

Bewertung von Unsicherheiten bei werkstoffmechanischen Fragestellungen mit dem Bayes-Verfahren

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Ingenieurwissenschaften

von der Fakultät für Maschinenbau der

Universität Karlsruhe (TH)

genehmigte

Dissertation

von

Dipl.-Math. Svetlana Scherrer-Rudiy

aus Dshisak/Usbekistan

Tag der mündlichen Prüfung: 16. Dezember 2008

Hauptreferent: Prof. Dr.-Ing. N. Huber

Korreferent: Prof. Dr. rer. nat. O. Kraft

Kurzfassung

Bewertung von Unsicherheiten bei werkstoffmechanischen Fragestellungen mit dem Bayes-Verfahren

Durch den Einsatz moderner Rechnertechnologien steigen Ressourcen wie Speicherplatz und Rechengeschwindigkeit stetig an. Damit wird es möglich, immer komplexer werdende Aufgaben mit rechenintensiven numerischen Modellen zu lösen, die darüber hinaus in ihrer Qualität deutlich verbessert werden können. Davon profitieren besonders aufwändige statistische Methoden, wie z.B. verschiedene Arten von Monte-Carlo-Simulationen. Diese Arbeit befasst sich mit der Anwendbarkeit des Bayes-Verfahrens für die Bewertung von Unsicherheiten in Vorhersagen und Identifikationen komplexer strukturmechanischer Probleme. Eine klassische Anwendung ist die Bewertung von Unsicherheiten in der Ermittlung von Weibull-Parametern für Keramiken mit Hilfe von Bayes-Verfahren. Andererseits können Bayes'sche Ansätze in Neuronale Netze implementiert werden, um damit die Unsicherheitsbewertung der damit erzielten Vorhersagen vorzunehmen. Dieser innovative Ansatz wird jedoch wegen des damit verbundenen Aufwands kaum verfolgt und der mögliche Mehrwert nicht genutzt. In dieser Arbeit wurden Probabilistische Neuronale Netze entwickelt und für ausgewählte Beispiele eingesetzt. Ziel war es, die damit erzielbaren Möglichkeiten hinsichtlich verbesserter Vorhersagequalität und gleichzeitiger Unsicherheitsbewertung zu untersuchen. Es konnte im Rahmen dieser Arbeit gezeigt werden, dass es mit Hilfe Probabilistischer Neuronaler Netze möglich ist, bei konstanter Probenanzahl engere Konfidenzintervalle für die Ausfallwahrscheinlichkeit keramischer Bauteile zu erzielen. Der Einsatz der Methodik bei der Identifikation von mechanischen Eigenschaften metallischer Werkstoffe mit dem Eindruckversuch ergab robustere Ergebnisse. Ferner wurde untersucht, in wieweit die Unsicherheitsbewertung der eingesetzten Neuronale Netze für eine Optimierung der Eingangsdaten eines inversen Problems eingesetzt werden kann. Die Ergebnisse belegen, dass mit der Bayes'sche Vorgehensweise über die Unsicherheitsbewertung der Neuronale Netze hinaus der effizientere Umgang mit den oft kostbaren Trainingsdaten bei gleichzeitiger Erhöhung der Robustheit gewährleistet wird. Dies kann von entscheidender Bedeutung sein, wenn die Durchführung von Experimenten oder Simulationen zur Erstellung der Datenbasis mit hohen Kosten verbunden ist.

Abstract

Quantifying of Uncertainties for Problems of Material Mechanics with the Bayesian Approach

With the progress in computer technologies, the amount of available memory and CPU time is continuously growing. It is therefore possible to solve problems with increasing complexity by numerically costly models and it is consequently possible to improve their quality. Especially statistical methods as for example different variety of Monte Carlo simulations benefit therefrom. This work is concerned with the applicability of the Bayesian approach for the estimation of uncertainties in complex prediction and identification problems in solid mechanics. As a classical problem, the uncertainty of Weibull parameters for ceramics can be obtained with the help of the Bayesian approach. Moreover, Bayesian techniques can be implemented in artificial neural networks to achieve an estimation of uncertainties of their predictions. Due to the increased effort the advantages of this approach remain normally unused. In this work, probabilistic neural networks have been developed and were applied to some selected examples. Goal was the investigation of the achievable added value regarding uncertainty estimation and improved prediction capability. Using the probabilistic neural networks it has been shown that it is possible to shrink the confidence intervals for the failure probability of ceramic components. An application to the identification of mechanical properties of metals with indentation tests increased the robustness of the results. It has been further investigated how far the input quantities for inverse problems can be optimised on the basis of the sensitivity of Bayesian neural networks. The results prove that, in addition to the assessment of the uncertainty, the Bayesian approach efficiently exploits valuable training data at an increased robustness. This can be of vital importance, when experiments and simulations which are needed for the generation of the training data base are cost-intensive.

Danksagung

Diese Arbeit entstand während meiner Beschäftigung als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für Materialforschung II des Forschungszentrums Karlsruhe.

Großer Dankbarkeit erfüllt bin ich meinem Betreuer Herrn Prof. Dr. N. Huber. Er hat mir bereits am Anfang meiner Tätigkeit sehr interessante Aufgaben gestellt, hat mich vielseitig unterstützt und sich bis zum letzten Tag um die Diskussion der Ergebnisse und den weiteren Fortschritt meiner Arbeit teilnahmsvoll gekümmert. Ihm verdanke ich vieles.

Ebenso danke ich Herrn Prof. Dr. D. Munz herzlichst für die Aufnahme am Institut. Die damit verbundene Lebenswendung wurde für mich rückblickend nicht nur beruflich, sondern auch privat bereichernd und bedeutete viele positive Änderungen in meinem Leben.

Herrn Prof. Dr. O. Kraft danke ich für die Möglichkeit gut versorgt am Institut arbeiten zu dürfen, für sein Interesse an meiner Arbeit und für die Übernahme des Korreferats. Unter seiner Leitung und in der positiven Arbeitsatmosphäre seines Instituts habe ich viele Erfahrungen und Kenntnisse erworben.

Herrn Dr. H. Riesch-Oppermann danke ich besonders für seine aufmerksame und weisende Betreuung bei den Untersuchungen von Keramiken im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 483 und für die vielseitig bereichernde Begleitung.

Zudem bin ich jedem Kollegen dankbar mit dem ich zusammenarbeiten oder einfach nur im Arbeitsalltag kommunizieren durfte. Speziell dennoch war für mich die ständige Hilfsbereitschaft und die Pflege eines angenehmen Betriebsklima seitens des Abteilungsleiters Herrn Prof. Dr. M. Kamlah wichtig. Ebenso hilfreich war die kompetente Erfahrung in vielen infrastrukturellen und EDV-Fragen von Frau G. Rizzi. Meine direkten Bürokollegen Herr Dr. E. Tyulyukovskiy und Herr Dr. Y. Cao waren immer zu Gesprächen bereit und hatten oft nützliche Ratschläge zur Hand. Ich danke Ihnen an dieser Stelle dafür.

Außerdem danke ich selbstverständlich meinen Familienangehörigen dafür, dass sie mir immer im Alltag zur Seite stehen, sich mit mir für jedes kleine Gelingen von mir freuen, aber auch bei Problemen für Aufmunterung sorgen.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Bayes'scher Ansatz und Probabilistische Neuronale Netze	4
1.1 Bayes'sche Statistik	6
1.2 Probabilistische Neuronale Netze	7
1.2.1 Konventionelles Feed-Forward Neuronales Netz	7
1.2.2 Bayes'scher Ansatz - Lernen als Analogie zum statistischen Schließen	11
1.3 Aufbau eines probabilistischen Netzes	13
1.4 Methoden der Berechnung von Mehrfachintegralen für die Posterior-Verteilung	17
1.4.1 Gauß-Approximation	17
1.4.2 Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode	21
1.5 Zusammenfassung	31
2 Anwendung Bayes'scher Methoden für die Bewertung keramischer Bauteile	33
2.1 Bruchmechanische Beschreibung des Versagens	35
2.1.1 Spontanes Versagen	35
2.1.2 Berücksichtigung des unterkritischen Risswachstums	39
2.1.3 Bestimmung der Materialparameter aus experimentellen Daten	41
2.1.4 Ausfallwahrscheinlichkeit und ihre Unsicherheit	43
2.2 Bayes'sches Schließen für Weibullparameter	47
2.3 Methoden zur Reduzierung der Unsicherheit in der Vorhersage	50
2.3.1 Pooling von Daten	52
2.3.2 Optimierte Probenaufteilung	57

3	Identifikation mechanischer Eigenschaften metallischer Werkstoffe	63
3.1	Auswerteverfahren für Kugeleindruckversuche	64
3.1.1	Materialmodell	64
3.1.2	Beschreibung des Identifikationsverfahrens	69
3.1.3	Ergänzende Bemerkungen	71
3.2	Auswerteunsicherheit der Neuronalen Netze	71
3.2.1	Validierung mit FEM	73
3.2.2	Validierung mit Experimenten	75
3.3	Verkürzte Lastgeschichte	77
3.3.1	Neuronale-Netze-Entwicklung	78
3.3.2	Validierung mit FEM	81
3.3.3	Auswertung von Experimenten	82
3.4	Lokale mechanische Eigenschaften von FSW-Schweißnähten	83
	Zusammenfassung	86
A	Netzdefinitionen für den verkürzten Experimenteablauf	90

Einleitung

Bayes'sche Verfahren finden zunehmende Anerkennung während Rechnerkapazitäten immer mehr steigen und billiger werden. Oft werden besondere Fähigkeiten in so genannten Entscheidungsproblemen, wie z.B. "Spam- oder keine Spam-E-mail" und "gewinngefährdender oder ertragssteigernder Kunde" gewünscht, wenn die Faktoren, die Entscheidungen beeinflussen können, komplex sind. Aber auch bei Regressionsaufgaben, bei denen eine numerische Abbildung eines Zusammenhanges in Form von Neuronalen Netzen als Ersatz zur Approximation eines Zusammenhanges gesucht wird, wird die Bayes'sche Vorgehensweise einträglich. Dabei geht es bei der Bayes'schen Vorgehensweise darum, dass man ausgehend aus einer Vorkenntnis, die als Prior-Hypothese dient, einen neuen Erkenntnisstand über einen Zusammenhang durch Information aus bekannten Beispielen dieses Zusammenhanges gewinnt.

In der vorliegenden Arbeit wird Anwendbarkeit von Bayes'schen Methoden zur Bewertung von Unsicherheiten bei einigen Problemen der Materialforschung getestet. Vorwiegend liegt es nahe, auf dem Bayes'schen Ansatz basierende Probabilistische Neuronale Netze anstatt von konventionellen zu implementieren. Es wurden Arbeiten veröffentlicht ([34, 40, 5]), die sich mit der mathematisch-technischen Entwicklung von Probabilistischen Neuronalen Netzen und damit errechneten Vorhersagen beschäftigt haben. Die beiden wichtigsten Implementierungsmethoden, die die Lösungen hochdimensionaler Integrale über eine Wahrscheinlichkeitsverteilung erfordern, sind die Gauß-Approximation-Methode [34] und die Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode. Beide Varianten wurden im Rahmen dieser Arbeit für Neuronale Netze ausgearbeitet und angewendet. Es wurden dafür einige Anwendungen ausgewählt, für die konventionelle Neuronale Netze bereits mit Erfolg eingesetzt wurden. Damit wird ein direkter Leistungsvergleich ermöglicht. Ein Probabilistisches Neuronales Netz ist deutlich aufwendiger in der Implementierung und im Trainieren. Es gilt daher zu untersuchen, ob ihr Einsatz neue Aussagen und neue Erkenntnisse erzielt. Ein Probabilistisches Neuronales Netz wird so formuliert und aufgebaut, dass es nach dem Trainieren nicht nur eine einzelne Vorhersage als Antwort liefert, wie dies

im konventionellem Fall vorliegt, sondern eine ganze Verteilung der möglichen Vorhersagen gemäß ihrer Wahrscheinlichkeit für die gegebenen Daten erzeugt wird. Die Methode der Gauß-Approximation macht eine Annahme über die Form der Posterior-Verteilung der Netzparameter, auch Gewichte genannt, und nimmt eine lineare Approximation des Ausgabevektors des Netzes vor. Dadurch erhält man eine Verteilung der Vorhersage, die ebenfalls eine Gauß-Verteilung darstellt. Der numerische Aufwand reduziert sich durch solche Annahmen, schränkt aber die Qualität der Vorhersage ein.

In [32] wurde ein Überblick über Einsatz des Bayes'schen Ansatzes in Neuronalen Netzen gegeben und einige Studien zum Verwenden von Gauß-Approximation- und Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode für Vorhersagen vorgestellt. Sie weisen auf bessere Ergebnisse durch Einsatz von Probabilistischen Neuronalen Netzen hin, als dies mit einem mehrmalig durchgeführten gemittelten Einsatz von konventionellen Neuronalen Netzen möglich ist. Der wichtige Vorteil des Bayes'schen Ansatzes ist die Freiheit, unbekannte Eigenschaften nicht festlegen zu müssen, so die Autoren.

In [9] wurden gute Ergebnisse einer Anwendung von Probabilistischen Neuronalen Netzen mit Gauß-Approximation-Methode für die Bestimmung der Fließgrenze und der Zugfestigkeit für verschiedene Metalllegierungen dargestellt. Ebenso sind viele andere Anwendungen wie z.B. [15] bekannt, in denen die besonderen Fähigkeiten der Netze in Verbindung mit Bayes'schem Ansatz genutzt wurden, insbesondere das Vermeiden des Übertrainierens. Gute Quellen für weitere Details sind [5, 36, 40]. Dort sind umfangreiche Einzelheiten zu den hier verwendeten Methoden und Algorithmen zu finden.

In Kapitel 1 wird die Bayes'sche Behandlung statistischer Probleme ausführlich vorgestellt, wobei besonders auf deren Verwendung in Probabilistischen Neuronalen Netzen eingegangen wird.

In Kapitel 2 wird die Bewertung des Versagens keramischer Bauteile beschrieben. Die Streuung der Festigkeit und der Lebensdauer von Komponenten aus spröden keramischen Werkstoffen erfordert die Anwendung statistischer Methoden zu ihrer Auslegung. Diese Streuung ist auf zufällig verteilte herstellungsbedingte Fehler zurückzuführen. Anstelle der Angabe einer Bauteilfestigkeit oder einer Lebensdauer ist es nur möglich, eine Versagenswahrscheinlichkeit für einen gegebenen Zeitpunkt zu erhalten. Das Kapitel beginnt mit einer Darstellung des in [38], [21] und [56] beschriebenen Verfahrens zur Berechnung der Ausfallwahrscheinlichkeit keramischer Bauteile, die numerisch mittels des Programmpaketes STAU berechnet werden kann. Ausserdem wird die nichtparametrische Bootstrapmethode vorgestellt und es wird gezeigt, wie durch deren Verwendung z. B. in [22] Konfidenzintervalle für die Ausfallwahrscheinlichkeit gewonnen werden können. Ebenso können

die Konfidenzintervalle der Weibullparameter, die die Streuung der Festigkeit von keramischen Werkstoffen beschreiben, nach [22] mit der Bootstrapmethode geschätzt werden. Ziel dieser Arbeit ist es, Vorteile der Bayes'schen Methoden zur Schätzung von Unsicherheiten zu nutzen. Dabei wird die Datengewinnung durch Pooling von existierenden Daten mittels eines Neuronalen Netzes zur Reduktion der Bootstrap-Konfidenzintervalle der Ausfallwahrscheinlichkeit eines keramischen Bauteils getestet. Außerdem wird ein Probabilistisches Neuronales Netz für experimentelles Design eingesetzt, um die Entscheidung über eine geeignete Probenaufteilung hinsichtlich verschiedener experimenteller Bedingungen zu übernehmen.

Auf dem Gebiet der Identifikation von mechanischen Eigenschaften metallischer Werkstoffe aus dem Eindruckversuch haben sich Neuronale Netze als ein mächtiges, bisher in ihrer generellen Anwendbarkeit noch nicht übertroffenes Werkzeug etabliert ([25, 50]). Als nahezu zerstörungsfreie Methode zur Charakterisierung mechanischer Eigenschaften wenig untersuchter Werkstoffe werden zunehmend Eindruckversuche eingesetzt, dabei wird mit z.B. kugelförmigen Prüfkörpern eine Last-Eindringtiefe-Trajektorie gemessen. Diese kann für Metalle bei einer für die Versuchsdurchführung speziell definierten Lastgeschichte ausreichende Informationen über die mechanische Eigenschaften des untersuchenden Materials enthalten. Eine auf Neuronalen Netzen basierte Methode zur Auswertung des Eindruckversuchs wurde in [50] ausführlich dargestellt. Sie erlaubt die Ermittlung der viskoplastischen Eigenschaften und des Spannungs-Dehnungsverhalten eines metallischen Werkstoffs aus der Last-Eindringtiefe-Kurve für eine festgelegte Lastgeschichte des Kugeleindruckversuchs. In Kapitel 3 wird die Identifikationsmethode beschrieben, die durch den Einsatz von Probabilistischen Neuronalen Netzen modifiziert wird. In der vorliegenden Arbeit werden auf der Basis dieser Methode entwickelte Verfahren vorgestellt, die der Bewertung der Unsicherheiten solcher Auswertungen dienen. Die Ergebnisse für experimentelle und Finite-Elemente-Beispiele werden im Vergleich mit den existierenden konventionellen Ergebnissen diskutiert.

Auf Grund der Aussage über die Vorhersageunsicherheit wurde ein weiterer Aspekt betrachtet. Bei der Auswertung der immer gleichen Datenbasis können Netzdefinitionen miteinander verglichen und nützliche Information zum Netzdesign abgeleitet werden. Auf der Basis der existierenden Identifikationsmethode wird untersucht, ob eine einfachere Identifikationsmethode für einen verkürzten Versuchsablauf realisierbar ist.

Im abschließenden Kapitel sind die wichtigsten Ergebnisse und gewonnene Erfahrungen zusammengefasst.

Kapitel 1

Bayes'scher Ansatz und Probabilistische Neuronale Netze

Bayes'sche Methoden werden in der Statistik zunehmend populär, insbesondere für komplexe Fragestellungen wie Mustererkennung oder inverse Probleme der Datenanalyse.

Ein Beispiel einer erfolgreichen Anwendung von Bayes-Verfahren aus der aktuellen Computerwelt sind z.B. Spam-Filter, die in Abhängigkeit vom Vorkommen bestimmter Schlüsselwörter eine E-Mail mit einer errechneten Wahrscheinlichkeit in die Spam-Gruppe klassifizieren. Dabei wird die Eigenschaft, auf Grund der neuen Erkenntnissen den Filter zu verbessern, genutzt. Ein guter Spamfilter soll justierbar sein, da sich das Lexikon von den Spam-Autoren an aktuellere Interessen von potenziellen Opfern anpasst.

Eine solche "Renaissance" und wachsende Anerkennung der mehrere Jahrhunderte alten philosophisch-mathematischen Entdeckung ([3]) zusammengefasst in Form von

$$P(\text{Hypothese} | \text{Beobachtung}) = \frac{P(\text{Beobachtung} | \text{Hypothese})P(\text{Hypothese})}{P(\text{Beobachtung})},$$

wurde durch die schnelle Zunahme der zur Verfügung stehenden Rechnerleistung ausgelöst, die z.B. in Verbindung mit Monte-Carlo-Methoden eine sehr große Rolle spielt. In diesem Kapitel werden zunächst die theoretischen Grundlagen der Bayes'schen-Statistik vorgestellt.

Danach wird die Verwendung des Bayes'schen Ansatzes für das Folgern der Parameter eines Feed-Forward Neuronales Netzes ausführlich beschrieben. Ein Neuronales Netz ist ein universales mathematisches Instrument für das Approximieren beliebiger nichtlinearer Zusammenhänge. Mittels einiger vorhandener Datenpunkte eines Zusammenhangs kann ein Neuronales Netz anhand eines Lernprozesses trainiert werden. Dannach ist das Netz

in der Lage, den zugrunde liegenden Zusammenhang des Modells abzubilden. Dabei ist es wichtig, dass keine Parameter von Hand anzupassen sind. Ein Neuronales Netz ist fähig, die Parameter durch das Erlernen der Trainingsdaten selbst zu optimieren.

Leider ist bei der Anwendung konventioneller Neuronaler Netze keine Information darüber vorhanden, ob die vom Neuronalen Netz vorhergesagte Approximation des rekonstruierten Zusammenhanges vertrauenswürdig ist. Aus diesem Grund mussten bislang immer zusätzliche (Verifikations-)Beispiele zur Verfügung gestellt werden, um die entwickelten Netze auf ihre Fähigkeit zu prüfen, nicht gesehene Beispiele vorherzusagen, d. h. es bezüglich seiner Generalisierungsfähigkeit zu testen.

Bei einem probabilistischen Vorgehen ändert sich die Situation erheblich. Fehlergrenzen können automatisch bei gleichzeitigem Vermeiden von Übertrainierung ermittelt werden. Als Übertrainierung bezeichnet man ein viel zu genaues Anpassen an die Trainingsbeispiele. Hier wird konventionelles Lernen durch statistisches Schließen der Netzparameter aus der Kenntnis der Trainingsdaten und einer Prior-Information ersetzt. Für das Lernen dürfen bei dieser statistischen Vorgehensweise alle verfügbare Daten verwendet werden, weswegen auch die Qualität der Regression steigt. Es werden also keine zusätzlichen Verifikationsbeispiele benötigt.

Allerdings besteht die Notwendigkeit des Lösens von hochdimensionalen Mehrfach-Integralen über die (Posterior-)Verteilung der Netzparameter, die dabei entstehen. Zwei Varianten von Bayes'schen "Lernmethoden" wurden hierfür implementiert. Die erste ist die Gauß-Approximation mit ständiger Neuschätzung der Hyperparameter wie sie in [34] entwickelt und in [34, 5, 35, 36] vorgestellt wurde. Die Hyperparameter sind hier einige zusätzliche Parameter des Neuronalen Netzes, die die Verteilung der konventionellen Parameter, d. h. der synaptischen Gewichte, kontrollieren. Die Methode wird in Abschn. 1.4.1 beschrieben. Sie basiert auf dem Finden der wahrscheinlichsten Parameter und Hyperparameter für die gegebenen Daten und dem Approximieren ihrer Posterior-Verteilung durch eine in dem wahrscheinlichsten Punkt zentrierte Gauß-Verteilung. Sie wurde bereits in der Praxis, z.B. in [16], für einige wirtschaftswissenschaftliche Aufgaben wie Aktienkursvorhersagen den konventionellen Neuronale-Netze-Anwendungen gegenüber gestellt und brachte einen bedeutenden Vorteil vor allem in der Genauigkeit der Vorhersage und der Automatisierung des Lernprozesses.

Die rein numerische Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode ist eine andere Möglichkeit der Charakterisierung der Posterior-Verteilung der Netzparameter, die für die Berechnung von Mehrfach-Integralen benutzt werden kann. Die Methode wurde in [40, 39] in ihrer effektiven Hybrid Monte Carlo Variante speziell für den Umgang mit Neuronalen Netzen ange-

passt. Sie kombiniert eine herkömmliche Gradientenmethode mit Monte-Carlo-Simulation, was eine schnelle stochastische Untersuchung des Parameterraums erlaubt. Für diese Vorgehensweise wurde die Software nur für einen speziellen Fall Neuronaler Netze mit einer Zwischenschicht mit der Tangenshyperbolicus-Aktivierungsfunktion und einem linearem Output implementiert. Eine angemessen ausführliche Beschreibung der Vorgehensweise folgt in Abschn. 1.4.2.

Die in diesem Kapitel behandelte Methodik wurde in eine erweiterte Version der NN-Trainingssoftware implementiert. Die Vorteile, die durch die Verwendung Probabilistischer Neuronaler Netze in der Praxis gewonnen werden können, werden darauf folgend in hinsichtlich verschiedenen Anwendungsthemen aufgeteilten Kapiteln der Arbeit vorgestellt.

Die wichtigsten Hypothesen, auf denen diese Arbeit basiert sind:

- Bei einem konventionellen Neuronalen Netz erhält man nach dem Trainieren eine gut an das Problem angepasste Lösung. Allerdings ist man dabei unsicher, ob die Wahl nun richtig getroffen wurde und die erhaltene Netzversion wirklich die beste ist. Nebenbei können viele andere mindestens genauso gut sein, auf die man beim Trainieren gar nicht gestoßen ist. Es gibt also korrekterweise nicht nur eine einzige Vorhersagemöglichkeit der Ergebnisse. Die Verteilung der denkbaren Ergebnisse sollte zumindest in Form ihres Mittelwerts und ihrer Streuung dargestellt werden.
- Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode sollte genauer sein, da keine Annahme über die Verteilung der Ergebnisse zugrunde gelegt wird und sie eher numerisch charakterisiert wird.

1.1 Bayes'sche Statistik

Die Bayes'sche Analyse ist ein Verfahren in der Statistik, welches die Parameter einer angenommenen Verteilung basierend auf den relevanten beobachteten Daten schätzt. Sie beginnt mit einer "Prior-Verteilung", die sich auf Beobachtungen, wie z.B. einer Abschätzung für wahrscheinliche Werte dieser Parameter, stützt. In der Praxis ist es üblich, davon auszugehen, dass diese "Prior-Verteilung" eine Gleichverteilung auf einem passenden Intervall ist. Wesentlich am Bayes-Ansatz ist die Beschreibung der Unsicherheit von Modellparametern durch entsprechende Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Demgegenüber interessiert sich die orthodoxe Statistik für die Unsicherheit der Versuchsergebnisse in hypothetischen Wiederholungen der Experimente bei vorgegebenen Werten der Modellparameter.

Die Prior-Verteilung beschreibt datenunabhängiges Vorwissen, das sich aus den verwendeten Modellierungsansätzen ergibt (Positivität von Parametern etc.). Wenn die Prior-Verteilung definiert wurde, werden Daten gesammelt und ihr zugeordnet. Danach wird die Likelihood-Funktion berechnet, mit der Prior-Verteilung multipliziert, und so normiert, um eine Wahrscheinlichkeit von 1 über alle möglichen Werte zu erhalten. So entsteht die Posterior-Verteilung. Die Maximumstelle der Verteilungsdichte ist dann der Schätzer für die gesuchten Parameter. Außerdem können ihre Wahrscheinlichkeitsintervalle, so genannte Bayes'sche Intervalle, analog zu Konfidenzintervallen berechnet werden.

1.2 Probabilistische Neuronale Netze

1.2.1 Konventionelles Feed-Forward Neuronales Netz

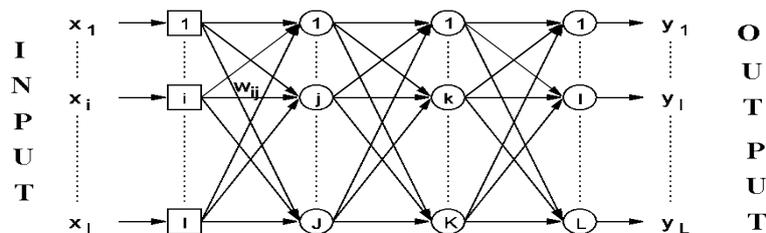


Abb. 1.1: Feed-Forward Neuronales Netz mit vier Schichten

Neuronale Netze sind breit einsetzbar und werden bei Lösungen von direkten Näherungs- und Vorhersageproblemen, bei inversen Problemen, wie der Optimierung und der Identifizierung von Parametern, oder auch für Klassifizierungsaufgaben angewendet. Die am häufigsten verwendeten Netze, die sogenannten konventionellen Feed-Forward Netze, sind in der Lage, diverse komplexe Zusammenhänge zu erlernen, wobei der Lernprozess entfernt an den Lernprozess im Nervensystem zum Erlernen primärer Fähigkeiten anhand gesehener Beispiele erinnert.

Ein Netz besteht aus einer beliebigen endlichen Anzahl netzartig verbundener elementarer Einheiten, die auch als Neuronen genannt werden. Daher stammt der Name dieses mächtigen mathematischen Werkzeugs. Innerhalb eines Netzes unterscheidet man zwischen Input-, Hidden- und Output-Neuronen nach ihrer Zugehörigkeit zu einer von M Schichten im Netz. Die Input-Neuronen erhalten eine externe Eingabe und die Output-Neuronen produzieren externe Ausgaben. Hidden-Neuronen haben nur Verbindungen zu Neuronen aus der vorherigen Schicht, und erhalten ihre Eingaben von anderen Hidden-Neuronen oder von den Input-Neuronen und sind somit im Netz versteckt. Signale vom

Eingang werden im Netz modifiziert und durch die Verbindungen zum Ausgang übergeben. Neuronale Netze sind somit nichts anderes als Netze von Funktionen. Dabei sind unter Neuronen primitive Funktionen gemeint, die ihre Eingabe in eine Ausgabe transformieren.

Jedes Neuron hat so viele Parameter bzw. synaptische Gewichte, wie es Signale von anderen Neuronen bekommt und zusätzlich einen internen Schwellwert. Die globale Anzahl der Netzparameter kann durch Hinzufügen zusätzlicher Schichten oder einzelner Neuronen beliebig eingestellt werden, wobei erwünscht ist, abhängig von der Komplexität der Aufgabe, nicht zu viele Parameter einzuführen.

Die Eingangsdaten $\mathbf{x} = \{x_i\}_{i=1}^I$ werden den Ausgangsdaten $\mathbf{y} = \{y_l\}_{l=1}^L$ über den Parametervektor \mathbf{w} zugewiesen, was einer nichtlinearen Abbildung $y_l = y_l^{(M)} = \mathcal{N}[w_{ij}, x_i]$ von Eingangsdaten auf die Ausgangsdaten entspricht:

$$\begin{cases} y_i^{(0)} = x_i \\ y_k^{(m)} = \varphi(v_k^{(m)}), \quad v_k^{(m)} = \sum_{j=1}^J w_{kj}^{(m)} y_j^{(m)} - w_{k0}^{(m)} \quad m = 1, \dots, M \end{cases} \quad (1.1)$$

Ein möglicher Ansatz für die Funktion $\varphi(v)$ ist die Sigmoidal-Funktion, eine nichtlineare für alle $-\infty < v < \infty$ differenzierbare Funktion

$$\varphi(v) = \frac{1}{1 + e^{-v}}, \quad (1.2)$$

mit einem Wertebereich $(0, 1)$. Eine andere differenzierbare Funktion, die oft verwendet wird, ist der hyperbolische Tangens:

$$\varphi(v) = \tanh v = \frac{e^v - e^{-v}}{e^v + e^{-v}} \quad (1.3)$$

die Werte im Intervall $(-1, 1)$ annimmt.

Die Struktur eines Neuronalen Netzes und seine Eigenschaft sich an bereits gesehene Beispiele eines erlernten Zusammenhanges zu erinnern, wurde von den Entwicklern aus den biologischen Prozessen im Gehirn abgeleitet. Daher wurden auch Begriffe wie z.B. Neuron und Lernprozess aus der Biologie entnommen. Eine wichtige vorteilhafte Eigenschaft eines Neuronalen Netzes ist, dass es sehr schnell in der Auswertung ist, nachdem es einmal trainiert wurde.

Lernprozess

Neuronale Netze erlernen einen Zusammenhang $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}$, der durch mehrere Trainingsbeispiele gegeben ist, indem sie interne Parameter \mathbf{w} , die synaptischen Gewichte, so anpassen, dass ein durch diese Beispiele gegebener Zusammenhang reproduziert wird. Diese Anpassung heißt Lernprozess und erfolgt unter Verwendung eines Optimierungsverfahrens mit der Zielfunktion

$$S(\mathbf{w}) = G(\mathbf{w}) + \alpha E_W(\mathbf{w}) \quad (1.4)$$

Die Zielfunktion besteht aus einem Fehlerterm $G(\mathbf{w})$ und einem Regulierungsterm $E_W(\mathbf{w})$. Dabei wird ein optimaler Satz Parameter \mathbf{w} gesucht, welcher der besten Anpassung des Neuronalen Netzes auf die gegebenen Daten entspricht. Für N gegebene Trainingsbeispiele $\{\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{t}^{(n)}\}_{n=1}^N$ ist die Zielfunktion:

$$S = G_{\{I,II,III\}}(\{\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{t}^{(n)}\}_{n=1}^N, \mathbf{w}) + \alpha \sum w_i^2. \quad (1.5)$$

Für verschiedene Aufgaben ist der Fehlerfunktionsteil unterschiedlich, z.B. für die Regression:

$$G_I = \frac{1}{2} \beta \sum_{n=1}^N \sum_{l=1}^L (t_l^{(n)} - y_l(\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{w}))^2, \quad (1.6)$$

für die Aufteilung in zwei Klassen:

$$G_{II} = - \sum_{n=1}^N [t^{(n)} \log y(\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{w}) + (1 - t^{(n)}) \log(1 - y(\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{w}))] \quad (1.7)$$

und in L Klassen:

$$G_{III} = - \sum_{n=1}^N \sum_{l=1}^L t_l^{(n)} \log y_l(\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{w}), \quad \sum_{l=1}^L t_l^{(n)} = 1. \quad (1.8)$$

Das Netz wird durch Minimieren der Zielfunktion $S(\mathbf{w})$ trainiert:

$$\mathbf{w}^* : \min \longrightarrow S(\mathbf{w}) \quad (1.9)$$

Die Minimierung führt man mit der Hilfe von Gradientenmethoden durch. Der Gradient kann hierbei analytisch mit

$$\Delta \mathbf{w} = -\eta \text{grad}S(\mathbf{w}) \quad (1.10)$$

bestimmt werden und man erhält eine iterative Verbesserung der Gewichte mit

$$\mathbf{w}^{(t+1)} = \mathbf{w}^{(t)} + \Delta \mathbf{w}. \quad (1.11)$$

Nach genügend Iterationen erhält man einen optimalen Wert \mathbf{w}^* , der einem Minimum der Zielfunktion $S(\mathbf{w})$ entspricht und für den das Netz mit den gegebenen Trainingsdaten einen möglichst kleinen Fehler hat.

Voraussage

Das trainierte Netz ist dann in der Lage, den durch die Beispiele gegebenen Zusammenhang zu approximieren und für neue, unbekannte Eingangsdaten zu rekonstruieren. Die Güte der Rekonstruktion ist von verschiedenen Faktoren abhängig, z.B. von der Quantität und Qualität der Trainingsbeispiele und von der Architektur des Netzes, d.h. die Organisation der inneren Schichten und Neuronen in diesen. Nach dem das Netz einmal trainiert wurde, kann für einen neuen Input \mathbf{x} damit eine Voraussage \mathbf{t} getroffen werden, in dem das Netz auf diesem Eingabevektor mit dem Parametervektor \mathbf{w}^* ausgewertet wird:

$$\mathbf{t} \approx \mathbf{y}(\mathbf{x}, \mathbf{w}^*) \quad (1.12)$$

Über die Sicherheit des Ergebnisses ist aber zunächst keine Aussage vorhanden. Für manche Probleme ist das Finden eines Minimums der Zielfunktion oft nicht eindeutig und vom Anfangswert des Parametersatzes abhängig. Die Aussagequalität kann nur anhand von Verifikationsbeispielen geprüft werden. Leider ist in der Regel die Anzahl von Beispielen des gesuchten Zusammenhangs, die zur Verifikation verwendet werden können, stark begrenzt. Zum Einen sind solche Beispiele üblicherweise sehr aufwendig zu erhalten, weil jedes einzelne ein experimentelles Ergebnis oder eine komplexe Berechnung darstellt, zum Anderen sind sie wertvoller in der Menge der Trainingsdaten, die direkt zum Trainieren verwendet werden. Die Unsicherheit steigt zum Rand des Trainingsbereiches, darüber hinaus sind keine zumutbaren Aussagen möglich, da für der Zusammenhang zwischen Eingangsdaten und Ausgangsdaten nur eine auf Neuronalen Netzen basierte Interpolationsmethode angewendet wurde.

Während des Trainings wird ein relativer Fehlerbetrag für jeden Outputneuron $err_{T,l}$ bzw. $err_{V,l}$ für Trainings- bzw. Verifikationsdaten ausgegeben, den 90% der entsprechenden

Daten unterschreiten. Diese Werte werden zwar in Anlehnung an die Statistik als 90%-Konfidenzintervalle genannt, haben aber nicht den Anspruch, um die Unsicherheit des Neuronalen Netzes zu bewerten und beurteilen nur die aktuelle Approximationsqualität des Netzes für die Besetzung mit gegebenen Werten von synaptischen Gewichten.

1.2.2 Bayes'scher Ansatz - Lernen als Analogie zum statistischen Schließen

In einem Probabilistischen Neuronalen Netz wird der konventionelle Lernprozess als stochastisches Bayes'sches Lernen beschrieben [34, 40]. Die dadurch entstehenden Vorteile werden im Weiteren erläutert.

Betrachtet wird ein Feed-Forward Neuronales Netz mit der gleichen Struktur wie es im vorherigen Abschn. 1.2.1 beschrieben wurde. Im Unterschied zu konventionellen Neuronalen Netzen bieten Bayes'sche Neuronale Netze zusätzlich folgende Eigenschaften:

1. Die Trainingsprozedur der Minimierung der Fehlerfunktion wird durch eine Bayes'schen Betrachtungsweise ersetzt, in der ein Lernprozess für die Netzparameter auf Grundlage der vorhandenen Trainingsbeispiele modelliert wird.
2. Es können Fehlerbalken oder Konfidenzintervalle für die mit dem Neuronalen Netz erhaltenen Vorhersagen abgeschätzt werden.
3. Bayes'sche Methoden erlauben die Wahl der Regularisierungsparameter α und β allein aus den Trainingsdaten, ohne die Notwendigkeit der Aufteilung der Daten in Trainings- und Validierungs- Beispiele.

Das im vorherigen Abschnitt beschriebene Trainieren eines konventionellen Neuronalen Netzes basiert auf der Maximum-Likelihood Methode, die der Minimierung der Fehlerfunktion entspricht. Dieses Vorgehen beinhaltet immer die Gefahr des Übertrainierens, also der Nachbildung zufälliger Strukturen in den Trainingsmustern, die nur mittels manueller Anpassung des Regularisationsparameters vermieden oder gemindert werden kann. Im Gegensatz dazu wird beim Bayes'schen Vorgehen die Unsicherheit der Gewichte \mathbf{w} in Form einer Wahrscheinlichkeitsverteilung in dem Gewichtsraum berücksichtigt. Hier geht man zunächst von einer Prior-Verteilung für \mathbf{w} aus, die als $P(\mathbf{w})$ bezeichnet wird. Nachdem einige Daten D in Form von Trainingsbeispielen dem Netz zugefügt wurden, erhält man die Posterior-Verteilung $P(\mathbf{w}|D)$ entsprechend dem Satz von Bayes:

$$P(\mathbf{w}|D) = \frac{P(D|\mathbf{w})P(\mathbf{w})}{P(D)}. \quad (1.13)$$

Hier ist $P(D|\mathbf{w})$ die auf Grundlage der Daten D erhaltene Likelihoodfunktion und $P(D)$ die Größe im Nenner, die eine korrekte Normierung der Posterior-Verteilung garantiert. Gl. (1.13) stellt ein mit $P(\mathbf{w})$ gewichtetes Mittel der Likelihoodfunktion $P(\mathbf{w}|D)$ dar. Der Anschluss an die konventionellen Neuronale Netze wird dadurch hergestellt, dass die Zielfunktion $S(\mathbf{w})$ als negativer Logarithmus der Posterior-Verteilung $P(\mathbf{w}|D)$ aufgefasst wird:

$$P(\mathbf{w}|D) = \frac{1}{Z_S} \exp(-S(\mathbf{w})) \quad (1.14)$$

mit der Normierungskonstante Z_S .

Entsprechend wird der Fehlerterm G als negativer Logarithmus der Likelihoodfunktion $P(D|\mathbf{w})$ interpretiert und der Regulierungsterm E_W definiert die Prior-Verteilung

$$P(\mathbf{w}|\alpha) = \frac{1}{Z_W(\alpha)} \exp(-\alpha E_W(\mathbf{w})). \quad (1.15)$$

Ein trainiertes Neuronales Netz kann in den Begriffen der Bayes-Methodik als die Posterior-Verteilung seiner synaptischen Gewichte \mathbf{w} beschrieben werden. Für einen neuen Inputvektor \mathbf{x} erhält man aus der Verteilung der Gewichte die statistische Verteilung des entsprechenden Outputvektors \mathbf{t} , die so genannte Vorhersagewahrscheinlichkeit $P(\mathbf{t}|\mathbf{x}, D)$. Für Klassifizierungsnetze etwa gibt $P(\mathbf{t}|\mathbf{x}, D)$ die Wahrscheinlichkeit an, dass der Output \mathbf{t} in eine von zwei oder mehreren vorgegebenen Klassen fällt. Die Verteilung des Outputs für einen gegebenen Inputvektor \mathbf{x} kann nach den Regeln der Probabilistik so aufgeschrieben werden:

$$P(\mathbf{t}|\mathbf{x}, D) = \int P(\mathbf{t}, \mathbf{w}|\mathbf{x}, D) d\mathbf{w} = \int P(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \mathbf{w}) P(\mathbf{w}|D) d\mathbf{w} \quad (1.16)$$

Daraus ergibt sich also die Gewichtung der Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von \mathbf{t} über alle möglichen Werte von \mathbf{w} entsprechend ihrer (Posterior-) Wahrscheinlichkeit $P(\mathbf{w}|D)$.

Beim probabilistischen Ansatz wird also das Lernen als Analogie zum statistischen Schließen betrachtet. Ein Lernprozess lässt sich gemäß Abb. 1.2 darstellen.

Wenn Vorkenntnisse über die uns interessierenden Parameter bestehen, und Daten zur Kenntnis genommen werden, verbessern sich diese Vorkenntnisse zu einem neuen Erkenntnisstand.

Die Posterior-Wahrscheinlichkeit, die dem neuen Erkenntnisstand entspricht, ist dem Pro-

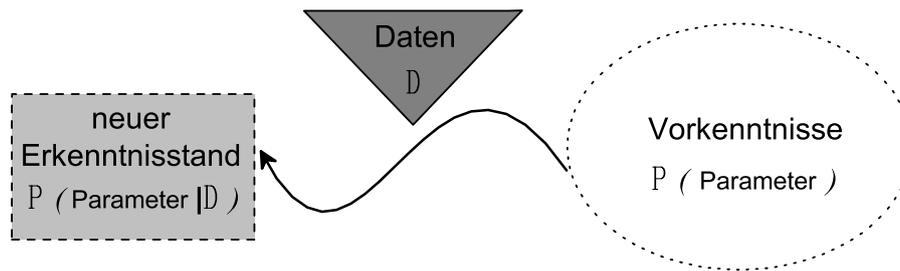


Abb. 1.2: Statistisches Schließen für einen unbekannt Parameter.

dukt der Prior-Wahrscheinlichkeit der Vorkenntnisse und der Likelihoodfunktion, welche den Informationseingang aus den Daten beschreibt, proportional:

Posterior – Wahrscheinlichkeit \sim Likelihood – Funktion \times Prior – Wahrscheinlichkeit.

Die Bayes-Formel für das Folgern der Posterior-Verteilung des Parametersatzes \mathbf{w} unter Berücksichtigung der Trainingsdaten D ist gegeben mit

$$\begin{aligned}
 P(\mathbf{w}|D, \alpha) &= \frac{P(D|\mathbf{w})P(\mathbf{w}|\alpha)}{P(D|\alpha)} \\
 &= \frac{\exp[-G(\mathbf{w})] \exp(-\alpha E_W) / Z_W(\alpha)}{P(D|\alpha)} \\
 &= \frac{\exp(-S(\mathbf{w}))}{Z_M}. \tag{1.17}
 \end{aligned}$$

Eine genauere Herleitung dieses Zusammenhangs wird im anschliessenden Abschn. 1.3 ausführlicher diskutiert. Der Parametersatz \mathbf{w}^* , den man bei **Minimierung** von $S(\mathbf{w})$ lokal findet, ist somit gleichzeitig der selbe Parametersatz, wie der **am meisten wahrscheinliche** Parametersatz \mathbf{w}_{MP} , **der größten \mathbf{w} -Dichte** $P(\mathbf{w}|D, \alpha)$ entspricht.

1.3 Aufbau eines probabilistischen Netzes

Ein Neuronales Netz ist eine nichtlineare und mit synaptischen Gewichten \mathbf{w} parametrisierte Abbildung des Eingangsvektors \mathbf{x} auf den Ausgangsvektor $\mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w})$. Es existiert eine bestimmte Anzahl N von Beispielen, oder Trainingsmuster $D = \left\{ \{\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{t}^{(n)}\}_{n=1}^N \right\}$, bestehend aus Inputvektoren $\mathbf{x}^{(n)}$ und den entsprechenden Outputvektoren $\mathbf{t}^{(n)}$. Auf der Basis der Daten D soll ein Netz lernen diese Zusammenhänge zu approximieren, welche den zu Grunde liegenden physikalischen Abhängigkeiten entsprechen. Ein klassisches konven-

tionelles Neuronales Netz wird durch Minimieren mit Hilfe der Gradientenmethode der Zielfunktion aus Gl. (1.4) trainiert, die aus einem Fehlerfunktionsteil und einem Regularisationsteil besteht. Weiterhin ist es möglich, eine probabilistische Interpretation für das Modell zu geben. Um Parameter des Netzes \mathbf{w} zu folgern, die den gegebenen Daten D entsprechen, sind die Likelihood-Funktion und die Prior-Verteilung der Parameter nötig. Die Suche nach einem Parametersatz, der $S(\mathbf{w})$ minimiert, ist gleichbedeutend mit der Suche nach dem wahrscheinlichsten Wert der Posterior-Verteilung.

Aus dem konventionellen Trainieren bekommt man als Ergebnis einen konkreten Satz der synaptischen Gewichte \mathbf{w}^* , welcher die gegebenen Daten D am besten reproduzieren kann. Bei der Bayes'schen Vorgehensweise bekommt man ein ganzes Ensemble von glaubwürdigen Parametersätzen. Dabei wird keine einzelne bestimmte Hypothese als Parametersatz zur Vorhersage ausgewählt, sondern jeder wird, gewichtet mit ihrer Wahrscheinlichkeit, in die Vorhersage einbezogen. Wenn die Anzahl der während des Trainings bekannter Daten N steigt, konzentriert sich das Posterior-Ensemble mehr in die Nähe des am meisten wahrscheinlichen Wertes \mathbf{w}_{MP} .

Bei Klassifizierungsproblemen wird der Outputwert $y(\mathbf{x}; \mathbf{w})$ vom Netz als die Wahrscheinlichkeit, dass ein Objekt mit der Inputvektor \mathbf{x} zur Klasse '1' gehört, also $y(\mathbf{x}; \mathbf{w}) = P(t = 1 | \mathbf{x}, \mathbf{w})$ definiert. Dann stellt jeder Wert von \mathbf{w} eine andere Aussage über die Wahrscheinlichkeit der Klasse '1' als eine Funktion von \mathbf{x} vor und teilt somit auf seine eigene Weise alle Objekte in zwei Klassen auf. Bei Regressionaufgaben bildet der Outputvektor $\mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w})$ vom Netz bei jedem Satz der Netzparameter \mathbf{w} den entsprechenden Outputvektor \mathbf{t} gut oder schlecht nach.

Die Likelihood-Funktion soll quantifizieren, wie gut der bestimmte Satz der Netzparameter die gegebenen Trainingsdaten reproduzieren kann. Für unabhängig erhobene Daten in D gilt:

$$\begin{aligned}
 P(D | \mathbf{w}) &= P(\{\mathbf{t}^{(n)}\}_{n=1}^N | \{\mathbf{x}^{(n)}\}_{n=1}^N, \mathbf{w}) \\
 &= \prod_{n=1}^N P(\mathbf{t}^{(n)} | \mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{w}) \\
 &= \sum_{n=1}^N \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^{1/2} \exp\left[-\frac{\beta}{2} \sum_{l=1}^L (t_l^{(n)} - y_l(\mathbf{x}^{(n)}; \mathbf{w}))^2\right] \\
 &= \frac{\exp[-G(\mathbf{w})]}{Z_D(\beta)}.
 \end{aligned} \tag{1.18}$$

Somit entspricht die probabilistische Interpretation der Fehlerfunktion dem negativen Logarithmus der Likelihood-Funktion. Die Maximierung der Likelihood-Funktion ist der Mi-

Minimierung der Fehlerfunktion gleichwertig.

Angenommen, dass a priori, d.h. ohne Vorhandensein der Kenntnisse in Form von Trainingsdaten D , alle Parameter \mathbf{w} einer in 0 zentrierten Normalverteilung mit Varianz σ_W , $\alpha = 1/\sigma_W^2$ unterliegen, also $w_i \sim N(0, \sigma_W)$, ergibt sich die entsprechende Prior-Verteilung des Parametervektors zu:

$$\begin{aligned}
 P(\mathbf{w}|\alpha) &= \prod_{i=1}^K P(w_i) \\
 &= \prod_{i=1}^K \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{w_i^2}{2\sigma_W^2}\right) \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^{K/2}} \exp\left(-\frac{1}{\sigma_W^2} \cdot \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K w_k^2\right) \\
 &= \frac{\exp(-\alpha E_W)}{(2\pi)^{K/2}}.
 \end{aligned} \tag{1.19}$$

Die Berücksichtigung des Regularisationsteils $E_W = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K w_k^2$ in der Zielfunktion $S(\mathbf{w})$ sorgt bei ihrer Minimierung dafür, dass die Gewichte allgemein möglichst kleine Werte annehmen und die Output-Funktion deswegen genügend glatt bleibt. Die probabilistische Interpretation des Regularisationsteils ist ebenfalls als negativen Logarithmus der Prior-Verteilung der Netzparameter anzusehen. Der Parameter α kontrolliert die Verteilung anderer Parameter, deswegen wird er als Hyperparameter bezeichnet. In der Praxis wird sogar ein verallgemeinertes Modell für die Parameter angenommen. Alle Parameter werden auf eine bestimmte Anzahl von G Gruppen aufgeteilt, so dass jede Gruppe von ihrer eigenen Normalverteilung mit der zugehöriger Varianz $\sigma_{W,g}$ und demnach $\alpha_g = 1/\sigma_{W,g}^2$ kontrolliert wird. Somit gilt:

$$P(\mathbf{w}|\alpha) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{g=1}^G \frac{1}{\sigma_{W,g}^2} \sum_{k=1}^{K_g} w_{k,g}^2\right) = \exp\left(-\sum_{g=1}^G \alpha_g E_{W,g}\right). \tag{1.20}$$

In der Regel gehören Gewichte $w_{k'j'}^{(m')}$, $w_{k''j''}^{(m'')}$ und Schwellwerte $w_{k'0}^{(m')}$, $w_{k''0}^{(m'')}$ von verschiedenen Schichten zu unterschiedlichen Gruppen. Somit wird die Möglichkeit gewährleistet, dass für Gewichte aus verschiedenen Gruppen Werte unterschiedlicher Größenordnungen angenommen werden können, die von den Hyperparametern $\{\alpha_g\}_{g=1}^G$ kontrolliert werden. Die beiden Zusammenhänge Gl. (1.18) und Gl. (1.19) werden direkt in die Bayes-Formel aus Gl. (1.13) eingesetzt, um von der Likelihood-Funktion und von der Prior-Verteilung

der Parameter zu folgender Beziehung zu schließen:

$$P(\mathbf{w}|D, \alpha) = \frac{\exp(-S(\mathbf{w}))}{Z_S^*}. \quad (1.21)$$

Somit ist die Posterior-Verteilung der Parameter bekannt, alle Kenntnisse aus den Trainingsdaten D sind in der Verteilung miteingeschlossen und der gesuchte Zusammenhang wurde anhand der Daten möglichst gut gelernt.

Voraussage

Wenn die Posterior-Verteilung der synaptischen Gewichte aus Gl. (1.21) bekannt ist, ist die Voraussage $\hat{\mathbf{t}}$ für den Vektor \mathbf{t} möglich, die einem nicht unter Trainingsdaten enthaltenen Eingangsvektor \mathbf{x} entspricht. Bei der Voraussage muss berücksichtigt werden, dass es nicht nur ein einzelner bester Satz von Parameter \mathbf{w}_{MP} verwendet werden kann, sondern dass die Parameter eine Verteilung besitzen und viele Werte in der Nähe des Minimums ebenfalls sehr wahrscheinlich sein können. Die wahrscheinlichste Voraussage für \mathbf{x} erhält man daher durch das Integrieren über alle möglichen Parametersätze \mathbf{w} bezüglich der Posterior-Verteilung von \mathbf{x} von allen Beiträgen, für die Wahrscheinlichkeit, dass dieser bestimmte Parametersatz \mathbf{w} für diesen Eingangsvektor voraussagt:

$$P(\mathbf{t}|\mathbf{x}, D, \alpha) = \int P(\mathbf{t}, \mathbf{w}|\mathbf{x}, D, \alpha) d\mathbf{w} = \int P(\mathbf{t}|\mathbf{x}, D, \alpha, \mathbf{w}) P(\mathbf{w}|D, \alpha) d\mathbf{w} \quad (1.22)$$

Der erste Faktor des Integranden entspricht der Wahrscheinlichkeit von \mathbf{t} für Inputvektor \mathbf{x} unter der Bedingung, dass das Netz als Parametersatz \mathbf{w} hat. Dieser Betrag wird mit einem Feed-Forward-Schritt durch das Neuronale Netz ermittelt:

$$P(\mathbf{t}|\mathbf{x}, D, \alpha, \mathbf{w}) = y(\mathbf{x}; \mathbf{w}). \quad (1.23)$$

Der zweite Faktor ist die Wahrscheinlichkeit, dass dieser bestimmte Parametersatz \mathbf{w} in Verbindung mit den Daten D gemäß der Posterior-Verteilung der Parameter

$$P(\mathbf{w}|D, \alpha) = \frac{\exp(-S(\mathbf{w}))}{Z_S^*} \quad (1.24)$$

vorkommt.

Um eine vertrauenswürdige Aussage mit einem probabilistischen Netz zu erhalten, sind

die Integrale zu berechnen, die den Erwartungswert und die Varianz für $\mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w})$ darstellen:

$$\hat{\mathbf{t}} = \mathbf{Y} = E\mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w}) = \int \mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w}) P(\mathbf{w} | D, \alpha) d^K \mathbf{w}, \quad (1.25)$$

$$\sigma_Y^2 = \int (\mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w}) - \mathbf{Y})^2 P(\mathbf{w} | D, \alpha) d^K \mathbf{w}. \quad (1.26)$$

Somit kann der am meisten wahrscheinliche Wert für die Klasse und die zugehörige Standardabweichung ermittelt werden. Allerdings erfordert die Berechnung eines solchen Integrals nichttriviale Methoden, da es hochdimensional ist und weil die Anzahl K der Anzahl von synaptischen Gewichten bei vielen Anwendungen eine Größenordnung von 10 bis 1000 annimmt.

1.4 Methoden der Berechnung von Mehrfachintegralen für die Posterior-Verteilung

Bei der Auswertung von konventionellen Neuronalen Netzen macht man Voraussagen durch einen einfachen Feed-Forward-Schritt durch das Netz, dessen synaptische Gewichte mit den Werten des optimalen Parametervektors \mathbf{w}^* besetzt wurden. Die Bayes'sche Vorgehensweise schließt eine Marginalisierung über die Parameter ein und berücksichtigt jeden Parametersatz mit der Wahrscheinlichkeit, die für ihn in Übereinstimmung mit Gl. (1.21) errechnet wird und stellt die Vorhersage als eine (hochdimensionale) Verteilung dar.

Für die Charakterisierung solcher hochdimensionaler Verteilungen werden in der Literatur zwei Methoden verwendet. Die Gauß-Approximation-Methode [34], die auf einer vereinfachenden Annahme über die Form der Posterior-Verteilung basiert und die Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode [40], die numerisch, durch Generieren von Stichproben, die Posterior-Verteilung wiedergibt. Beide Methoden werden nachfolgend in der Form wie sie implementiert wurden, ausführlich diskutiert.

1.4.1 Gauß-Approximation

Die Auswertung von typischen Gleichungen wie Gl. (1.25) und Gl. (1.26) erfordert eine numerische Integration über den üblicherweise hochdimensionalen Gewichtsraum. In diesem Abschnitt wird zunächst das in [34] vorgeschlagene Näherungsverfahren der Gauß-Approximation für die Posterior-Verteilung beschrieben. Diese erhält man durch eine Taylor-Entwicklung der Zielfunktion $S(\mathbf{w})$ in der Nähe ihres Minimum-Wertes \mathbf{w}_{MP} bis

zu Termen 2. Ordnung gemäß:

$$S(\mathbf{w}) = S(\mathbf{w}_{MP}) + \frac{1}{2}(\mathbf{w} - \mathbf{w}_{MP})^T \mathbf{A}(\mathbf{w} - \mathbf{w}_{MP}) \quad (1.27)$$

Dabei ist \mathbf{A} ein Matrix die entsprechend folgender Regel berechnet wird:

$$\mathbf{A} = \nabla \nabla S(\mathbf{w}_{MP}) = \beta \nabla \nabla E_D^{MP} + \alpha \mathbf{I}. \quad (1.28)$$

\mathbf{A} wird auch als Hessian oder Hesse-Matrix bezeichnet. Das Einsetzen in Gl. (1.21) der Taylor-Entwicklung (1.27) führt zu einer approximierten Posterior-Verteilung, die jetzt eine Gauß-Funktion der Gewichte ist:

$$P(\mathbf{w} | D) = \frac{1}{Z_S^*} \exp(-S(\mathbf{w}_{MP}) - \frac{1}{2} \Delta \mathbf{w}^T \mathbf{A} \Delta \mathbf{w}) \quad (1.29)$$

mit $\Delta \mathbf{w} = \mathbf{w} - \mathbf{w}_{MP}$. Als Z_S^* wird die dieser Gauß-Verteilung entsprechende Normierungskonstante bezeichnet, die bei Bedarf direkt berechnet werden kann:

$$Z_S^*(\alpha, \beta) = \exp^{-S(\mathbf{w}_{MP})} (2\pi)^{W/2} |\mathbf{A}|^{-1/2} \quad (1.30)$$

Das Verfahren zu einer genauen und effektiven numerischen Berechnung der Hesse-Matrix ist in [4] beschrieben. Für sehr große Datensätze ist eine Annahme, dass die Posterior-Verteilung zu einer Gauß-Verteilung tendiert, gerechtfertigt, wie es in [54] untersucht wurde. Das Verwenden der Gauß-Approximation wird dadurch motiviert, dass man somit einen weiteren großen Schritt in der analytischen Analyse machen kann.

Generell kann für jede nichtlineare Abbildungsfunktion des Neuronalen Netzes $\mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w})$ eine Mehrzahl von Minimum-Stellen der Fehlerfunktionen existieren. Die Gauß-Approximation kann dabei selbstverständlich nicht mehrere Minima berücksichtigen. Eine korrekte Vorgehensweise für die Approximierung der Posterior-Verteilung ist eine gemittelte Summe aus einzelnen Gauß'schen Termen, jeder in einem einzelnen Minimum zentriert, zu verwenden.

Verteilung des Outputs des Netzes

Das Einsetzen der approximierten Posterior-Verteilung (1.29) in die Berechnungsformel für die Posterior-Verteilung des Outputs (1.22) führt zu

$$P(\mathbf{t}|\mathbf{x}, D) \propto \int \exp\left(-\frac{\beta}{2}\{\mathbf{t} - \mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w})\}^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\Delta\mathbf{w}^T \mathbf{A} \Delta\mathbf{w}\right) d\mathbf{w}. \quad (1.31)$$

Eine weitere Annahme, dass die Streuung der Posterior-Verteilung, welche durch die Matrix \mathbf{A} festgelegt wird, klein ist, ermöglicht es, den Output vom Neuronalen Netz $\mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w})$ linear im Punkt \mathbf{w}_{MP} zu approximieren:

$$\mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w}) = \mathbf{y}_{MP} + \mathbf{g}^T \Delta\mathbf{w} \quad (1.32)$$

mit $\mathbf{g} \equiv \nabla_{\mathbf{w}} \mathbf{y} |_{\mathbf{w}_{MP}}$, $\mathbf{y}_{MP} = \mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w}_{MP})$. Diese Annahme erlaubt das Umschreiben von (1.31) in

$$P(\mathbf{t}|\mathbf{x}, D) \propto \int \exp\left(-\frac{\beta}{2}\{\mathbf{t} - \mathbf{y}_{MP} - \mathbf{g}^T \Delta\mathbf{w}\}^2 - \frac{1}{2}\Delta\mathbf{w}^T \mathbf{A} \Delta\mathbf{w}\right) d^K \mathbf{w}. \quad (1.33)$$

Die Berechnung des letzten Integrals kann somit analytisch erfolgen, woraus sich eine Gauß-Verteilung in der Form

$$P(\mathbf{t}|\mathbf{x}, D) = \frac{1}{(2\pi\sigma_Y^2)^{1/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{t} - \mathbf{y}_{MP})^2}{2\sigma_Y^2}\right) \quad (1.34)$$

ergibt mit dem Mittelwert \mathbf{y}_{MP} und der Varianz

$$\sigma_Y^2 = \frac{1}{\beta} + \mathbf{g}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{g}. \quad (1.35)$$

Somit kann die Standardabweichung σ_Y der Verteilung der Voraussage als ein Streubalken auf dem Mittelwert \mathbf{y}_{MP} interpretiert werden. Die Streuung besteht aus zwei Anteilen: der erste ergibt sich aus der eigentlichen Streuung der Daten, während der zweite die Unsicherheit in den synaptischen Gewichten widerspiegelt, die aus deren Posterior-Verteilung resultiert [5].

Somit erlaubt die Bayes'sche Vorgehensweise, einen Streubalken bzw. Konfidenzintervall $[\mathbf{y}_{MP}(\mathbf{x}) - \sigma_Y, \mathbf{y}_{MP}(\mathbf{x}) + \sigma_Y]$ für die Vorhersage mit dem Probabilistische Neuronale Netz zu berechnen, statt einem einzigen passenden Vorschlag als Vorhersage im konventionellen Fall. Ebenso wie beim konventionellen Trainieren wird hier zuerst der wahrscheinlichste Satz der Gewichte \mathbf{w}_{MP} durch Minimierung der Fehlerfunktion $S(\mathbf{w})$ gesucht. Die Ermittlung des Fehlerbalken erfolgt nach der Berechnung der Hesse-Matrix aus der Fehlerfunktion mittels Gl. (1.35).

Die Hyperparameter $\{\alpha_g\}_{g=1}^G$ und β werden während der Trainingsprozedur so angepasst, dass sie die Wahrscheinlichkeit der Daten maximieren [34].

Die Hesse-Matrix \mathbf{A} kann im allgemeinen Fall nicht analytisch berechnet werden, so wird bei der Berechnung eine Approximation

$$(\mathbf{A})_{ji} \approx \left(\frac{\partial S(w_j + \varepsilon)}{\partial w_i} - \frac{\partial S(w_j - \varepsilon)}{\partial w_i} \right) / 2\varepsilon \quad (1.36)$$

verwendet mit z.B. $\varepsilon = 1.E - 3$. Anschließend wird die aus der numerischen Ungenauigkeit entstandene Asymmetrie durch die Korrektur $a_{ij}^{kor} = (a_{ij} + a_{ji})/2$ für jeden Element der Matrix berichtigt. Die Symmetrie der Matrix gewährleistet ihre positiven Eigenwerte $\{\lambda_k\}_{k=1}^K$. Jeder Eigenwert entspricht einem synaptischen Gewicht. Somit wird der ganze Satz von Eigenwerten auf G Gruppen aufgeteilt, die der Aufteilung der Gewichte entsprechen:

$$\{\lambda_k\}_{k=1}^K = \left\{ \left\{ \lambda_{k_g} \right\}_{k_g=1}^{K_g} \right\}_{g=1}^G.$$

Für jede Gruppe g wird ein positives Derivat aus den entsprechenden Eigenwerten dieser Gruppe berechnet:

$$\gamma_g \equiv \sum_{k_g=1}^{K_g} \frac{\lambda_{k_g}}{\lambda_{k_g} + \alpha_g}, \quad 1 \leq g \leq G, \quad (1.37)$$

$\{K_g\}_{g=1}^G$ sind dabei die Anzahlen der synaptischen Gewichte in jeder Gruppe. Die Werte von $\{\alpha_g\}_{g=1}^G$ und β können dann entsprechend einer Neuschätzungs-Prozedur

$$\begin{aligned} \alpha_g^{new} &= \gamma_g / 2E_{W,g}, \quad 1 \leq g \leq G \\ \beta^{new} &= (N - \gamma) / 2E_D \end{aligned} \quad (1.38)$$

umgerechnet werden. Dabei wird mehrmals nach einer bestimmten Anzahl von Iterationen in die Minimum-Richtung eine Neuschätzung durchgeführt, weiter in die Minimum-Richtung der Zielfunktion $S(\mathbf{w})$ eine iterative Bewegung vorgenommen und erneut eine Neuschätzung gemacht. Dieser Vorgang wird wiederholt bis ein zufriedenstellendes Minimum erreicht wurde.

Zur Vereinfachung kann angenommen werden, dass $\gamma_g = K_g$. Aus (1.38) ergibt sich somit:

$$\begin{aligned} \alpha_{g,rau}^{new} &= K_g / 2E_{W,g}, \quad 1 \leq g \leq G \\ \beta_{rau}^{new} &= N / 2E_D. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Zusammenfassung für die Vorgehensweise

1. Anfangswerte für die Hyperparameter $\{\alpha_g^{(0)}\}_{g=1}^G$ und $\beta^{(0)}$ sollen gewählt werden, dabei kann β etwa aus der Streuung der Trainingsdaten geschätzt werden. $\{\alpha_g\}_{g=1}^G$ definieren die Prior-Verteilungen für die entsprechenden G Gruppen, deren synaptische Gewichte der jeweiligen Gruppe unterliegen. Alle Anfangswerte für die synaptischen Gewichte sollen aus den entsprechenden Gauß-Verteilungen generiert werden.
2. Das Neuronale Netz soll nach einem Optimierungsalgorithmus zur Minimierung der Zielfunktion $S(\mathbf{w})$ trainiert werden.
3. Mehrmals sollen nach einigen Iterationszyklen in der Optimierungsschleife die Hyperparameter $\{\alpha_g\}_{g=1}^G$ und β nach Gl. (1.38) entsprechend den Neuschätzungsgleichungen (1.38) oder vereinfacht nach Gl. (1.39) umgerechnet werden, welche die aktuelle Kenntnis von $\{\gamma_g\}_{g=1}^G$ erfordern. Dafür soll jedes Mal die aktuelle Hesse-Matrix \mathbf{A} berechnet und das ganze Spektrum ihrer Eigenwerte für das Einsetzen in Gl. (1.37) ermittelt werden. Ebenso wird die Ermittlung der inversen Matrix \mathbf{A}^{-1} für die Berechnung der Streuung der Vorhersage $\sigma_Y^{(r)}$ aus Gl. (1.35) benötigt. Anschließend werden die neuen Werte $\{\alpha_g\}_{g=1}^G$ und β bei der Berechnung von $S(\mathbf{w})$ eingesetzt.
4. Anschließend wird ein Feed-Forward-Schritt durch das Netz auf dem Inputvektor \mathbf{x} errechnet, woraus sich eine Vorhersage $\mathbf{Y}^{(r)} = \mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w}_{MP}^{(r)})$ ergibt.
5. Die Schritte 1 bis 4 sollen für verschiedene Zufallsinitialisierungen der synaptischen Gewichte mehrmals, z.B. $R = 5$, wiederholt werden. Dies soll das Finden verschiedener lokaler Minima sichern. Anschließend sollen alle Ergebnisse $\{\mathbf{Y}^{(r)} \mp \sigma_Y^{(r)}\}_{r=1}^R$ gemittelt werden:

$$\bar{\mathbf{Y}} = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \mathbf{Y}^{(r)}, \quad (1.40)$$

$$\sigma_Y^2 = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \left(\sigma_Y^{(r)}\right)^2 + \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \left(\mathbf{Y}^{(r)} - \bar{\mathbf{Y}}\right)^2. \quad (1.41)$$

1.4.2 Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode

Zur Lösung des Integrals in Gl. (1.25) wird ebenso als Alternative die Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode, weiter als MCMC bezeichnet, verwendet [40]. Im Unterschied zur vorher beschriebenen Methode der Gauß-Approximation wird bei MCMC der größte Teil

der Berechnungen numerisch durchgeführt. Das Verfahren ist daher sehr rechenzeitaufwendig, liefert dafür genauere Ergebnisse und ist nicht von der Richtigkeit einer Annahme über die Form der Posterior-Verteilung abhängig. Je nach Aufgabe und Ansprüche ist diese im Weiteren beschriebene MCMC-Methode für den Einsatz in Neuronalen Netzen besser geeignet.

Die MCMC-Methode ist ein Simulationsverfahren zur Untersuchung des Wahrscheinlichkeitsraums der unbekannt Parameter. Sie basiert auf der Suche nach Bereichen höchster Wahrscheinlichkeit durch zufälliges Wandern entlang einer Trajektorie im Parameterraum ausgehend von einem geeignet gewählten Anfangswert. Der folgende Punkt der Trajektorie ist jeweils nur vom vorherigen abhängig. Die Schrittweite ist ein Parameter der Simulation. Eine korrekte Schrittanpassung ist eine wesentliche Steuerungshilfe des Algorithmus. Dabei kann sichergestellt werden, dass der Parameterraum möglichst schnell durchschritten wird, aber dass dennoch keine Gebiete größer Wahrscheinlichkeit übersprungen werden.

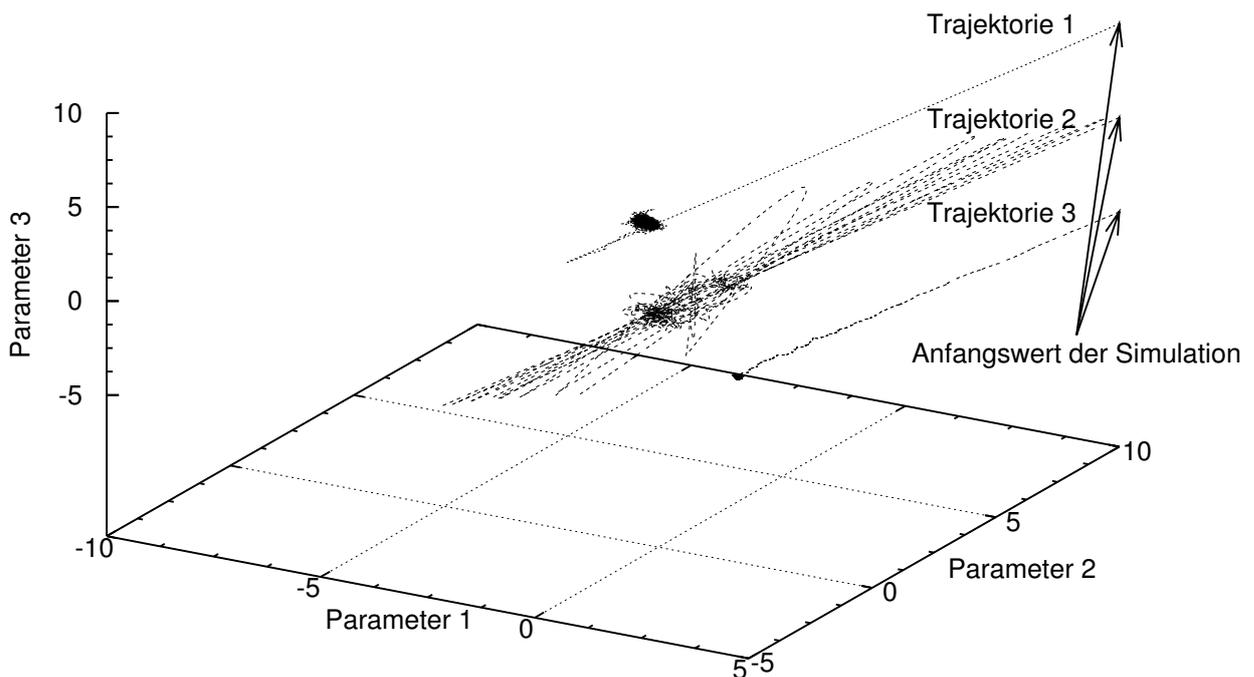


Abb. 1.3: MCMC-Trajektorien mit unterschiedlichen Schrittweiten im dreidimensionalen Parameterraum

Die in Abb. 1.3 gezeigten Trajektorien sind drei unterschiedliche Beispiele mit verschiedenen Schrittweiten in einem dreidimensionalen Parameterraum, der zwei Maxima der Verteilungsdichte enthält. Der besseren Erkennbarkeit wegen sind die Trajektorien leicht gegeneinander verschoben, was man an den Startpunkten erkennt, die in allen Fällen iden-

tisch vorgegeben wurden. Wesentlich bei der Wahl geeigneter Trajektorien ist das Erreichen der Verteilungsmaxima von einem Ort niedriger Verteilungsdichte (Trajektorie 2), sowie die Tatsache, dass die Simulation möglichst nicht in einem lokalen Maximum stecken bleibt, wie es bei Trajektorien 1 und 3 der Fall ist. Mit gut konstruierten Trajektorien erhält man nach einer bestimmten Anzahl von Schritten in der sogenannten Einbrennphase eine repräsentative Stichprobe aus der zugrunde liegenden ggf. mehrgipfligen Verteilung. Die Methode wurde für eine spezielle Variante von Feed-Forward Neuronalen Netzen entwickelt, die nur eine Zwischenschicht mit einer tanh-Aktivierungsfunktion enthält und deren Outputvektor durch eine lineare Funktion aktiviert wird:

$$\begin{aligned}
 h_j(x) &= \tanh(b_j^H + \sum_i w_{ij}^H x_i) \\
 y_l(x) &= b_l^O + \sum_j w_{jl}^O h_j
 \end{aligned}
 \tag{1.42}$$

Es gibt mehrere Hinweise in der Literatur, z. B. [40], die besagen, dass eine einzige versteckte Zwischenschicht ausreichend ist, um eine beliebige nichtlineare stetige Abbildung anzunähern.

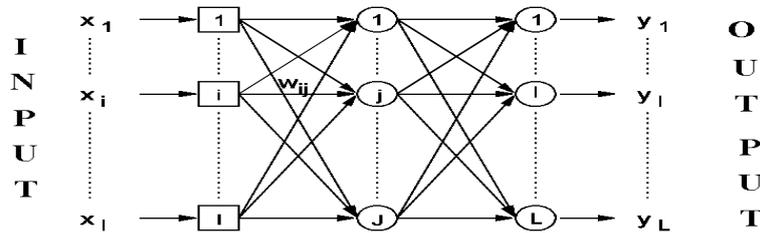


Abb. 1.4: Feed-Forward Neuronales Netz mit einer versteckten Schicht.

Die MCMC-Methode wird angewendet, um mehrere unabhängige Stichproben $\{\mathbf{w}^{(r)}\}_{r=1}^R$ aus der Posterior-Verteilung der synaptischen Gewichte (siehe Gl. (1.19)) zu entnehmen. Anschließend kann ein Schätzer $\hat{\mathbf{Y}}$ für den Erwartungswert der Vorhersage für \mathbf{t} an einem Inputvektor \mathbf{x} als Mittelwert aller Feed-Forward-Schritte der Netze $\{\mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w}^{(r)})\}_{r=1}^R$

$$\hat{\mathbf{Y}} = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w}^{(r)})
 \tag{1.43}$$

und 80%-Konfidenzintervalle aus 10%- bzw. 90%-Quantilen errechnet werden.

Da die Posterior-Verteilung $P(\mathbf{w}|D, \alpha)$ hochdimensional ist und keine bekannte Form besitzt, ist für die Generierung von Stichproben aus ihr eine komplexe stochastische Verfahrensweise notwendig. Deshalb sollen hierfür ausgeklügelte Verfahren angewendet werden.

Dafür wird einer Folge von Zufallsvariablen $\{Z_t\}$, $t = 0, 1, \dots$ ohne Gedächtnis generiert. Das heißt, Z_t ist nur von Z_{t-1} abhängig:

$$P(Z_t = j | \{Z_{\bar{t}} = i_{\bar{t}}\}_{\bar{t}=0}^{t-1}) = P(Z_t = j | Z_{t-1} = i_{t-1}). \quad (1.44)$$

Ein stochastisches Verfahren mit dieser Eigenschaft wird Markov-Kette genannt. Wenn hier Prognosen über die zukünftige Entwicklung des Prozesses gemacht werden, sind sie allein von der Gegenwart abhängig, d.h. sie können nicht durch zusätzliche Kenntnisse der Vergangenheit des Prozesses verbessert werden.

Das Metropolis-Hastings-Verfahren ([37, 17]) ist auf der Basis einer speziellen Markov-Kette $\{\mathbf{w}^{(t)}\}_{t \geq 0}$ so konstruiert, dass ab einer großen Zahl L , für alle $t > L$ die Zustände $\{\mathbf{w}^{(t)}\}_{t \geq L}$ dieser Kette Stichproben aus der gewünschten Posterior-Verteilung $P(\mathbf{w} | D, \alpha)$ sind und von der Wahl des Ausgangszustandes $\mathbf{w}^{(0)}$ unabhängig sind. Dazu muss man in einen Bereich großer Wahrscheinlichkeit der Posterior-Verteilung kommen. Das ist in der Regel erst nach einer Einlauf- bzw. Einbrennphase der Fall, weswegen alle Beispiele für $t < L$ unberücksichtigt bleiben. Für $t \geq L$ darf dann für das Integral in Gl. (1.22) die Abschätzung

$$\hat{\mathbf{Y}} = \frac{1}{R} \sum_{t=L}^{L+R} \mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w}^{(t)}) \quad (1.45)$$

vorgenommen werden. Die Posterior-Verteilung ist dann die stationäre Verteilung der Markov-Kette, d.h. die Verteilung, die man für die Zustände der Markov-Kette erhält, wenn man sie nach einer langen Zeit betrachtet.

Nach dem hier verwendeten Sampling-Verfahren wird der Parameterraum ausgehend aus einem Anfangszustand $\mathbf{w}^{(0)}$ untersucht. Als ein Hilfsvektor wird ein Impulsvektor \mathbf{p} der gleichen Dimension K wie der Netzparametervektor \mathbf{w} eingeführt, welcher aus Standard-Normal-verteilten Komponenten besteht. Ein vorläufiger Kandidat $\tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)}$ wird aus einer Normalverteilung generiert, die im aktuellen Kandidat zentriert ist:

$$\Delta \mathbf{w} = \varepsilon \mathbf{p}; \quad \mathbf{p} \sim N(0, 1). \quad (1.46)$$

Ist der neue Kandidat wahrscheinlicher bezüglich der Posterior-Verteilung als der vorhergehende, wird er als das nächste Element der Markov-Kette akzeptiert, andernfalls soll er nur mit einer Wahrscheinlichkeit $\exp(-S(\tilde{\mathbf{w}}))$ angenommen werden. Je weniger wahrscheinlich er ist, je seltener wird er akzeptiert:

$$\tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)} = \mathbf{w}^{(t)} + \Delta \mathbf{w} \quad (1.47)$$

$$\mathbf{w}^{(t+1)} = \begin{cases} \tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)}, & U < \exp(-\Delta S) \\ \mathbf{w}^{(t)}, & \text{andernfalls} \end{cases}$$

dabei ist $\Delta S = S(\tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)}) - S(\mathbf{w}^{(t)})$ und $U \sim U_{[0,1)}$.

Diese Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode ist bereits schneller als die normale Monte-Carlo-Methode, ist aber noch zu langsam für reale Berechnungen zur Untersuchung der Posterior-Verteilung der synaptischen Gewichte in Neuronalen Netzen.

Hybrid-Monte-Carlo

Eine effektivere Methode als das klassische Monte-Carlo-Verfahren ist in [40] beschrieben. Sie dient zur Verringerung des Random Walks bei der Netzparameter-Stichprobenentnahme aus der Posterior-Verteilung. Die Besonderheit der Hybrid-Monte-Carlo-Methode ist, dass der Parameterraum nicht gleichwertig in jede beliebige Richtung untersucht wird. Für Verteilungen, die eine Exponentialform

$$P = \frac{\exp(-S(\mathbf{w}))}{Z_S} \tag{1.48}$$

besitzen, ist $\mathbf{grad}S(\mathbf{w})$ berechenbar. Somit kann die Richtung zum Minimum, welche durch $\mathbf{grad}S(\mathbf{w})$ bekannt ist, bevorzugt werden. In diese Richtung sind die Schritte größer als in allen andere.

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)} &= \mathbf{w}^{(t)} + \Delta \mathbf{w}, \\ \text{mit } \Delta \mathbf{w} &= -\frac{\varepsilon^2}{2} \mathbf{grad}S(\mathbf{w}) + \varepsilon \mathbf{p}. \end{aligned} \tag{1.49}$$

Auch hier wird als ein vorläufiges Hilfsvektor ein Impulsvektor \mathbf{p} der gleichen Dimension K wie der Netzparametervektor \mathbf{w} zusammen mit den zugehörigen ‘‘Massen’’ $\{m_k\}_{k=1}^K$ eingeführt. Ein Hybrid-Monte-Carlo-Update startet immer mit der Generierung von allen Impulswerten p_k aus den entsprechenden Gauß-Verteilungen $N(0, m_k^2)$, welche in 0 zentriert sind und m_k^2 als Varianz haben. Sie sind voneinander und von der momentanen Position im \mathbf{w} -Raum unabhängig. Die Zielfunktion $S(\mathbf{w})$ wird erweitert zu

$$H(\mathbf{w}, \mathbf{p}) = S(\mathbf{w}) + \sum_{k=1}^K \frac{p_k^2}{2m_k} = S(\mathbf{w}) + K(\mathbf{p}). \tag{1.50}$$

Die stationäre Verteilung für diese Kette zerfällt in zwei Verteilungen, die Verteilung von

\mathbf{w} und von \mathbf{p} :

$$\begin{aligned}
 P(\mathbf{w}, \mathbf{p}) &= \frac{\exp(-H(\mathbf{w}))}{Z_H} \\
 &= \frac{\exp(-S(\mathbf{w}))}{Z_S} \cdot \frac{\exp(-K(\mathbf{p}))}{(2\pi)^{K/2}} \\
 &= P(\mathbf{w}|\mathbf{D}, \alpha)P(\mathbf{p}).
 \end{aligned} \tag{1.51}$$

Somit, wenn eine Stichprobe $(\mathbf{w}^{(r)}, \mathbf{p}^{(r)})$ aus der Verteilung $P(\mathbf{w}, \mathbf{p})$ generiert ist, unterliegt $\mathbf{w}^{(r)}$ der Posterior-Verteilung $P(\mathbf{w}|\mathbf{D}, \alpha)$.

Die erweiterte Funktion $H(\mathbf{w}, \mathbf{p})$ ist eine Hamilton-Funktion, welche die Hamilton'schen Gleichungen erfüllt:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\mathbf{w}}{d\tau} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{p} \\
 \frac{d\mathbf{p}}{d\tau} &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{grad} S(\mathbf{w})
 \end{aligned} \tag{1.52}$$

Dementsprechend werden \mathbf{w} und \mathbf{p} bei jedem Schritt $(\mathbf{w}(\tau), \mathbf{p}(\tau)) \rightarrow (\mathbf{w}(\tau + \varepsilon), \mathbf{p}(\tau + \varepsilon))$ nach dieser Vorschrift geändert:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{p}(\tau + \frac{\varepsilon}{2}) &= \mathbf{p}(\tau) - \frac{\varepsilon}{2} \mathbf{grad} S(\mathbf{w}(\tau)) \\
 \mathbf{w}(\tau + \varepsilon) &= \mathbf{w}(\tau) + \varepsilon \mathbf{p}(\tau + \frac{\varepsilon}{2}) \\
 \mathbf{p}(\tau + \varepsilon) &= \mathbf{p}(\tau + \frac{\varepsilon}{2}) - \frac{\varepsilon}{2} \mathbf{grad} S(\mathbf{w}(\tau + \varepsilon))
 \end{aligned} \tag{1.53}$$

Um der Trajektorie aus (1.53) zu folgen, wird eine regelmäßige Berechnung von $\mathbf{grad} S(\mathbf{w})$ benötigt, die mittels der herkömmlichen Backpropagation durchgeführt werden kann [18, 25]. Wegen des speziellen Typs der verwendeten Netzstruktur (Gl. (1.42)) muss die Berechnung der Formeln für die Backpropagation allerdings entsprechend angepasst werden.

Komponentenweise können die Gl. (1.53) umgeschrieben werden, wenn $\hat{p}_k = p_k / \sqrt{m_k} \sim N(0; 1)$ eingeführt wird:

$$\begin{aligned}
 \hat{p}_k(\tau + \frac{\varepsilon}{2}) &= \hat{p}_k(\tau) - \frac{(\varepsilon/\sqrt{m_k})}{2} \frac{\partial S}{\partial w_k}(\mathbf{w}(\tau)) \\
 w_k(\tau + \varepsilon) &= w_k(\tau) + (\varepsilon/\sqrt{m_k}) \hat{p}_k(\tau + \frac{\varepsilon}{2}) \\
 \hat{p}_k(\tau + \varepsilon) &= \hat{p}_k(\tau + \frac{\varepsilon}{2}) - \frac{(\varepsilon/\sqrt{m_k})}{2} \frac{\partial S}{\partial w_k}(\mathbf{w}(\tau + \varepsilon))
 \end{aligned} \tag{1.54}$$

Somit entsprechen verschiedenen Netzparametern w_k unterschiedliche Schrittweiten $\varepsilon_k = \varepsilon/\sqrt{m_k}$. Die Schrittweiten werden während der Berechnung nach jeder Gibbs-Hyperparametererhebung speziell eingestellt (siehe auch [40]) und bleiben auf der Trajektorie aus den Gl. 1.54 unverändert::

$$\varepsilon_k \approx \eta \left[\frac{\partial^2 S}{\partial w_k^2} \right]^{-1/2}. \tag{1.55}$$

η ist dabei ein vom Benutzer zu wählender Anpassungskoeffizient. Er soll in Abhängigkeit von der Ablehnungsrate kleiner als 1 gesetzt werden, falls die Schrittweiten ε_k allgemein zu groß sind.

Dabei bleibt $H(\mathbf{w}, \mathbf{p})$ konstant, während die Zielfunktion $S(\mathbf{w})$ sich gleichzeitig verkleinert:

$$\Delta H = \frac{dH}{d\tau} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{w}} \frac{d\mathbf{w}}{d\tau} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \frac{d\mathbf{p}}{d\tau} = 0; \quad S(\mathbf{w}) \rightarrow \min. \tag{1.56}$$

Basierend auf der tatsächlichen Änderung der Hamilton-Funktion

$$\Delta H = H(\tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)}, \tilde{\mathbf{p}}^{(t+1)}) - H(\mathbf{w}^{(t)}, \mathbf{p}^{(t)}); \quad U \sim U_{[0,1)}, \tag{1.57}$$

welche in der numerischen Ungenauigkeit begründet ist, soll am Ende der Trajektorie entschieden werden, ob der neu generierte Kandidat $Z_{t+1} = (\tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)}, \tilde{\mathbf{p}}^{(t+1)})$ als das nächste Glied der Markov-Kette nach folgender Regel angenommen oder abgelehnt werden soll:

$$(\mathbf{w}^{(t+1)}, \mathbf{p}^{(t+1)}) = \begin{cases} (\tilde{\mathbf{w}}^{(t+1)}, \tilde{\mathbf{p}}^{(t+1)}), & U < \exp(-\Delta H) \\ (\mathbf{w}^{(t)}, \mathbf{p}^{(t)}), & \text{andernfalls} \end{cases} \tag{1.58}$$

Diese Akzeptanzregel kann auch anders geschrieben werden:

$$a(\Delta H) = \min(1, \exp(-\Delta H)). \tag{1.59}$$

Die Kandidaten bei denen die Werte der Hamilton-Funktion H niedriger geworden sind,

werden immer akzeptiert, die Kandidaten mit höheren Werten nur mit der Wahrscheinlichkeit $\exp(-\Delta H)$.

Modifikation von Hybrid-Monte-Carlo zur schnelleren Durchführung

Die vorher beschriebene gut bekannte Version von Hybrid-Monte-Carlo wurde von Neal [39] verbessert, um mehr akzeptierte Kandidaten zu generieren und somit schneller den Bereich von großen Wahrscheinlichkeiten zu erreichen. Dabei sollten solche Anforderungen an den Algorithmus, wie die "detailed balance"-Bedingung und die Ergodizität der gebildeten Markov-Kette erfüllt bleiben. Sie sichern ein korrektes Stichprobenentnehmen aus der Posterior-Verteilung in Gl. (1.21). Ergodisch ist ein dynamisches System dann, wenn die beschriebene Trajektorie jedem Punkt im Raum in endlicher Zeit beliebig nahe kommt. Die Erfüllung der "detailed balance"-Bedingung bedeutet Reversibilität, also dass die Wahrscheinlichkeit des Übergangs von einem Punkt Z_i zu einem anderen Punkt Z_j genauso groß ist wie die des Übergangs von Punkt Z_j zu Z_i .

In [39] wurde die verbesserte Methode vorgestellt und ihre Eigenschaften untersucht. In gleicher Form wurde sie in dieser Arbeit verwendet. Anstelle von einem einzigen Kandidaten, der in der Standardversion der Hybrid-Monte-Carlo-Prozedur auf Akzeptanz geprüft wird, wird hier eine Reihe von W Kandidaten generiert (mit $1 \leq W \leq L + 1$, wobei L die Anzahl von Iterationen aus Gl. (1.53) definiert). Es wird zuerst eine Richtung λ und eine natürliche Zahl K zufällig gewählt ($\lambda = +1$ oder $\lambda = -1$ und $K \in \{0, \dots, W - 1\}$, welche gleichwahrscheinlich bzw. gleichverteilt sein sollen). Dann wird ein Anteil rückwärts der Trajektorie entlang berechnet. Angefangen in Z_0 mit dem Schritt $\varepsilon = -\lambda \varepsilon_0$ werden insgesamt K Iterationen durchgeführt, welche als Z_{-1}, \dots, Z_{-K} bezeichnet werden. Der Anfangszustand Z_0 wird danach wieder verwendet und ein anderer Anteil der Kandidaten wird vorwärts mit dem Schritt $\varepsilon = +\lambda \varepsilon_0$ für $L - K$ Iterationen mit den Kandidaten Z_1, \dots, Z_{L-K} simuliert. Daraus werden zwei Reihen gebildet: die Ablehnungsreihe als Set $\mathcal{R} = \{Z_{-K}, \dots, Z_{-K+W-1}\}$ in der Nähe des Ausgangszustandes Z_0 und die Akzeptanzreihe $\mathcal{A} = \{Z_{L-K-W+1}, \dots, Z_{L-K}\}$. Es werden anschließend Energien für beide Reihen definiert:

$$F(\mathcal{W}) = -\log \left(\sum_{Z \in \mathcal{W}} \exp(-H(Z)) \right), \mathcal{W} \equiv \mathcal{R} \text{ oder } \mathcal{A}, \quad (1.60)$$

die die Entscheidung über Akzeptanz beeinflussen. Mit Hilfe der Akzeptanzfunktion $a(\Delta F)$ aus Gl. (1.59) mit $\Delta F = F(\mathcal{A}) - F(\mathcal{R})$ wird entschieden, welche von den Reihen \mathcal{R} oder \mathcal{A} als \mathcal{W} gewählt werden soll. Anschließend kann ein einzelner Kandidat aus dieser Reihe

\mathcal{W} entsprechend der Wahrscheinlichkeit

$$P(Z) = \exp(-H(Z) + F(\mathcal{W})) \quad (1.61)$$

als nächstes Glied der Markov-Kette ausgesucht werden.

Gibbs-Stichprobenentnahme für Hyperparameter

Die Netzparameter werden [40] zufolge in vier Gruppen aufgeteilt: $\{w_{k,1}^H\}_{k=1}^{K_1}$ - synaptische Gewichte von Input-Neuronen zu Hidden-Neuronen aus der versteckten Schicht, $\{b_{k,2}^H\}_{k=1}^{K_2}$ - Schwellwerte der Hidden-Neuronen, $\{w_{k,3}^O\}_{k=1}^{K_3}$ - synaptische Gewichte von Hidden-Neuronen zu Output-Neuronen und $\{b_{k,4}^O\}_{k=1}^{K_4}$ - Schwellwerte der Output-Neuronen.

Die Netzparameter aus der letzten Gruppe werden besonders behandelt und konsequent immer aus der Standard-Gauß-Verteilung $N(0; 1)$ generiert. Die Hyperparameter, welche alle anderen Gruppen von Netzparametern und das Rauschen der Output-Neuronen kontrollieren, werden während der Berechnung aktualisiert. Die Verteilung der Gewichte $w_{k,g}$ in jeder Gruppe g ist gegeben durch:

$$P(\{w_{k,g}\}_{k=1}^{K_g} | \alpha_g) = (2\pi)^{-K_g/2} \alpha_g^{K_g/2} \exp(-\alpha_g \sum_{k=1}^{K_g} w_{k,g}^2 / 2) \quad (1.62)$$

Die Prior-Verteilungen für die Hyperparameter α_g sind die zu den Gauß-Verteilungen der Netzparameter $w_{k,g}$ konjugierten Gamma-Verteilungen:

$$P(\alpha_g) = \frac{(\alpha_{g,S}/2\alpha_{g,M})^{\alpha_{g,S}/2}}{\Gamma(\alpha_{g,S}/2)} \alpha_g^{\alpha_{g,S}/2-1} \exp(-\alpha_g \alpha_{g,S}/2\alpha_{g,M}) \quad (1.63)$$

mit den Parametern $\alpha_{g,S}$ und $\alpha_{g,M}$ aus Tab. 1.1. Eine Verteilung $f(\mu)$ heißt konjugierte Verteilung für $f(u|\mu)$, wenn $f(\mu|u)$ und $f(\mu)$ dieselbe Form haben, d.h. wenn die Prior- und die Posterior-Verteilung zu derselben Familie von Verteilungen gehören. Die bedingte Verteilung ist:

$$\begin{aligned} P(\alpha_g | \{w_{k,g}\}_{k=1}^{K_g}) &\propto P(\{w_{k,g}\}_{k=1}^{K_g} | \alpha_g) P(\alpha_g) \\ &\propto \alpha_g^{(\alpha_{g,S}+K_g)/2-1} \exp(-\alpha_g (\frac{\alpha_{g,S}}{\alpha_{g,M}} + \sum_{k=1}^{K_g} w_{k,g}^2) / 2), \end{aligned}$$

	Formparameter: $\alpha_{g,S}$ bzw. β_S	Skalenparameter: $\alpha_{g,M}$ bzw. β_M
α_1 für $\{w_{k,1}^H\}_{k=1}^{K_1}$	0.2	1.
α_2 für $\{b_{k,2}^H\}_{k=1}^{K_2}$	0.2	1.
α_3 für $\{w_{k,3}^O\}_{k=1}^{K_3}$	0.2	J^*
β	0.2	100

Tab. 1.1: Parameter der Gamma-Verteilungen für verschiedene Hyperparameter.

*) Neuronenanzahl in der versteckten Schicht.

$$\alpha_g \sim G(\alpha_{g,S}, \alpha_{g,M}). \quad (1.64)$$

Die Durchführung der Gibbs-Updates der Hyperparameter wird somit durch Entnahme von Stichproben aus der Gamma-Verteilung in Gl. (1.64) gemacht. Die Behandlung des Hyperparameters β wird entsprechend der konjugierten Gamma-Verteilung

$$P(\beta | \{\mathbf{x}^n, \mathbf{t}^n\}_{n=1}^N, \mathbf{w}) \propto \beta^{(\beta_S+L)/2-1} \exp(-\beta (\frac{\beta_S}{\beta_M} + \sum_{n=1}^N \sum_{l=1}^L (t_l^{(n)} - y_l(\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{w}))^2)/2),$$

$$\beta \sim G(\beta_S, \beta_M) \quad (1.65)$$

durchgeführt.

Zusammenfassung für die Vorgehensweise

Die Markov-Kette-Monte-Carlo-Simulation zur Stichprobenentnahme aus der Posterior-Verteilung der Netzparameter, bzw. synaptischen Gewichte, wird in zwei Phasen durchgeführt. In der ersten Phase, die als Einbrennphase bezeichnet wird, wird der hochwahrscheinliche Bereich im \mathbf{w} -Raum schnell gefunden, ausgehend von dem in der zweiten Phase Stichproben entnommen werden. Die Markov-Kette wird in beiden Phasen mittels abwechselndem Gibbs-Sampling-Update der Hyperparameter mit Hybrid-Monte-Carlo-Update der Netzparameter gebildet. Für die Hybrid-Monte-Carlo-Updates muß die Anzahl der Schritte L und der Anpassungsfaktor für die Schrittweiten η festgelegt werden. In [40] wurde in vorgestellten Beispielrechnungen der Faktor $\eta = 0.3$ gewählt, weil dabei die Abweisungsrate etwa bei 10% bis 20% der Kandidaten der Markov-Kette lag. In anderen Anwendungen muss η nach Bedarf niedriger oder höher gesetzt werden. Ebenfalls wur-

den in [40] einige Vergleichsrechnungen mit verschiedenen Iterationsanzahlen $L = 2^{10-k}$ mit $0 \leq k \leq 10$ in der ersten Phase durchgeführt, aus denen sich $k = 4$ als Optimum herausgestellt hat. Diese Werte für η und k wurden als Orientierungswerte übernommen. Für die Generierung von Zufallszahlen wurde der Zufallszahlengenerator aus [40] verwendet. Der Standard-Zufallszahlengenerator vom verwendeten C++-Compiler kann keine so große Anzahl von unabhängigen Zufallszahlen liefern, die für die korrekte Ausführung des MCMC-Verfahrens ausreichend wäre. Für Stichprobenentnahmen aus Standard-Verteilungen wie z.B. Gamma- und Gauß-Verteilungen, wurden die in [45] dargestellten Algorithmen verwendet.

In der zweiten Phase soll die eigentliche Stichprobenentnahme stattfinden, dabei werden zusammen mit den Netzparametern $\mathbf{w}^{(r)}$ auch die Hyperparameter $\beta^{(r)}$ zur Verwendung in der Vorhersage gespeichert.

Wenn genügend Stichproben aus der Posterior-Verteilung vorhanden sind, wird der Schätzer für \mathbf{t} aus (1.25) durch

$$\hat{\mathbf{Y}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{R/5} \sum_{r=1}^{R/5} \mathbf{Y}^{(5r)} = \frac{1}{R/5} \sum_{r=1}^{R/5} \mathbf{y}(\mathbf{x}; \mathbf{w}^{(5r)}) \quad (1.66)$$

berechnet. Die ersten 100 von den gesamten $400 = (R + 100)$ gesammelten Stichproben der Posterior-Verteilung wurden ignoriert und den restlichen $R = 300$ Stück wurde jede fünfte für die Vorhersage verwendet. Als Streubalken wird ein Konfidenzintervall aus 10%- bzw. 90%-Quantilen $[\hat{\mathbf{Y}}_{10\%}, \hat{\mathbf{Y}}_{90\%}]$ aus der Reihe

$$\{\hat{\mathbf{Y}}_{5r,m}\}_{r=1,m=1}^{R/5,100} \quad \text{mit} \quad \hat{\mathbf{Y}}_{5r,m} = \mathbf{Y}^{(5r)} + \mathbf{v}_m^{(5r)}, \mathbf{v}_{m,l}^{(5r)} \sim N(0, 1/\beta^{(5r)}) \quad (1.67)$$

ermittelt.

1.5 Zusammenfassung

Konventionelle Neuronale Netze erlauben keine Aussagen über die Unsicherheit der Ergebnisse. Ein Probabilistisches Neuronales Netz ist technisch hochentwickelt und wesentlich fortgeschrittener als ein konventionelles. Lernen wird als statistisches Schließen durch Einsatz der Bayes'schen Vorgehensweise betrachtet. Beim Implementieren entstehen hochdimensionale Integrale, die durch Gauß-Approximation vereinfacht oder mit Markov-Kette-Monte-Carlo-Methoden numerisch gelöst werden können. Die Lösung enthält nicht nur vorhergesagte Werte für den untersuchten Zusammenhang, sondern auch Streubalken

für diese Werte, welche die Unsicherheit der eingesetzten Netze bezüglich der gesehenen Daten widerspiegeln. Die Gefahr des Übertrainierens wird bestmöglich ausgeschlossen. Dabei sind keine Verifikationsbeispiele für das Kontrollieren des Trainingsprozesses notwendig. Alle Daten können zum Trainieren eingesetzt werden.

Die Auswertung eines trainierten probabilistischen Neuronalen Netzes ist etwas aufwendiger als der herkömmliche Feed-Forward-Schritt durch das konventionelle Netz. Im Falle von MCMC z.B. sollen etwa 150 Feed-Forward-Durchgänge ausgerechnet und anschließend gemittelt werden. Die zeitliche Verlangsamung bleibt allerdings dem Anwender verborgen, weil es sich dabei pro Auswertung um Millisekunden handelt. Der wesentliche Aufwand liegt im probabilistischen Trainieren, welches aber nur einmalig für jedes Problem durchgeführt wird. Bei der MCMC-Methode sind oft mehrere Trainingsversuche notwendig, weil die Akzeptanzrate der Markov-Kette-Kandidaten mittels der Schrittweite ϵ richtig eingestellt werden muss, und jeder "Versuch" dabei erheblich rechenaufwendiger als konventionelles Trainieren ist.

Die Anwendung der Bayes-Methode für die Datenauswertung und die Implementierung Bayes'scher Neuronaler Netze wird in der vorliegenden Arbeit in folgenden Kapitel in zwei verschiedenen Aufgabengebieten gezeigt: bei der Zuverlässigkeitsbewertung keramischer Bauteile und zur Materialparameteridentifikation aus Kugeleindruckversuchen für metallische Werkstoffe.

Kapitel 2

Anwendung Bayes'scher Methoden für die Bewertung keramischer Bauteile

Ein charakteristisches Merkmal keramischer Werkstoffe ist die ausgeprägte Streuung ihrer Festigkeitseigenschaften. Der Ausfall keramischer Bauteile wird durch instabile Ausbreitung von natürlichen Rissen verursacht. Dabei sind Lage, Größe und Orientierung der durch Herstellung oder Nachbearbeitung im Material bereits vorhandenen natürlichen Risse zufällige Größen. Den Ausfall des Bauteils löst der gefährlichste Riss aus, für den die Kombination seiner Größe, Lage im beanspruchten Bauteil und Orientierung bezüglich der gegebenen Belastung die ungünstigste ist. Der Ausfall eines Bauteils kann entweder von einem kleinen Riss in einem hoch belasteten Bereich des Bauteils oder von einem weniger belasteten größeren Riss ausgelöst werden. So misst man bei Bauteilen identischer Geometrie unter gleicher Belastung unterschiedliche, stark streuende Werte für Bruchfestigkeiten. Die Theorie zur Beschreibung des Versagens spröder Werkstoffe geht auf Weibull [55] zurück, der als erster eine phänomenologische Beschreibung dafür vorgeschlagen hatte. Das Übertragen des Modells des schwächsten Kettengliedes ("weakest-link theory") auf Keramik [2] erlaubte es, aus der Kenntnis der Spannungen in der keramischen Komponente und bruchmechanischer Kennwerte des Werkstoffs die Wahrscheinlichkeit des Ausfalls des Bauteils abzuschätzen, um seine Betriebssicherheit somit zu beurteilen.

Die Bauteilauslegung für die Bewertung der Versagenswahrscheinlichkeit für ein keramisches Bauteil beinhaltet eine Finite-Elemente-Spannungsanalyse der untersuchten Komponente und anschließende numerische Integration des Spannungsfeldes, die mit Hilfe des im Institut für Materialforschung II entwickelten Berechnungsprogramm STAU durchgeführt wird.

Die grundlegenden theoretischen Hintergründe zu STAU sind in Abschn. 2.1.4 be-

schrieben, ausführlichere Informationen dazu befinden sich in entsprechenden Quellen [56, 23, 42]. Bei der Berechnung fließen Informationen über den Werkstoff in die numerische Integration in Form von Materialparametern ein.

Die Ergebnisse von STAU sind die Ausfallwahrscheinlichkeit P_f des keramischen Bauteils und das lokale Bruchrisiko, die räumliche Verteilung von P_f im Bauteil, die einem bestimmten Satz der Werkstoffparametern entsprechen. Zur Ermittlung dieser Materialparameter wurde eine umfassende experimentelle Datenbasis für Al_2O_3 - Keramik verwendet, die im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 483 "Hochbeanspruchte Gleit- und Frik-tionssysteme auf Basis ingenieurkeramischer Werkstoffe" der Universität Karlsruhe (TH) und des Forschungszentrums Karlsruhe zur Verfügung gestellt wurde. Diese besteht aus 4-Punkt-Biegeversuchen bei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten, dabei sind die Festigkeitsdaten für die Raumtemperatur und einige andere Temperaturniveaus verfügbar. Wegen der streuenden Materialkennwerte ist keine deterministische Analyse bei der Vorhersage des Versagens möglich. Eine Bewertung der Streuung der Materialparameter und dem daraus folgenden Vertrauensbereich für die Unsicherheit in der Vorhersage des Bauteilversagens erfolgt durch die Simulation mittels der Bootstrapmethode. Weil die Materialparameter aus stichprobenartigen experimentellen Daten bestimmt werden, ist auch die Unsicherheit in der resultierenden Ausfallwahrscheinlichkeit P_f stark von der Qualität und Quantität der zugrunde liegenden Datenbasis abhängig.

Nach einem theoretischen Überblick über das Versagen keramischer Werkstoffe werden in diesem Kapitel Ergebnisse für einige Aufgabenstellungen gezeigt, in denen die Anwendung von Bayes'schen Methoden Vorteile gebracht hat. Als erstes wurde untersucht, ob mit einem Bayes'schen Ansatz im Vergleich zur Bootstrapmethode eine bessere Aussage über die Unsicherheit von Materialparametern erreicht werden kann.

Außerdem wurde bei der Bewertung der Zuverlässigkeit keramischer Bauteile eine Reduzierung der Unsicherheit in der Vorhersage angestrebt. Im Folgenden werden zwei Vorgehensweisen vorgestellt, die dafür Bayes'sche Neuronale Netze verwenden. Bei dem ersten Ansatz werden verfügbare experimentelle Daten von unterschiedlich getesteten Proben mittels eines Bayes'schen Neuronalen Netzes zu einem Datensatz zusammengefasst, was zu einer Vergrößerung des Stichprobenumfangs führt und sich in einer schmaleren Verteilungsfunktion für die Versagenswahrscheinlichkeit auswirkt [43, 44].

Bei der zweiten Vorgehensweise wird die Möglichkeit für eine effizientere Ausnutzung von verfügbaren Probenressourcen untersucht. Für einige Fälle der Probenaufteilung werden zuerst entsprechende Konfidenzintervalle der Ausfallwahrscheinlichkeit errechnet. Danach wird die erhaltene Information als Trainingsbeispiele der Abhängigkeit der Unsicherheit in

P_f von der Art der Probenaufteilung einem Bayes'schen Neuronalen Netz vermittelt. Das Netz wird zur Rekonstruktion dieser Abhängigkeit eingesetzt. Verschiedene Einteilungen einer gegebenen Anzahl von Proben auf unterschiedliche Testbedingungen werden ausgewertet, um den Einfluss der Gewichtung bei der Probenaufteilung auf die resultierende Unsicherheit in der Ausfallvorhersage zu untersuchen. Wenn eine optimale Verteilung der Proben mit einer möglichst kleinen Unsicherheit in P_f gefunden wird, ist es sinnvoll diese bei Versuchsplanung zur Ersparnis von Proben- und Zeitkosten zu übernehmen.

2.1 Bruchmechanische Beschreibung des Versagens

2.1.1 Spontanes Versagen

Die herstellungsbedingt oder in Folge einer Bauteilnachbearbeitung in einer keramischen Komponente enthaltenen Poren, Risse und Einschlüsse, nachfolgend als "Fehler" bezeichnet sind für das Ausfallen der Komponente maßgebend verantwortlich. Für die Beschreibung des durch diese Fehler verursachten spontanen Versagens für ein keramisches Bauteil, wurden folgende Beobachtungen aus [38] festgestellt, die als grundlegende modellbeschreibende Annahmen gelten:

- Alle Fehler können als ebene bruchmechanische Risse angesehen werden.
- Die Größe und auch die Festigkeit eines Fehlers sind Zufallsgrößen.
- Die Lage der Fehler und ihre Orientierung im Bauteil oder auf der Oberfläche des Bauteils sind ebenfalls Zufallsgrößen und unterliegen einer Gleichverteilung.
- Einzelne Fehler beeinflussen sich gegenseitig nicht, deshalb werden auch ihre Festigkeiten und Längen als statistisch unabhängige Größen betrachtet.
- Gleichzeitig mit dem Versagen eines empfindlichsten Fehlers versagt das gesamte Bauteil.

Der Spannungsintensitätsfaktor der Belastungsart bei Zugbeanspruchung senkrecht zur Rissebene eines ebenen Risses K_I hängt von der Fehlergröße oder Risslänge a , der charakteristischen an dem Riss anliegenden Spannung σ und dem geometrischen Faktor Y ab:

$$K_I = \sigma Y \sqrt{a} \quad (2.1)$$

und stellt das Maß der Belastung dieses Fehlers im Bauteil dar. Bei mehrmodaler Belastung wird die Belastungsgröße K_{Ieq} über eine einachsige Vergleichsspannung σ_{eq} definiert:

$$K_{Ieq} = \sigma_{eq} Y \sqrt{a}$$

Dabei ist die Vergleichsspannung σ_{eq} eine zum Modus *I* gleichwertige Belastung eines mehrachsig belasteten Bauteils[6] und hängt von der Spannungskomponente σ_n , die senkrecht zur Rissebene ist und der Schubspannung in der Rissebene τ ab. σ_n und τ werden aus den Hauptspannungen σ_{11} , σ_{22} und σ_{33} am Ort des Risses bestimmt, wie in Abb. 2.1 dargestellt ist.

Die Normal- und die Schubspannung σ_n bzw. τ können in Abhängigkeit von den Hauptspannungen dargestellt werden [6, 22]:

$$\begin{aligned}\sigma_n &= \sigma_{11} \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi + \sigma_{22} \sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi + \sigma_{33} \cos^2 \vartheta \\ \tau &= (\sigma_{11} \cos^2 \varphi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi - \sigma_{33}) \sin \varphi \cos \vartheta\end{aligned}$$

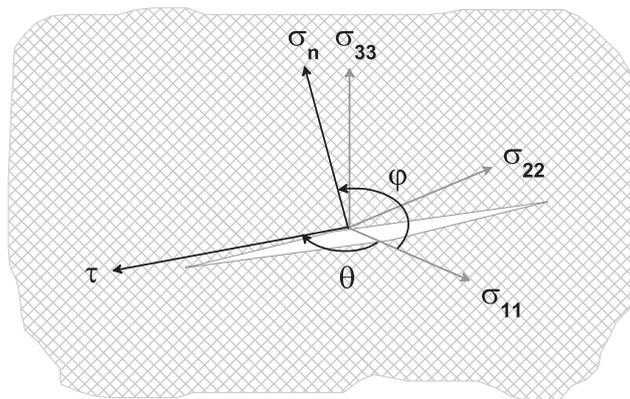


Abb. 2.1: Normal- und Schubspannung am ebenen Riss

Ein ausführlicher Überblick über verschiedene Vergleichsspannungskriterien ist in der Literatur zu finden [6, 48]. Bei den Berechnungen in dieser Arbeit war es sinnvoll sich auf ein bestimmtes Spannungskriterium festzulegen. Die Untersuchungen in [6] haben gezeigt, dass Keramik oft schubspannungsunempfindlich versagt und das Normalspannungskriterium eine sichere Auslegung von keramischen Komponenten mit natürlichen Rissen unter mehrmodaler Beanspruchung ermöglicht. So wird das Normalspannungskriterium, bei dem die Vergleichsspannung der Normalspannung entspricht, verwendet: $\sigma_{eq} = \sigma_n$.

Bei dem oben beschriebenen, etablierten Versagensmodell für keramische Bauteile ist der Fehler mit der ungünstigsten Kombination aus Orientierung, Festigkeit und angebrachter

Vergleichsspannung versagensentscheidend. Versagen tritt spontan ein, wenn für einen einzelnen Fehler unter mehrachsiger Last der Spannungsintensitätsfaktor K_{Ieq} einen kritischen Wert K_{Ic} , oft als Risswiderstand oder Risszähigkeit benannt, erreicht:

$$K_{Ieq} = \sigma_{eq} Y \sqrt{a} \geq K_{Ic} \Rightarrow a_c = \left(\frac{K_{Ic}}{\sigma_{eq} Y} \right)^2 \quad (2.2)$$

Gleichung (2.2) kann für die Bewertung des Versagens mit transienten Belastungen unmittelbar verallgemeinert werden. In diesem Fall ändert sich die Vergleichsspannung $\sigma_{eq}(t)$. Versagen tritt dann ein, wenn der Spannungsintensitätsfaktor $K_{Ieq}(t)$ zu einem Zeitpunkt ξ ($0 \leq \xi \leq t$) den kritischen Wert K_{Ic} überschreitet.

$$K_{Ieq}(t) = \sigma_{eq}(t) Y \sqrt{a(t)} \geq K_{Ic} \Rightarrow a_c(t) = \left(\frac{K_{Ic}}{\sigma_{eq}(t) Y} \right)^2 \quad (2.3)$$

Ein Bauteil bei einer transienten Beanspruchung wird zum Zeitpunkt t sofort spontan versagen, falls zu diesem Zeitpunkt an einem beliebigen Ort im Bauteil wenigstens ein Riss mit einer Länge größer als die kritische Risslänge $a_c = a_c(x, t)$ vorhanden ist. Dabei wird die momentane kritische Risslänge aus der momentanen Belastung $\sigma_{eq}(t)$ errechnet. Der Risswiderstand K_{Ic} ist eine Materialkonstante, deswegen kann eine der unbekanntenen Größen $\sigma_{eq}(t)$ und $a_c(t)$ aus Gl. (2.3) durch die andere ausgedrückt werden.

Bei einer konstanten Last folgt aus (2.2), dass entweder das Bauteil sofort bei Aufbringen der Last brechen soll, oder das Versagen gar nicht auftreten wird, falls keine gefährlichen Risse mit der Länge a_c im Material bereits vorhanden waren. Dies wird beim so genannten Überlastverfahren ausgenutzt, bei dem alle gefertigten Bauteile mit einer größeren als die maximal während des Betriebs erwarteten Spannung σ_p belastet werden. Dabei brechen alle Bauteile, in denen Risse mit einer Länge größer als a_c vorhanden sind. Wird unterkritisches Risswachstum während des Betriebs ausgeschlossen, so können die Bauteile, die diesen Proof-Test überstanden haben, sehr lange Lebensdauern aufweisen.

Anzahl, Länge, Lage und Orientierung der in einem Bauteil vorhandenen Fehler sind Zufallsgrößen. Lage und Orientierung der Risse werden aus Gründen der Homogenität und Isotropie des Werkstoffs als gleich verteilt angenommen.

Unter der Annahme, dass besonders große Fehler seltener auftreten, lässt sich der Verlauf der Verteilungsdichte für Risslängen bei größeren Werten von a näherungsweise durch ein Potenzgesetz mit $f_{a_i}(a) \sim \frac{1}{a^r}$ beschreiben, und entspricht dann folgender Verteilungsfunktion:

$$F_{a_i}(a) = 1 - \left(\frac{a_0}{a} \right)^{r-1} \quad (2.4)$$

wobei a_0 als untere Grenze versagensrelevanter Fehler aus Normierungsgründen eingeführt wurde.

Bezeichnet man die mittlere Anzahl der Fehler in einer Volumeneinheit V_0 des Werkstoffs als n_0 , so sind im Bauteil mit Volumen V im Mittel $Z = V \frac{n_0}{V_0}$ Fehler vorhanden. Über die tatsächliche Anzahl der Fehler M wurde die Annahme getroffen, dass sie einer Poissonverteilung unterliegt. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Bauteil gerade M Fehler hat ist:

$$P_M = \frac{e^{-Z} Z^M}{M!}$$

Die Herleitung der Verteilung der Festigkeit eines Bauteils unter einer homogenen statischen Last ist in [56, 38, 6] ausführlich beschrieben. Die Wahrscheinlichkeit des Ausfalls P_f kann mit $1 - P_s$ berechnet werden, wobei P_s die Bauteilüberlebenswahrscheinlichkeit ist. Weil uns die genaue Anzahl der Fehler im Bauteil nicht bekannt ist, sollen bei der Berechnung der Bauteilüberlebenswahrscheinlichkeit die Überlebenswahrscheinlichkeiten bei allen möglichen Hypothesen addiert werden, dass das Bauteil genau M Fehler enthält ($0 \leq M \leq \infty$) und dabei alle vorhandenen Fehler kürzer als der kritische Wert a_c sind:

$$P_f = 1 - P_s = 1 - \left[\sum_{M=0}^{\infty} P_M \left(1 - \int_{a_c}^{\infty} f_a(a) da \right)^M \right] = 1 - \exp \left(-Z \left(\frac{a_0}{a_c} \right)^{r-1} \right). \quad (2.5)$$

Daraus ergibt sich die Verteilung der Bauteilfestigkeit in Form einer 2-parametrischen Weibullverteilung.

$$P_f = F(\sigma_c) = 1 - \exp \left(-\frac{n_0}{V_0} V \left(\frac{\sqrt{a_0} \sigma_c Y}{K_{Ic}} \right)^{2(r-1)} \right) = 1 - \exp \left[-\left(\frac{\sigma_c}{b} \right)^m \right]. \quad (2.6)$$

Den Parameter m bezeichnet man als Weibullexponent bzw. Weibullmodul. Eine möglichst genaue Abschätzung dieser Parameter und ihrer Unsicherheit für einen bestimmten keramischen Werkstoff ist für die Beschreibung des spontanen Versagens eines aus diesem Werkstoff hergestellten Bauteils notwendig. Für die Bewertung des Bauteils bei einer verallgemeinerten inhomogenen und zeitabhängigen Beanspruchung, sollte noch der Einfluss der im Folgenden beschriebenen unterkritischen Rissausbreitung berücksichtigt werden.

2.1.2 Berücksichtigung des unterkritischen Risswachstums

Die natürlichen, herstellungs- oder nachbearbeitungsbedingten im Bauteil vorhandenen Fehler verlängern sich während die Komponente belastet wird. Das Bauteil verliert dabei an Festigkeit, weil sich der Spannungsintensitätsfaktor K_I entsprechend Gl. (2.3) vergrößert. Diese langsame Verlängerung des Risses von der Anfangsgröße a_i bis zu der von der Belastung abhängigen kritischen Risslänge a_c , bei der die instabile Rissausbreitung einsetzt, bezeichnet man als unterkritisches Risswachstum. Die Zuverlässigkeit eines keramischen Bauteils kann dadurch bei einer längeren Beanspruchung erheblich gemindert werden. Experimente haben gezeigt, dass die Risswachstumsgeschwindigkeit $\frac{da}{dt}$ eines Werkstoffs als Funktion des Spannungsintensitätsfaktors K_I ausgedrückt werden kann:

$$\frac{da}{dt} = f(K_I) \quad (2.7)$$

Der qualitative Verlauf der Gl. (2.7) wird in Abb. 2.2 dargestellt.

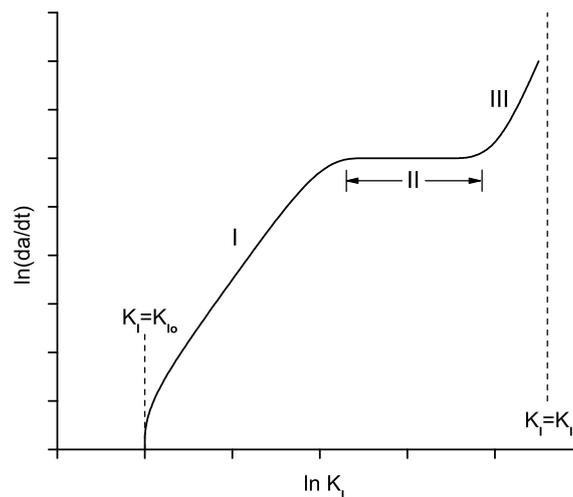


Abb. 2.2: Typische $\ln \frac{da}{dt}$ vs. $\ln K_I$ -Abhängigkeit.

Bei einigen Materialien findet bei kleinen K_I -Werten, wenn der Spannungsintensitätsfaktor unterhalb eines Schwellwertes K_{I0} liegt, kein unterkritisches Risswachstum statt. In einigen Fällen tritt der Bereich II auf, wenn die Risswachstumsgeschwindigkeit unabhängig von K_I ist. Dieses Plateau im Versagensverhalten im Bereich II wurde bisher nur für Glas experimentell nachgewiesen. Im Bereich III in Abb. 2.2 breitet sich der Riss instabil aus, was in der Tat zum sofortigen Versagen des Bauteils führt. Allgemein ist bei Keramiken der Bereich I eindeutig vorhanden und ist für die Beschreibung des Versagensverhaltens daher in erster Linie von Bedeutung.

Im Bereich I, wo die Abhängigkeit in Abb. 2.2 linear verläuft (gilt: $\ln \frac{da}{dt} = l + n \ln K_I = \ln(e^l \cdot K_I^n)$), kann Risswachstum durch ein Potenzgesetz beschrieben werden:

$$\frac{da}{dt} = A \cdot K_I^n = A^* \left(\frac{K_I}{K_{Ic}} \right)^n \quad (2.8)$$

wobei die letztere Normierung auf Materialparameter K_{Ic} einer besseren Dimensionierung dienen soll. Bei vorgegebener Belastung $\sigma_{eq}(t)$ lässt sich die Differentialgleichung (2.8) durch trennen der Veränderlichen integrieren [38, 56]:

$$\int_{a_i}^{a(t)} a^{-\frac{n}{2}} da = \int_0^t \frac{A^*}{K_{Ic}^n} \sigma_{eq}^n(\tilde{t}) Y^n d\tilde{t}$$

Für die meisten keramischen Werkstoffe ist $n > 10$ ($\Rightarrow n \neq 2$), darum gilt für die Beschreibung der Rissverlängerung infolge einer Belastung zum Zeitpunkt t :

$$a(t) = \left[a_i^{\frac{2-n}{2}} + \frac{(2-n)A^*Y^n}{2K_{Ic}^n} \int_0^t \sigma_{eq}^n(\tilde{t}) d\tilde{t} \right]^{\frac{2}{2-n}} \quad (2.9)$$

Die Anfangsrisstiefe a_i des Risses, der zum Versagen führt, lässt sich für einen Werkstoff aus der Inertfestigkeit σ_c und der Risszähigkeit K_{Ic} berechnen: $a_i = \left(\frac{K_{Ic}}{\sigma_c Y} \right)^2$. Die Inertfestigkeit kann aus Experimenten bei einer hohen Belastungsgeschwindigkeit ermittelt werden, am besten in einem inerten Medium zur sicheren Unterdrückung des unterkritischen Risswachstums.

Bis zum Zeitpunkt des Versagens $t = t_F$ verlängert sich der Riss mit der Anfangslänge a_i und erreicht die kritischen Risslänge $a_c = a(t_F) = \left(\frac{K_{Ic}}{\sigma_F Y} \right)^2$. Aus Gl. (2.3) ergibt sich somit:

$$\int_0^{t_F} \sigma_{eq}^n(\tilde{t}) d\tilde{t} = B \sigma_c^{n-2} \left[1 - \left(\frac{a_i}{a_c} \right)^{\frac{n-2}{2}} \right] = B \sigma_c^{n-2} \left[1 - \left(\frac{\sigma_F}{\sigma_c} \right)^{n-2} \right] \quad (2.10)$$

mit der Konstante B , welche einige bruchmechanische Größen beinhaltet:

$$B = \frac{2K_{Ic}^2}{A^*Y^2(n-2)}$$

Das Materialparameterpaar B und n bezeichnet man als Risswachstumsparameter oder Parameter des unterkritischen Risswachstums. Für statisch belastete keramische Kompo-

nennten bei $\sigma_{eq} = const$ vereinfacht sich die letzte Gleichung, unter der Annahme, dass $(\sigma_F/\sigma_c)^{n-2} \ll 1$ für $n > 10$, zu

$$t_F = B \frac{\sigma_c^{n-2}}{\sigma_{eq}^n}.$$

Somit kann in diesem Fall die Zeit bis zum Bruch direkt aus der Formel errechnet werden, falls die Inertfestigkeit und beide Risswachstumsparameter bekannt sind.

2.1.3 Bestimmung der Materialparameter aus experimentellen Daten

Für eine umfassende Charakterisierung des Versagensverhaltens eines keramischen Werkstoffs sind sowohl die Weibullparameter der spontanen Festigkeit als auch die Parameter der Rissausbreitung erforderlich. Die Bestimmung der Risswachstumsparameter kann durch Auswertung der Ergebnisse der dynamischen 4-Punkt-Biegeversuche bei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten erfolgen. Bei einer niedrigen Belastungsgeschwindigkeit ist der Einfluss des unterkritischen Risswachstums im Werkstoff ausgeprägter. In der Komponente vorhandene Risse haben ausreichend Zeit, um sich zu verlängern. Die Versagensspannung σ_F ist dabei geringer, als für ein Bauteil, das bei einer vergleichsweise größeren Belastungsgeschwindigkeit, dafür aber während einer kürzeren Zeit belastet wurde, weil sich im letzteren Risse noch nicht bedeutend verlängert haben. Für höhere Belastungsgeschwindigkeiten wird das Risswachstum unbedeutender, so dass für die Versagensspannung σ_F ein Sättigungswert σ_c existiert [38].

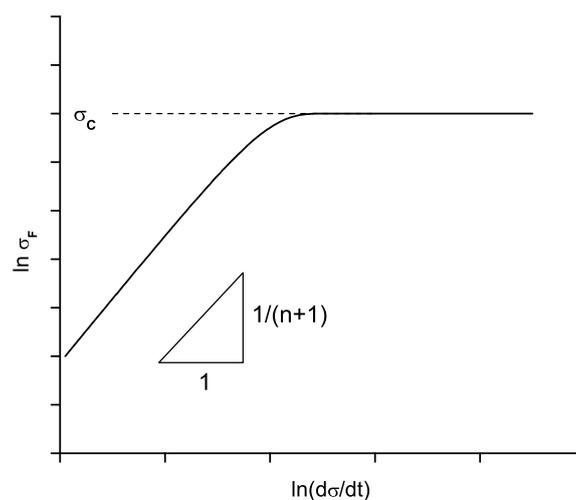


Abb. 2.3: Doppelt-logarithmische Auftragung der Abhängigkeit der Versagensspannung σ_F von der Belastungsgeschwindigkeit $d\sigma/dt$.

Durch die Mediane der Versuchsreihen die bei geringen Belastungsgeschwindigkeiten gemessen wurden, kann bei einer doppelt-logarithmischen Auftragung wie in Abb. 2.3 eine Ausgleichsgerade berechnet werden [38], die den Einfluss des unterkritischen Risswachstums auf die ertragbare Spannung in Abhängigkeit von der Belastungsgeschwindigkeit $d\sigma/dt$ beschreibt. Falls das Risswachstumsgesetz (2.8) für den untersuchten Werkstoff gilt, kann die folgende Gleichung für diese Gerade aufgestellt werden:

$$\ln \sigma_F = \frac{1}{n+1} \ln \dot{\sigma} + \frac{1}{n+1} \ln [(n+1)B\sigma_c^{n-2}] \quad (2.11)$$

Die Risswachstumsparameter n und B werden aus der Steigung und dem Achsenabschnitt dieser Ausgleichsgeraden bestimmt.

Die spontane Festigkeit eines keramischen Werkstoffs beschreiben die Weibullparameter der Inertfestigkeit. Die Weibullparameter der Inertfestigkeit m und b werden aus der Versuchsreihe bestimmt, die bei höherer Belastungsgeschwindigkeit im Sättigungsbereich (s. Abb. 2.3) gemessen wurde. Die Auswertung der Inertfestigkeitsdaten $\{\sigma_{c,i}\}_{i=1}^N$ von N 4-Punkt-Biegeversuchsproben erfolgt mittels der Maximum-Likelihood-Methode nach [13]. Die Ermittlung des Parameters m erfolgt durch numerisches Lösen der Gleichung:

$$\frac{N}{m} + \sum_{i=1}^N \ln \sigma_{c,i} - N \frac{\sum_{i=1}^N \sigma_{c,i}^m \ln \sigma_{c,i}}{\sum_{i=1}^N \sigma_{c,i}^m} = 0$$

Danach wird der geschätzte Wert m bei der Bestimmung von b verwendet:

$$b = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_{c,i}^m \right]^{1/m}$$

Da der Schätzungswert für den Parameter m nicht erwartungstreu ist, wird er nach [13] in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang N korrigiert.

Alternativ kann die Bestimmung der Risswachstumsparameter eines keramischen Werkstoffs aus statischen Biegeversuchen mit dem Lastniveau σ mit der gleichen Auswertemethode für die Weibullverteilung erfolgen, da die Lebensdauer genau wie die Inertfestigkeit, einer Weibullverteilung unterliegt [33, 38]:

$$F(t) = 1 - \exp \left[- \left(\frac{t}{t_0} \right)^{m^*} \right]$$

Die Weibullparameter der Lebensdauerverteilung m^* und t_0 werden aus Lebensdauermes-

sungen mit Hilfe der Maximum-Likelihood-Methode geschätzt. Anschließend wird eine Umrechnung dieser Parameter [38] in die Risswachstumsparameter n und B benötigt:

$$m^* = \frac{m}{n-2} \quad \text{und} \quad t_0 = \frac{Bb^{n-2}}{\sigma^n} \quad (2.12)$$

Bei Lebensdauerversuchen kann es manchmal passieren, dass einige Proben, als "Sofortbrüche" benannt, unmittelbar nach Aufbringen der Last ausfallen. Außerdem können einige Proben vorhanden sein, als "Durchläufer" bezeichnet, die besonders langlebig sind und die gesamte Versuchsdauer überstehen. Die Bestimmung der Risswachstumsparameter für Datensätze beim Vorhandensein solcher Ausreißer muss in diesem Fall nach einem modifizierten Auswerteverfahren erfolgen, wie es [38, 22] zu entnehmen ist. Allerdings wurden in dieser Arbeit keine Lebensdauerdaten ausgewertet, weil die statischen Versuche besonders zeitaufwändig sind und keine umfangreiche Datenbasis zur Verfügung steht. Alle Materialparameter wurden durch Auswertung dynamischer 4-Punkt-Biegeversuche bestimmt. Die entsprechenden Experimente wurden am Institut für Werkstoffkunde I der Universität Karlsruhe bei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten und einigen unterschiedlichen Temperaturniveaus von Nejma [41] durchgeführt. Pro Belastungsgeschwindigkeit und Temperaturniveau wurde eine Serie von 15 Versuchen getestet. Die Messwerte wurden im Rahmen des SFB 483 zur Charakterisierung der Al_2O_3 -Keramik F99,7 des Herstellers Friatec erhoben.

2.1.4 Ausfallwahrscheinlichkeit und ihre Unsicherheit

Ein Fehler versagt zum Zeitpunkt t , wenn seine Fehlergröße $a(t)$ die momentane kritische Fehlergröße $a_c(t) = \left(\frac{K_{Ic}}{\sigma_{eq}(t)Y}\right)^2$ erreicht hat. Aus Gl. (2.9) für Rissverlängerung kann ein Ausdruck für die kritische Anfangsrisslänge $a_{ci}(\xi)$ des Risses eingeführt werden ([56]):

$$a_{ci}(\xi) = \left[\left(\frac{\sigma_{eq}(\xi)}{K_{Ic}}\right)^{n-2} + \frac{(n-2)A^*Y^n}{2K_{Ic}^n} \int_0^t \sigma_{eq}^n(\tilde{t})d\tilde{t} \right]^{\frac{2}{2-n}} \quad (2.13)$$

Bezeichnet man als $P_{s1}(t)$ die Wahrscheinlichkeit, dass ein einzelner Fehler zu keiner Zeit $\xi \in [0, t]$ zum Versagen geführt hat, so bekommt man

$$\begin{aligned}
P_{s1}(t) &= P\{\forall \xi \in [0, t] : a(\xi) < a_c(\xi)\} = P\{\forall \xi \in [0, t] : a_i(\xi) < a_{ci}(\xi)\} \\
&= P\{a_i(\xi) < \min_{\xi \in [0, t]} a_{ci}(\xi)\} = F_{a_i}(\min_{\xi \in [0, t]} a_{ci}(\xi)) = 1 - \left(a_0 \max_{\xi \in [0, t]} a_{ci}^{-1}(\xi) \right)^{m/2},
\end{aligned}$$

wobei F_{a_i} die angenommene Fehlerverteilung im Werkstoff aus Gl. (2.4) ist.

Auf die gleiche Weise wie im einfacheren statischen Fall aus Abschn. 2.1 kann die Ausfallwahrscheinlichkeit $P_{f,V}(t)$ eines Bauteils mit Volumen V unter mehrachsiger zeitabhängiger Last mit Berücksichtigung des unterkritischen Risswachstums als $1 - P_s$ abgeleitet werden [38, 56]. Bei der Berechnung der Überlebenswahrscheinlichkeit muss auch in diesem Fall über alle Hypothesen addiert werden, dass das Bauteil genau M Fehler enthält, $0 \leq M \leq \infty$ und dabei keiner von ihnen seine kritische Größe zum Zeitpunkt t erreicht hat. Demnach soll die Ausfallwahrscheinlichkeit auf Grund des Versagens durch Volumenfehler im allgemeinen so berechnet werden:

$$\begin{aligned}
P_{f,V}(t) &= 1 - \exp \left[-\frac{1}{V_0} \int_V \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} S d\Omega dV \right] \quad (2.14) \\
\text{mit } S &= \left(\max_{\xi \in [0; t]} \left\{ \left[\left(\frac{\sigma_{eq}(\xi)}{\sigma_0} \right)^{n-2} + \frac{\sigma_0^2}{B} \int_0^{\xi} \left(\frac{\sigma_{eq}(\tilde{t})}{\sigma_0} \right)^n d\tilde{t} \right]^{\frac{1}{n-2}} \right\} \right)^m
\end{aligned}$$

Der Integrand S entstand in Gl. (2.14) aus $P_{s1}(t)$ und drückt die maximale an einem Ort im Zeitintervall $[0; t]$ erfahrene kritische Spannung aus. Der erste Summand des Integrandes S beschreibt den Anteil der spontanen Ausfallwahrscheinlichkeit unter zeitabhängiger Last. Der zweite Summand stellt den Einfluss des unterkritischen Risswachstums auf die Ausfallwahrscheinlichkeit dar und wird für den Fall, dass dieses unberücksichtigt bleibt, nicht in die Gleichung einbezogen. Die Integration in (2.14) über das Einheitsvolumen V_0 und die Rissorientierung auf der Oberfläche der Einheitskugel Ω wird mit der Hilfe des Postprozessors STAU durchgeführt. Die orts- und zeitabhängigen Belastungswerte, die für die Bestimmung der Vergleichsspannung σ_{eq} notwendig sind, werden aus der vorhergehenden Finite-Elemente-Analyse des untersuchten Bauteils zur Verfügung gestellt. σ_0 bezeichnet den volumenunabhängigen Weibullparameter, der sich aus dem experimentell ermittelten

Festigkeitswert b errechnen lässt:

$$\sigma_0 = b \left[\frac{1}{V_0} \int_V \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \left(\frac{\sigma_{\text{eq}}}{\sigma^*} \right)^m d\Omega dV \right]^{\frac{1}{m}} \quad (2.15)$$

dabei ist σ^* eine charakteristische Spannung, im Bauteil etwa die in analytischer Form vorliegende maximale Randfaserspannung der 4-Punkt-Biegeprobe. σ_0 ist ein Materialkennwert und hängt nicht von der Versuchsanordnung und der Probengeometrie ab, bei denen b bestimmt wurde [38, 56].

Deterministische Größen, wie etwa die Bauteilgeometrie einer auf Versagen untersuchten keramischen Komponente, sowie Randbedingungen und Belastungsbedingungen beeinflussen zwar den Wert von P_f aber haben keinen Einfluss auf die Unsicherheit der Ausfallwahrscheinlichkeit P_f . Der streuende Charakter mechanischer Eigenschaften bei keramischen Werkstoffen und die Art wie deren Kenngrößen auf der Basis von Stichproben von Messungen berechnet werden, haben zur Folge, dass bei der oben beschriebenen Auswertung experimenteller Daten mittels Gl. (2.12) und Gl. (2.11) nur statistische Schätzer für Materialparameter m , b , n und B vorliegen. Dabei werden bei deren Bestimmung keine Aussagen über die statistische Streuung, deren sie unterliegen, erteilt.

Im nachfolgenden Abschnitt 2.1.4 wird kurz vorgestellt wie die Unsicherheit der Schätzer für die Materialparameter $m = \hat{m}$, $\sigma_0 = \hat{\sigma}_0$, $n = \hat{n}$ und $B = \hat{B}$ mit der Bootstrap-Methode untersucht werden kann. Auf die gleiche Weise stellt die Gl. (2.14) nur einen statistischen Punktschätzer für die Ausfallwahrscheinlichkeit $P_f = \hat{P}_f$ dar, der wegen den streuenden zugrunde liegenden Materialdaten eine unsichere Zufallszahl ist. So unterliegt auch die Ausfallwahrscheinlichkeit P_f einer unbekanntem statistischen Verteilung, die zunächst einer Untersuchung bedarf.

Bewertung der Vorhersage-Unsicherheiten mit der Bootstrap-Methode

Die nichtparametrische Bootstrap-Resampling-Methode in der Form wie sie in Abb. 2.4 schematisch dargestellt ist, wurde in [22] vorgeschlagen, um die Streuung der Materialparameter und die daraus folgende Unsicherheit in der vorhergesagten Versagenswahrscheinlichkeit zu charakterisieren.

Die Simulationsmethode wurde nach [14] entwickelt, ihre Implementierung ist in [22] ausführlich vorgestellt. Ziel der Simulation ist es, Informationen über die Verteilung des Schätzers $\hat{\theta}$ zu erhalten, der im hier betrachteten Fall einen Materialparameter oder die Ausfallwahrscheinlichkeit P_f bezeichnet. Dieser Schätzer ist eine Zufallsvariable $\hat{\theta} = s(\mathbf{x})$

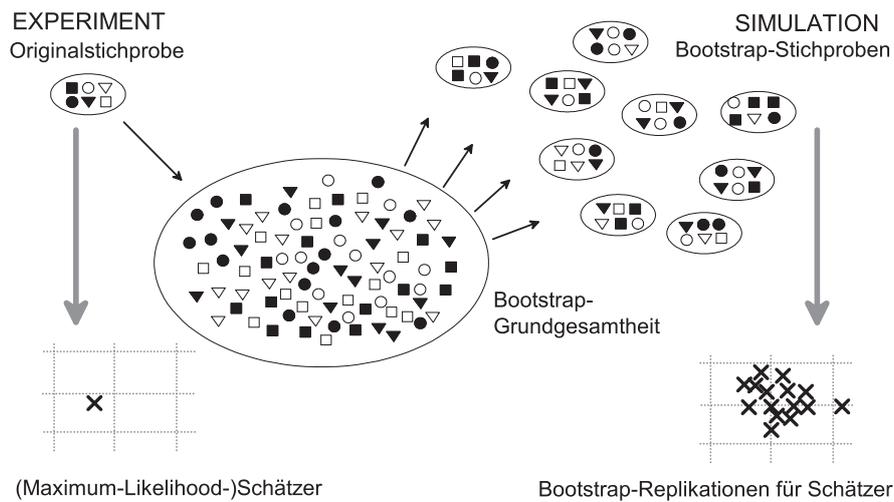


Abb. 2.4: Skizze der Vorgehensweise bei der Bootstrap-Resampling-Methode.

von der Originalstichprobe $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_I)$, die aus den im Experiment beobachteten Daten besteht. Es werden durch Simulation mit einem Zufallszahlengenerator neue so genannte "Bootstrap-Stichproben" $\mathbf{x}^* = (x_1^*, \dots, x_I^*)$ durch I -maliges Ziehen mit Zurücklegen aus der Originalstichprobe \mathbf{x} erzeugt. Diese neuen Stichproben werden auf die gleiche Weise wie die Originalstichprobe \mathbf{x} mit der Stichprobenfunktion s ausgewertet und ergeben Bootstrap-Replikationen für den Schätzer für die Realisierung der Bootstrap-Stichprobe \mathbf{x}^* : $\hat{\theta}^* = s(\mathbf{x}^*)$. Die resultierende empirische Verteilung der Originalstichprobe $\hat{\mathcal{F}}_{\mathbf{x}}$ dient als nichtparametrischer Schätzer für die unbekannte tatsächliche Verteilung $\mathcal{F}_{\mathbf{x}}$. Die Verteilung des Schätzers $\hat{\theta}$ bzw. die Konfidenzintervalle für diesen werden aus der empirischen Verteilungsfunktion der Bootstrapschätzer $\hat{\theta}^{*b}$ bestimmt. Die empirischen Konfidenzintervalle entsprechen den α - und $(1 - \alpha)$ -Quantilen der Verteilungsfunktion $K_{bootstrap}$ und können um die Größe einer Biaskorrektur $z_0 = \Psi^{-1}(K_{bootstrap}(\hat{\theta}))$ durch die inverse Transformation mit Hilfe der Verteilungsfunktion der Standardnormalverteilung Ψ verschoben werden, woraus endgültige korrigierte Konfidenzintervalle entstehen. Ist ein bedeutend größerer Anteil der Bootstrap-Replikationen größer als der Schätzer aus der Originalstichprobe $\hat{\theta}$, wirkt sich das in einem Wert $z_0 < 0$ aus. Dann werden die Simulationsergebnisse $\hat{\theta}^{*b}$ als tendenziell zu groß interpretiert und das Konfidenzintervall wird zu kleineren Werten verschoben. Die in dieser Arbeit verwendete Generierung von Resampling-Stichproben wurde auf eine etwas andere Weise, mittels parametrischem Bootstrap aus entsprechenden Weibullverteilungen mit bekannten, von experimentellen Daten geschätzten, Weibullparametern simuliert, wie es im Folgenden dokumentiert wird. Seitdem die Möglichkeit zur Charakterisierung der Konfidenzintervalle für P_f besteht, wird auch ihre Verkleinerung erstrebenswert. Dabei existiert kein anderer Weg die Verteilungsfunktion der Ausfallwahr-

scheinlichkeit zu beeinflussen als durch gezielte Veränderung der Datenbasis, deren Auswertung zur Veränderung der Verteilungen der Materialparameter führt, welche sich dann in der Unsicherheit von P_f auswirken.

Untersuchungen zur Reduzierung der Unsicherheit der Ausfallwahrscheinlichkeit keramischer Bauteile sind ein Thema der vorliegenden Arbeit gewesen, weil sie uns eine vertrauenswürdigere Überlebensprognose versprechen. In folgendem Teil dieses Kapitels wird auf die Methoden und Ergebnisse dieser Untersuchungen genauer eingegangen. Zuvor wird das Bayes'sche Schließen für Weibullparameter beschrieben, wie es prinzipiell gegenüber einer klassischen Datenauswertung funktioniert und welchen Informationsgewinn es beim Anwenden mit sich bringt.

2.2 Bayes'sches Schließen für Weibullparameter

Die bisher verwendeten Konfidenzintervalle, wie sie für Weibullparameter existieren [13] oder die in Abschn. 2.1.4 beschriebenen Bootstrap-Konfidenzintervalle basieren auf der Verteilung einer geeignet gewählten Stichprobenfunktion und beschreiben damit die Streuung in zukünftigen hypothetischen Experimenten auf Grundlage von Parametern die aus der vorliegenden Stichprobe bestimmt werden. Bayes-Intervalle können aus der Posterior-Verteilung für die unbekannt Parameter bestimmt werden und beschreiben damit die Unsicherheit der Parameter auf Basis der vorliegenden Stichprobe und möglicher Vorkenntnisse aus vorangegangenen Experimenten oder allgemeiner Art, wie etwa die Positivität von Parametern.

Bayes'sches Schließen für einen unbekannt Parameter μ beruht auf dem Satz von Bayes und ist z.B. in [46] ausführlich beschrieben. Für eine vorliegenden Stichprobe D aus einer Verteilung mit unbekanntem Parameter μ und der Vorkenntnis I in welcher die experimentellen Randbedingungen zusammengefasst werden ist die Posterior-Verteilung $P(\mu | D, I)$ gegeben als

$$P(\mu | D, I) = \frac{P(\mu | I) \times P(D | \mu, I)}{P(D | I)} \quad (2.16)$$

$P(D | \mu, I)$ bedeutet in diesem Zusammenhang die bekannte Likelihood-Funktion, die als Wahrscheinlichkeit des erhaltenen Datensatzes D bei vorgegebenem Wert des Parameters μ interpretiert werden kann. $P(\mu | I)$ ist die Prior-Verteilung für den Parameter μ , die ein allgemeines Vorwissen über die möglichen Werte des Parameters μ aufgrund der Vorkenntnis I beschreibt, also wenn die experimentellen Daten aus D noch nicht berücksichtigt wur-

den. Die im Nenner stehende Größe $P(D|I)$ ist für den konkreten Datensatz D konstant und dient der Normierung der Posterior-Verteilung, so dass das Integrieren der Posterior-Verteilung über alle möglichen Werte für μ eine 1 garantiert.

Für den Spezialfall der Festigkeitsdaten, die bekannterweise einer Weibullverteilung unterliegen, ist die Likelihood-Funktion für unabhängige Stichprobenwerte $D = \{(x_1, \dots, x_N)\}$ gerade das Produkt der Weibull-Verteilungsdichten für jede Messung x_i :

$$P(D|(m, b), I) = \prod_{i=1}^N f_x(x_i|(m, b), I) = \prod_{i=1}^N \frac{m}{b} \left(\frac{x_i}{b}\right)^{m-1} \exp\left(-\left(\frac{x_i}{b}\right)^m\right) \quad (2.17)$$

und $\mu = (m, b)$ ist ein Vektor mit den beiden Weibull-Parametern. Für die Posterior-Verteilung ergibt sich bis auf die weggelassene Normierungskonstante $P(D|I)$ folgender Ausdruck:

$$P((m, b)|D, I) \propto P((m, b)|I) \times \prod_{i=1}^N f_x(x_i|(m, b), I) \quad (2.18)$$

Nimmt man die Prior-Verteilung als konstant an, was der Tatsache entsprechen würde, dass man alle möglichen Werte für das Parameterpaar (m, b) in einem relevanten quadratischen Bereich ihrer gemeinsamen Ebene als gleichwahrscheinlich betrachtet, so stimmt die Posterior-Verteilung bis auf die Normierungskonstante mit der Likelihood-Funktion überein. Bayes-Intervalle erhält man in diesem Fall als zweidimensionale Konturen konstanter Dichte aus der Posterior-Verteilung, die solche Bereiche auf der Weibullparameterenebene einschränken, für die die Likelihoodfunktion größer als ein prozentualer Anteil des Wertes im Maximum $\mu_{MaxLi} = (m_{MaxLi}, b_{MaxLi})$ ist. Wählt man das Maximum der Posterior-Verteilung als Schätzer für die unbekannt Parameter, so erhält man die Aussage der standardmäßig bei der Ermittlung der Weibull-Parameter verwendeten Maximum-Likelihood Methode.

Die Maximum-Likelihood Methode funktioniert gut wenn es eine einzige stark lokalisierte Maximumstelle der Likelihood-Funktion existiert. Wenn die Likelihood-Funktion mehrere nicht stark lokalisierte Maxima besitzt, wie in Abb. 2.5(b) skizziert wurde, ist die Aussage der Maximum-Likelihood Methode für den gegebenen Datensatz D nicht charakterisierend genug. Ein anderes Problem tritt in hochdimensionalen Räumen auf; dort ist das Maximum der Verteilungsdichte nicht unbedingt repräsentativ für den Bereich, der eine hohe Wahrscheinlichkeit des Auftretens besitzt.

Das Bayes-Verfahren nimmt eine Gewichtung über den ganzen Bereich der Likelihood-Funktion vor und berücksichtigt alle Werte mit der Wahrscheinlichkeit, mit der sie vor-

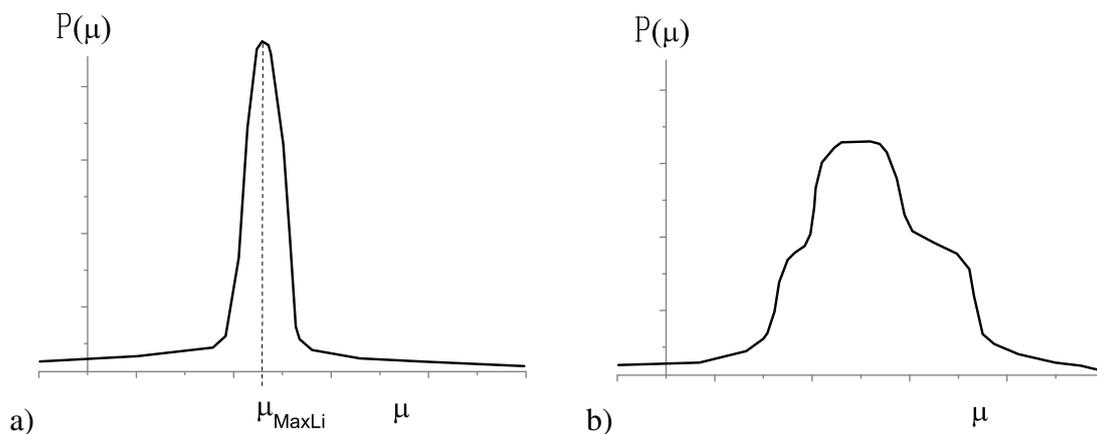


Abb. 2.5: Die Maximum-Likelihood-Methode a) für stark lokalisierte Likelihood-Funktionen und b) für diffuse Likelihood-Funktionen.

kommen. Zur Bestimmung der Weibullparameter der Festigkeit ist oft die Genauigkeit der Maximum-Likelihood-Methode ausreichend, weil Festigkeitsdaten oft einer typischen Weibullverteilung mit einer einzigen Maximumstelle unterliegen, die allerdings in ihrer Form unterschiedlich ausgedehnt sein kann. Das Vorhandensein mehrerer Fehlerpopulationen im Werkstoff kann sich ebenfalls in der Form der Likelihoodfunktion und entsprechend der Posterior-Verteilung widerspiegeln. Im Beispiel aus Abb. 2.6 sind Bayes-Konturen der Posterior-Verteilung (10% bis 90% des Maximums) der Weibullparameter für temperaturabhängige Inertfestigkeitsdaten gegenüber der Maximum-Likelihood-Auswertung mit den herkömmlichen nach [13] gerechneten, 90%-Konfidenzintervallen als Pfeile eingezeichnet. Die neue Auswertung enthält zwar nur qualitative Aussagen im Sinne wie die Posterior-Verteilung für die untersuchten Parameter aussieht, hat sich aber bereits in der Praxis viel versprechend gezeigt und wird als Ersatz zur Maximum-Likelihood-Auswertung weiterentwickelt.

Der Vorteil Bayes'scher Methoden gegenüber den Methoden der klassischen Statistik ist deren Berücksichtigung der Unsicherheit in den Parametern eines statistischen Modells für eine konkret vorhandene Stichprobe. Klassisch erfolgt dagegen die Betrachtung der Unsicherheit (künftiger, bei hypothetisch wiederholten Experimenten) von Stichprobenfunktionen bei vorgegebenen Parametern des statistischen Modells, die aus der jeweils gemessenen Stichprobe gewonnen werden.

Die Verteilung der Gewichte in Bayes'schen Neuronalen Netzen enthält oft mehrere Maxima, so sind für deren Charakterisierung Integrationsverfahren in hochdimensionalen Parameterräumen erforderlich. Die im vorherigen Kap. 1 beschriebenen Gauß-Approximation und Markov-Kette-Monte-Carlo-Methoden wurden in dieser Absicht, zur Charakterisie-

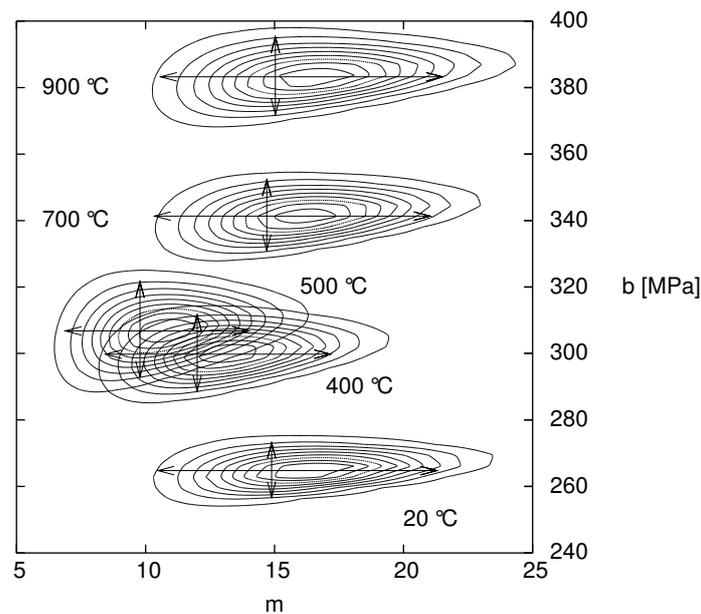


Abb. 2.6: Gegenüberstellung der Auswertemethoden: Maximum-Likelihood-Konfidenzintervalle (als Pfeile gezeichnet) vs. Bayes-Konturen ausgewertet an Festigkeitsdaten für Al_2O_3 -Keramik aus [41].

rung der Posterior-Verteilungen, implementiert. Somit kann Bayes'sches Schließen mittels Neuronaler Netze für die Regression unbekannter Zusammenhänge auf der Basis einiger bekannter Datenpunkte, wie z.B. in folgenden Ansätzen zur Reduzierung der Vorhersageunsicherheit, angewendet werden.

2.3 Methoden zur Reduzierung der Unsicherheit in der Vorhersage

Die Materialparameter m , σ_0 , n und B werden aus statischen und dynamischen 4-Punkt-Biegeversuchen bestimmt. Statische Versuche sind einfach durchzuführen, sind aber sehr zeitaufwändig. Dynamische Versuche sind schneller, brauchen aber besondere kostspielige Ausrüstung und eine aufwendige Betreuung. Für einige Werkstoffe ist die Anzahl der Proben ebenfalls eine Kostenfrage. Somit sind genügend wichtige Gründe vorhanden, warum eine Reduzierung der Vorhersageunsicherheit anzustreben gewünscht ist.

Ein im folgenden Abschn. 2.3.1 vorgestellter Ansatz zur Reduzierung der Unsicherheit in der Vorhersage ist das Pooling von Daten. Für die Vorhersage der Konfidenzintervalle der Ausfallwahrscheinlichkeit wurden auch in dieser Arbeit die in [22] entwickelten Bootstrap-Resampling Methoden benutzt. Die Berechnung benötigt Simulation neuer Datensätze auf

der Grundlage der gemessenen Festigkeitswerte aus der vorhandenen Datenbasis. Für die Beschreibung des temperaturabhängigen Verhaltens der Festigkeit wurde Regression mittels probabilistischer Neuronaler Netze mit der Gauß-Approximation-Methode angewendet. Diese Regression erlaubt ein "Pooling" der Daten und deren Skalierung auf ein interessierendes Temperaturniveau. Dabei entsteht eine große Sammlung von Festigkeitsdaten für diese Temperatur aus verschiedenen Probenserien für andere Temperaturen, was zu einer kleineren Unsicherheit der Vorhersage führt. Für einige Regressionsaufgaben, wie die z.B. für das Pooling eingesetzte "ein Input- zu einem Output-Neuron"-Regression, kann es sehr vorteilhaft sein, dieses schnelle Regressionsinstrument anzuwenden, das an verfügbaren Datenpunkten statistisch gesehen den wahrscheinlichsten Zusammenhang rekonstruiert und zusätzlich noch in der Lage ist, die Unsicherheit der Ergebnisse abzuschätzen.

Die für die Berechnung der Materialparameter benötigten Daten werden aus Experimenten bei verschiedenen Temperatur- oder Belastungsniveaus entnommen. Ein Algorithmus zu entwickeln, das uns erlauben würde, effiziente Einteilung von Proben bezüglich verschiedenen Arten von Experimenten in der Hinsicht auf die Minimierung von der resultierenden Streuung in der Vorhersage der Ausfallwahrscheinlichkeit zu finden, wäre besonders nützlich. Eine andere Lösung der Aufgabe der Minimierung der Streuung in der Vorhersage wurde durch kombinierte Verwendung von der parametrischen Bootstrap-Methode und Neuronaler Netze gefunden und ist in Abschn. 2.3.2 ausführlich beschrieben. Ein mit Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode behandeltes Neuronales Netz wurde für die Aufgabe der Belegung einer begrenzten Anzahl von Proben auf eine Gruppe von Belastungsbedingungen von Experimenten benutzt mit der Absicht, eine minimale Unsicherheit in der resultierenden Bewertung der Ausfallwahrscheinlichkeit zu erzielen. Für das Generieren künstlicher Proben aus den Originaldaten für die Untersuchung des Einflusses verschiedener Datenbasen, wurde eine parametrische Bootstrap-Simulation angewendet. Für einige Probenaufteilungen durch Gewichtung unterschiedlicher Probenserien, wurden Datenpunkte des zu rekonstruierenden Zusammenhanges errechnet und darauf ein Neuronales Netz trainiert. Mit der Hilfe des Regressionsnetzes kann die Abhängigkeit zwischen Anteilen der Festigkeitsdaten und der entsprechenden Unsicherheit in der Versagensvorhersage rekonstruiert werden. Anschließend ist das Neuronale Netz in der Lage die Relevanz von bestimmten Serien in der Unsicherheit der Vorhersage endgültiger Ausfallwahrscheinlichkeit zu detektieren. Somit können Ansätze für Strategien einer effizienten Einteilung verfügbarer Proben auf bestimmte Experimentbedingungen vorgeschlagen werden.

2.3.1 Pooling von Daten

Als "Pooling" wird in dieser Arbeit die Zusammenfassung von Daten aus Experimenten bei verschiedenen Temperaturen zu einem Datensatz mittels passender Transformation bezeichnet (siehe auch [43]). Im speziellen hier vorgestellten Fall wurden Festigkeitsdaten für Al_2O_3 -Keramik aus [41] verwendet. Alle ermittelten Daten, bei denen pro Temperatur und Belastungsgeschwindigkeit je 15 Proben getestet wurden sind in Abb. 2.8(a) bis (d) dargestellt. Allerdings musste eine Überarbeitung der vorhandenen Daten vorgenommen werden, weil beim Erstellen der Datenbasis keine Festigkeitsprüfung für die größte Belastungsgeschwindigkeit von 958 MPa/s für höhere Temperaturen 500°C, 700°C und 900°C stattgefunden hat, nur für die Raumtemperatur und 400°C. Da bei höheren Temperaturen der Sättigungswert oder die Inertfestigkeit σ_c schneller als bei niedrigen Temperatur eintritt, wurden die experimentellen Daten aus den Experimenten mit der vorhergehenden Belastungsgeschwindigkeit von 91 MPa/s als Inertfestigkeitsdaten betrachtet und in der Datenbasis sowohl zur Bestimmung des unterkritischen Risswachstums als auch zur Berechnung der Inertfestigkeit verwendet. Mittels eines Neuronalen Netzes ist es möglich, aus den Daten die Abhängigkeit der Festigkeit von der Temperatur zu rekonstruieren. Für diese Regression wurde die in Abschn. 1.4.1 aus [34] vorgestellte Gauß-Approximation-Methode verwendet. Die für diese Anwendung benutzten Neuronalen Netze sind sehr schnell beim Trainieren und Auswerten und können für die Skalierung des ganzen Datensatzes auf eine bestimmte Temperatur T_{ref} (20°C, 400°C, 500°C oder 700°C) eingesetzt werden. Die Regressionskurven sind in den Diagrammen in Abb. 2.8(a) bis (d) als durchgezogene Linien mit gestrichelten Fehlerbalken eingezeichnet.

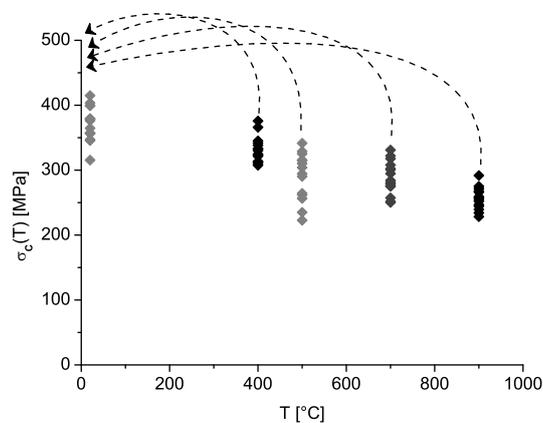


Abb. 2.7: Skizze des Poolings am Beispiel einer Skalierung auf die Raumtemperatur.

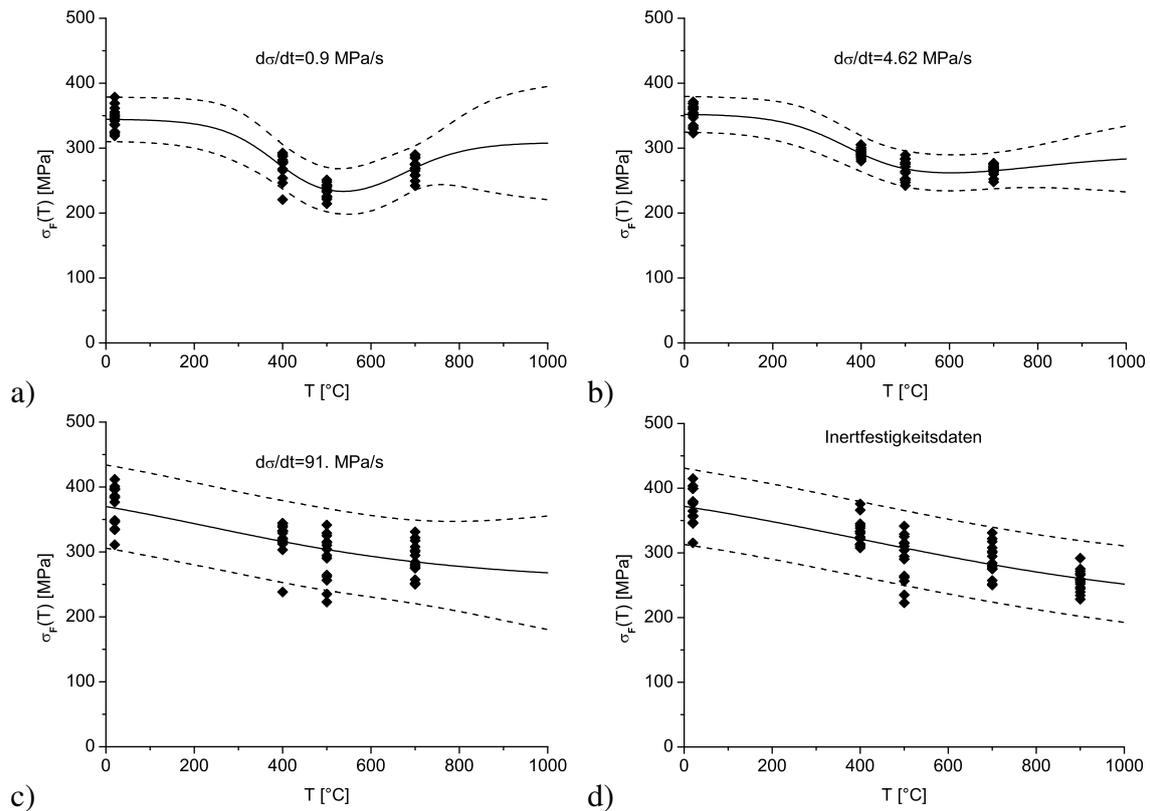


Abb. 2.8: Experimentelle Daten aus 4-Punkt-Biegeversuchen für Al_2O_3 -Keramik aus [41] zusammen mit Regression ihrer Temperaturabhängigkeit.

Nach einer sorgfältigen Skalierung existieren zwei Datensätze als Festigkeitsdaten für diese Temperatur T_{ref} mit verschiedenem Umfang: der ursprüngliche mit 15 Werten und der gepoolte mit 75. Alle gepoolte Daten sind für den Fall der Skalierung auf die Raumtemperatur ($T_{ref} = 20^\circ\text{C}$) in Abb. 2.9 dargestellt. Für die Berechnung der Streuung der Ausfallwahrscheinlichkeit P_f wurde die nichtparametrische Bootstrap-Methode wie sie in [22] zur Generierung von großen Anzahlen von Bootstrap-Stichproben aus gegebenen Datensätzen bestimmten Umfangs entwickelt wurde, verwendet (siehe Abschn. 2.1.4). Aus den Stichproben wurden Materialparameter bestimmt. Untersucht wurde ein 4-Punkt-Biegebalken, die FE-Vernetzung ist in Abb. 2.10 dargestellt. Durch Berechnung der Ausfallwahrscheinlichkeit des keramischen Bauteils mit der Software STAU ([23]) für jeden Satz der Materialparameter erhält man jedes Mal einen Wert für die Ausfallwahrscheinlichkeit des Bauteils. Aus der Gesamtheit aller Auswertungen resultiert die empirische Verteilungsfunktion der Ausfallwahrscheinlichkeit. Alle Pooling-Ergebnisse in Form von Verteilungsfunktionen der Ausfallwahrscheinlichkeit sind in Abb. 2.11 und 2.12 dargestellt, ausserdem sind die Ergebnisse in Abb. 2.13 zusammengefasst. Dabei entspricht die in Schwarz gezeichnete Verteilungsfunktion den Originaldaten und die in Grau den gepoolten Daten. Zusätzlich

wurden die Medianwerte für die Ausfallwahrscheinlichkeit für beide Verteilungen mit aufgetragen. Die 90%-Konfidenzintervalle für die Ausfallwahrscheinlichkeit können aus den 5%- und 95%-Quantilen der Verteilungsfunktion bestimmt werden. Wie von der Methode erwartet wurde, sind die Konfidenzintervalle für die gepoolten Daten mit einem größeren Stichprobenumfang schmäler als die, die direkt von ursprünglichen Daten errechnet wurden.

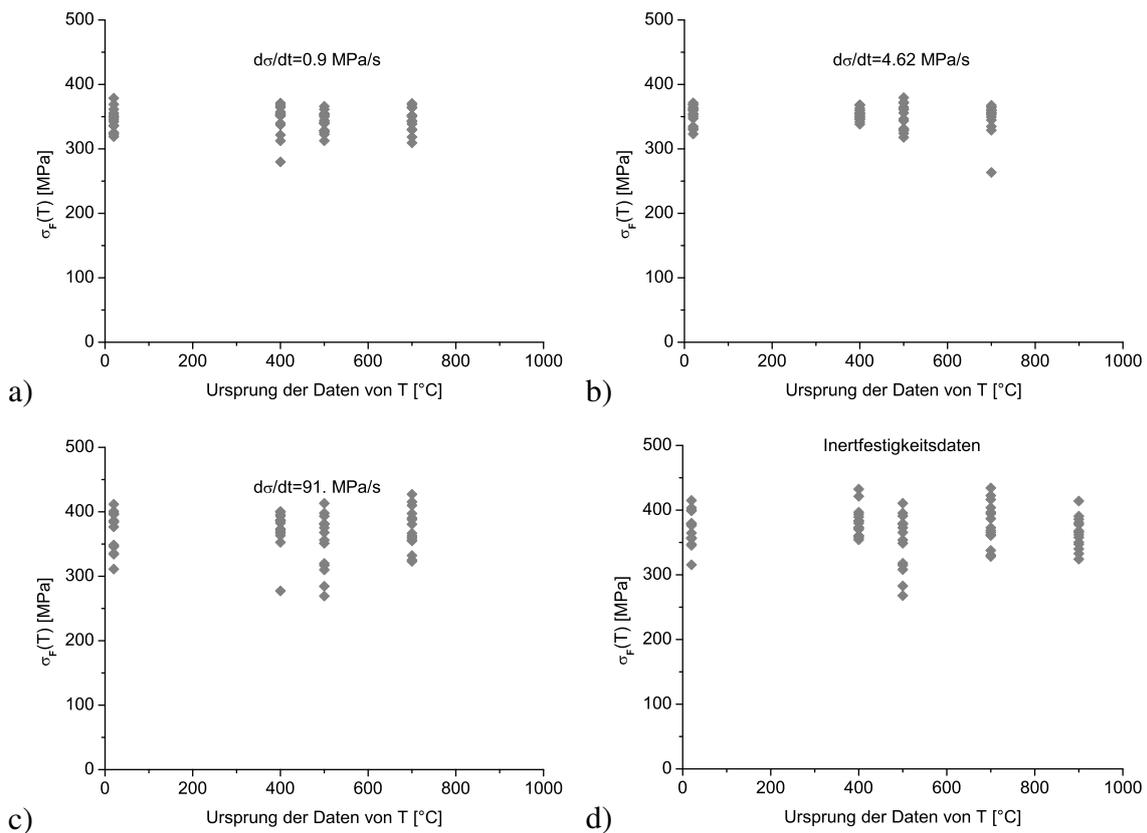


Abb. 2.9: "Gepoolte" Datensätze skaliert auf die Raumtemperatur.

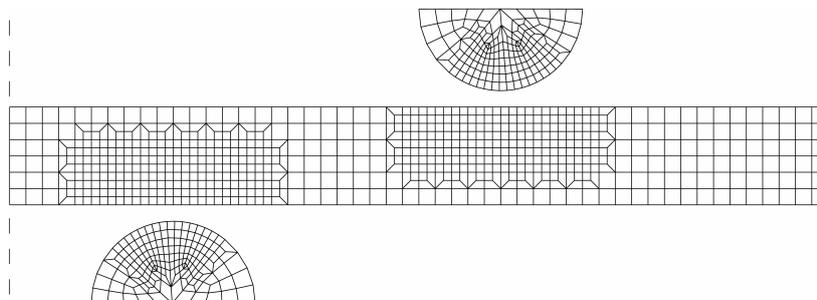


Abb. 2.10: FE-Modell eines 4-Punkt-Biegebalkens.

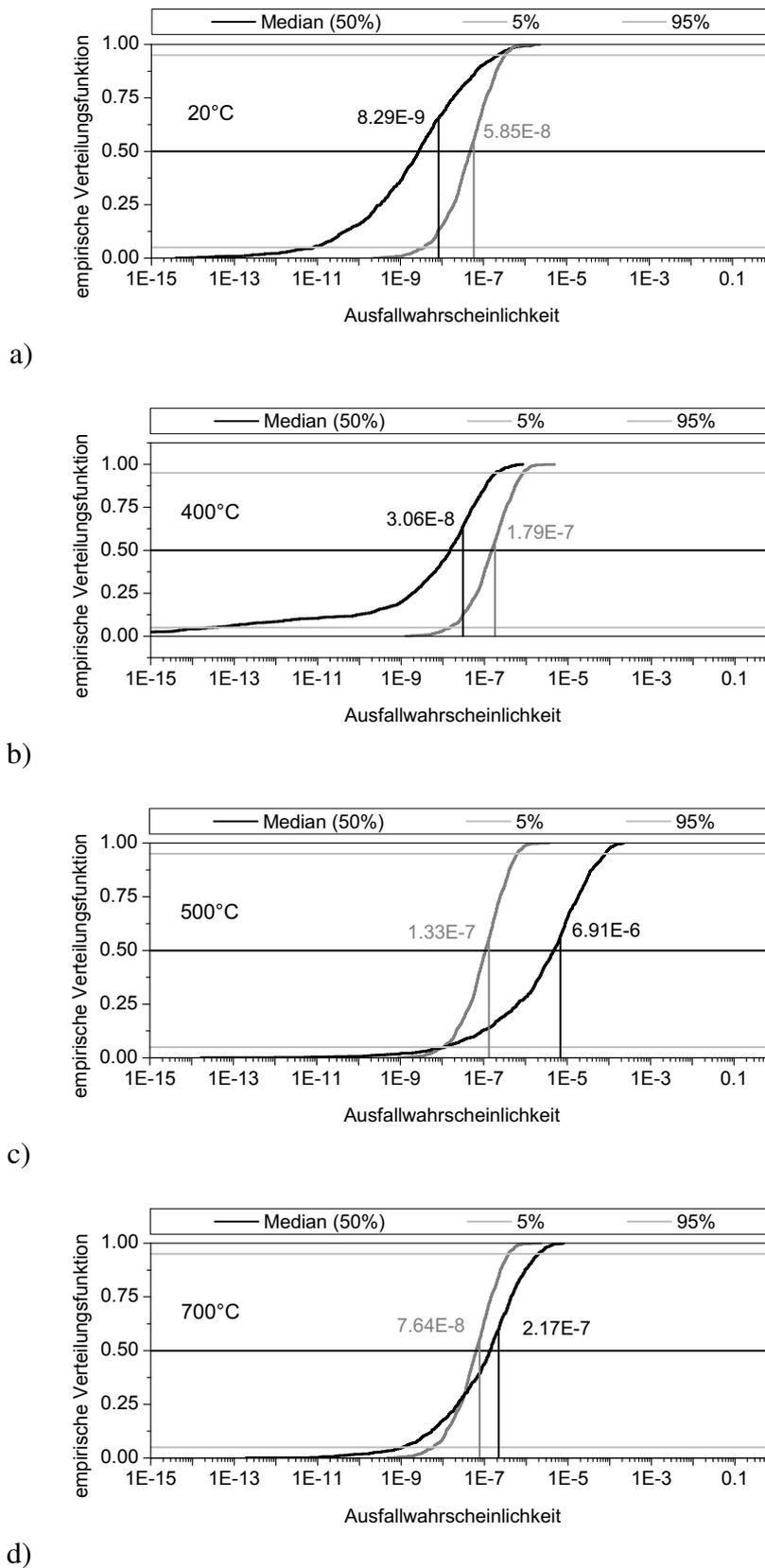


Abb. 2.11: Ergebnisse für spontanes Versagen (ohne Berücksichtigung des unterkritischen Risswachstums) für a) 20°C, b) 400°C, c) 500°C, d) 700°C.

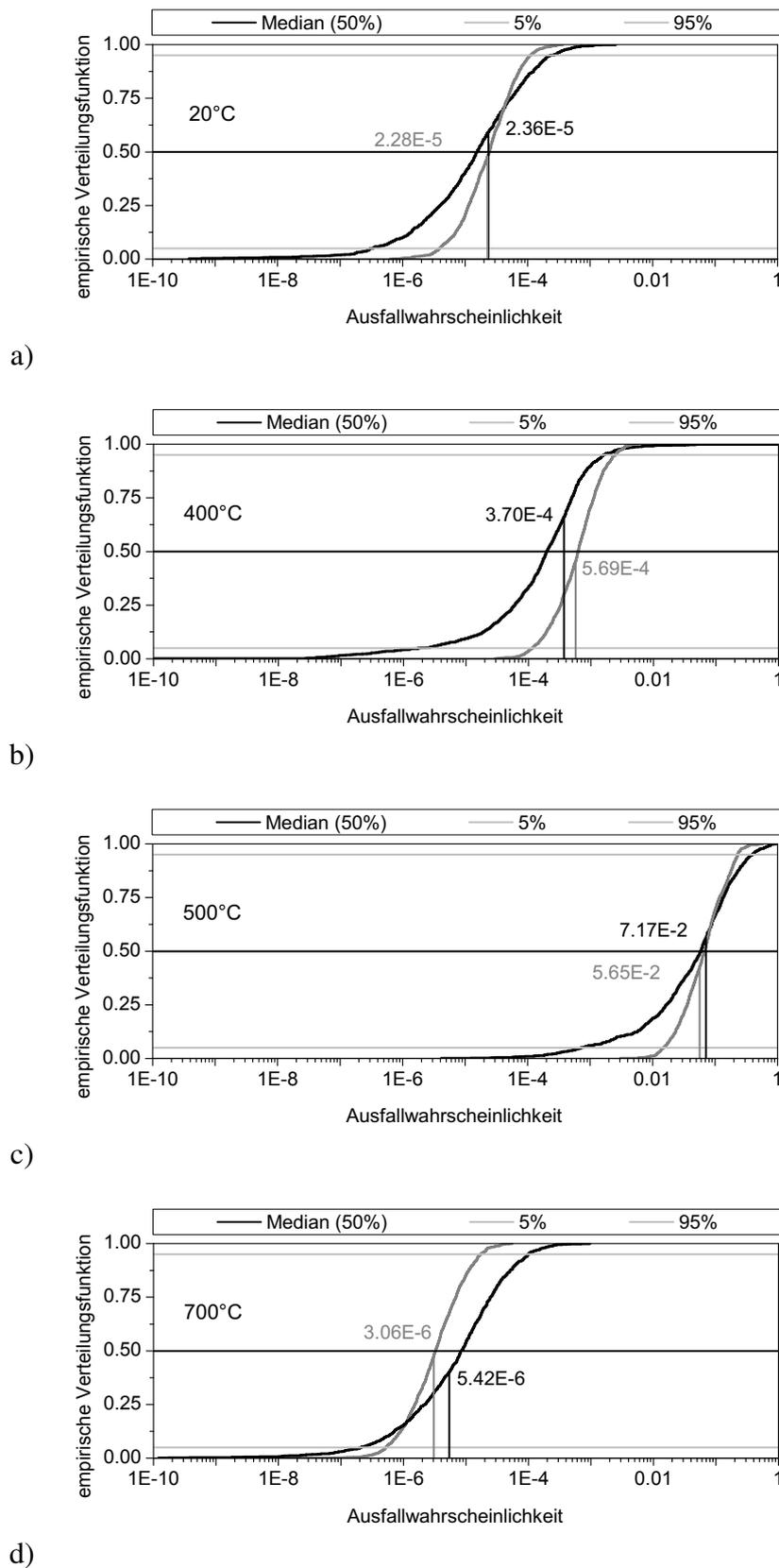
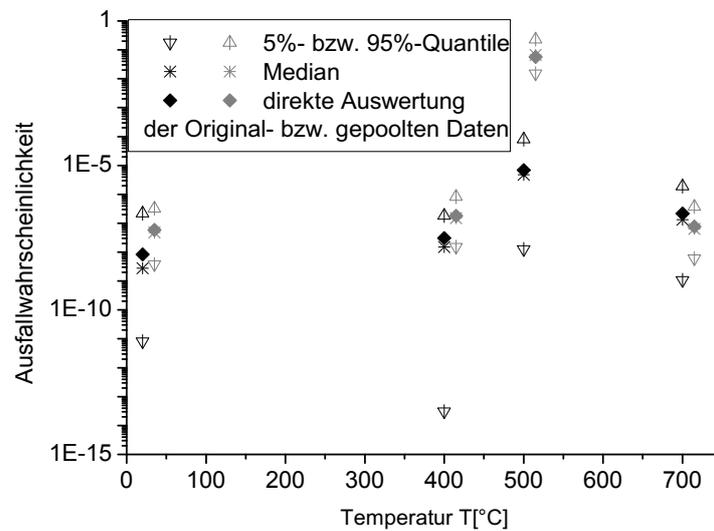
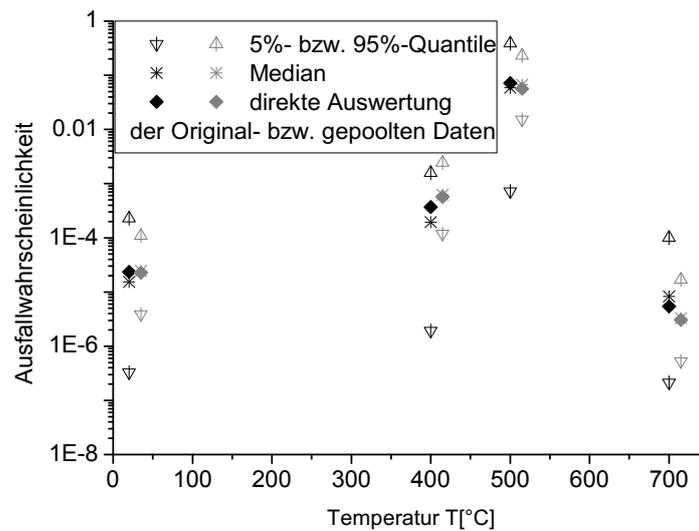


Abb. 2.12: Ergebnisse mit Berücksichtigung des unterkritischen Risswachstums für a) 20°C, b) 400°C, c) 500°C, d) 700°C.



a)



b)

Abb. 2.13: Zusammenfassung der Ergebnisse des Poolings für a) spontanes Versagen und b) Versagen mit Berücksichtigung des unterkritischen Risswachstums.

2.3.2 Optimierte Probenaufteilung

Eine andere Möglichkeit zur Reduzierung der Unsicherheiten in der Zuverlässigkeit besteht in einer gezielten Wahl von Art und Anzahl unterschiedlicher Experimente bei der Erhebung der Datenbasis zur Materialcharakterisierung. Eine analytische Sensitivitätsanalyse

in dem Sinne wie die Streuung einzelner Materialparameter aus der Gruppe (m, σ_0, n, B) sich in der Streuung der Ausfallwahrscheinlichkeit auswirkt ist wegen der nicht trivialen Abhängigkeit in Form von Gl. (2.14) nicht denkbar. So wurde für das inverse Problem eine Lösung mittels Kombinieren von numerischen Methoden (Bootstrap-Resampling-Methode, Bayes'sche Neuronale Netze) gesucht. Ein Werkzeug sollte entwickelt werden, das für vorhandene Probenressourcen eine optimale Aufteilung der Proben auf verschiedenen Charakterisierungsexperimente finden kann. Dabei soll bei deren Auswertung eine möglichst kleine Unsicherheit in der Vorhersage der Ausfallwahrscheinlichkeit erzielt werden. Die Vorgehensweise wird im weiteren am Beispiel des bereits beim Pooling verwendeten FE-Modells eines 4-Punkt-Biegebalkens aus Al_2O_3 -Keramik ausführlich beschrieben. Die Belastung des 4-Punkt-Biegebalkens wurde in diesem Fall so eingestellt, dass unterkritisches Risswachstum beobachtet werden kann. Dies bedeutet eine niedrigere Kraft an den Stützpunkten und dafür längere Belastungszeit. Dabei ist der qualitative Verlauf der Festigkeitsabhängigkeit von der Belastungsgeschwindigkeit, wie in Abb. 2.3, aus der vorhandenen Datenbasis für den Werkstoff annähernd bekannt. Präziser ausgedrückt, ist es nur wichtig, dass für den Werkstoff ungefähr der Übergangspunkt auf der Achse der Belastungsgeschwindigkeit $\dot{\sigma}$ bekannt ist, nach dem im Experiment die Festigkeitswerte sicher im Sättigungsbereich liegen und Inertfestigkeiten repräsentieren.

Zur Erstellung der Datenbasis, wurden 60 4-Punkt-Biegeproben aus Al_2O_3 -Keramik bei Raumtemperatur bei 4 unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten getestet, die in Abb. 2.14 zusammen mit der Linie, die durch die Medianwerte jeder Datengruppe läuft, abgebildet sind. Daraus können alle 4 relevanten Materialparameter des Werkstoffs (m, σ_0, n, B) mit Hilfe der oben beschriebenen Auswertung geschätzt werden und, den Daten entsprechende, Ausfallwahrscheinlichkeit zusammen mit ihren Vertrauensgrenzen mittels der Bootstrap-Simulation ausgerechnet werden. Die Experimente erlauben zwar eine vollständige Charakterisierung des Werkstoffs, allerdings ist es interessant, ob bei einer sparsamen, intelligenteren Probenaufteilung bei einem kleineren Probenumfang vergleichbare oder kleinere Vertrauensgrenzen für die Ausfallwahrscheinlichkeit berechnet werden können. Untersucht wurde die Möglichkeit einer günstigen Aufteilung von 24 vorhandenen Biegeproben auf 4 Varianten von Versuchsbedingungen, die den gleichen 4 Belastungsgeschwindigkeiten bei Raumtemperatur, die bei der Erstellung der Datenbasis aus Abb. 2.14 entsprechen. Es wird also eine Lösung des inversen Problem der Verteilung N_1, \dots, N_D einer beschränkten Probenanzahl $N = \sum_{j=1}^D N_j$ auf verschiedene Belastungsgeschwindigkeiten gesucht. $D = 4$ bezeichnet hier die Anzahl der Belastungsgeschwindigkeiten. Aus den zugrunde liegenden experimentellen Daten sind Informationen bezüglich Weibullparameter

aus Experimenten bei allen 4 Belastungsgeschwindigkeiten, die in der Tabelle 2.1 aufgeführt sind, mittels der Maximum-Likelihood-Methode erhältlich.

Für die Probenanteile p_1, \dots, p_D mit $p_1 + \dots + p_D = 1$ werden für jeweils N_1, \dots, N_D die relativen Häufigkeiten $p_i = \frac{N_i}{N}$ bezeichnet. Diese sollen so optimiert werden, dass die Unsicherheit in der durch STAU für den für diese Datenerhebung bestimmten Parametersatz ermittelten Ausfallwahrscheinlichkeit möglichst klein wird.

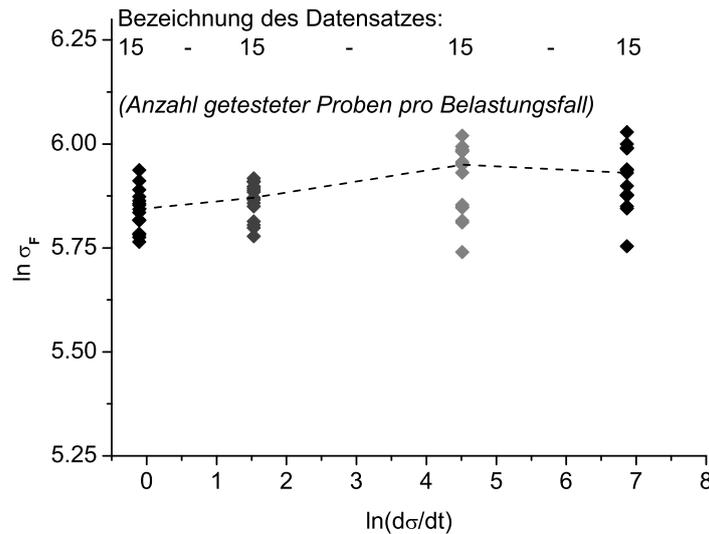


Abb. 2.14: Festigkeitsdaten aus dynamischen Biegeversuchen für verschiedene Belastungsgeschwindigkeiten $d\sigma/dt$ aus [41], gestrichelte Linie verbindet Medianwerte.

Fall Nr.	Belastungsgeschwindigkeit $\dot{\sigma}(= d\sigma/dt)$ [MPa/s]	Weibullparameter (m, σ_0) [-, MPa]
1	0.9	(18.859 , 352.583)
2	4.62	(27.388 , 358.828)
3	91.	(14.364 , 383.615)
4	958.	(15.036 , 279.977)

Tab. 2.1: Relevante Belastungsgeschwindigkeiten für dynamische Versuche und aus entsprechenden Experimenten berechnete Weibullparameter.

Ein probabilistisches Neuronales Netz soll für die Regressionsaufgabe der Charakterisierung der Abhängigkeit der Ausfallwahrscheinlichkeit des keramischen Bauteils von der Anzahl der Experimente für ausgewählte Belastungsbedingungen benutzt werden. Die Strategie für das Erwerben der Trainingsdaten für das Neuronale Netz ist sehr ähnlich der für die Berechnung der Konfidenzintervalle mit dem Bootstrap-Resampling-Verfahren:

1. Zuvor wurden 6 zufällige gleichmäßig verteilte Stichproben $\{N_j\}_{j=1}^D$, so das $N_j \geq 0$, $j = 1, \dots, D$: $\sum_{j=1}^D N_j = N$ generiert und die entsprechenden relativen Häufigkeiten $\{p_j\}_{j=1}^D$ errechnet.
2. Eine große Anzahl der folgenden Schritte wurde durchgeführt:
 - (a) Für jeden Belastungsfall $j = 1, \dots, D$ wurden genau $N_j^{(l)}$ neue Daten mit der Hilfe der parametrischen Bootstrap-Methode als Wiederholungsprobennahmen aus einer Weibullverteilung mit den Parametern $(m_i, \sigma_{0,i})$ in der dazugehörigen Reihe in Tab. 2.1 simuliert. Aus diesen wurde ein Satz mit resultierenden Materialparametern $(m^{(l)}, \sigma_0^{(l)}, n^{(l)}, B^{(l)})$ für den ganzen Datensatz von generierten Festigkeitswerten berechnet.
 - (b) Die ermittelten Materialparameter $(m^{(l)}, \sigma_0^{(l)}, n^{(l)}, B^{(l)})$ wurden der Software STAU zur Berechnung der Ausfallwahrscheinlichkeit übergeben.
3. Aus allen erhaltenen Ausfallwahrscheinlichkeiten wurde eine empirische Verteilungsfunktion gebildet und $(1 - 2\alpha)$ -Konfidenzintervalle der Ausfallwahrscheinlichkeit wurden ausgerechnet.

Anschließend wurde mit den vorbereiteten Informationen in Form von Trainingsdaten ein Probabilistisches Neuronales Netz mittels Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode trainiert. Wegen der kleinen Anzahl von Trainingsdaten ist hier die Gauß-Approximation-Methode nicht anwendbar, weil dann die Gauß-Approximation nicht gerechtfertigt ist und die Methode nicht konvergiert (siehe z. B. [32]). Die Trainingsdaten bestehen aus $(p_1^{(l)}, \dots, p_D^{(l)})$ als $D = 4$ Stück von Input-Neuronen und den entsprechenden α - und $(1 - \alpha)$ -Quantilen der Verteilungsfunktion der Ausfallwahrscheinlichkeit $(\log \mathcal{P}_{f,(\alpha)}^{(l)}, \log \mathcal{P}_{f,(1-\alpha)}^{(l)})$ als 2 Output-Neuronen für jedes $l = 1, \dots, 6$. Das Netz soll diesen Zusammenhang zwischen den Anteilen von Proben und der Breite der Konfidenzintervalle aus diesen wenigen Daten erlernen. Im Netz wurde eine Zwischenschicht mit 3 Neuronen belegt. Das Trainieren mit MCMC erfordert, wie es in Kap. 1.3 beschrieben wurde, eine Einlaufphase, nach der Stichproben für die Parameter des Netzes gesammelt werden können, die für die Regressionsvorhersage verwendet werden.

Die konventionellen Neuronalen Netze wurden schon bei der Berechnung der Konfidenzintervalle in [22] zur Reduzierung der Rechenzeit erfolgreich eingesetzt. Auch in dieser Arbeit wurden Bayes'sche Neuronale Netze verwendet, um einen Großteil von STAU-Rechnungen mit einer schnellen Auswertung eines bereits trainierten Netzes zu ersetzen. Der besondere Vorteil dieses Einsatzes Bayes'scher Neuronaler Netze ist, dass keine

großen Datenmengen zum Trainieren benötigt werden und schon mit wenigen Trainingsdaten qualitativ gute Ergebnisse zu erhalten möglich ist. Auf Verifikationsbeispiele kann auch verzichtet werden. Allerdings kann eine Art von Verifikation durchgeführt werden (Abb. 2.15), die nicht eine Kontrollgröße des Trainingsprozesses ist, sondern nur zur Demonstration der Qualität der Regression des Netzes dient.

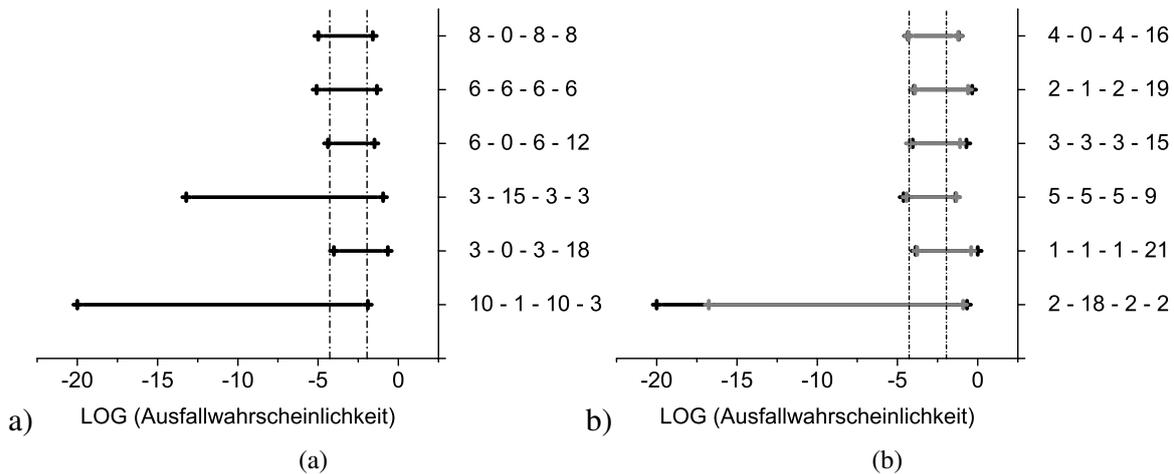


Abb. 2.15: (a) Gerechnete Konfidenzintervalle, die als Trainingsdaten für Neuronales Netz dienen; (b) Vergleich: Vorhersage (grau)-Rechnung (schwarz) für neue, während dem Trainieren unbekannte, Probenaufteilungen.

Abb. 2.15(a) zeigt 90%-Konfidenzintervalle für alle 6 Realisierungen, die als Trainingsbeispiele dienten. Diese sind reine STAU-Ergebnisse und wurden nach dem oben beschriebenen Verfahren mit der Bootstrap-Simulation gerechnet.

In Abb. 2.15(b) sind einige andere Möglichkeiten der Aufteilung von Proben dargestellt, mit Konfidenzintervallen, die durch trainierte Neuronale Netze ausgewertet wurden. Zur Beurteilung der Qualität der Vorhersage sind zum Vergleich auch die entsprechenden mit der Bootstrap-Methode berechneten Konfidenzintervalle für diese Fälle in schwarz mit eingezeichnet. Als gestrichelte vertikale Linien sind in beiden Diagrammen die Konfidenzintervalle für je 15 Proben mit $N_{BASIS} = 60$ eingezeichnet. Sie zeigen keine deutlich kleinere Unsicherheit im Vergleich zu einigen Fällen mit $N = 24$. Auf der vertikalen Achse ist jeweils die Verteilung der Proben auf die vier unterschiedlichen Versuchsbedingungen angegeben.

Wie es in Abb. 2.15(b) zu sehen ist, erkennt das Neuronale Netz, dass es ungünstig ist, zu viele Proben für die 2. Belastungsgeschwindigkeit (4.62 MPa/s) zu verwenden. Dagegen führt die Vergrößerung des Probenanteils im Bereich der Inertfestigkeiten zu einer reduzierten Streuung der Ausfallwahrscheinlichkeit. Durch das Auswerten von neuen Pro-

benaufteilungen mittels des trainierten Bayes'schen Neuronalen Netzes können ein oder mehrere optimierte Sätze $\{p_j\}_{j=1}^D$ für die Probenhäufigkeitsverteilung ausgewählt werden und somit die entsprechende Aufteilung der Proben $\{N_j\}_{j=1}^D$, die den schmalsten Konfidenzintervallen entspricht. Für alle mögliche realistische Verteilungen der Proben auf die entsprechenden Inputs können die Konfidenzintervalle mit dem Neuronalen Netz ausgewertet werden und die beste Variante ausgesucht werden (z.B. 6-0-6-12). Somit kann das Verfahren bei der Versuchsplanung eingesetzt werden. Allerdings sollte in der Tat eine Versuchsplanung sukzessiv durchgeführt werden, weil man bei unbekanntem Werkstoff nicht sicher sein kann welche Belastungsgeschwindigkeit z. B. für die Bestimmung von Inertfestigkeiten relevant ist. Somit müssen zunächst sparsam einige Proben zum Finden eines Trends getestet werden und der Rest mit Berücksichtigung der beschriebenen Ergebnisse für die Verbesserung der Genauigkeit verteilt werden.

Kapitel 3

Identifikation mechanischer Eigenschaften metallischer Werkstoffe

Instrumentierte Eindringprüfung als Hilfsmittel zur Untersuchung mechanischer Werkstoffeigenschaften ist weit verbreitet. Im Eindruckversuch können wegen lokal begrenzter Deformation kleine Werkstoffsvolumina untersucht und gleichzeitig komplizierte Probenpräparationen vermieden werden. Ebenso ist es oft von großem Interesse, die lokale Variation der mechanischen Eigenschaften in Abhängigkeit von der Position zu bestimmen, wenn sie z.B. an einer Schweißnaht vorhanden ist.

Die allgemein bekannten Probleme bei diesem Verfahren sind z. B. Oberflächenveränderung als Folge einer Oberflächenbehandlung durch Polieren, Oberflächenrauigkeit, Nullpunktbestimmung, Spitzenformungenauigkeit usw., die in der Regel zu systematischen Fehlern der Messungen führt. Solche Schwierigkeiten kommen im Bereich der Mikro- und noch stärker in der Nanoindentation vor und werden im Folgenden als Messunsicherheit bezeichnet. Die Thematik des vorliegenden Kapitels ist, eine, komplementär zur Beurteilung der Messunsicherheit, ermöglichte Unsicherheitsschätzung der Auswertemethode durch den Einsatz Bayes'scher Verfahren. Aus diesem Grund werden alle Entwicklungen zunächst nur auf Finite-Elemente-Rechnungen oder Experimente im Makrohärte-Bereich getestet, um zusätzliche Störfaktoren aus der Datenquelle zu minimieren. Analog wurde eine Verifizierung mit Hilfe der Makro-Eindringprüfung bereits bei früheren Entwicklungen durchgeführt [27, 28].

Daten aus der registrierenden Eindringprüfung in Form der repräsentativen Spannung und Dehnung wurden mehrfach in verschiedenen Veröffentlichungen in Analogie zu Zugversuchen betrachtet. Übliche Vorgehensweisen für die Ermittlung von mechanischen Eigenschaften aus Eindruckexperimenten basieren entweder auf dem Konzept der repräsentati-

ven Spannung und Dehnung [47, 1] oder verwenden einen inversen Algorithmus auf der Basis des Π -Theorems (siehe [10, 8]). In dieser Arbeit wird die Materialparameteridentifizierung mittels eines Verfahrens durchgeführt, das auf Neuronale Netze basiert und das inverse Problem in Form eines expliziten Computer-Modells approximiert. Der entscheidende Vorteil solcher Auswertung ist deren extrem schnelle Ausführung. Die Reproduzierbarkeit und die Robustheit der verwendeten Netze sind bei der Anwendung in der Praxis von großer Bedeutung und Gegenstand dieses Kapitels. Die Motivation dieser Arbeit liegt also in der Bewertung der aus dem Einsatz der Neuronale Netze resultierenden Auswertunsicherheiten für eine existierender Analyseverfahren [51].

Ausführlichere Informationen zur Entwicklung der hier diskutierten Auswertemethoden sind in [51] vorgestellt. Eine ausführliche Darstellung der experimentellen Durchführung ist ebenfalls in [51] und außerdem in [31] gegeben. Die entwickelten Neuronale-Netze-Definitionen sind aufwändig erarbeitet, vielfach numerisch und experimentell verifiziert und an einer großen Bandbreite von Werkstoffen in Zusammenarbeit an unterschiedlichen Forschungseinrichtungen getestet worden. Sie wurden deshalb als Grundlage aus [50] übernommen, um darauf aufbauend Probabilistische Neuronale Netze zu generieren.

Langfristiges Ziel ist es, eine kombinierte Methode auszuarbeiten, die die gesamte Unsicherheit aus dem Messverfahren wie aus der Auswertung ermittelt. Der gegenwärtige Bericht befasst sich allerdings mit der Netzunsicherheit als hierfür elementares Teilproblem.

3.1 Auswerteverfahren für Kugeleindruckversuche

In diesem Abschnitt wird das verwendete Materialmodell und das Identifikationsverfahren aus [51] beschrieben. Das Modell stammt aus [49] und wird in seiner Grundstruktur für den vereinfachten Fall kleiner Deformationen erläutert.

3.1.1 Materialmodell

Als phänomenologisches Materialmodell zur Beschreibung des Verformungsverhaltens wird Viskoplastizität angenommen. Dieses Modell ist in der Lage die wichtigsten Verhaltensmerkmale metallischer Werkstoffe unter mechanischer Belastung zu beschreiben. Generell existiert in der Spannungs-Dehnungs-Kennlinie untersuchter Metalle am Anfang der Belastung ein ausgeprägter elastischer Bereich. Die plastische Verformung setzt ab Erreichen der Fließgrenze k_0 ein. Anschließend besteht das Verhalten aus einer nichtlinearen

Verfestigung, die den Gleichgewichtszustand beschreibt, der z.B. nach langer Relaxation oder bei einer sehr langsamen Belastung erreicht ist, sowie aus einer zu dieser Gleichgewichtsspannung hinzukommenden geschwindigkeitsabhängigen Überspannung F . Für dieses Materialmodell wurde eine große Anzahl von Finite-Elemente-Simulationen mit variierten Werten der eingehenden Materialparameter durchgeführt, um das Verformungsverhalten während einer Eindringprüfung numerisch zu simulieren.

Im Folgenden wird das verwendete Werkstoffmodell für den Sonderfall kleiner Deformationen erläutert. Üblicherweise wird die gesamte Dehnung ε in einen elastischen Anteil ε_e und einen plastischen Anteil ε_p additiv zerlegt nach:

$$\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_p \implies \dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_e + \dot{\varepsilon}_p. \quad (3.1)$$

Für ε_e wird ein lineares Elastizitätsgesetz der Form

$$\varepsilon_e = \frac{1}{E} \sigma \implies \dot{\varepsilon}_e = \frac{1}{E} \dot{\sigma} \quad (3.2)$$

angenommen. Die Materialgleichung für ε_p spiegelt die Abhängigkeit des momentanen Zustandes von der vergangenen Belastungsgeschichte wieder. Das Plastizitätsmodell basiert auf isotroper und kinematischer Verfestigung. Unter der Annahme, dass sich der Mittelpunkt der Fließfläche anfänglich symmetrisch zu den betragsmäßig identischen Fließgrenzen in Zug- und Druckrichtung befindet, wird die Fließbedingung für Plastizität gemäß

$$F(t) = \bar{F}(\sigma(t), \xi(t), k(t)) = 0 \quad (3.3)$$

formuliert, wobei die Fließfunktion

$$\bar{F}(\sigma, \xi, k) := \bar{f}(\sigma, \xi) - k, \quad (3.4)$$

bzw.

$$f(t) = \bar{f}(\sigma(t), \xi(t)) := |\sigma - \xi|. \quad (3.5)$$

Hier beschreiben die Variablen $\xi(t)$ und $k(t)$ die isotrope und die kinematische Verfestigung. Aus der Fließbedingung (3.3) folgt mit (3.4) und (3.5):

$$F = 0 \implies \frac{\sigma - \xi}{k} = \pm 1. \quad (3.6)$$

Die Bedingung für Belastung lautet somit

$$F = 0 \text{ und } \left(\frac{\sigma - \xi}{k} \dot{\sigma} \right)_{\varepsilon_p, \xi, k = \text{const}} > 0, \quad (3.7)$$

d.h. der Spannungszustand muss sich auf der Fließfläche ($F = 0$) befinden und im nächsten Schritt (bei festgehaltenen inneren Variablen ε_p, ξ, k) diese verlassen.

Um die Zuwachsrichtung der plastischen Dehngeschwindigkeit bei Zug- und Druckbelastung richtig zu erfassen, wird das Vorzeichen von $\dot{\varepsilon}_p$ gleich dem von $\frac{\sigma - \xi}{k}$ gesetzt, so dass man mit der plastischen Bogenlänge

$$s(t) := \int_0^t |\dot{\varepsilon}_p(\tau)| d\tau \implies \dot{s} = |\dot{\varepsilon}_p| \quad (3.8)$$

die folgende Fließregel erhält:

$$\dot{\varepsilon}_p = \begin{cases} \dot{s} \frac{\sigma - \xi}{k} & \text{für Belastung} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.9)$$

Um die Größen \dot{s} , ξ und k zu bestimmen, fehlen nur noch zwei Materialgleichungen, da die dritte Beziehung aus der so genannten Konsistenzbedingung folgt, d.h. der Spannungszustand darf die Fließfläche zu keinem Zeitpunkt verlassen:

$$\dot{F} = 0 \iff \dot{f} = \dot{k}. \quad (3.10)$$

Im Folgenden werden Materialgleichungen für ξ und k angenommen und \dot{s} aus $\dot{F} = 0$ bestimmt. Die Materialgleichungen für ξ und k sind in Form von Differentialgleichungen formuliert. Es ist üblich, solche Gleichungen als Evolutionsgleichungen zu bezeichnen. Für die nichtlineare Verfestigung werden diese als Armstrong-Frederick-Ansatz formuliert:

$$\dot{\xi} = \frac{3}{2} c \dot{\varepsilon}_p - b \dot{s} \xi, \quad (3.11)$$

$$\dot{k} = (\gamma - \beta(k - k_0)) \dot{s}. \quad (3.12)$$

Hier bezeichnen c, b, k_0, γ und β positive Materialkonstanten. Integriert man diese Evolu-

tionsgleichungen, so erhält man aus Gleichung (3.11) für die kinematische Verfestigung

$$\xi(s) = \int_0^s \frac{3}{2} c e^{-b(s-\bar{s})} \frac{d}{d\bar{s}} \varepsilon_p(\bar{s}) d\bar{s}. \quad (3.13)$$

Durch analoge Integration ergibt sich aus $k(s=0) = k_0$ und (3.12) die Gleichung für die isotrope Verfestigung:

$$k(s) = k_0 + \frac{\gamma}{\beta} (1 - e^{-\beta s}). \quad (3.14)$$

Im Gegensatz zur Plastizität wird für Viskoplastizität eine Überspannung $F > 0$ zugelassen und die Bestimmung von \dot{s} erfolgt nicht aus der Konsistenzbedingung (3.10), sondern durch eine weitere Evolutionsgleichung für die akkumulierte plastische Bogenlänge

$$\dot{s} = \frac{\langle F \rangle^m}{\eta}. \quad (3.15)$$

In (3.15) sind η und m die Materialparameter zur Festlegung der viskosen Effekte, welche sich in Form von Geschwindigkeitsabhängigkeit, Kriech- oder Relaxationseffekten bemerkbar machen.

Aus (3.11), (3.12) und (3.15) lassen sich die in Tabelle 3.1 angegebenen charakteristischen Kenngrößen herleiten, die für die Identifikation relevant sind [25, 50].

Initialer Tangentenmodul	$\sigma' = \gamma + \frac{3}{2}c$
Anteil von k an σ'	$\sigma_k'^* = \frac{\gamma}{\sigma'}$
Anteil von ξ an σ'	$\sigma_\xi'^* = \frac{3}{2} \frac{c}{\sigma'}$
Maximale Verfestigung	$\Delta\Sigma = \frac{\gamma}{\beta} + \frac{3}{2} \frac{c}{b}$
Anteil von k an $\Delta\Sigma$	$\Delta\Sigma_k^* = \frac{\gamma}{\beta} \frac{1}{\Delta\Sigma}$
Anteil vom ξ an $\Delta\Sigma$	$\Delta\Sigma_\xi^* = \frac{3}{2} \frac{c}{b} \frac{1}{\Delta\Sigma}$
Maximale Überspannung	$F_0 = (\eta \dot{\varepsilon}_{ref})^{\frac{1}{m}}$

Tab. 3.1: Charakteristische Kenngrößen.

Das den durchgeführten Finite-Elemente-Simulationen zugrunde liegende Materialmodell (3.16)-(3.21) ist eine Verallgemeinerung des Modells (3.1)-(3.15) auf große Deformationen, die als UMAT in ABAQUS implementiert wurde [12, 11, 30]:

$$\overset{\nabla}{\mathbf{S}} = \dot{\mathbf{S}} - \mathbf{L}\mathbf{S} - \mathbf{S}\mathbf{L}^T = C[\mathbf{D} - \mathbf{D}_p], \quad (3.16)$$

$$F = \sqrt{\frac{3}{2}(\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D \cdot (\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D} - k_0, \quad (3.17)$$

$$\mathbf{D}_p = \dot{s} \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{(\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D}{\|(\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D\|}, \quad (3.18)$$

$$\dot{k} = (\gamma - \beta(k - k_0))\dot{s}, \quad (3.19)$$

$$\overset{\nabla}{\mathbf{Z}} = \dot{\mathbf{Z}} - \mathbf{L}\mathbf{Z} - \mathbf{Z}\mathbf{L}^T = c\mathbf{D}_p - b\dot{s}\mathbf{Z}, \quad (3.20)$$

$$\dot{s} = \sqrt{\frac{2}{3}\mathbf{D}_p \cdot \mathbf{D}_p} = \frac{\langle F \rangle^m}{\eta}. \quad (3.21)$$

In diesen Evolutionsgleichungen bezeichnet \mathbf{S} den gewichteten Cauchy Spannungstensor, \mathbf{L} den Geschwindigkeitsgradienten, C den Elastizitätstensor vierter Stufe, \mathbf{D} den symmetrischen Anteil von \mathbf{L} sowie \mathbf{D}_p dessen inelastischen Anteil und \mathbf{Z} den Tensor der kinematischen Verfestigung. Für weitere Einzelheiten sei auf die oben angegebene Literatur verwiesen. Von besonderem Interesse für diese Arbeit ist, dass die charakteristischen Kenngrößen aus Tabelle 3.1, die für das Modell bei kleinen Deformationen gewonnen wurden, auch für das hier verwendete Modell übernommen werden können [25, Abschnitt 4.3]. Dieses Modell wurde zur Berechnung von mehreren hunderten von Trainings- und Verifikations-Beispielen für die festgelegte Lastgeschichte wie in Abb. 3.1 verwendet.

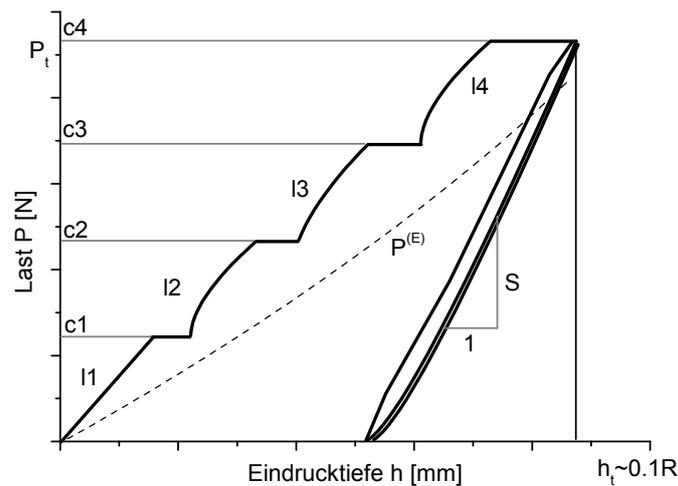


Abb. 3.1: Lastgeschichte.

Die verwendete Lastgeschichte besteht aus vier Belastungsphasen, denen je eine Zwischenkriechphase von je 100 s bzw. am Ende der vierten eine Kriechphase von 600 s folgt. Daran schießt sich eine Hystereseschleife aus Entlastung und Wiederbelastung an, die für technische Werkstoffe in der Regel eine Hysterese erzeugt. Während der fünften Zwischenkriechphase wird der geschwindigkeitsabhängige Anteil des gesamten Spannungs-Dehnungsverhaltens sichtbar, womit der zugeordnete Gleichgewichtszustand ermittelt werden kann. Auf Grundlage dieser Lastgeschichte wurden mittels FEM-Simulationen Daten generiert und diese zum Trainieren aller im Folgenden beschriebenen Neuronalen Netze verwendet.

3.1.2 Beschreibung des Identifikationsverfahrens

In Abb. 3.2 ist die Vorgehensweise für die Identifikation schematisch dargestellt. Die Identifikationsmethode besteht aus dem Einsatz mehrerer aufeinanderfolgender Neuronaler Netze. Je ein Neuronales Netz ist zuständig für die Ermittlung des Nullpunktes, des E-Moduls, der geschwindigkeitsabhängigen Überspannung F sowie des Verfestigungsverhaltens des Werkstoffs. Außerdem besteht optional die Möglichkeit, aus der abschließenden Entlastungs-Wiederbelastungs-Hysterese die kinematische Verfestigung des Werkstoffs als einen Anteil des Verfestigungsverhaltens zu ermitteln. Die kinematische Verfestigung ist im Bezug auf das zyklischen Verformungsverhalten relevant.

In Abb. 3.3 ist das Ergebnis exemplarisch für Eurofer 97 dargestellt (siehe [29]). Solche hochwertigen Ergebnisse sind nur mit Experimenten hoher Qualität erreichbar. Bei unzureichender Messqualität ergeben sich insbesondere Probleme mit der Ermittlung der kinematischen Verfestigung, so dass nur eine Voraussage für den Zugversuch ermittelt werden kann. Der Bauschinger-Effekt gekennzeichnet durch eine unsymmetrische Form der zyklischen Hysteresen bezüglich der Dehnungsachse kann mit k und ξ richtig beschrieben werden. In Abb. 3.3a) sind die gemessenen Kraft-Eindringtiefekurven dargestellt. Die Qualität des Messsystems und die Homogenität des Werkstoffs ergeben eine gute Reproduzierbarkeit der Kurven. Die Messergebnisse wurden zur Materialparameteridentifikation mit der auf Neuronalen Netzen basierten Auswertemethode verwendet. Dabei dienten die Entlastungs-Wiederbelastungs-Hysteresen als Eingangsdaten für die Identifizierung des kinematischen Anteils der Verfestigung mit Hilfe von XiNet (s. Abb. 3.2). Anschließend konnte für die identifizierten Materialparameter das zyklische Zug-Druckverhalten simuliert werden. Die Ergebnisse für die unterschiedlichen Dehnschwingbreiten verglichen mit den experimentellen Kurven weisen eine gute Voraussagequalität auf.

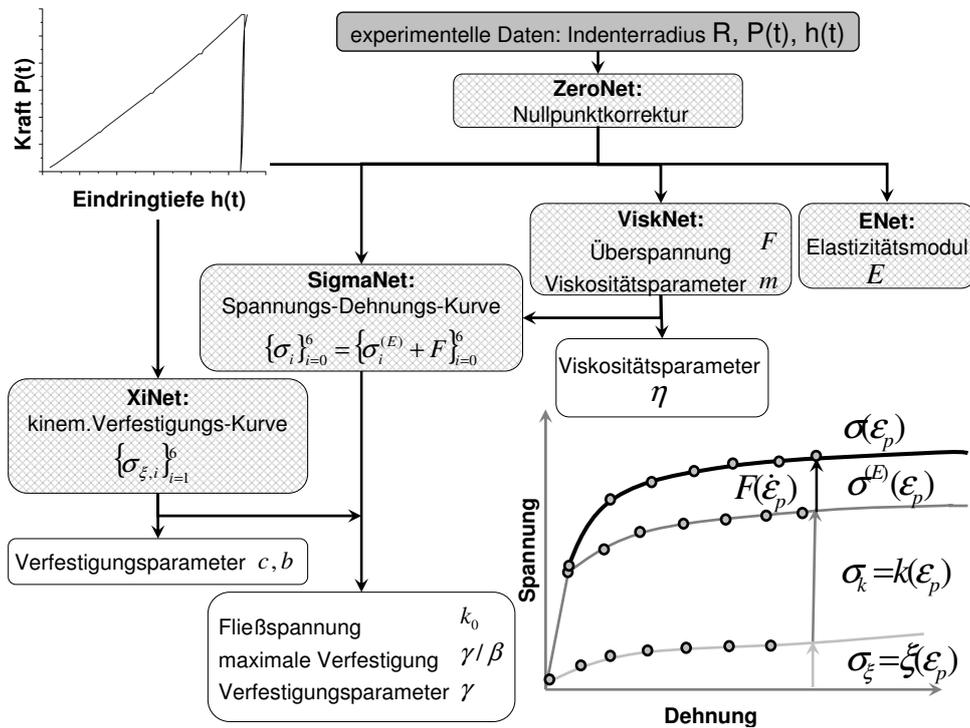


Abb. 3.2: Schema der Auswertung für die Materialparameteridentifikation aus dem Kugleindruckexperiment nach [52].

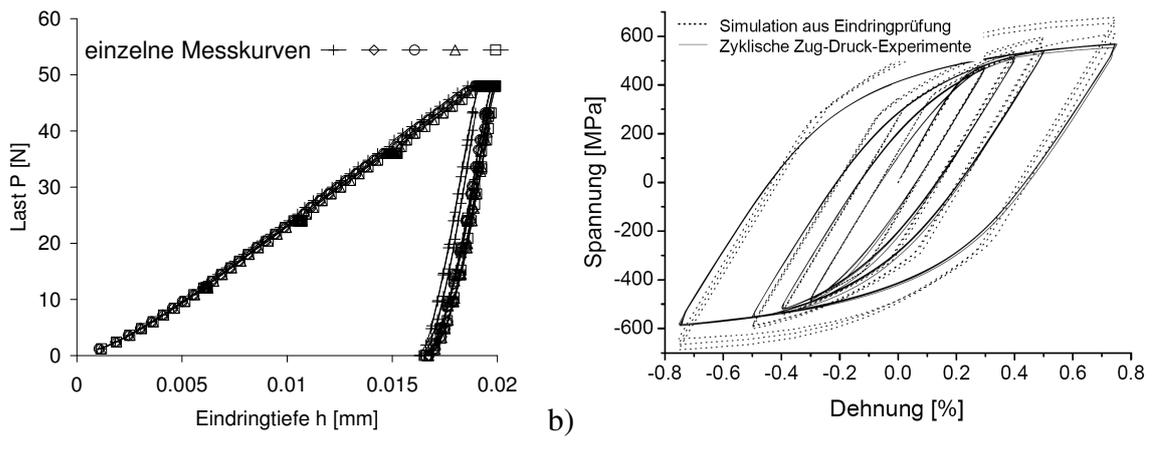


Abb. 3.3: a) Indentationsmessungen an Eurofer 97 durchgeführt mit dem Zwick-Messgerät ZHU2.5; b) Vergleich des gemessenen zyklischen Verformungsverhaltens aus Zug-Druckversuchen mit der Voraussage auf der Basis der identifizierten Materialparameter aus der Eindringprüfung [29].

3.1.3 Ergänzende Bemerkungen

Eine bedeutende Unsicherheitsquelle in der Auswertung der Kugeleindruckversuche ist die Prüfkörpergeometrie. In der praktischen Anwendung werden zum Teil beträchtliche Abweichungen der Kugelprüfkörper von der idealen Form beobachtet [50, 31, 53], wobei die Herstellungsungenauigkeiten zu einem von der Eindringtiefe abhängigen Kugelradius führen. Solche Imperfektionen sind besonders ausgeprägt bei Mikroprüfkörpern vorhanden, weil diese schwieriger in der Herstellung sind. Um durch solche Imperfektionen verursachte Auswertefehler zu eliminieren, wurde ein spezielles ebenfalls auf Neuronalen Netzen basiertes Korrekturverfahren entwickelt [52]. Man ist seitdem nicht mehr auf die Annahme eines mittleren Kugelradius angewiesen, der meist nicht dem nominellen Kugelradius entspricht. Dieses Verfahren eliminiert den Einfluss dieser systematischen Fehlerquelle. Nach erfolgreicher Geometriekorrektur kann die Kraft-Eindringtiefekurve mit den Neuronalen Netzen, die in dem folgenden Abschnitt beschrieben sind, unter der Annahme einer idealen Kugelgeometrie ausgewertet werden.

Um experimentell gemessene Daten mit Simulationen aus dem Modell (3.16) bis (3.21) zu vergleichen werden hier folgende Beziehungen zwischen der technischen Spannung σ_t , der technischen Dehnung e von einer Seite und der wahren Spannung σ und der wahren logarithmischen Dehnung ε von der anderen benötigt

$$\sigma_t := \frac{F_\Delta}{A_0} = \frac{\sigma}{1+e}, \quad (3.22)$$

$$\sigma := \frac{F_\Delta}{A} = \sigma_t(1+e), \quad (3.23)$$

$$e := \frac{l-l_0}{l_0} = \exp(\varepsilon) - 1 \quad (3.24)$$

$$\varepsilon := \ln(l/l_0) = \ln(1+e) \quad (3.25)$$

F_Δ bezeichnet hier die gemessene Kraft, A und A_0 bezeichnen den aktuellen Querschnitt und den Ausgangsquerschnitt, l und l_0 die aktuelle Länge und die Ausgangslänge der Probe.

3.2 Auswerteunsicherheit der Neuronalen Netze

Unsicherheiten in der Auswertung können neben der Datenunsicherheit durch die Unsicherheit der verwendeten Neuronalen Netze bezüglich der ausgewerteten Daten verursacht

sein. Jedes in dem Identifikationsschema in Abb. 3.2 dargestellte Neuronale Netz (zur Definition siehe [50]) liefert eine Realisierung als Vorhersage für diejenige Materialparameter, die in seinem “Zuständigkeitsbereich” liegen.

Die Bewertung der Unsicherheit jedes einzelnen Neuronalen Netzes kann mit Hilfe von Bayes-Verfahren vorgenommen werden. Hierfür wurden zwei Ansätze untersucht, die Gauß-Approximation und die Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode. Bei der Gauß-Approximation wird die Annahme getroffen, dass es ein oder einige höchstwahrscheinliche Netze gibt, in deren näheren Umgebung die Identifikationsergebnisse eine Gauß-Verteilung haben. Diese höchstwahrscheinlichen Netze können durch konventionelles Training ermittelt werden. In den so gefundenen Minima der Zielfunktion $S(\mathbf{w})$ aus Gl. (1.4) wird eine Abschätzung für die Wahrscheinlichkeit von Lösungen in der Nachbarschaft des Optimums nach einer Gauß-Verteilung nach Gl. (1.34) errechnet.

Bei der Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode aus Abschn. 1.4.2 werden aus der Verteilung von allen denkbaren Neuronalen Netze Stichproben gemäß ihrer Wahrscheinlichkeit, dass sie für die gezeigten Trainingsdaten die korrekte Lösung darstellen, simuliert und dann als Gesamtheit statistisch ausgewertet. Mit dieser Methode können somit “repräsentative” Stichproben aus den Verteilungen für die identifizierten Materialparameter ermittelt werden, deren Verteilungsfunktionen sich aus dem oben beschriebenen Verfahren ergeben.

Wie es dem Identifikationsschema in Abb. 3.2 zu entnehmen ist, verwenden einige Neuronale Netze die Ergebnisse von anderen, z.B. alle nachfolgenden Netze verwenden Daten, die zuvor mit Hilfe von ZeroNet korrigiert wurden. Dementsprechend fließen die Unsicherheiten, die von den vorher verwendeten Netzen entstanden, in die Vorhersagen und die Unsicherheiten der anderen Neuronalen Netze ein. Es gibt also mehrere Quellen deren Unsicherheiten abhängig vom Datenfluss zu berücksichtigen sind.

Bei der Gauß-Approximation wurden auch dieses Mal anstelle von einem Netz wie bei konventionellem Trainieren insgesamt jeweils 5 Neuronale Netze trainiert, woraus sich 5 verschiedene Vorhersagen ergeben und anschließend zusammen ausgewertet werden. Das Trainieren wurde auf die gleiche Weise mit unterschiedlichen Startwerten durchgeführt und anschließend durch Mitteln aller 5 Vorhersageergebnisse abgeschlossen. Somit wurde sichergestellt, dass mehrere, in der Regel lokale Minima erfasst werden und in den Auswertungen berücksichtigt werden. Die Auswertung dieser Methode kann schnell durchgeführt werden und bietet in der Regel relativ gute Schätzung der Netzunsicherheit. Allerdings liegt bei dieser Auswertung die Annahme zu Grunde, dass die Streuung der Output-Daten einer Gauß-Verteilung unterliegt, was unter Umständen eine gewisse Einschränkung darstellt.

Mit Hilfe der Markov-Kette-Monte-Carlo-Simulation, wurde ein zweiter Ansatz realisiert,

der keine Annahmen über die Form der Verteilung der Ergebnisse zu Grunde legt. Aus der Verteilung der Sätze der synaptischen Gewichte nach dem im Abschnitt 1.4.2 beschriebenen Algorithmus wurden alle in Frage kommenden Neuronalen Netze entsprechend ihrer Wahrscheinlichkeit während des Trainings durchlaufen und abgespeichert. Über die Wahrscheinlichkeit eines Netzes entscheiden gemäß Gl. (1.21) die vorliegenden Trainingsdaten. Damit die Vorhersage aus der Stichprobenverteilung repräsentativ wird, werden insgesamt 250 Sätze synaptischer Gewichte, die 250 Neuronalen Netzen entsprechen, für jedes Experiment ausgewertet.

Die Summe an Neuronalen Netzen liefert aufgrund ihrer Wahrscheinlichkeit somit dem Anwender eine Verteilung von Materialparametern, woraus die Verteilung entsprechender Spannungs-Dehnungskurven simuliert werden kann. Zusätzlich zu dem Verlauf der "Median"-Spannungs-Dehnungskurve, die als Erwartungswert der Voraussage dient, ist nun auch die zugehörige Streubreite, die Rückschlüsse auf die Verlässlichkeit des Ergebnisses ermöglicht, bekannt. Es ist möglich, optional nur diejenigen Neuronalen Netze auszuwählen, für die man die Unsicherheiten betrachten möchte.

Weil Probabilistische Neuronale Netze nur eine verdeckte Schicht enthalten dürfen, wurden die existierenden Netzstrukturen aus [52, 51] so geändert, dass Neuronen aus mehreren verdeckten Schichten in eine gemeinsame Schicht verschoben wurden. Bei dem Netz ZeroNet befinden sich somit 8 Neuronen in der Zwischenschicht, bei ENet 5, bei ViskNet 8, bei SigmaNet 16 und bei XiNet 10.

3.2.1 Validierung mit FEM

In Abb. 3.4 sind einige FEM-Verifikationsbeispiele dargestellt, die mit Gauß-Approximation bewertet wurden. In dieser Darstellung bezeichnet der exakte Verlauf (graue Linie) die aus den bekannten Materialparametern simulierte Spannungs-Dehnungskurve, den Erwartungswert (schwarze Linie) sowie der jeweils obere und der untere 80%-Konfidenzintervall (schwarze gestrichelte Linien) als Ergebnis der Auswertung mit Gauß-Approximation.

Bei dem Beispiel aus Abb. 3.4a) und Abb. 3.5a) ist der initiale Tangentenmodul der Spannungs-Dehnungskurve sehr groß. Diese Information ist aus dem Kugeleindruck für die Auswertung nicht gut sichtbar. Die Fehler in der Identifikation der Spannungs-Dehnungskurve sind größer zum Teil bis hin zum Verlassen der Konfidenzintervalle. Die Verfestigungsparameter k_0, γ und c , die für die Form der Spannungs-Dehnungs-Kurve im elastisch-plastischen Übergang verantwortlich sind, sind also in erhöhtem Maße unsicher.

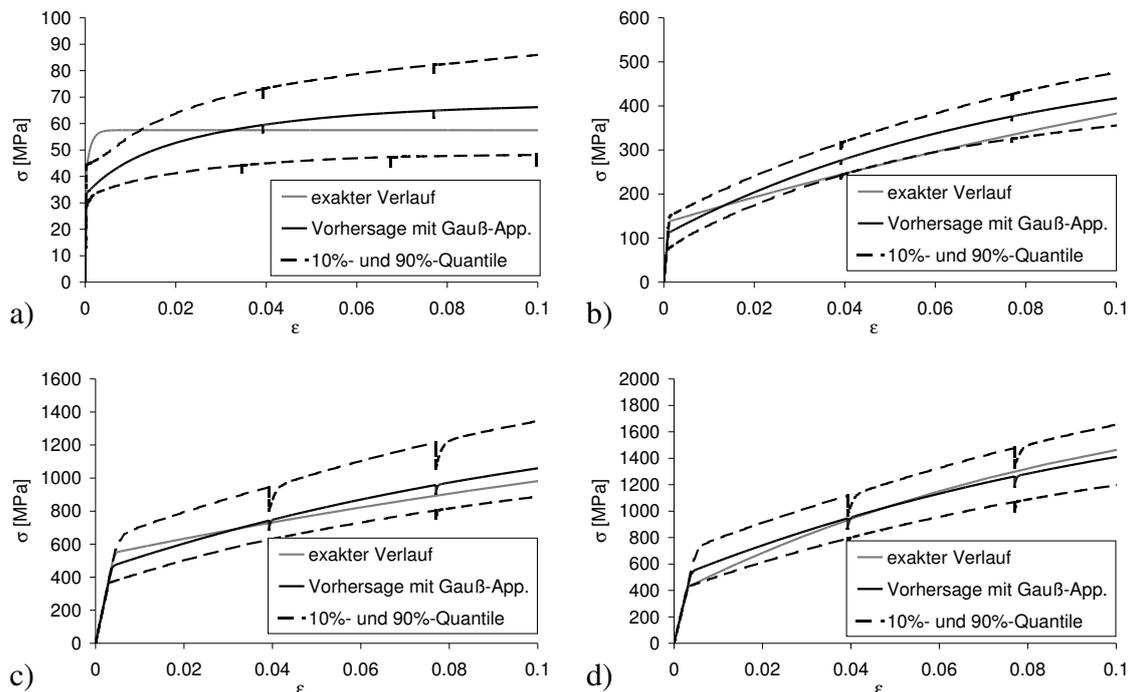


Abb. 3.4: Auswertung mit Gauß-Approximation-Methode mit Unsicherheitsbewertung für einige Verifikationsbeispiele.

Dagegen sind die Auswertungen für Beispiele mit moderatem initialen Tangentenmodul genauer identifizierbar (siehe z.B. Abb. 3.4c)). Der gesamte Verfestigungsverlauf ist aus Daten erkennbar. Die identifizierte Spannungs-Dehnungskurve liegt ganz innerhalb der Konfidenzintervalls, zudem ist die Unsicherheit verglichen mit dem Rechnung aus Abb. 3.4a) deutlich kleiner. Die gesamte Ermittlung der Materialparameter wird in diesem Fall robuster, was sich in reduzierten Streubändern niederschlägt.

Der Vergleich der Gauß-Approximation-Methode in Abb. 3.4 mit der MCMC-Methode in Abb. 3.5 zeigt vergleichbare Ergebnisse für die Voraussagen und für die Streuungen. In Abb. 3.6 sind Verteilungsfunktionen für das Neuronale Netz ENet, welches den E-Modul identifiziert, dargestellt. Für die Gauß-Approximation-Methode werden einige (hier fünf) Gauß-Verteilungen gesucht und gemittelt. Diese einzelne Verteilungen wurden in der Abbildung miteingezeichnet. Die Ergebnisse beider Methode sind ähnlich, besonders im Bereich zwischen den 30%- bis 50%-Quantilen. Eine einzelne Gauß-Verteilung zur Vorhersage zu nehmen ist völlig unzureichend, weil es in Einzelfällen zu erheblichen Unterschieden führen kann.

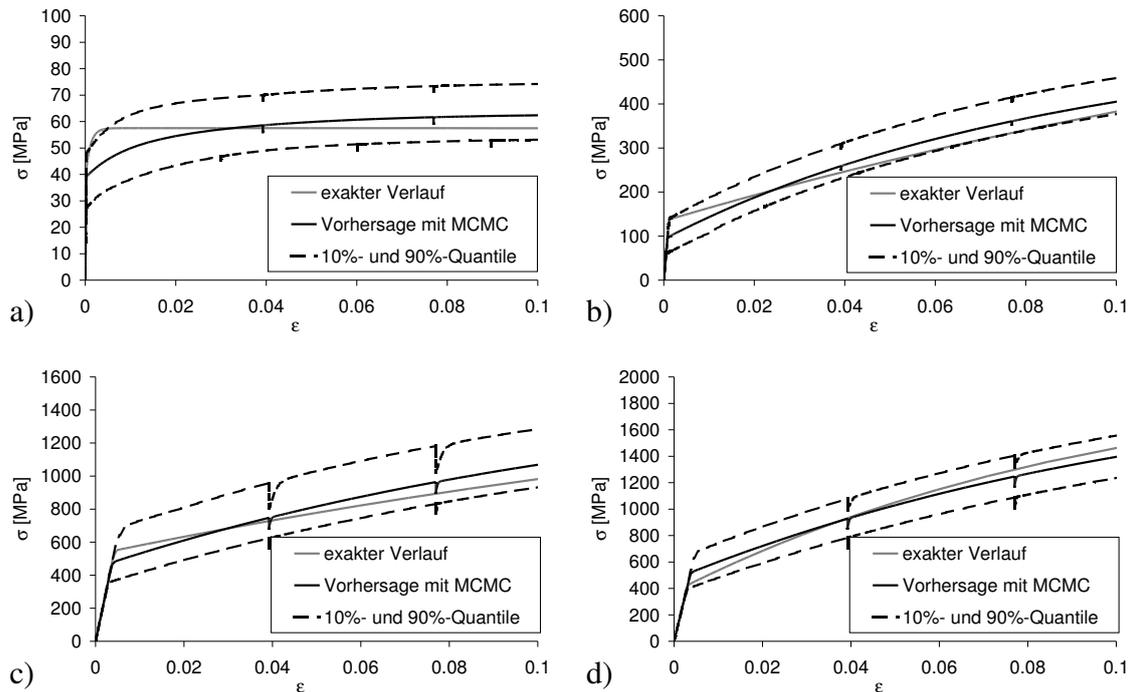


Abb. 3.5: Auswertung mit Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode mit Unsicherheitsbewertung für einige Verifikationsbeispiele.

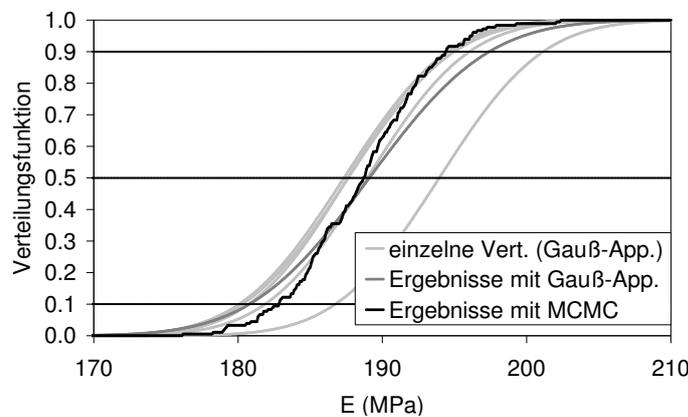


Abb. 3.6: Vergleich von Verteilungsfunktionen für den E-Modul für ein Verifikationsbeispiel mit Gauß-Approximation und Markov-Kette-Monte-Carlo.

3.2.2 Validierung mit Experimenten

Analog zum vorangegangenen Abschnitt wurden Auswertungen für vorhandene experimentelle Daten durchgeführt. Abb. 3.7 und 3.8 zeigen Auswertungen der Probabilistischen Neuronalen Netze zu vier Experimenten an Eurofer 97, welche in Abb. 3.3a) dar-

gestellt sind. Die Vorhersagekurve (schwarze Linie) und die zugehörigen 10%- bzw. 90%-Quantilen (schwarze gestrichelte Linien) aus der probabilistischen Auswertung können mit dem aus Zugversuchen ermittelten Referenzverlauf (graue Linie) und der Auswertung mit konventionellen Neuronalen Netzen (graue gestrichelte Linie) aus [29] verglichen werden. Die wahrscheinlichste Vorhersage ist mit der exakten Lösung allgemein gut übereinstimmend. Allerdings sind hier ähnliche Probleme wie beim Verifikationsbeispiel mit großem initialen Tangentenmodul (s. Abb. 3.4) vorhanden.

Insgesamt zeigen die Auswertungen, dass die Probabilistischen Neuronalen Netze tatsächlich imstande sind, unterschiedliche Unsicherheiten, die durch das jeweils vorliegende Beispiel bedingt sind, darzustellen.

Abb. 3.9a) zeigt die Auswertung ausschließlich bezüglich der Unsicherheit aus SigmaNet. In Abb. 3.9b) wurde für das gleiche Beispiel die Unsicherheit aller restlichen Neuronalen Netzen ausgewertet. Genauso wie im dargestellten Fall zeigen mehrere andere Auswertungen, dass der wesentliche Teil der Unsicherheit in der Regel aus SigmaNet entsteht. Daher sollten sich zukünftige Weiterentwicklungen auf eine weitere Reduzierung der Unsicherheiten in SigmaNet konzentrieren.

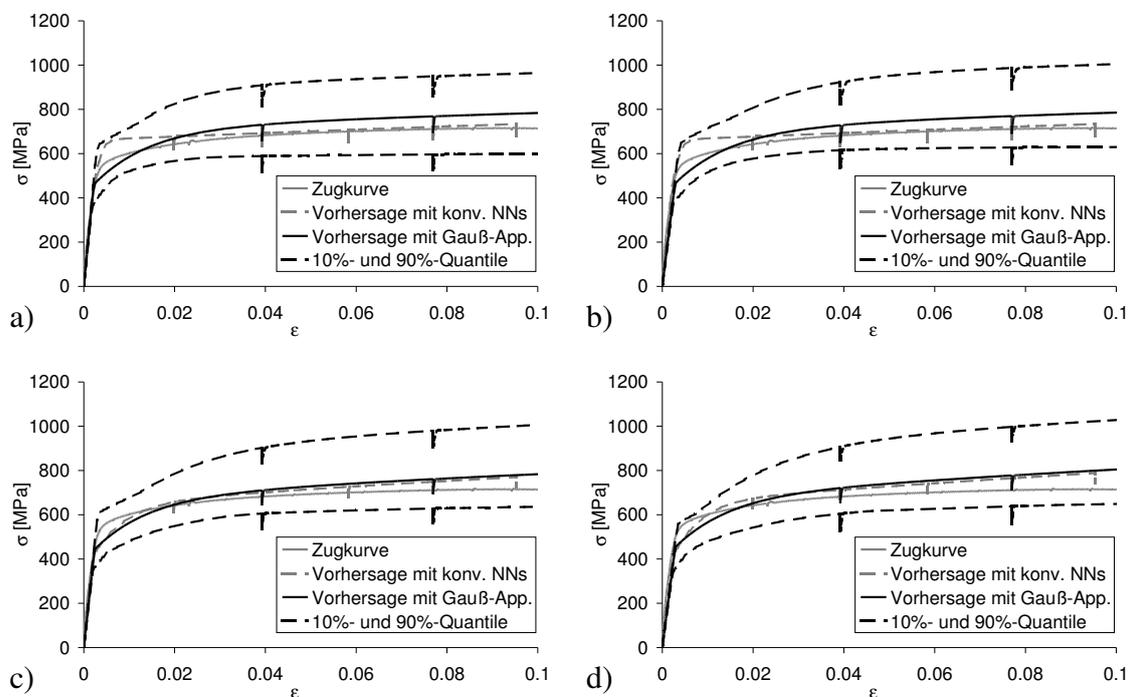


Abb. 3.7: Unsicherheitsauswertung mit Gauß-Approximation-Methode für Werkstoff Eurofer 97 aus vier unterschiedlichen Messkurven.

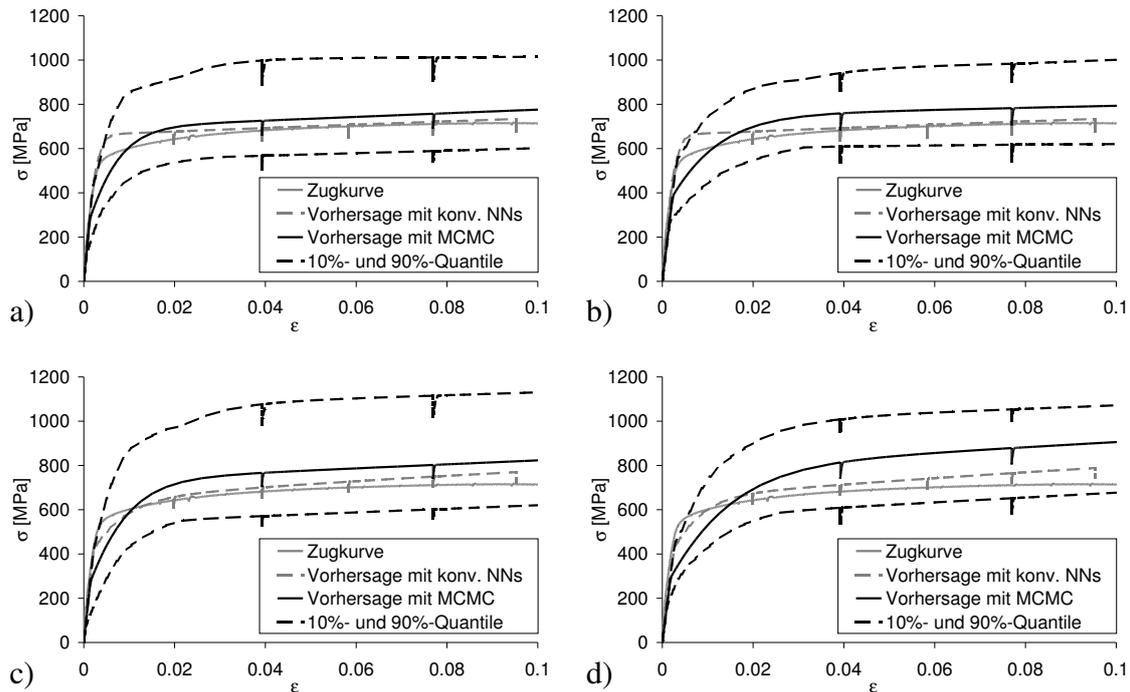


Abb. 3.8: Unsicherheitenbewertung mit Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode für Werkstoff Eurofer 97 aus vier unterschiedlichen Messkurven.

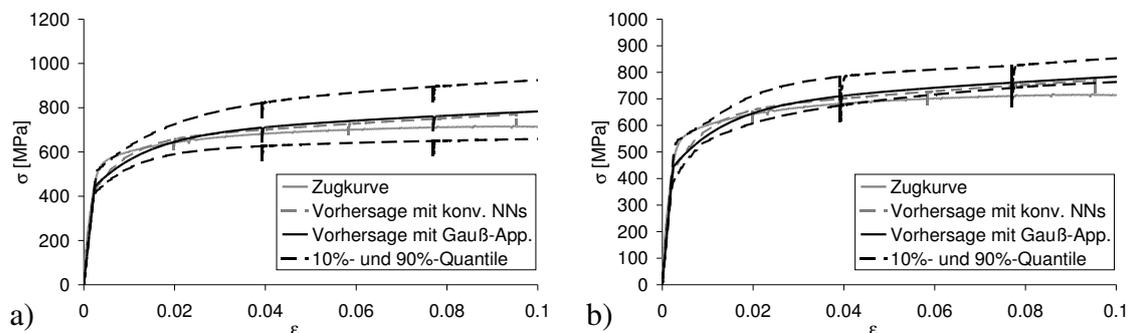


Abb. 3.9: Exemplarischer Vergleich für ein Verifikationsbeispiel mit Markov-Kette-Monte-Carlo: (a) Unsicherheit von SigmaNet, (b) alle Unsicherheiten außer von SigmaNet.

3.3 Verkürzte Lastgeschichte

Über die reine Unsicherheitsbewertung hinaus können die Probabilistischen Neuronale Netze eingesetzt werden, um die Möglichkeit einer effizienten Materialcharakterisierung mit einer verkürzten Lastgeschichte für das Experiment zu untersuchen. Hierfür wäre es

hilfreich, die Kriechphasen so weit wie möglich zu vermeiden, da das bisherige Belastungsprogramm mit einer Versuchsdauer von über 10 Minuten im industriellen Einsatz häufig zu zeitaufwändig ist. Gleichzeitig sollten die Ergebnisse weiterhin eine ausreichend gute Robustheit aufweisen.

Hierzu wurde die sukzessive Modifikation der Input- und Output-Daten vorgenommen und bei jeder Netzänderung aus den berechneten Netzunsicherheiten auf die Veränderung der Auswertequalität geschlossen. Der Verlauf des Optimierungsprozesses ist in Abb. 3.12 dargestellt. Die Abbildung enthält zum Einen den klassisch berechneten relativen Fehler (bezeichnet mit “err”) und zum Anderen die mit dem Bayes-Verfahren berechneten relativen Netzunsicherheiten im Form der Standardabweichung (bezeichnet mit “sig”), ausgewertet jeweils für den E-Modul E , die Fließspannung k_0 und die bei 8% Dehnung zugeordnete Spannung $\sigma_{8\%}$. Die Ergebnisse wurden jeweils gemittelt für einen Satz aus 12 vorhandenen Verifikationsbeispielen.

Der Verlauf der Kraft-Eindrucktiefe-Kurve beim verkürzten Experiment enthält keine ausreichenden Daten für die Separation ihrer Bestandteile hinsichtlich der unterschiedlichen Verfestigungsarten und der Überspannung (s. Abb. 3.10). Es wird daher nur die Identifikation der Gesamtspannung angestrebt wie dies in Abb. 3.10 schematisch dargestellt ist.

3.3.1 Neuronale-Netze-Entwicklung

Das bestehende und ausreichend verifizierte Neuronale Netz (weiter als SigmaNet 7 bezeichnet) wurde aus der Referenzmethode übernommen und derart modifiziert, dass als Ergebnis der Identifikation eine Spannungs-Dehnungs-Kurve ermittelt wird. Dabei sind die Ausgangsdaten von SigmaNet 7 entdimensionierte Werte der Gesamtspannung, die bestimmten Beträgen der plastischen Dehnung $\varepsilon_{p,i} [\%] \in \{0, 1, 2, 4, 8, 16, 32\}$ entsprechen (siehe Anhang A). Die Ausgangsversion enthält in ihren Eingangsdaten alle Informationen des Referenzexperiments, wie z.B. die Verläufe aller Kriechphasen. Die genaue Beschreibung der Netzdefinitionen aller getesteten Versionen der Auswerteverfahren ist in Anhang A aufgeführt. Bei der ersten Modifikation von SigmaNet 7 zu SigmaNet 8 wurden alle Daten aus Zwischenkriechphasen weggelassen und eine Normierung von Gleichungen (A.2) bis (A.9) mit der Eindringtiefe h_0 am Ende der Belastung durchgeführt. Dabei wurde eine deutliche Reduktion der Streuung beobachtet. Es kann also davon ausgegangen werden, dass die Zwischenkriechphasen für die Bestimmung der Gesamtspannung keine relevante Information enthalten; das heißt, überflüssige Informationen machen die Aussagen Neuronaler Netze zumindest theoretisch nicht unbedingt sicherer. In diesem Zusammenhang ist

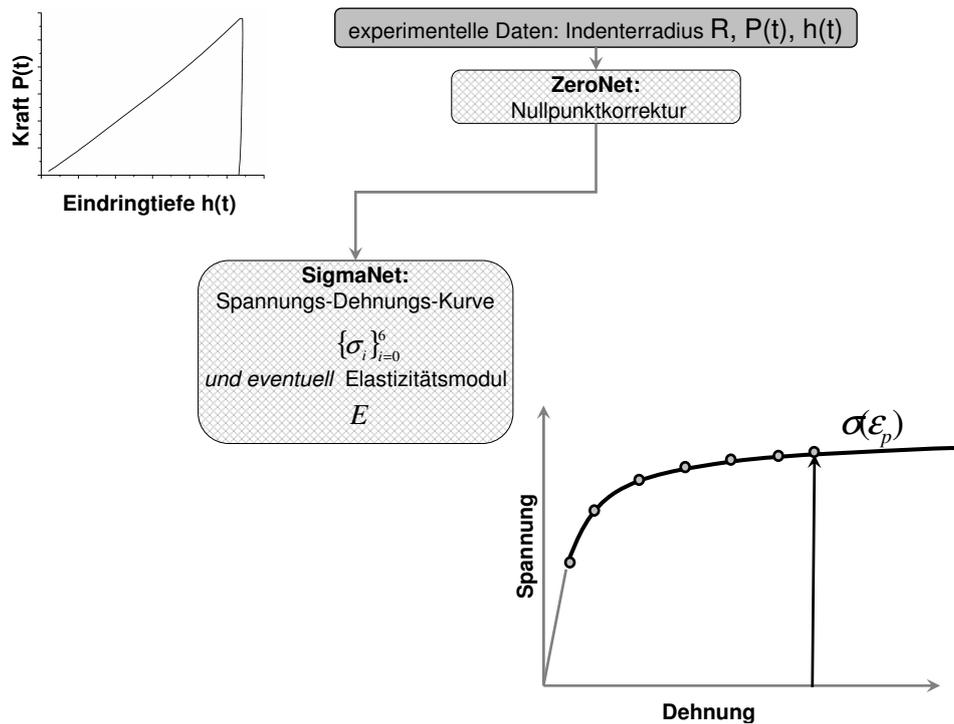


Abb. 3.10: Schema der Auswertung für die Materialparameteridentifikation aus dem Kugeleindruckexperiment für das verkürzte Experiment.

anzumerken, dass die Konfidenzintervalle aus konventionellen Neuronalen Netzen nicht das Gleiche bedeuten wie die Streuung der Unsicherheit des Neuronalen Netzes.

Im nächsten Schritt wurde SigmaNet 8 zu SigmaNet 9 modifiziert, wobei die Steifigkeitskorrektur der Belastungsphase mittels der Beziehung $h_p = h - P/S$ vorgenommen wurde (s. A.20-A.26). Das Ziel war dabei, die Form der Belastungskurve unabhängig von den elastischen Eigenschaften zu machen und damit die Netzunsicherheit zu reduzieren. Dies brachte allerdings keinen wesentlichen Gewinn in der Streuung mit sich (s. Abb. 3.12).

Bei der Modifikation von SigmaNet 9 zu SigmaNet 10 wurde eine weitere Steifigkeitskorrektur der Form $h_p = h - P/S \cdot \sqrt{h h_0}$ getestet, die ebenfalls keine bemerkbaren Vorteile aufweist.

Bei der Modifikation zu SigmaNet 11 wurden "ipol"-Daten $\{h_i^{ipol}, P_i^{ipol}\}_{i=1}^5$ (beschrieben in Gl. (A.6) in Anhang A) ganz weggelassen, was sogar zur geringfügigen Reduzierung der Streuung um etwa 8% führte. Diese Daten liefern SigmaNet eine robuste Information über das Verfestigungsverhalten, unabhängig von der maximalen Eindringtiefe h_t (s. (A.6)). Die Daten scheinen aus der Sicht des Probabilistischen Netzes unnötig, wenn lediglich die

Gesamtspannung betrachtet werden soll.

Bei dem Übergang von SigmaNet 11 zu SigmaNet 12 wurde der Elastizitätsmodul als eine weitere Netzausgabe hinzugefügt, und sehr genau ermittelt.

Motiviert durch die Literatur [8, 7] wurde in einer weiteren Modifikation von SigmaNet 12 zu SigmaNet 13 zusätzlich das Verhältnis der bei der Belastung eingebrachten Energie W_t zur Entlastungsenergie W_e (s. Abb. 3.11) als eine neue Netzeingabe eingeführt. Die Ermittlung des Elastizitätsmoduls ohne einen Schätzer (Gl.(A.57)) ergab eine mangelhafte Identifikation. Die resultierende Genauigkeit in der Spannungs-Dehnungskurve ist dagegen durch eingehende energiebezogene Informationen erheblich verbessert. In der Streuung ist ebenfalls eine Verbesserung zu beobachten, sie ist z. B. bei der Fließspannung fast 50% der vorherigen Netzvariante SigmaNet 12. Folglich ist die Eingabe der Energien gemäß Abb. 3.11 sehr nützlich und erhöht die Robustheit.

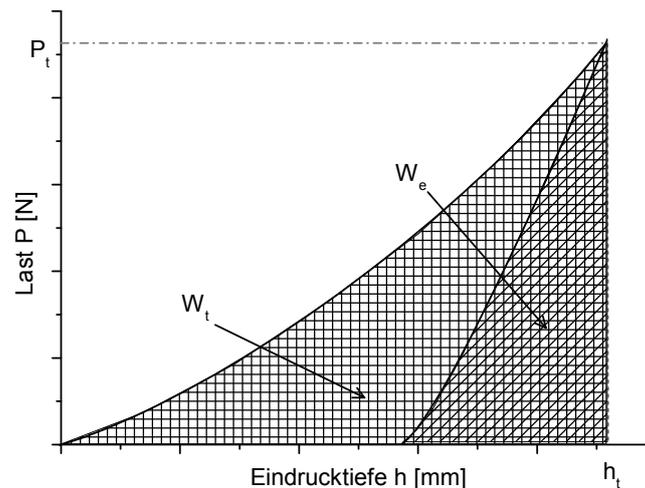


Abb. 3.11: Schema der Energieberechnung.

Mit der Modifikation von SigmaNet 13 zu SigmaNet 14 wurde bei der Berechnung des E-Moduls ein "Energien"-Schätzer aus [7] eingeführt. Der Schätzer entstand allerdings aus FE-Simulationen von Kugeleindruckversuchen, die bis zur Eindringtiefe $h = 0.15R$, also etwa 15 % der Kugelradien, simuliert wurden. Bei Rechnungen und Experimenten, die hier verwendet werden liegt der Wert der maximalen Eindringtiefe niedriger, d.h. bei etwa 8 bis 12% der entsprechenden Kugelradien. Der Schätzer ist folglich nicht für diese Eindringtiefe gültig und bedarf einer Korrektur durch das Neuronale Netz in Form des zugeordneten Outputs (s. Gl. (A.65)). In der Streuung ergibt sich eine Verbesserung, aller-

dings ist sie nicht so klein wie beim Verwenden der Oliver-Pharr-Methode (s. Gl. (A.47)). Der höhere Korrekturaufwand ist am größeren Wertebereich von (A.65) erkennbar.

Die Netzdefinitionen von SigmaNet 13 und SigmaNet 15 sind grundsätzlich identisch. Bei den eingehenden Energienberechnungen wurden jedoch etwa 10% der Daten von unten ($P < 0.1P$) abgeschnitten. Hiermit soll die Sensivität bezüglich möglicher Nullpunktfehler verringert werden. Tatsächlich führte dies zu keiner Verschlechterung der Identifikationsqualität bei der Beobachtung von FEM-Beispielen ohne Nullpunktfehler.

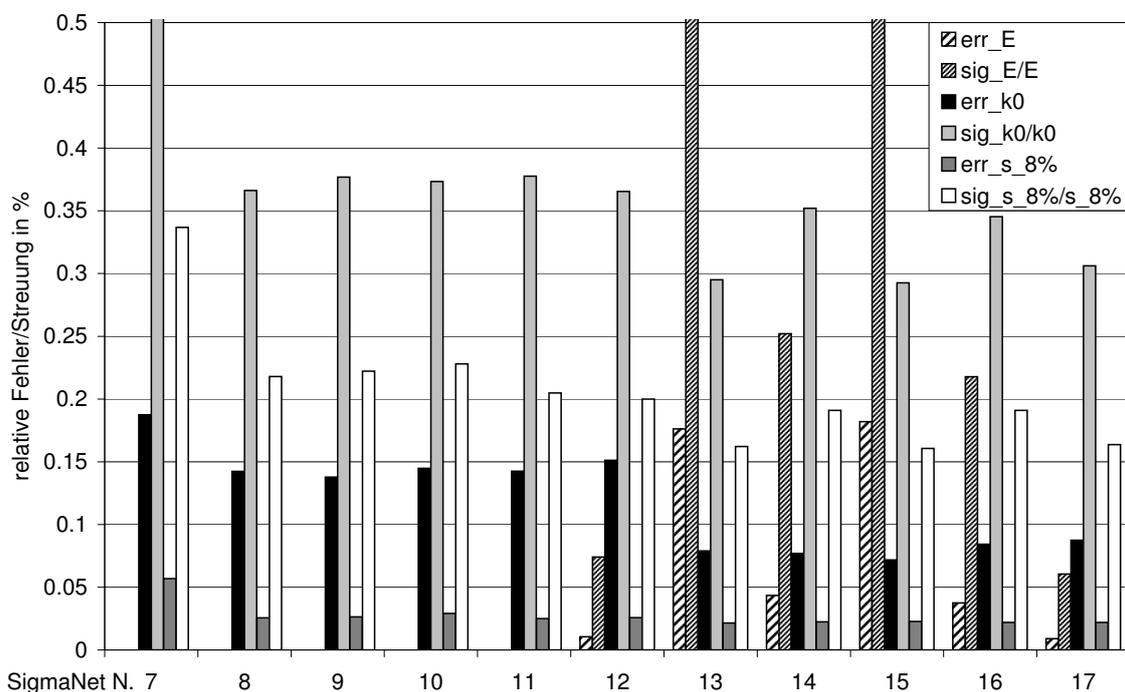


Abb. 3.12: Optimierung des Auswerteverfahrens basierend auf der Streuung und Auswertegenauigkeit für E-Modul, Fließspannung und Spannung bei 8% Dehnung mit Hilfe der Gauß-Approximation-Methode.

3.3.2 Validierung mit FEM

In Abb. 3.13 sind Auswertungen mit SigmaNet 17 der gleichen Verifikationsbeispiele dargestellt, welche zuvor mit der Referenzmethode in Abschn. 3.2 ausgewertet wurden (siehe Abb. 3.4 und Abb. 3.5). Die Qualität der Auswertung wurde durch die in diesem Abschnitt vorgenommene Modifikation keinesfalls verschlechtert. In den Beispielen, in denen die neue Auswertung genauer den Spannungs-Dehnungsverlauf identifiziert (z.B. in Abb.3.13c)) ist ebenso der Steuerungsbalken deutlich schmaler. Somit konnte zumindest

hinsichtlich theoretischer Beispiele eine deutliche Verbesserung der Identifikation erzielt werden.

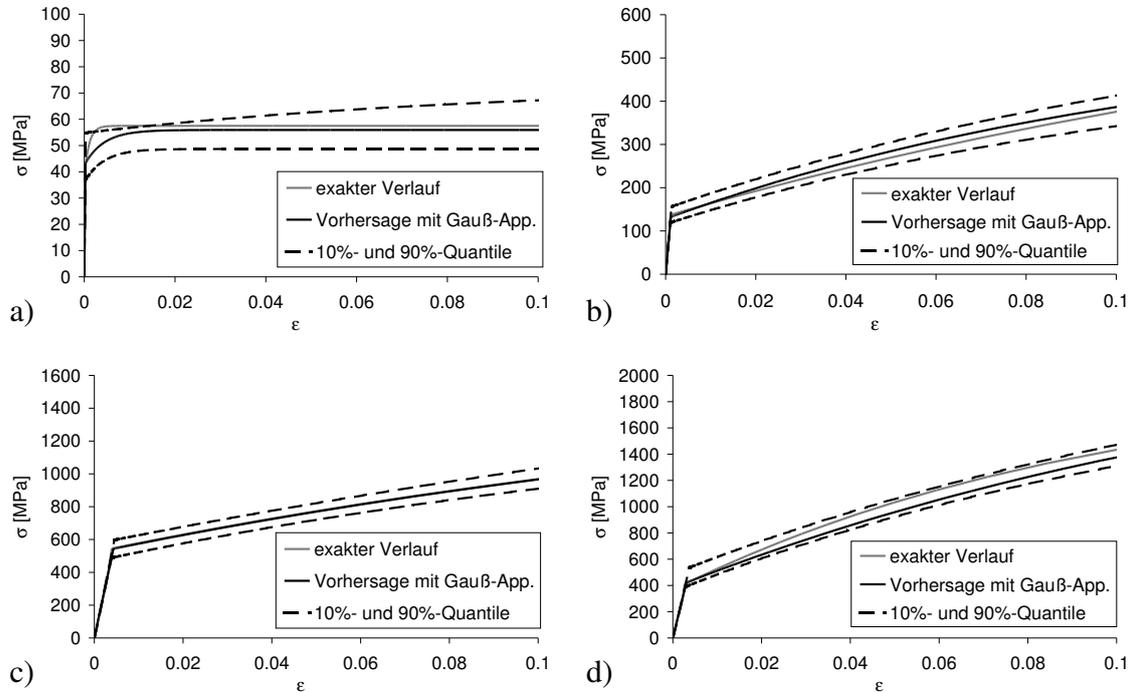


Abb. 3.13: Einige ausgewählte rechnerische Verifikationsbeispiele ausgewertet mit dem Netz SigmaNet 17 mit Gauß-Approximation-Methode.

3.3.3 Auswertung von Experimenten

Die Ergebnisse der modifizierten Auswertung für den verkürzten Experimentenablauf für Eurofer 97 sind in Abb. 3.14 dargestellt. Verglichen mit den Auswertungen für die Referenzmethode mit der Originallastgeschichte (siehe Abschn. 3.2, Abb. 3.7 und Abb. 3.8) zeigt die Auswertung mit der verkürzten Versuchsdauer leider eine schlechtere Qualität. Der Grund der Verschlechterung gegenüber Rechnungen mit FEM- Beispielen konnte nicht geklärt werden.

Offensichtlich wurde durch die Reduktion der Inputs für das Neuronale Netz eine Information eliminiert, die bei der Auswertung von exakten Daten wenig bedeutsam ist, bei der Auswertung von Experimenten aber einen wesentlichen Beitrag liefert. Eine Auswertung der Experimente entlang der Optimierung von SigmaNet 7 bis SigmaNet 17 zeigte, dass bereits das Weglassen der Zwischenkriechphasen von "7" nach "8" zu einem systematischen Fehler führt. Dies kann nur so verstanden werden, dass die verbleibenden experimentellen Daten die benötigte Information nicht mit hinreichenden Genauigkeit enthalten. Offenbar

kann dieser Informationsverlust durch die Ergänzung mit Zwischenkriechphasen kompensiert werden. Welcher Natur dieser Informationsverlust ist, kann im Rahmen dieser Arbeit nicht abschließend geklärt werden. Es ist jedoch zu vermuten, dass die Ursache im Zusammenhang mit dem viskoplastischen Materialverhalten zu suchen ist, das das Kriechen bei konstanter Last beschreibt. Diese Vermutung wird durch die Beobachtung gestützt, dass unabhängig durchgeführte Simulationen mit einem Materialgesetz der Plastizität den gleichen systematischen Fehler in der Auswertung der Experimente erzeugten.

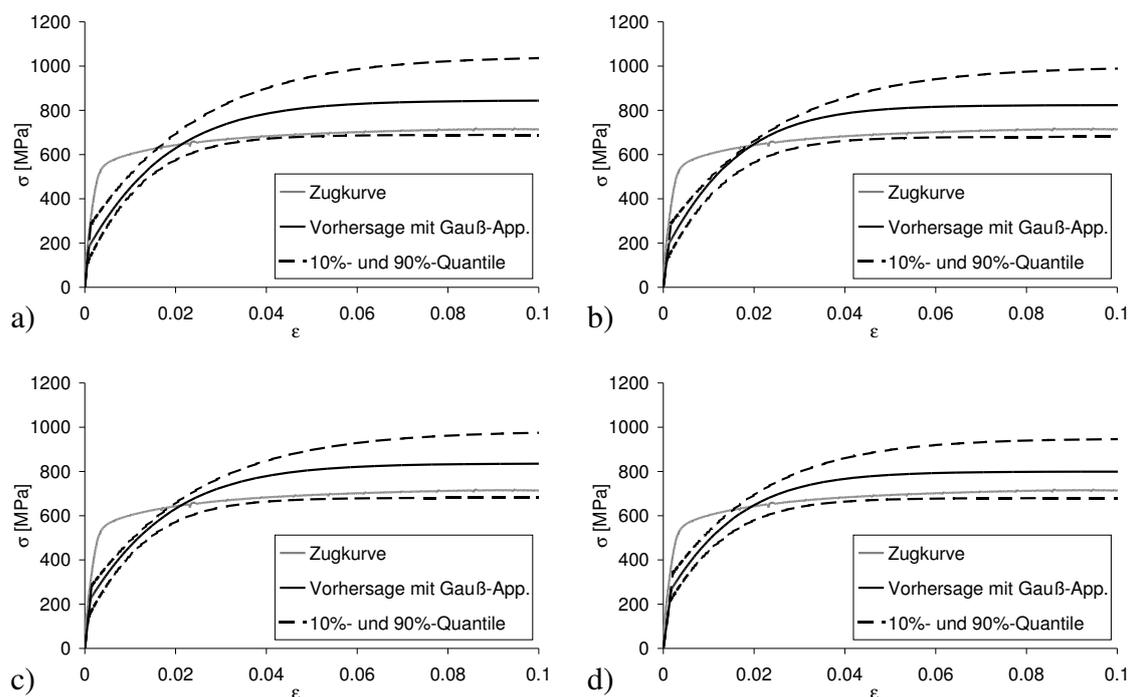


Abb. 3.14: Einige experimentelle Beispiele für Eurofer 97 ausgewertet mit dem Netz SigmaNet 17 mit Gauß-Approximation-Methode.

3.4 Lokale mechanische Eigenschaften von FSW-Schweißnähten

Die drei Varianten der Auswertung mit den trainierten Neuronalen Netzen (konventionell, mit der Gauß-Approximation- und mit der Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode) wurden im Rahmen eines Technologietransferprojekts in die kommerziell erhältliche Software Inspektor-X der Firma ASMEC GmbH implementiert und erlauben die Auswertung von Experimenten über eine grafische Benutzeroberfläche. Bei der Implementierung wurden die in der ursprünglichen Methode erhaltenen Fitting-Prozeduren, die der Ermittlung der

Verfestigungsparameter dienen, verbessert. Das GKSS-Forschungszentrum Geesthacht hat mit Hilfe der bisher verfügbaren Software [52] und mit der Software InspectorX Indentationsmessungen an rührreibgeschweißten (FSW = Friction Stir Welding) Aluminium-Proben analysiert und mit den Ergebnissen aus Mikroflachzugproben verglichen. Die Messungen wurden hierbei wie für das zuvor gezeigte Beispiel Eurofer97 mit einem Zwick- Härtemesskopf durchgeführt (s. auch [19]). Zugunsten der Übersichtlichkeit wurde auf das Eintragen der Konfidenzintervalle verzichtet und es werden nur die Erwartungswertkurven gezeigt. Insgesamt zeigten alle Auswertungen für den Grundwerkstoff gute Übereinstimmung bis zu plastischen Dehnungen von bis 8% analog zu Abb. 3.15 [20]. In diesem Fall liegt die probabilistische Variante mit Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode näher an den Mikrozugergebnissen, als die klassischen Feed Forward Neuronalen Netze. Die verbleibende Abweichung ist mit großer Wahrscheinlichkeit auf Resteigenspannungen in dem gewalzten Grundwerkstoff zurückzuführen [26].

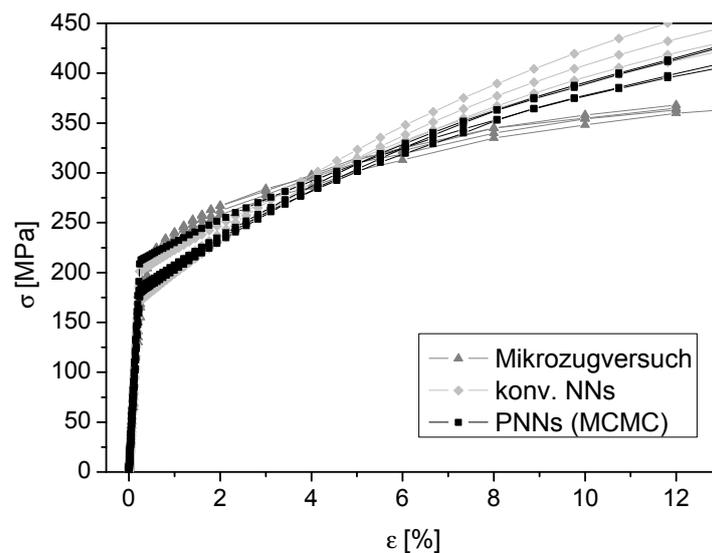


Abb. 3.15: Spannungs-Dehnungsverhalten für Grundwerkstoff Al 5083, ermittelt aus Mikrozugversuchen und mit der neuen Implementierungsversion in der Software InspectorX [20].

Für die lokale Festigkeitsverteilung über den Querschnitt der FSW-Naht hinweg zeigte sich die Originalsoftware von [50] jedoch kaum sensitiv bezüglich des durch die eingebrachte Temperatur erzeugten lokalen Festigkeitsabfalls und lieferte für plastische Dehnungen unter 8% eine nahezu konstante Festigkeit. Die Software InspectorX lieferte dagegen eine sehr gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus den Mikroflachzugproben über den

gesamten Dehnungsbereich von 0-12% hinweg (s. Abb. 3.16 a) bis c)). Darüber hinaus ergaben die klassischen Neuronalen Netze ohne probabilistische Bewertung und die Variante mit MCMC nahezu deckungsgleiche Verläufe. Diese Anwendungen der entwickelten Neuronalen Netze belegen, dass die Methode einen Reifegrad erreicht hat, mit dem sie zur zuverlässigen Messung von lokalen Spannungs-Dehnungseigenschaften in gradierten Werkstoffen, wie z.B. in Schweißnähten, eingesetzt werden kann.

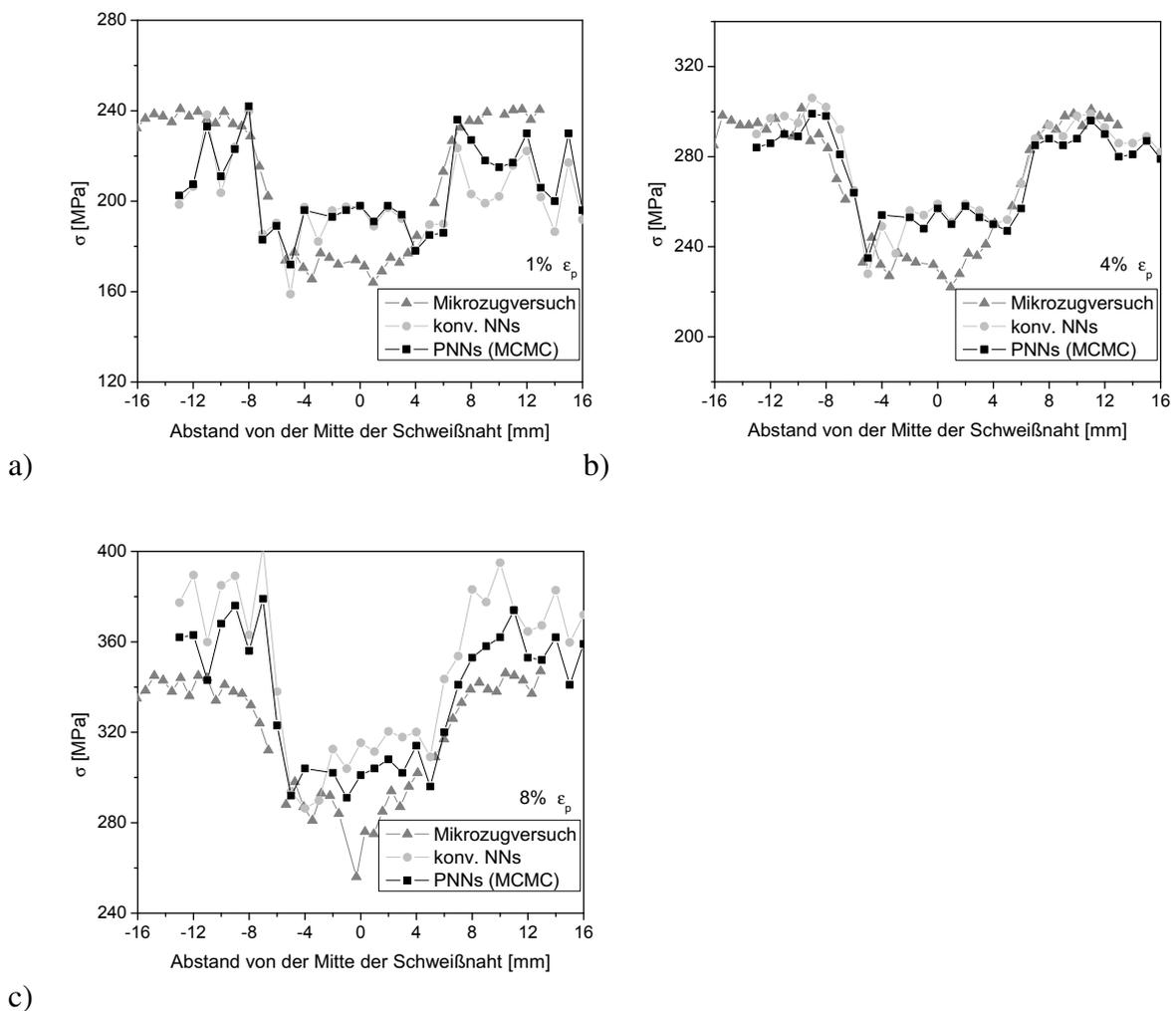


Abb. 3.16: Lokale Variation der Festigkeit in einer FSW-geschweißten Al 5083-Legierung. Die x-Achse entspricht der Koordinate von der Mitte der Schweißnaht: a) 1% plastische Dehnung; b) 4% plastische Dehnung; c) 8% plastische Dehnung [20].

Zusammenfassung

Das Ziel der vorliegenden Arbeit war es, die Anwendbarkeit von Bayes'schen Methoden zur Bewertung von Unsicherheiten für interessante Fälle der Materialforschung zu untersuchen. Vor allem aber war es besonders wichtig festzustellen, ob die Methoden durch ihren Einsatz neue Erkenntnisse in gewählten Anwendungsbereichen ermöglichen.

In Kapitel 1 wurde die Bayes'sche Methode zur Behandlung statistischer Probleme vorgestellt. Dabei wurde speziell auf die Besonderheiten und Vorteile des Bayes'schen Ansatzes in Neuronalen Netzen eingegangen. Hier besteht Interesse hinsichtlich einer möglichen Schätzung von Unsicherheiten der mit Neuronalen Netzen gewonnenen Vorhersagen. Generell liegen die Vorteile der Nutzung der Probabilistischen Neuronalen Netze außerdem in ihrer Genauigkeit, da sie nicht nur eine einzige "beste" Vorhersage des zu rekonstruierten Zusammenhanges ermitteln, sondern eine Verteilung der Vorhersage liefern. Sie gehen sparsam mit wertvollen Trainingsdaten um, da keine Verifikationsdaten beim Trainieren benötigt werden. Allerdings ist das Probabilistische Trainieren deutlich aufwendiger in der Programmierung.

In Kapitel 2 wurde die Problemstellung der Bewertung des Versagens keramischer Bauteile betrachtet. Komponenten aus spröden keramischen Werkstoffen können wegen der im Material zufällig verteilten Fehler nur statistisch hinsichtlich ihres Versagens ausgelegt werden. Dabei ist die Unsicherheit der Bewertung von großer Bedeutung. Die Bayes'sche Methode liefert bei Schätzung der Weibullparameter im Vergleich zur Bootstrapmethode ebenfalls Vertrauensgrenzen, erfordert aber keine künstliche Simulationen von Daten. Bayes'sche Neuronale Netze wurden hier zur besseren Ausnutzung von experimentellen Daten verwendet. Daten, die unter verschiedenen Bedingungen (bei verschiedenen Testtemperaturen) gesammelt wurden, wurden mit dieser Methode auf eine Referenztemperatur transformiert (gepoolt). Dabei wurden die guten Regressionsfähigkeiten eines Probabilistischen Netzes zur Gewinnung des Zusammenhanges zwischen den Festigkeitsdaten und verschiedenen Temperaturen ausgenutzt. Anschließend wurden Bootstrap-Konfidenzintervalle der Ausfallwahrscheinlichkeit eines Beispielbauteils berechnet und so-

wohl für die Originaldaten als auch für neu gewonnene so genannte "gepoolte" Daten verglichen. Die Ergebnisse zeigen eine bedeutende Reduzierung der Streuung im Sinne von Konfidenzintervallen.

Als eine weitere Anwendungsmöglichkeit wurde getestet, ob die Probabilistischen Neuronalen Netze als Mittel zu Zwecken experimentellen Designs einsetzbar sind. Ausgehend von einer festen Probenanzahl wurde die Auswirkung der Probenverteilung auf verschiedene Belastungsgeschwindigkeiten anhand einiger Beispiele auf die Breite der Konfidenzintervalle berechnet. Anschließend wurde dieser Zusammenhang durch ein Probabilistisches Neuronales Netz rekonstruiert um ihn später zur Optimierung der Probenaufteilung zu verwenden. Die Auswertung zeigte, dass man genauere Mittelwerte und schmalere Konfidenzintervalle erzielen kann wenn man bei der Versuchsdurchführung mehr Proben für die Belastungsgeschwindigkeit verwendet, die der Ermittlung der genaueren Inertfestigkeit dient. Proben bei anderen Belastungsgeschwindigkeiten zu testen ist ebenfalls wichtig, allerdings reichen bei zwei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten drei Proben aus. Weitere Daten sind überflüssig und beeinflussen die Breite der Konfidenzintervalle nicht mehr stark. Insgesamt sollte angemerkt werden, dass die Probabilistischen Neuronalen Netze gegenüber konventionellen genauer in den gestellten Regressionsaufgaben approximieren und auch bei kleinem Datenumfang angewendet werden dürfen. Ein Grund ist, dass sie keine Verifikationsdaten benötigen und aus den Daten die verfügbar sind optimal lernen.

Ein anderer Anwendungsbereich, über den es in Kapitel 3 berichtet wurde, ist die Materialparameteridentifikation mittels Kugeleindruckversuchen für metallische Werkstoffe. Eine auf konventionellen Neuronalen Netzen basierte Methode wurde auf Probabilistische Neuronale Netze umgestellt, um die Unsicherheiten des identifizierten Materialverhaltens zu berücksichtigen. Die verwendeten Neuronale Netze sind miteinander verknüpft, so dass die sich aus allen Netzen ergebende Unsicherheit nicht trivial als Summe aller Beträge berechnet werden kann. Vielmehr musste eine große Anzahl der gesamten Identifikationsprozeduren durchgerechnet werden, die außer den Netzauswertungen noch andere numerische Operationen, wie z.B. das Fitten der Daten an die Verfestigungskurve beinhaltet.

Die Auswertung zeigte, dass die größte Unsicherheitsquelle in einem Netz SigmaNet liegt, welches für die Identifikation der Gesamtspannung verantwortlich ist. Beide Auswertungsverfahren mit Gauß-Approximation- und Markov-Kette-Monte-Carlo-Methode wurden für einige numerisch gerechnete oder vorher in Zugversuchen experimentell untersuchte Werkstoffe ausreichend verifiziert. Die Verifikation des ermittelten Spannungs-Dehnungsverhaltens mit experimentellen Kurven des Zugversuches zeigt eine hervorragende Übereinstimmung bei gleichzeitiger guter Robustheit der Methode ebenso in der

Auswertung mit den Probabilistische Neuronale Netzen.

Die Auswertemethode wurde auf die Möglichkeit einer Verkürzung der Dauer der experimentellen Lastgeschichte untersucht. Eine vereinfachte Version des Auswerteverfahrens wurde entwickelt, die nur ein Neuronales Netz enthält und sich ausschließlich auf die Ermittlung der Spannungs-Dehnungs-Kennlinie beschränkt, ohne deren einzelnen Bestandteile ermitteln zu können. Die Versuchsdauer wurde von mehr als 10 Minuten deutlich auf etwa ca. 2 Minuten reduziert, indem die Zwischenkriechphasen während der Kraftaufbringung eliminiert wurden und die Kriechzeit bei maximaler Kraft auf 1 Minute reduziert wurde. Allerdings hat sich die Identifikationsqualität der Auswertungen für Experimente deutlich verschlechtert, obwohl Finite-Elemente-Verifikationsbeispiele wesentlich genauer ausgewertet wurden, als mit der Variante mit langer Versuchsdauer. Fehlende Informationen in den Inputdaten haben offensichtlich negative Auswirkung auf die Robustheit der trainierten Netze und bestätigen die Rechtfertigung des Umfangs der Originalmethode aus [50] und den Aufwand ihrer Entwicklung.

Die entsprechend [50] in dieser Arbeit erstellten Probabilistischen Neuronale Netze zeigen neben der Unsicherheitsbewertung eine ausgezeichnete Identifikationsqualität im Bereich kleiner plastischer Dehnungen bis 8% Dehnung. In einer Zusammenarbeit mit dem GKSS-Forschungszentrum Geesthacht wurden Eindruckversuche an Schweißnähten mit beiden Varianten ausgewertet und die ermittelten Kurven mit Mikroflachzug-Kurven verglichen. Die Auswertung mit Probabilistischen Neuronale Netzen zeigt eine hervorragende Übereinstimmung mit den Daten aus den zugeordneten Mikroflachzugexperimenten und ist sensitiv hinsichtlich der Position in der Schweißnaht.

Anhang A

Netzdefinitionen für den verkürzten Experimenteablauf

Alle unten verwendete Nomenklaturbezeichnungen stammen direkt aus [50] und werden hier ohne eine ausführliche Beschreibung übernommen.

SigmaNet 6

Eingabedefinition

Zur Ermittlung der Spannungs-Dehnungs-Kurve wurden 7 Punkte festgelegt, für die die zugehörigen Spannungen zu bestimmen sind. Die plastische Dehnung in diesen Punkten beträgt

$$\varepsilon_{p,i}[\%] \in \{0, 1, 2, 4, 8, 16, 32\}. \quad (\text{A.1})$$

Zur Identifikation mit Hilfe eines Neuronales Netzes dienen neben dem Verhältnis der maximalen Eindringtiefe zum Kugelradius

$$x_1 := \frac{h_t}{R}, \quad (\text{A.2})$$

entdimensionierte Verläufe der Kraft sowie während der Belastung

$$x_2, \dots, x_6 := \frac{P_{l,i}}{P_5^{ipol}}, \quad i = 2, 4, 6, 8, 10 \quad (\text{A.3})$$

als auch am Ende der jeweiligen Kriechphase

$$x_7, \dots, x_{10} := \frac{P_{c_{i,10}}}{P_5^{ipol}}, i = 1, 2, 3, 4 \quad (\text{A.4})$$

und das Verhältnis der Eindrucktiefe $h_5^{ipol} = 0.08R$ entsprechender Kraft zur maximalen Kraft

$$x_{11} := \frac{P_5^{ipol}}{P_t} \quad (\text{A.5})$$

als Eingangsdaten. Hier bezeichnet P_i^{ipol} für $i = 1, \dots, 5$ die aufgebrachte Last, die der Eindrucktiefe

$$\frac{h_i^{ipol}}{R} \in \{0.01, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08\} \quad (\text{A.6})$$

entspricht. Ebenso die dimensionslosen Verläufe der Kriechphasen in folgender Form

$$x_{12} := \frac{h_t - h_0}{h_t}, \quad (\text{A.7})$$

$$x_{13}, \dots, x_{16} := \frac{h_{c_{i,10}} - h_{l_{i,10}}}{h_{c_{i,10}}}, i = 1, 2, 3, 4 \quad (\text{A.8})$$

und das Verhältnis der Entlastungssteifigkeit zur Härte

$$x_{17} := \frac{Sh_t}{P_t} \quad (\text{A.9})$$

werden eingegeben.

Ausgabedefinition

Die Spannung in den festgelegten Punkten wird durch die Tabor-Spannung σ bei der Eindrucktiefe $h_5^{ipol} = 0.08R$ entdimensioniert. Diese Spannung kann aus der Größen des Eindrucksexperiments durch die Beziehung für die representative Spannung

$$\sigma = \frac{1}{k_\sigma} \frac{P}{\pi a^2} \quad (\text{A.10})$$

berechnet werden, wobei $k_\sigma = 2.8$ eine empirische aus Experimenten bestimmte Konstante aus [47] ist. Dabei bezeichnet $a = c\sqrt{2Rh - h^2}$ den Kontaktradius mit c als Grad des Einsinkens oder des Aufwölbens aus [24]. Somit ergibt sich die Ausgabedefinition in der

Form

$$y_1, \dots, y_7 := \frac{\sigma_i}{\tilde{\sigma}} = \frac{\sigma_i}{\frac{P_5^{ipol}}{k_\sigma \pi (2Rh_5^{ipol} - (h_5^{ipol})^2)}}, i = 1, 2, \dots, 7. \quad (\text{A.11})$$

Die Spannungen σ_i sind dabei in den plastischen Dehnungen (A.1) definiert:

$$\sigma_i := k_0 + \frac{\gamma}{\beta}(1 - e^{-\beta \epsilon_{p,i}}) + \frac{3c}{2b}(1 - e^{-b \epsilon_{p,i}}) + F, \quad (\text{A.12})$$

wobei die Überspannung F zuvor mit dem Neuronalen Netz ViscNet für Viskositätsparameter ermittelt wird.

SigmaNet 7

Eingabedefinition

Eingangsdaten x_1, \dots, x_{17} sind wie für SigmaNet 6 definiert.

Ausgabedefinition

Die Ausgabedefinition hat eine ähnliche Form

$$y_1, \dots, y_7 := \frac{\sigma_i}{\tilde{\sigma}} = \frac{\sigma_i}{\frac{P_5^{ipol}}{k_\sigma \pi (2Rh_5^{ipol} - (h_5^{ipol})^2)}}, i = 1, 2, \dots, 7, \quad (\text{A.13})$$

allerdings bezeichnen σ_i die den plastischen Dehnungen aus (A.1) entsprechende Werte der Gesamtspannung.

SigmaNet 8

Eingabedefinition

$$x_1 := \frac{h_0}{R}, \quad (\text{A.14})$$

$$x_2, \dots, x_6 := \frac{h_{l_1,i}}{h_0}, i = 2, 4, 6, 8, 10, \quad (\text{A.15})$$

$$x_7, x_8 := \frac{h_{l_2,i}}{h_0}, i = 5, 10, \quad (\text{A.16})$$

$$x_9, x_{10} := \frac{h_{l_3,i}}{h_0}, i = 5, 10, \quad (\text{A.17})$$

$$x_{11}, \dots, x_{20} := \frac{h_{c_{4A,i}} - h_0}{h_0}, i = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, \quad (\text{A.18})$$

$$x_{21} := \frac{Sh_0}{P_{c_{4A,20}}}. \quad (\text{A.19})$$

Ausgabedefinition

Ausgabedaten y_1, \dots, y_7 sind wie für SigmaNet 7 definiert.

SigmaNet 9

Eingabedefinition

$$h_{0P} = h_0 - P_0/S, \quad (\text{A.20})$$

$$x_1 := \frac{h_{0P}}{R}, \quad (\text{A.21})$$

$$x_2, \dots, x_6 := \frac{h_{l_1,i} - P_{l_1,i}/S}{h_{0P}}, i = 2, 4, 6, 8, 10, \quad (\text{A.22})$$

$$x_7, x_8 := \frac{h_{l_2,i} - P_{l_2,i}/S}{h_{0P}}, i = 5, 10, \quad (\text{A.23})$$

$$x_9, x_{10} := \frac{h_{l_3,i} - P_{l_3,i}/S}{h_{0P}}, i = 5, 10, \quad (\text{A.24})$$

$$x_{11}, \dots, x_{20} := \frac{h_{c_{4A,i}} - h_0}{h_{0P}}, i = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, \quad (\text{A.25})$$

$$x_{21} := \frac{Sh_0}{P_{c_{4A,20}}}. \quad (\text{A.26})$$

Ausgabedefinition

$$y_{1,\dots,y_7} := \frac{\sigma_i}{\tilde{\sigma}} = \frac{\sigma_i}{\frac{P_5^{ipol}}{k_\sigma \pi (2Rh_5^{ipol} - (h_5^{ipol})^2)}}, i = 1, 2, \dots, 7. \quad (\text{A.27})$$

SigmaNet 10**Eingabedefinition**

$$h_{0P} = h_0 - P_0/S, \quad (\text{A.28})$$

$$x_1 := \frac{h_{0P}}{R}, \quad (\text{A.29})$$

$$x_2, \dots, x_6 := \frac{h_{l_{1,i}} - P_{l_{1,i}}/S \cdot \sqrt{h_{l_{1,i}} h_0}}{h_{0P}}, i = 2, 4, 6, 8, 10, \quad (\text{A.30})$$

$$x_7, x_8 := \frac{h_{l_{2,i}} - P_{l_{2,i}}/S \cdot \sqrt{h_{l_{2,i}} h_0}}{h_{0P}}, i = 5, 10, \quad (\text{A.31})$$

$$x_9, x_{10} := \frac{h_{l_{3,i}} - P_{l_{3,i}}/S \cdot \sqrt{h_{l_{3,i}} h_0}}{h_{0P}}, i = 5, 10, \quad (\text{A.32})$$

$$x_{11}, \dots, x_{20} := \frac{h_{c_{4A,i}} - h_0}{h_{0P}}, i = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, \quad (\text{A.33})$$

$$x_{21} := \frac{Sh_0}{P_{c_{4A,20}}}. \quad (\text{A.34})$$

Ausgabedefinition

Ausgabedaten y_{1,\dots,y_7} sind wie für SigmaNet 7 definiert.

SigmaNet 11**Eingabedefinition**

$$x_1 := \frac{h_0}{R}, \quad (\text{A.35})$$

$$x_2, \dots, x_6 := \frac{h_{l_{1,i}}}{h_0}, i = 2, 4, 6, 8, 10, \quad (\text{A.36})$$

$$x_7, x_8 := \frac{h_{l_{2,i}}}{h_0}, i = 5, 10, \quad (\text{A.37})$$

$$x_9, x_{10} := \frac{h_{l_{3,i}}}{h_0}, i = 5, 10, \quad (\text{A.38})$$

$$x_{11}, \dots, x_{20} := \frac{h_{c_{4A,i}} - h_0}{h_0}, i = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, \quad (\text{A.39})$$

$$x_{21} := \frac{Sh_0}{P_{c_{4A,20}}}. \quad (\text{A.40})$$

Ausgabedefinition

Ausgabedaten y_1, \dots, y_7 sind wie für SigmaNet 7 definiert.

SigmaNet 12

Eingabedefinition

$$x_1 := \frac{h_0}{R}, \quad (\text{A.41})$$

$$x_2, \dots, x_6 := \frac{h_{l_{1,i}}}{h_0}, i = 2, 4, 6, 8, 10, \quad (\text{A.42})$$

$$x_7, x_8 := \frac{h_{l_{2,i}}}{h_0}, i = 5, 10, \quad (\text{A.43})$$

$$x_9, x_{10} := \frac{h_{l_{3,i}}}{h_0}, i = 5, 10, \quad (\text{A.44})$$

$$x_{11}, \dots, x_{20} := \frac{h_{c_{4A,i}} - h_0}{h_0}, i = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, \quad (\text{A.45})$$

$$x_{21} := \frac{Sh_0}{P_{c_{4A,20}}}. \quad (\text{A.46})$$

Ausgabedefinition

$$y_1 := E_r \frac{2\sqrt{2Rh_0 - h_0^2}}{S}, \quad (\text{A.47})$$

$$y_{2,\dots,y_8} := \frac{\sigma_i}{\bar{\sigma}} = \frac{\sigma_i}{P_0} \frac{1}{\frac{k_\sigma \pi (2Rh_0 - h_0^2)}{P_0}}, \quad i = 2, 3, \dots, 8. \quad (\text{A.48})$$

SigmaNet 13

Eingabedefinition

$$x_1 := \frac{h_0}{R}, \quad (\text{A.49})$$

$$x_2, \dots, x_6 := \frac{h_{l_{1,i}}}{h_0}, \quad i = 2, 4, 6, 8, 10, \quad (\text{A.50})$$

$$x_7, x_8 := \frac{h_{l_{2,i}}}{h_0}, \quad i = 5, 10, \quad (\text{A.51})$$

$$x_9, x_{10} := \frac{h_{l_{3,i}}}{h_0}, \quad i = 5, 10, \quad (\text{A.52})$$

$$x_{11}, \dots, x_{20} := \frac{h_{c_{4A,i}} - h_0}{h_0}, \quad i = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, \quad (\text{A.53})$$

$$x_{21} := \frac{W_e}{W_t}, \quad (\text{A.54})$$

$$W_t = \frac{1}{2} P_{l_{1,1}} h_{l_{1,1}} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^4 ((P_{l_{k,10}} + P_{l_{k+1,1}})(h_{l_{k+1,1}} - h_{l_{k,10}}) + \sum_{i=1}^{10} (P_{l_{k,i}} + P_{l_{k,i+1}})(h_{l_{k,i+1}} - h_{l_{k,i}})) \quad (\text{A.55})$$

$$W_e = \sum_{i=1}^{10} (P_{u,i+1} + P_{u,i})(h_{u,i+1} - h_{u,i}). \quad (\text{A.56})$$

Ausgabedefinition

$$y_1 := E_r \frac{h_0^2}{P_0}, \quad (\text{A.57})$$

$$y_{2,\dots,y_8} := \frac{\sigma_i}{\bar{\sigma}} = \frac{\sigma_i}{P_0} \frac{1}{\frac{k_\sigma \pi (2Rh_0 - h_0^2)}{P_0}}, \quad i = 2, 3, \dots, 8. \quad (\text{A.58})$$

SigmaNet 14

Eingabedefinition

$$x_1 := \frac{h_0}{R}, \quad (\text{A.59})$$

$$x_2, \dots, x_6 := \frac{h_{l_{1,i}}}{h_0}, \quad i = 2, 4, 6, 8, 10, \quad (\text{A.60})$$

$$x_7, x_8 := \frac{h_{l_{2,i}}}{h_0}, \quad i = 5, 10, \quad (\text{A.61})$$

$$x_9, x_{10} := \frac{h_{l_{3,i}}}{h_0}, \quad i = 5, 10, \quad (\text{A.62})$$

$$x_{11}, \dots, x_{20} := \frac{h_{c_{4A,i}} - h_0}{h_0}, \quad i = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, \quad (\text{A.63})$$

$$x_{21} := \frac{W_e}{W_t} = w_{\lambda 1}. \quad (\text{A.64})$$

Ausgabedefinition

$$y_1 := E_r \frac{h_0^2}{P_0} \Phi, \quad (\text{A.65})$$

$$\Phi = (1 - \varphi)^{0.3} \psi \quad (\text{A.66})$$

$$\varphi = 0.00414 + 0.485 \exp\left(-\frac{w_{\lambda 1}}{0.313}\right) \quad (\text{A.67})$$

$$\psi = 8.85w_{\lambda_1} - 18.18(w_{\lambda_1})^2 + 50.57(w_{\lambda_1})^3 + 91.06(w_{\lambda_1})^4 + 82.68(w_{\lambda_1})^5 + 29.34(w_{\lambda_1})^6 \quad (\text{A.68})$$

$$y_{2,\dots,y_8} := \frac{\sigma_i}{\bar{\sigma}} = \frac{\sigma_i}{P_0} \cdot \frac{1}{k_{\sigma}\pi(2Rh_0 - h_0^2)}, \quad i = 2, 3, \dots, 8. \quad (\text{A.69})$$

SigmaNet 15

Eingabedefinition

$$W_t = \frac{1}{2}P_{l,3}h_{l,3} + \frac{1}{2}\sum_{i=3}^{10}((P_{l,i+1} + P_{l,i})(h_{l,i+1} - h_{l,i})) + \frac{1}{2}\sum_{k=2}^4((P_{l,k,10} + P_{l,k+1,1})(h_{l,k+1,1} - h_{l,k,10}) + \sum_{i=1}^{10}(P_{l,k,i} + P_{l,k,i+1})(h_{l,k,i+1} - h_{l,k,i})) \quad (\text{A.70})$$

$$W_e = \sum_{i=1}^9(P_{u,i+1} + P_{u,i})(h_{u,i+1} - h_{u,i}), \quad (\text{A.71})$$

Ausgabedefinition

SigmaNet 16

Eingabedefinition

Die Definition der Eingangsdaten entspricht genau der Definition im Netz SigmaNet 14. Ausnahme ist die Berechnung für W_t und W_e , die hier nach Gl. (A.70) und (A.71) durchgeführt wird.

Ausgabedefinition

SigmaNet 17

Eingabedefinition

x_1, \dots, x_{21} sind genauso definiert, wie in den Netzen SigmaNet 15 und SigmaNet 16. Der Vollständigkeit wegen sind die Definitionen unten aufgeführt:

$$x_1 := \frac{h_0}{R}, \quad (\text{A.72})$$

$$x_2, \dots, x_6 := \frac{h_{l_{1,i}}}{h_0}, \quad i = 2, 4, 6, 8, 10, \quad (\text{A.73})$$

$$x_7, x_8 := \frac{h_{l_{2,i}}}{h_0}, \quad i = 5, 10, \quad (\text{A.74})$$

$$x_9, x_{10} := \frac{h_{l_{3,i}}}{h_0}, \quad i = 5, 10, \quad (\text{A.75})$$

$$x_{11}, \dots, x_{20} := \frac{h_{c_{4A,i}} - h_0}{h_0}, \quad i = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, \quad (\text{A.76})$$

$$x_{21} := \frac{W_e}{W_t}. \quad (\text{A.77})$$

Ausgabedefinition

$$y_1 = E_r \frac{2\sqrt{2Rh_0 - h_0^2}}{S}, \quad (\text{A.78})$$

$$y_{2,\dots,y_8} := \frac{\sigma_i}{\tilde{\sigma}} = \frac{\sigma_i}{P_0} \frac{1}{k_\sigma \pi (2Rh_0 - h_0^2)}, \quad i = 2, 3, \dots, 8. \quad (\text{A.79})$$

Literaturverzeichnis

- [1] J.-H. Ahn and D. Kwon: *Derivation of plastic stress-strain relationship from ball indentations*. J. Mater. Res., 16:3170–3178, 2001.
- [2] S. B. Batdorf and J. G. Crose: *A statistical theory for the fracture of brittle structures subjected to nonuniform stress*. J. Appl. Mechanics, 41:459–461, 1974.
- [3] T. Bayes: *An essay towards solving a problem in the doctrine of chances*. Philos. Trans. R. Soc. London, 53:370–418, 1763. (<http://www.stat.ucla.edu/history/essay.pdf>).
- [4] C. M. Bishop: *Exact calculation of the Hessian matrix for the multi-layer perceptron*. Neural Computation, 4(4):494–501, 1992.
- [5] C. M. Bishop: *Neural networks for pattern recognition*. Oxford Univ. Press, 1995.
- [6] A. Brückner-Foit, T. Fett, K.-S. Schirmer and D. Munz: *Discrimination of multiaxially criteria using brittle fracture loci*. J. Eur. Cer. Soc., 16:689–696, 1997.
- [7] Y. Cao, X. Qian and N. Huber: *Spherical indentation into elastoplastic materials: Indentation-response based definitions of the representative strain*. Materials Science and Engineering A, 454-455:1–13, 2007.
- [8] Y.-T. Cheng and C.-M. Cheng: *Scaling, dimensional analysis, and indentation measurements*. Materials Science and Engineering, R 44:91–149, 2004.
- [9] T. Cool, H. K. D. H. Bhadeshia and D. J. C. MacKay: *The yield and ultimate tensile strength of steel welds*. Materials Science and Engineering, A(223):186–200, 1997.
- [10] M. Dao, N. Chollacoop, K. J. Van Vliet, T. A. Venkatesh and S. Suresh: *Computational modeling of the forward and reverse problems in instrumented sharp indentation*. Acta Materialia, 49:3899–3918, 2001.

-
- [11] E. Diegele, S. Hartmann and Ch. Tsakmakis: *Finite deformation plasticity and visko-plasticity laws exhibiting nonlinear hardening rules Part II: Representative examples*. Computational Mechanics, 25:13–27, 2000.
- [12] E. Diegele, W. Jansohn and Ch. Tsakmakis: *Finite deformation plasticity and visko-plasticity laws exhibiting nonlinear hardening rules Part I: Constitutive theory and numerical integration*. Computational Mechanics, 25:1–12, 2000.
- [13] DIN 51110: *Prüfung von keramischen Hochleistungswerkstoffen*. Hrsg. Deutsches Institut für Normung, Berlin, 1990.
- [14] B. Efron and R. J. Tibshirani: *An introduction to the Bootstrap*. Chapman & Hall/CRC, 1993.
- [15] L. Gavard, H. K. D. H. Bhadeshia, D. J. C. MacKay and S. Suzuki: *Bayesian neural network model for austenite formation in steels*. Materials Science and Technology, 12:453–463, 1996.
- [16] S. Gutjahr: *Optimierung Neuronaler Netze mit der Bayes'schen Methode*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 1999.
- [17] W. K. Hastings: *Monte Carlo Sampling Methods using Markov Chains and their applications*. Biometrika, 57(1):97–109, 1970.
- [18] S. Haykin: *Neural Networks: A comprehensive foundation*. Macmillan, New York, 1994.
- [19] J. Heerens, F. Mubarok and N. Huber: *Effect of surface preparation and uniaxial residual stresses on the stress-strain behaviour determined from spherical indentation experiments*. J. Mater. Res., accepted, 2008.
- [20] J. Heerens, D. Rao, J. dos Santos and N. Huber: *Characterisation of property distribution in Friction Stir Welds using spherical indentation testing and micro tensile testing, MSE 2008, 1.-4. Sept. 2008, Nürnberg*.
- [21] A. Heger: *Bewertung der Zuverlässigkeit mehrachsiger belasteter keramischer Bauteile*. Fortschritt-Berichte VDI Reihe 18, Nr. 132, VDI-Verlag Düsseldorf, 1998.
- [22] K. Heiermann: *Konfidenzintervalle für die Ausfallwahrscheinlichkeit keramischer Bauteile auf Grundlage der Bootstrappedmethode*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 2003.

- [23] K. Heiermann et al.: *STAU Version 3, User's Manual*. Universität Karlsruhe (TH), 2000.
- [24] R. Hill, B. Storåkers and A. B. Zdunek: *A theoretical study of the Brinell hardness test*. Proc. Roy. Soc. Lond., A(423):301–330, 1989.
- [25] N. Huber: *Anwendung Neuronaler Netze bei nichtlinearen Problemen der Mechanik*. FZKA-Bericht 6504, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 2000.
- [26] N. Huber and J. Heerens: *On the effect of a general residual stress state in indentation and hardness testing*. Acta Materialia, 2008. (<http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2008.08.029>).
- [27] N. Huber and Ch. Tsakmakis: *An experimental device for depth-sensing indentation tests in mm-scale*. J. Mater. Res., 13(No. 6):1650–1655, 1998.
- [28] N. Huber and E. Tyulyukovskiy: *A new loading history for identification of viscoplastic properties by spherical indentation*. J. Mater. Res., 19(1):101–113, 2004.
- [29] N. Huber, E. Tyulyukovskiy, H.-C. Schneider, R. Rolli and M. Weick: *An indentation system for determination of viscoplastic stress-strain behavior of small metal volumes before and after irradiation*. Journal of Nuclear Materials, 377:352–358, 2008.
- [30] W. Jansohn: *Formulierung und Integration von Stoffgesetzen zur Beschreibung großer Deformationen in der Thermoplastizität- und -viskoplastizität*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 1996.
- [31] D. Klötzer, Ch. Ullner, E. Tyulyukovskiy and N. Huber: *Identification of viscoplastic material parameters from spherical indentation data. Part II: Experimental validation of the method*. J. Mater. Res., 21(No. 3):677–684, 2008.
- [32] J. Lampinen and A. Vehtari: *Bayesian approach for neural networks—review and case studies*. Neural Networks, 14:257–274, 2001.
- [33] J. F. Lawless: *Statistical models and methods for lifetime data*. John Wiley & Sons, Inc., 1982.
- [34] D. J. C. MacKay: *Bayesian methods for adaptive models*. Dissertation, California Institute of Technology, 1992.

- [35] D. J. C. MacKay: *Probable networks and plausible predictions — A review of practical Bayesian methods for supervised neural networks*. *Network: Computation in Neural Systems*, 6:469–505, 1995.
- [36] D. J. C. MacKay: *Information Theory, Inference, and Learning Algorithms*. Cambridge University Press, 2003.
- [37] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller and E. Teller: *Equation of state calculations by fast computing machines*. *Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, 1953.
- [38] D. Munz and T. Fett: *Ceramics: mechanical properties, failure behaviour, materials selection*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1999.
- [39] R. M. Neal: *An improved acceptance procedure for the Hybrid Monte Carlo Algorithm*. *Journal of Computational Physics*, 111(1):194–203, 1994.
- [40] R. M. Neal: *Bayesian learning in neural networks*. Springer-Verlag New York, 1996.
- [41] R. Nejma: *Verformungs- und Versagensverhalten von Aluminiumoxidkeramik unter isothermer und thermisch-mechanischer Ermüdungsbeanspruchung*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 2007.
- [42] H. Riesch-Oppermann, M. Härtelt and O. Kraft: *STAU - a review of the Karlsruhe weakest link finite element postprozessor with extensive capabilities*. *Int. J. Mat. Res.*, 99:1055–1065, 2008.
- [43] H. Riesch-Oppermann, S. Scherrer-Rudiy and T. Erbacher and O. Kraft: *Uncertainty analysis of reliability predictions for brittle fracture*. *Eng. Fracture Mechanics*, 74:2933–2942, 2007.
- [44] S. Roudi, H. Riesch-Oppermann and O. Kraft: *STAU - a review of the Karlsruhe weakest link finite element postprozessor with extensive capabilities*. *Mat-wiss. u. Werkstofftech.*, 36:171–176, 2005.
- [45] R. Y. Rubinstein: *Simulation and the Monte Carlo method*. John Wiley & Sons, Inc., 1981.
- [46] D. S. Sivia: *Data analysis: a Bayesian tutorial*. Oxford Univ. Press, 1996.
- [47] D. Tabor: *Hardness of metals*. Cambridge University Press, 1951.

- [48] T. Thiemeier: *Lebensdauervorhersage für keramischer Bauteile unter mehrachsiger Beanspruchung*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 1989.
- [49] Ch. Tsakmakis: *Methoden zur Darstellung inelastischen Materialverhaltens bei kleinen Deformationen*. Habilitationsschrift, Universität-Gesamthochschule Kassel, 1994.
- [50] E. Tyulyukovskiy: *Identifikation von mechanischen Eigenschaften metallischer Werkstoffe mit dem Eindruckversuch*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 2005.
- [51] E. Tyulyukovskiy and N. Huber: *Identification of viscoplastic material parameters from spherical indentation data. Part I: Neural networks*. J. Mater. Res., 21(No. 3):664–676, 2006.
- [52] E. Tyulyukovskiy and N. Huber: *Neural networks for tip correction of spherical indentation curves from bulk metals and thin metal films*. Journal of the mechanics and physics of solids, 55:391–418, 2007.
- [53] Ch. Ullner: *Messunsicherheit in der instrumentierten Eindringprüfung*. VDI-Berichte, Nr. 1948:41–50, 2006.
- [54] A. M. Walker: *On the asymptotic behavior of posterior distributions*. Journal of the Royal Statistical Society, B 31 (1):80–88, 1969.
- [55] W. Weibull: *A statistical representation of fatigue failures in solids*. Transactions of the Royal Institute of Technology Stockholm, Sweden, 27, 1949.
- [56] C. Ziegler: *Bewertung der Zuverlässigkeit keramischer Komponenten bei zeitlich veränderlichen Spannungen und bei Hochtemperaturbelastung*. Fortschritt-Berichte VDI Reihe 18, Nr. 238, VDI-Verlag Düsseldorf, 1998.