissen identifiziert wurden, näher untersucht werden. In Kapitel 2 wird zunächst ein klassischer probabilistischer Ansatz vorgestellt, der die Kalibrierungsaufgabe als Optimierungsfragestellung betrachtet und die Streuungen der Parameter vereinfacht über einen Linearisierungsansatz analog zur Methode Erster Ordnung der Zweiten Momente abschätzt.

Alternativ dazu wird ein Intervallansatz eingeführt, der die möglichen Wertebereiche der zu identifizierenden Parameter als Intervalle ebenfalls durch einen Optimierungsansatz ermittelt. Mit Hilfe eines Richtungssuchverfahrens wird im Raum der zu identifizierenden Parameter die Grenzfläche des gültigen Parameterraumes mit gewünschter Diskretisierung bestimmt. Mit diesem Ansatz lässt sich das Zusammenwirken der einzelnen Parameter sowie auch die Fragestellungen der Eindeutigkeit sehr gut analysieren.



**Abbildung 1:** Kalibrierung eines Materialmodells: die Modellparameter werden anhand der Modellantwortgrößen eines Simulationsmodells schrittweise an die Messgrößen angepasst

## 2 Probabilistischer Ansatz

Im Rahmen des Maximum-Likelihood-Ansatzes [1,2] wird von einem idealen Simulationsmodell ausgegangen und die verbleibenden Abweichungen werden als Messungenauigkeiten angenommen und statistisch beschrieben. Im Allgemeinen wird dabei eine multidimensionale Normalverteilung für diese Messfehler definiert,

$$P(\mathbf{y}^* - \mathbf{y}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^m |\mathbf{C}_{yy}|}} \exp \left[ -\frac{1}{2} (\mathbf{y}^* - \mathbf{y})^T \mathbf{C}_{yy}^{-1} (\mathbf{y}^* - \mathbf{y}) \right] \quad (1)$$

wobei  $\mathbf{C}_{yy}$  die Kovarianzmatrix der Messunsicherheit abbildet. Wenn die Likelihood-Funktion der Modellparameter  $\mathbf{p}$  maximiert werden soll, ergibt sich folgende Zielfunktion für ein Minimierungsproblem

$$J = (\mathbf{y}^* - \mathbf{y})^T \mathbf{C}_{yy}^{-1} (\mathbf{y}^* - \mathbf{y}) \rightarrow \min \quad (2)$$

Wird die Zielfunktion  $J$  in Abhängigkeit der Modellparameter  $\mathbf{p}$  linearisiert, kann man folgendes Aktualisierungsschema anwenden [2]

$$\Delta \mathbf{p} = (\mathbf{A}^T \mathbf{C}_{yy}^{-1} \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{C}_{yy}^{-1} \Delta \mathbf{y}, \quad \mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{p}} \quad (3)$$

wobei  $\mathbf{A}$  die lokale Sensitivitätsmatrix darstellt, welche durch die lokalen Ableitungen der Modellantwortgrößen im Bezug zu den Modellparametern gebildet wird. Setzt man nun voraus, dass der optimale Parametervektor  $\mathbf{p}_{opt}$  gefunden wurde, kann die Kovarianzmatrix dieses optimalen Parametersatzes durch folgenden Linearisierungsansatz abgeschätzt werden

$$\mathbf{C}_{pp} = (\mathbf{A}_{opt}^T \mathbf{C}_{yy}^{-1} \mathbf{A}_{opt})^{-1} \quad (4)$$

Diese abgeschätzte Kovarianzmatrix beinhaltet unter Annahme einer Normalverteilung der identifizierten Parameter alle relevanten Informationen zu den statistischen Eigenschaften: sowohl die Streuung der identifizierten Parameter als auch ein Zusammenhang zwischen den identifizierten Parametern kann durch diesen Linearisierungsansatz sehr einfach abgeschätzt werden. In [3] wurde dieser vereinfachte Ansatz mit statistisch aufwändigeren Verfahren, wie das Bayes'sche Aktualisierungsverfahren gegenübergestellt. In vielen Fragestellungen ist der Linearisierungsansatz jedoch ausreichend genau und sehr effizient umsetzbar. Es lassen sich mit diesem Ansatz insbesondere die Eindeutigkeit der Kalibrierungslösung als einfache Nachlaufrechnung zur Optimierung bewerten [4]. Es bietet sich jedoch an, in einer initialen globalen Sensitivitätsanalyse zunächst den Einfluss der zu identifizierenden Parameter auf das Vorwärtsproblem zu analysieren, und nur die Parameter in der Minimierung der Likelihood-Funktion zu berücksichtigen, welche einen messbaren Einfluss auf die Ergebnisgrößen des Simulationsmodells haben [5].

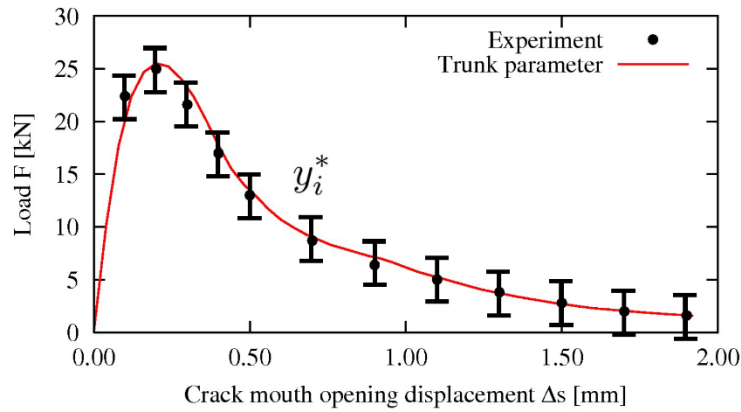
In den meisten statistischen Ansätzen wird nun die genaue Kenntnis der Kovarianzmatrix  $\mathbf{C}_{yy}$  der Messpunkte vorausgesetzt. Im Gegensatz dazu sind in vielen Anwendungsfällen jedoch nicht genügend Messreihen verfügbar oder diese sind durch Messfehler behaftet und eine ausreichend genaue Abschätzung der Kovarianzmatrix ist nicht möglich. Ein vereinfachter Ansatz ist daher die Messfehler bzw. die Streuungen der Modellantworten als unabhängig anzunehmen und mit einer Diagonalmatrix zu arbeiten. Eine weitere Vereinfachung wäre die Messfehler für die betrachteten Antwortgrößen als konstant anzusetzen und damit die Kovarianz der Modellparameter wie folgt abzuschätzen, welches der klassischen Methode der Minimierung der kleinsten Fehlerquadrate entspricht

$$\mathbf{C}_{yy} = \sigma_y^2 \mathbf{I} \quad \mathbf{C}_{pp} = \sigma_y^2 (\mathbf{A}_{opt}^T \mathbf{A}_{opt})^{-1} \quad (5)$$

Ist überhaupt keine Information zu den Messfehlern bekannt, kann zumindest die Standardabweichung vereinfacht als die Abweichung zwischen kalibriertem Simulationsmodell und den Messdaten angenommen werden

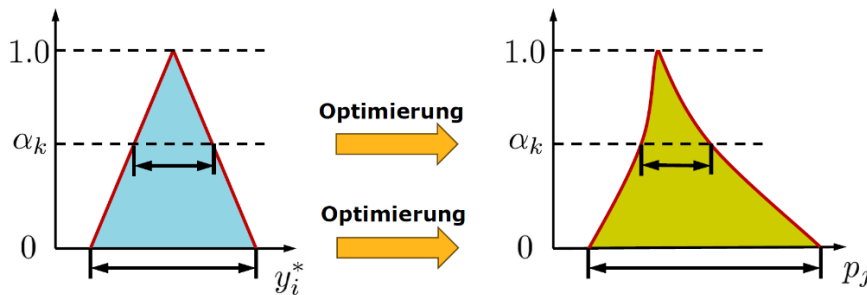
$$\sigma_y \approx RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i^* - y_i)^2} \quad (6)$$

### 3 Intervalansatz



**Abbildung 2:** Kalibrierung eines Materialmodells an unscharfen Messwerten mit gegebenen Intervallgrenzen

Anstelle von probabilistischen Messpunkten mit gegebenen Mittelwerten und einer Kovarianzmatrix, kann man alternativ die Messpunkte auch als ein Unschärfe-Intervall betrachten. In dem klassischen Intervalansatz jedoch, z.B. in [6], werden die Eingangparameter eines Strukturmodells als unscharfe Intervallgrößen mit einem mittleren wahrscheinlichsten Wert angegeben. In mehreren Optimierungsschritten werden dann die minimal und maximal möglichen Werte einer bestimmten Antwortgröße für den zulässigen Intervallbereich der Eingangsparameter bestimmt. Im inversen Ansatz müssen wir nun die Messgrößen als Intervallgrößen mit einem minimalen und maximalen Wert definieren, siehe Abbildung 2. Die Intervalle einer unbekanntem Materialkenngröße können nun analog zu [6] mit der  $\alpha$ -Level Optimierung unter Berücksichtigung der  $\alpha$ -Level der Messpunkte bestimmt werden, wie in Abbildung 3 dargestellt.



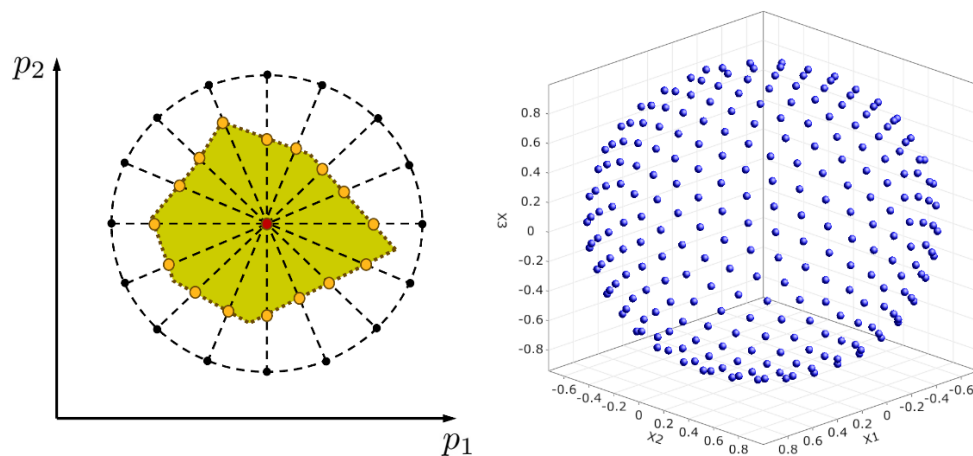
**Abbildung 3:** Bestimmung der Intervallgrenzen der Materialparameter bei gegebenen Intervallgrenzen der unscharfen Messpunkte

Dieses Vorgehen erlaubt allerdings nur die unabhängige Bestimmung der Intervallgrenzen bzw. der  $\alpha$ -Level für jeden Materialparameter einzeln. Die Interaktion zwischen den

Materialparametern und deren Einfluss auf die Streuungen der Messgrößen kann nicht direkt untersucht werden. Daher wird in diesem Beitrag ein anderes Verfahren vorgeschlagen:

1. Für den Mittelwert der Messpunkte werden die unbekannt Materialparameter z.B. mit der bekannten Methode der kleinsten Fehlerquadrate kalibriert.
2. Die minimalen und maximalen Intervallgrenzen werden für jeden Parameter einzeln abgeschätzt.
3. Im Bereich der Intervallgrenzen wird eine bestimmte Anzahl an Suchrichtungen auf einer aufgespannten Hyperkugel definiert und per Bisektion wird der Durchstoßpunkt zwischen dem zulässigen und unzulässigen Bereich ermittelt.

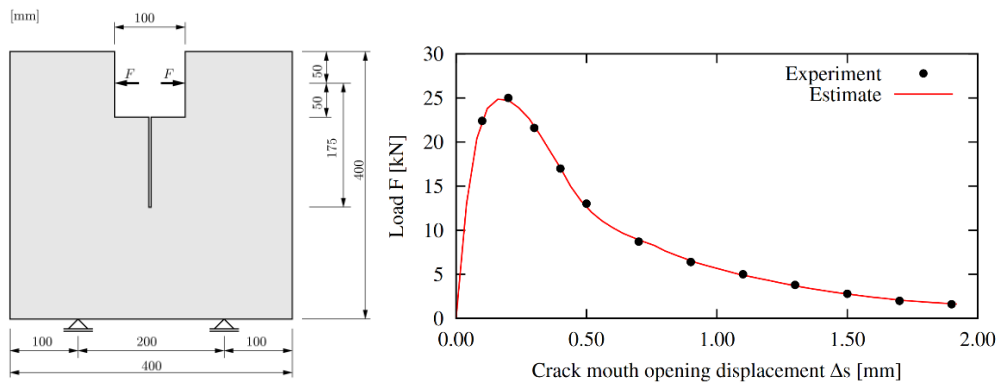
In Abbildung 4 ist das Richtungssuchverfahren prinzipiell dargestellt. Dieses Verfahren wird analog zu dem aus der Zuverlässigkeitstheorie bekannten Directional Sampling durchgeführt, wobei die Suchrichtungen bzw. die Startpunkte auf der Hyperkugel im Einheitsraum so ermittelt werden, dass ihr Abstand zueinander gleichförmig angeordnet ist. Weitere Hinweise zur Bestimmung dieser sogenannten Fekete-Punkte sind in [7] zu finden. Der Vorteil dieser Vorgehensweise ist, dass für eine beliebige Anzahl an Materialparametern die Grenzfläche des Streubereiches mit möglichst gleichmäßig verteilten Diskretisierungspunkten mit einem sehr einfachen Suchverfahren gefunden werden kann.



**Abbildung 4:** Richtungssuchverfahren zur Bestimmung der Grenzfläche der möglichen Parameter-werte in zwei Dimensionen (links) und 3D Fekete-Punkte als Ausgangspunkt der Suche (rechts)

## 4 Numerisches Beispiel

In diesem Beispiel wurden die Materialparameter von unbewehrtem Beton anhand eines Keilspaltversuches nach [8] kalibriert. Dabei wurden 6 unbekannt Materialparameter: der Elastizitätsmodul  $E_{mod}$ , die Querdehnzahl  $\nu_{ue}$ , die Zugfestigkeit  $f_{ct}$ , die Mode-I-Bruchenergie  $G_f$  sowie die Formparameter  $\alpha_{ft}$  und  $\alpha_{wc}$  des bilinearen Entfestigungsmodells berücksichtigt. Der Versuchsaufbau sowie der verschiebungsgesteuerte Versuch wurden mit einer 2D Finite-Elemente-Berechnung abgebildet. Details zu dem Simulations- und Entfestigungsmodell sind in [9] zu finden.

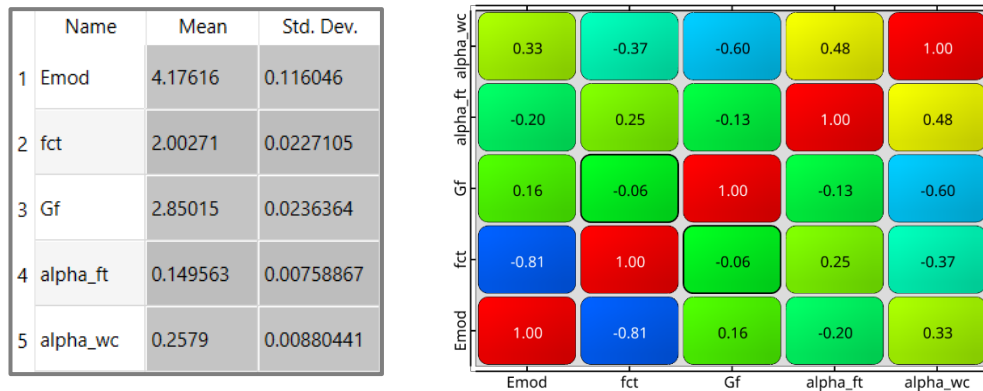


**Abbildung 4:** Untersuchter Keilspaltversuch nach [8] (links), Gegenüberstellung der Messung und der Simulationsergebnisse mit den kalibrierten Materialparametern (rechts)

In einem ersten Schritt wurde eine globale, varianzbasierte Sensitivitätsanalyse des Vorwärtsproblems in den gegebenen Parameterbereichen analog zu [5] vorgenommen. Der Einfluss der Querdehnzahl konnte dabei als annähernd null quantifiziert werden, daher wurde dieser Parameter in den weiteren Untersuchungen vernachlässigt. Alle anderen Parameter zeigten einen signifikanten Einfluss auf eine oder mehrere Ergebnisgrößen der simulierten Entfestigungsfunktion.

Danach wurde die Kalibrierung des Modells unter Verwendung der Summe der Fehlerquadrate durchgeführt. Die optimale Simulationskurve ist in Abbildung 4 dargestellt. Der minimale Root-Mean-Square-Error (RMSE) von 151 N, welcher etwa 0,6% der Maximalkraft in der Last-Verschiebungskurve entspricht, wurde anschließend als Ansatz für die Streuung der Messwerte analog Gleichung 6 angesetzt. Die nach Gleichung 5 abgeschätzten Standardabweichungen sowie die Korrelationen der Parameter untereinander sind in Abbildung 5 zu finden. Die Abbildung zeigt, dass der Elastizitätsmodul nur mit höherer Ungenauigkeit als die anderen Parameter zu identifizieren ist. In der Korrelationsmatrix ist eine signifikante Abhängigkeit zwischen dem identifizierten Elastizitätsmodul und der Zugfestigkeit erkennbar. In Abbildung 6 sind die abgeschätzten paarweisen Abhängigkeiten einiger Parameter dargestellt. Mit dem probabilistischen Ansatz wird der Zusammenhang zwischen Elastizitätsmodul und Bruchenergie sowie zwischen Bruchenergie und Zugfestigkeit als sehr gering abgeschätzt.

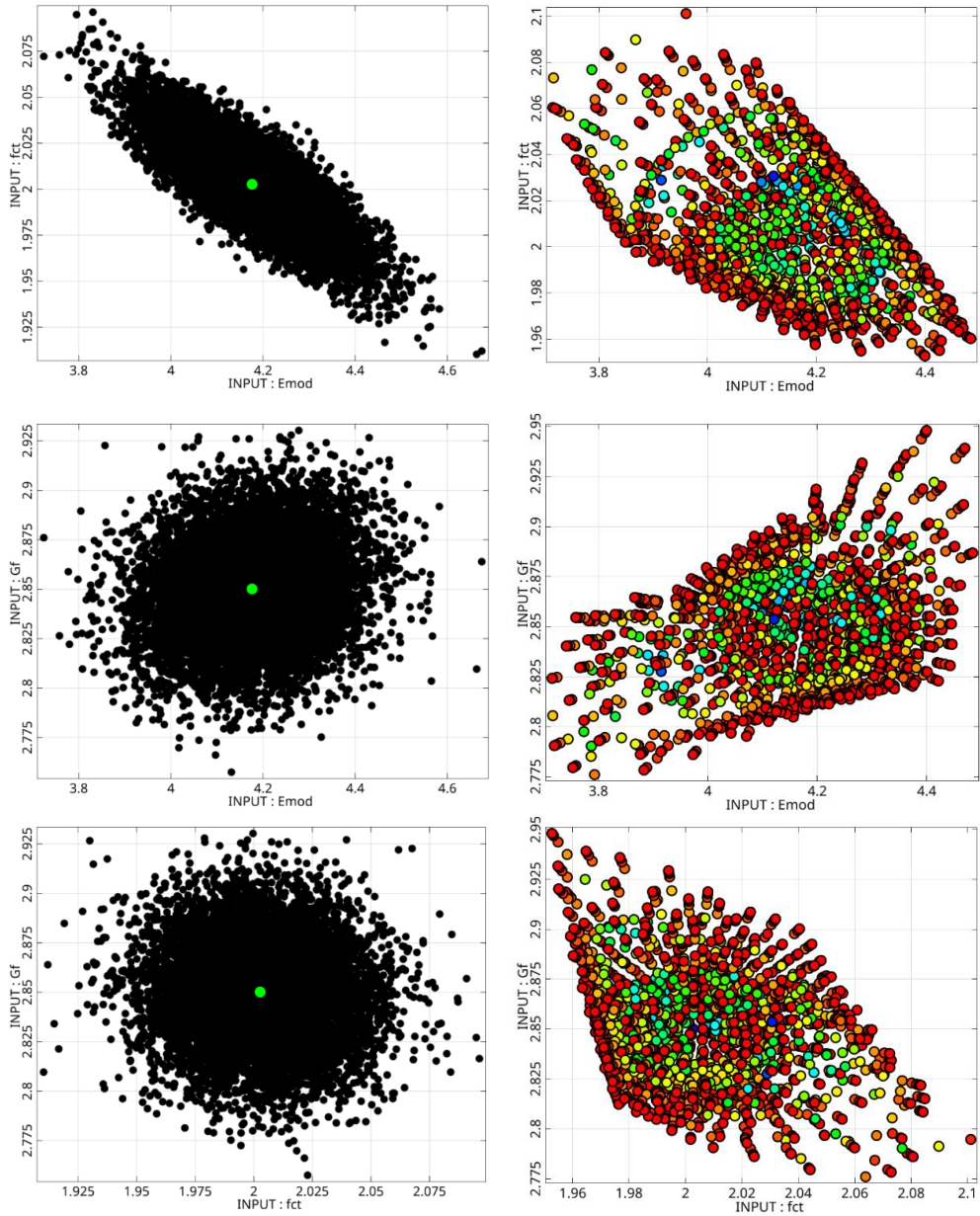
Den Ergebnissen des probabilistischen Ansatzes wurde nun der in Kapitel 3 eingeführte Intervallansatz gegenübergestellt. Dazu wurde der Parameterraum des Elastizitätsmoduls, der Zugfestigkeit sowie der Bruchenergie mit 500 Suchrichtungen analysiert. Als Genauigkeitsschranke diente dabei eine Toleranz der Kraftgrößen von 500 N, was etwa der 3-fachen Größe des geschätzten RMSE entspricht. In Abbildung 6 sind die Ergebnisse der Intervallsuche denen des probabilistischen Ansatzes gegenübergestellt. Dabei wird ersichtlich, dass die ermittelten Grenzen der jeweiligen Parametersubräume durch die Linearisierung im probabilistischen Ansatz nur teilweise zufriedenstellend abgebildet werden. Allerdings ist der Intervallansatz numerisch bedeutend aufwendiger und benötigte in der vorgestellten Berechnung etwa 2000 Modellaufrufe im Gegensatz zu 10 Aufrufen zur Berechnung der Sensitivitätsmatrix in Gleichung 3.



**Abbildung 5:** Abgeschätzte Streuungen (links) und Korrelationen (rechts) der identifizierten Materialparameter unter Verwendung des probabilistischen Ansatzes

## Literatur

- [1] BECK, J.V.; ARNOLD, K.; Parameter estimation in engineering and science, New York: Wiley Interscience, 1977
- [2] LEDESMA, A.; GENS, A.; ALONSO, E.E.; Estimation of parameters in geotechnical backanalysis - I. Maximum likelihood approach, Computers and Geotechnics 18, 1-27, 1996
- [3] MOST, T.; Identification of the parameters of complex constitutive models: Least squares minimization vs. Bayesian updating, IFIP Working Group Conference, München, 2010
- [4] MOST, T.; KALLMEYER, R.; NIEMEIER, R.; Estimate of Material Parameter Uncertainties in calibrated Simulation Models, NAFEMS World Congress, Quebec, Kanada, 2019
- [5] MOST, T.; Effiziente Parameteridentifikation für numerische Simulationsmodelle, NAFEMS D-A-CH Konferenz, Bamberg, 2014
- [6] MÖLLER, B.; BEER, M.; Fuzzy structural analysis using  $\alpha$ -level optimization, Computational Mechanics, 26:547-565, 2000
- [7] NIE, J.; ELLINGWOOD, B.R.; Directional methods for structural reliability analysis, Structural Safety 22, 233-249, 2000
- [8] TRUNK, B.; Einfluss der Bauteilgröße auf die Bruchenergie von Beton, Dissertation, Eidgenössische Technische Hochschule, Zürich, 1999
- [9] MOST, T.; Stochastic crack growth simulation in reinforced concrete structures by means of coupled finite element and meshless methods, Dissertation, Bauhaus-Universität Weimar, 2005



**Abbildung 6:** Abgeschätzte Streuungen und Korrelationen der identifizierten Materialparameter unter Verwendung des probabilistischen Ansatzes (links) und unter Anwendung des Intervalansatzes für 3 Parameter (rechts)